

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра математического моделирования и анализа данных

Аннотация к магистерской диссертации

**«Алгоритмы глубокого обучения для предсказания структуры
белковых комплексов»**

Новиков Антон Андреевич

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор
Тузиков А. В.

Минск, 2025

Реферат

Магистерская диссертация, 58 страниц, 18 рисунков, 25 источников, 95 формул

Ключевые слова: БЕЛОК, ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ БЕЛКОВ, ГЛУБОКОЕ ОБУЧЕНИЕ, ПОЛНОСВЁРТОЧНЫЕ СЕТИ, МАТРИЦЫ КОСИНУСОВ, СВОРАЧИВАНИЕ БЕЛКА, ТЕОРИЯ ПОЛЯ, СПЕЦИАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ.

Объектом исследования являются белковые молекулы и комплексы.

Предметом исследования являются белок-белковые взаимодействия, способы их описания и методы предсказания.

Целью работы является предсказание взаимодействия пар белковых молекул, заданных с помощью координат C α -атомов углерода и последовательностей аминокислотных остатков.

В ходе работы получены новые типы матриц косинусов, исследованы их свойства. Предложена математическая модель для описания белок-белковых взаимодействий на основе теории поля, с использованием алгоритмов машинного обучения. Описан численный подход к приближению полей, заданных на всем пространстве. Описаны архитектуры нейронных сетей, применимых к данной задаче. Проведены вычислительные эксперименты.

Полученные результаты работы могут быть использованы для реализации алгоритмов предсказания белок-белкового взаимодействия, а также для смежных задач.

Abstract

Master's thesis, 58 pages, 18 figures, 25 sources, 95 formulas

Keywords: PROTEIN, PROTEIN INTERACTION, DEEP LEARNING, FULLY CONVOLUTIONAL NETWORKS, COSINE MATRICES, PROTEIN FOLDING, FIELD THEORY, SPECIAL RELATIVITY.

The object of the research is protein molecules and complexes.

The subject of the research is protein-protein interactions, ways of their description and prediction methods.

The aim of this work is interaction prediction for pairs of protein molecules specified with C α -carbon atoms coordinates and sequences of amino acid residues.

In the course of the work, new types of cosine matrices were obtained, their properties were investigated. New mathematical model for protein-protein interaction description was proposed, it is based on the field theory and uses machine learnings algorithms. A numerical approach to the approximation of fields defined over the entire space was described. Architectures of the neural networks applicable to the problem were described. Computational experiments were conducted.

The obtained results can be employed to implement protein-protein interaction prediction methods and in adjacent problems.