

Մոլեկուլային դոքինգի արդյունքների կոնֆորմացիոն վերլուծության և վիզուալացման համակարգի մշակում կլաստերացման մեթոդների կիրառմամբ

Разработка системы конформационного анализа и визуализации результатов молекулярного докинга с использованием методов кластеризации

Development of the system for conformational analysis and visualizing of molecular docking results by the clustering methods

Ժամանակակից կենսահոմատիկայի հիմնական խնդիրներից է բժշկական սաքանական ուսումնասիրությունների արդյունքում ստացված մեծ տվյալների վերլուծությունը: Փորձարարական ճանապարհով ստացված տվյալների ավտոմատ մշակումը, կառավարումը, վերլուծությունը և դրանց մեկնաբանությունը էականորեն հեշտացնում են կատարվող ուսումնասիրությունները: Կենսաքանական տվյալների ճշգրտության ամրագրումն անմիջականորեն կապված է դրանց ճիշտ դասակարգման, կառուցվածքային կարգավորման և մեկնաբանության մեթոդաբանությունից, որոնց լուծումը կարելի է գտնել ժամանակակից միջմասնագիտական ոլորտներում ինչպիսին է կենսահոմատիկան և ծրագրավորումը:

Աշխատանքում փորձ է արված ստեղծել համակարգ, որն ավտոմատ դասակարգում և վիզուալացնում է մոլեկուլային դոքինգի արդյունքում ստացված տվյալները՝ կլաստերացման մեթոդների օգնությամբ, ապահովելով դրանց ճշգրիտ ընտրությունն ու մշակումը:

Համակարգի հիմքում է ընկած ժամանակակից ծրագրային միջոցների օգտագործումը և կիրառում Python լեզվի միջավայրում, ինչպիսին են տվյալների մշակման BioPandas, Pandas, Numpy, Matplotlib և այլ փաթեթներ: