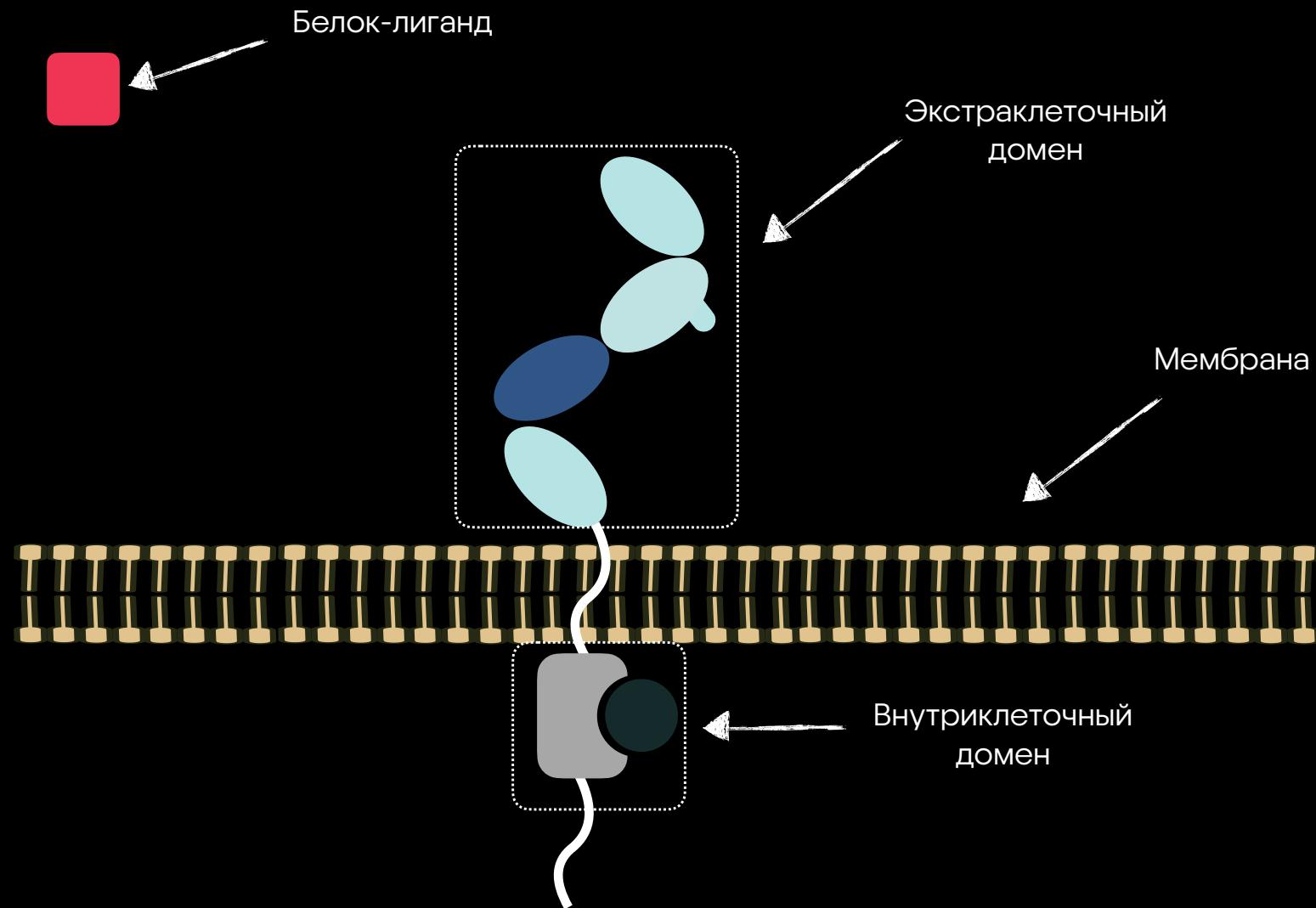
