

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

Кафедра биомедицинской информатики

**Изучение подходов обучения с подкреплением для генерации
потенциальных лекарств**

Курсовой проект

Благодарного Артёма Андреевича
ФПМИ, БМИ, 3 курс 3 группа

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

Цель проекта:

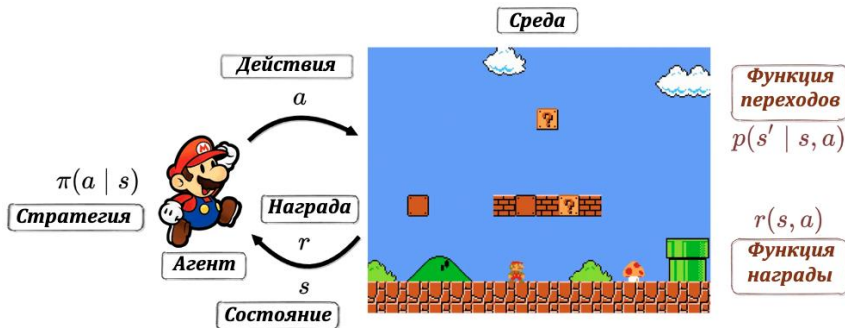
Изучить подходы обучения с подкреплением для генерации потенциальных лекарств.

Задачи проекта:

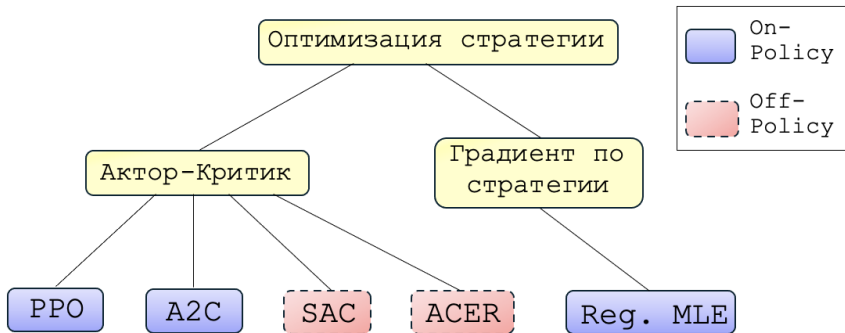
1. Изучить теорию по алгоритмам обучения с подкреплением.
2. Исследовать платформу REINVENT 4.
3. Запустить свой эксперимент.
4. Проанализировать результат.

Обучение с подкреплением

$$Q_{k+1}^*(s, a) \leftarrow r(s, a) + \gamma \mathbb{E}_{s' \sim p(s'|s, a)} \max_{a'} Q_k^*(s', a').$$



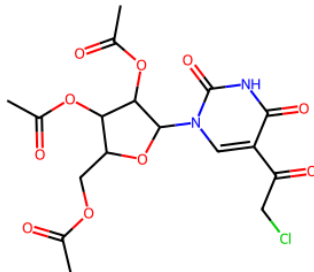
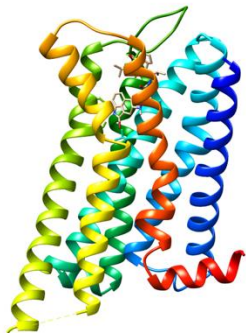
Алгоритмы оптимизации стратегии



Эксперимент

Дофаминовый рецептор D2

CC(=O)OCC1OC(n2cc(C(=O)CCl)c(=O)[nH]c2=O)C(OC(C)=O)C1OC(C)=O



Спасибо за внимание!