**РЕФЕРАТ**

Пояснительная записка 80 с., 13 рис., 10 табл., 11 источника

ФАРМАКОЛОГИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ОЦЕНКИ ТЕРАПЕВТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ВЕЩЕСТВ

Объектом исследования является веб-сайт для оптимизации драг-дизайна.

Цель работы – создание программного средства для определения терапевтического класса химического соединения используя методы машинного обучения.

Фармакологическая система была выполнена с целью повышения производительности и качества процесса драг-дизайна, что позволит сделать его более эффективным.

На их основе разработаны и спроектированы функциональные требования к разрабатываемому программному средству. На основе функциональных требований спроектирована общая архитектура программного средства.

Cистема позволит провести качественную оптимизацию комбинаторной библиотеки, а также упрощение молекулярного докинга.