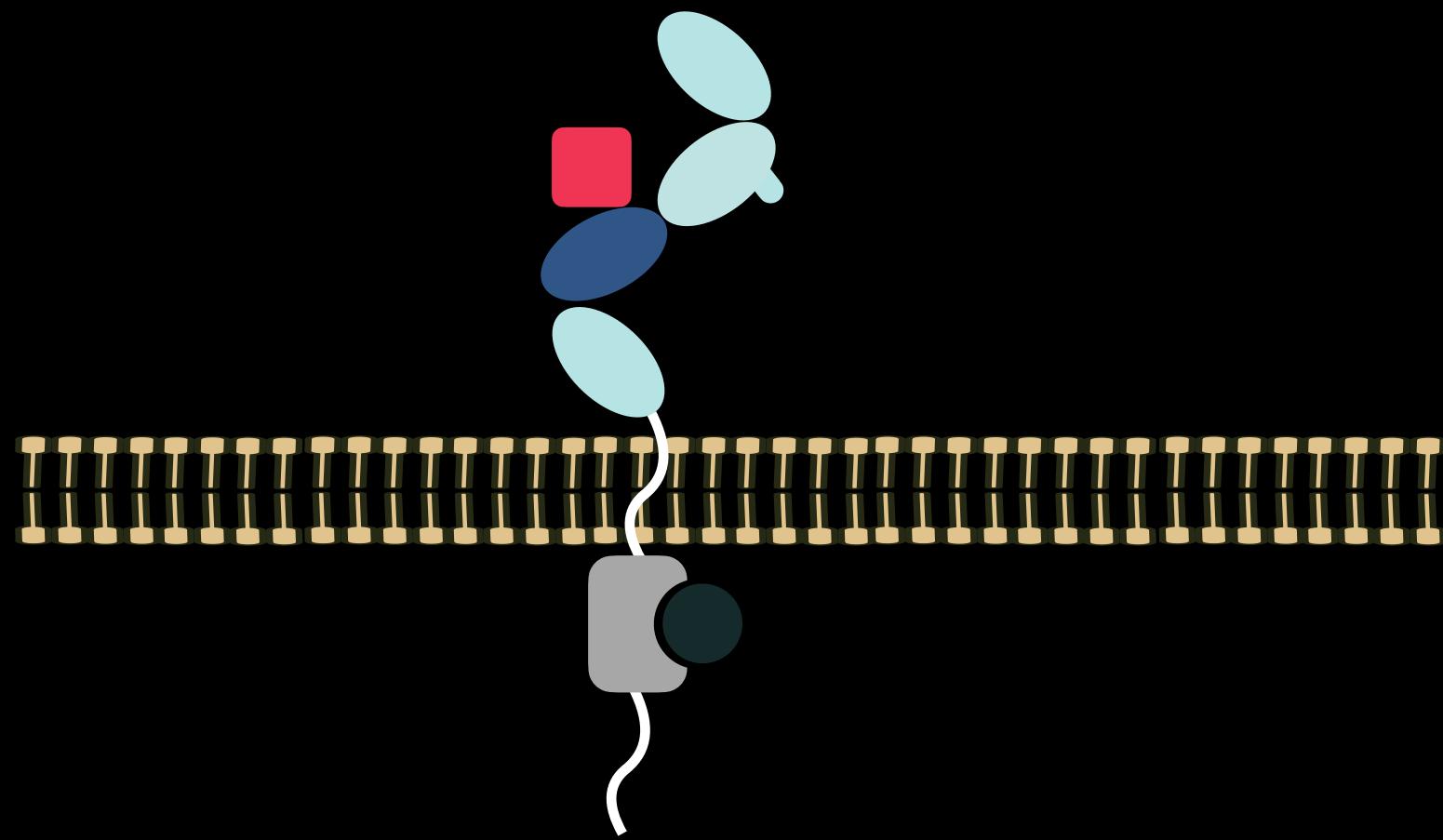
