X

# Χ

**Kalba**

lietuvių

užsienio

**Anotacija**

Baigiamajame bakalauro darbe nagrinėjamos mašininiu mokymu pagrįstos vertinimo funkcijos, skirtos baltymo surišimo su ligandu stiprumo įvertinimui. Yra atkartojamas pasirinktas vertinimo funkcijos dirbtinių neuroninių tinklų modelis. Atliekamas šio modelio apmokymas naudojant skirtingai modifikuotus pradinius duomenis, aprašomi kiekvienos gautos vertinimo funkcijos rezultatai bei įverčiai. Papildomai modelis yra palyginamas su kitų mašininiu mokymusi modeliais, skirtais baltymo-ligando sąryšio prognozei.

Darbą sudaro 6 dalys: įvadas, literatūros apžvalga, metodai, rezultatai, išvados ir siūlymai, literatūros sąrašas.

Darbo apimtis – ... p. teksto be priedų, ... iliustr., ... lent., ... bibliografiniai šaltiniai.

Atskirai pridedami darbo priedai.

**Bioinžinerijos** studijų programos baigiamasis bakalauro darbas

Pavadinimas **Baltymo – ligando jungimosi in silico vertinimo funkcijos kūrimas naudojant mašininį mokymąsi**

Autorius **Taisija Dėmčėnko** Vadovas **Vytautas Rafanavičius**

Vilniaus Gedimino technikos universitetas

**Fundamentinių mokslų** fakultetas

**Chemijos ir bioinžinerijos** katedra

**Prasminiai žodžiai:** virtuali atranka, vertinimo funkcija, mašininis mokymasis, baltymo jungimasis su ligandu, dirbtiniai neuroniniai tinklai

ISBN ISSN

Egz. sk. ………..

Data ….-….-….