**ВСТУП**

Білки є невід'ємною складовою усього живого та займають провідні ролі майже у всіх його процесах. Від структурної функції до рецепторної та захисної. Завдяки їх обширності вони стали одним із найбільш бажаних об’єктів досліду. Через їхню високу специфічність всі вони мають дуже різноманітну структуру. Тому для їх класифікації потрібен великий обсяг вхідних даних, для виявлення закономірностей і схожості.

Актуальність класифікації білкових зв’язків дуже складно переоцінити, адже виявлення хоч мінімальних закономірностей можете полегшити вивчення і використання білків в різноманітних газузях як медицини, так і промисловості.

Ділянки PPI є плоскими і широкими, без особливих впадин і вигинів, що у сильній мірі погіршує вплив лікарських препаратів. Але, як було сказано вище їх існує велика різноманітність білків і всі вони специфічні. Якби їх принципи та структура були б однакові – не було би селективності.

Приймаючи до уваги усі ці фактори було вирішено знайти ділянки зв’язування за допомогою комп’ютерного коду. Потім на основі цих ділянок спробувати знайти фармокофори. Ці всі фармокофори можна використовувати, якщо між ними не велика відстань, або окремо, якщо їх вклад (кількість зв’язків) достатньо велика.

Для проведення досліду була взята велика кількість білкових структур. Написаний код, який на їх основі знаходить PPI і потім відтворює білкову молекулу, яка приймає учать в PPI.