**КУРСОВАЯ РАБОТА**

аналитический отчёт

по дисциплине

«Классическое машинное обучение»

на тему

«Разработка моделей машинного обучения для создания лекарственных соединений»

Выполнил:

студент группы М24-525

Шаповал Виктор Николаевич

**ВВЕДЕНИЕ**

Процесс создания нового лекарственного препарата является сложным и многоэтапным. Необходимо определить его химическую формулу, синтезировать соединение, провести первичные биологические испытания и организовать тестирование. Все эти этапы требуют значительного времени, однако современные методы машинного обучения способны существенно ускорить данный процесс.

C помощью различных моделей машинного обучения можно спрогнозировать эффективность соединений и подобрать наиболее подходящие сочетания параметров для разработки лекарственных средств.

**ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ**

Цель работы - на основании предоставленных данных от химиков построить прогноз, позволяющий подобрать наиболее эффективное сочетание параметров для создания лекарственных препаратов.

Задачи

1) Проанализировать текущие параметры с использованием различных методов

2) Научиться предсказывать эффективность полученных данных

Для решения поставленных задач требуется:

* Провести разведочный анализ – EDA
* Создать модель регрессии для IC50
* Создать модель регрессии для CC50
* Создать модель регрессии для SI
* Создать модель классификации основываясь на превышение медианного значение выборки IC50
* Создать модель классификации основываясь на превышение медианного значение выборки CC50
* Создать модель классификации основываясь на превышение медианного значение выборки SI
* Создать модель классификации основываясь на превышение значение равного 8 выборки SI
* Сравнить между собой полученные модели, выполнить анализ результатов их работы и обосновать выбор наиболее качественных решений

**РАЗВЕДОЧНЫЙ АНАЛИЗ – EDA**

Задач

**МОДЕЛЬ РЕГРЕССИИ ДЛЯ IC50**

Задач

**МОДЕЛЬ РЕГРЕССИИ ДЛЯ СC50**

Задач

**МОДЕЛЬ РЕГРЕССИИ ДЛЯ SI**

Задач

**МОДЕЛЬ КЛАССИФИКАЦИИ ПО МЕДИАННОМУ ЗНАЧЕНИЮ ДЛЯ ВЫБОРКИ IC50**

Задач

**МОДЕЛЬ КЛАССИФИКАЦИИ ПО МЕДИАННОМУ ЗНАЧЕНИЮ ДЛЯ ВЫБОРКИ СC50**

Задач

**МОДЕЛЬ КЛАССИФИКАЦИИ ПО МЕДИАННОМУ ЗНАЧЕНИЮ ДЛЯ ВЫБОРКИ SI**

Задач

**МОДЕЛЬ КЛАССИФИКАЦИИ ПО ЗНАЧЕНИЮ РАВНОМУ 8 ДЛЯ ВЫБОРКИ SI**

Задач

**СРАВНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ**

Задач

**СРАВНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ**

Задач

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Задач