

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ  
Кафедра биомедицинской информатики**

Аннотация к дипломной работе

**“РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ОЦЕНКИ ИНГИБИТОРНОЙ  
АКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ”**

Анищенко Арсений Игоревич

Научный руководитель — старший преподаватель кафедры БМИ Николаев Г. И.

2020

## Реферат

Дипломная работа, 52 страницы, 17 рисунков, 1 таблица, 9 формул, 35 источников.

ДРАГ-ДИЗАЙН, МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, ИСКУССТВЕННЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, ГЛУБОКОЕ ОБУЧЕНИЕ, РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ФИНГЕРПРИНТ, ИНГИБИТОРЫ ПРОНИКНОВЕНИЯ ВИЧ-1, БЕЛОК gp120, МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.

Объект исследования — методы машинного обучения, которые можно применить для разработки новых лекарственных соединений, и способы оценки ингибиторной активности химического соединения.

Цель работы — создание нового алгоритма оценки ингибиторной активности химических соединений на основе технологии машинного обучения и молекулярных фингерпринтов.

Методы исследования: изучение тематической литературы и научных исследований, анализ данных о химических соединениях и энергии связи их комплекса с белком оболочки ВИЧ-1 gp120, создание базы данных молекулярных фингерпринтов, обучение нейронных сетей, статистическая оценка результатов.

Результатом работы являются новые методы поиска потенциальных ингибиторов белка оболочки ВИЧ-1 gp120. Была создана специальная база данных молекулярных фингерпринтов, которая насчитывает 166.416.851 соединений с соответствующими им молекулярными фингерпринтами MACCS, служащая для поиска химических соединений. Было предложено несколько решений регрессионной задачи прогнозирования потенциальной энергии связи комплекса лиганд с белком gp120 при помощи нейронных сетей.

Области применения: поиск новых лекарственных препаратов, виртуальный скрининг, оценка ингибиторной активности химических соединений.

## **Abstract**

Diploma thesis, 52 pages, 17 pictures, 1 table, 9 formulas, 35 sources.

DRUG DESIGN, MACHINE LEARNING, ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS, DEEP LEARNING, REGRESSION MODELS, MOLECULAR FINGERPRINT, HIV-1 ENTRY INHIBITORS, GP120 PROTEIN, MOLECULAR MODELING.

The object of the research is machine learning methods, which can be used for new drug compounds development, and methods for inhibitory activity of a chemical compound evaluation.

Purpose of the work is to create a new algorithm for assessing the inhibitory activity of chemical compounds, based on machine learning technology and molecular fingerprints.

Research methods: subject literature and scientific research study, chemical compounds and the binding energy of their complex with HIV-1 gp120 envelope protein data analysis, molecular fingerprint database creation, neural networks training, results statistical evaluation.

The result of the work is new methods for searching for potential HIV-1 gp120 coat protein inhibitors. A special database of molecular fingerprints was created, which has 166,416,851 compounds with their corresponding molecular fingerprints MACCS, which is used for chemical compounds search. Several solutions to the regression problem of potential binding energy of the ligand complex with the gp120 protein prediction using neural networks was proposed.

The scopes are: drug search, virtual screening, inhibitory activity of chemical compounds evaluation.