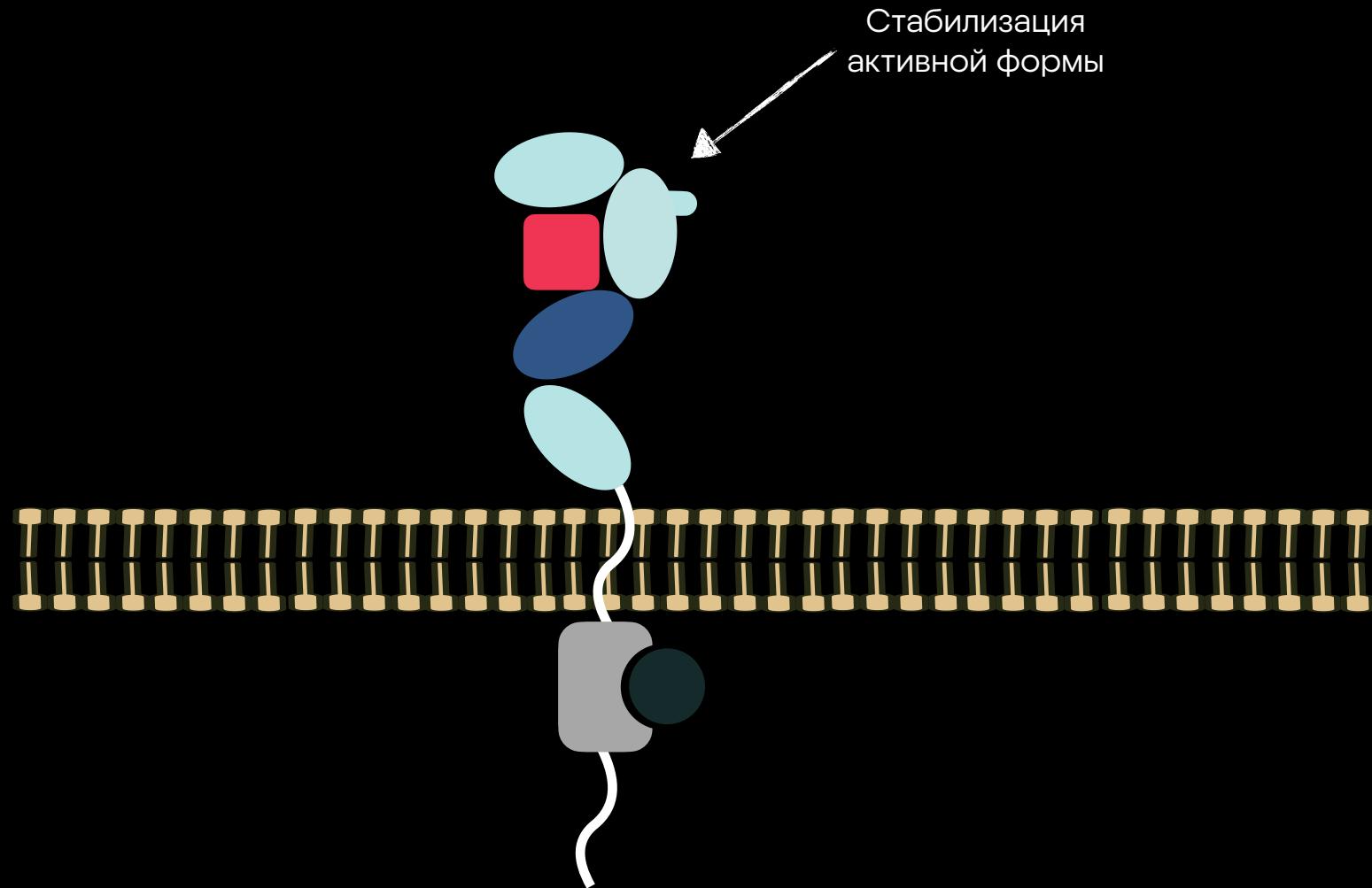


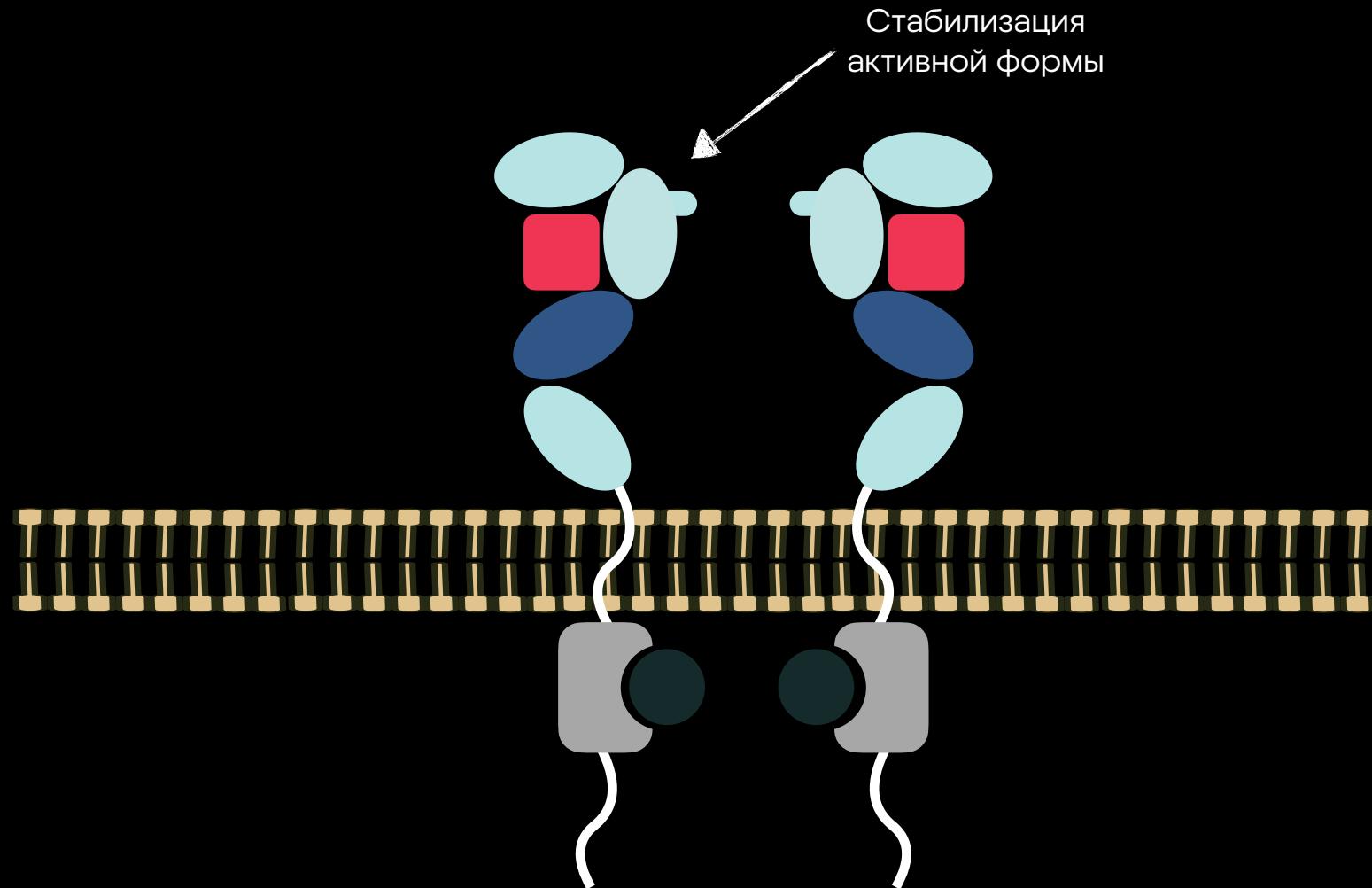


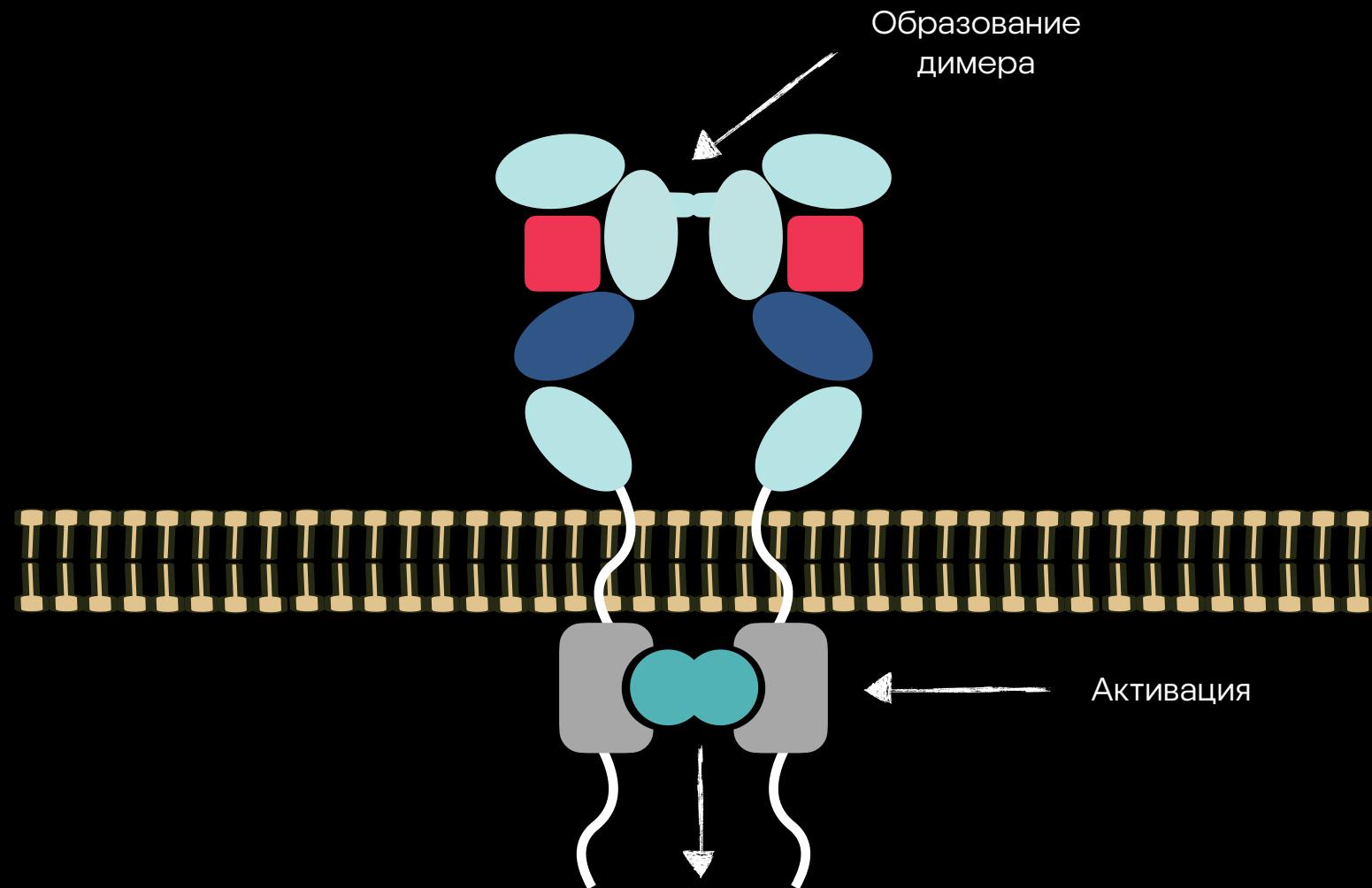
Глубокое обучение в структурной биологии





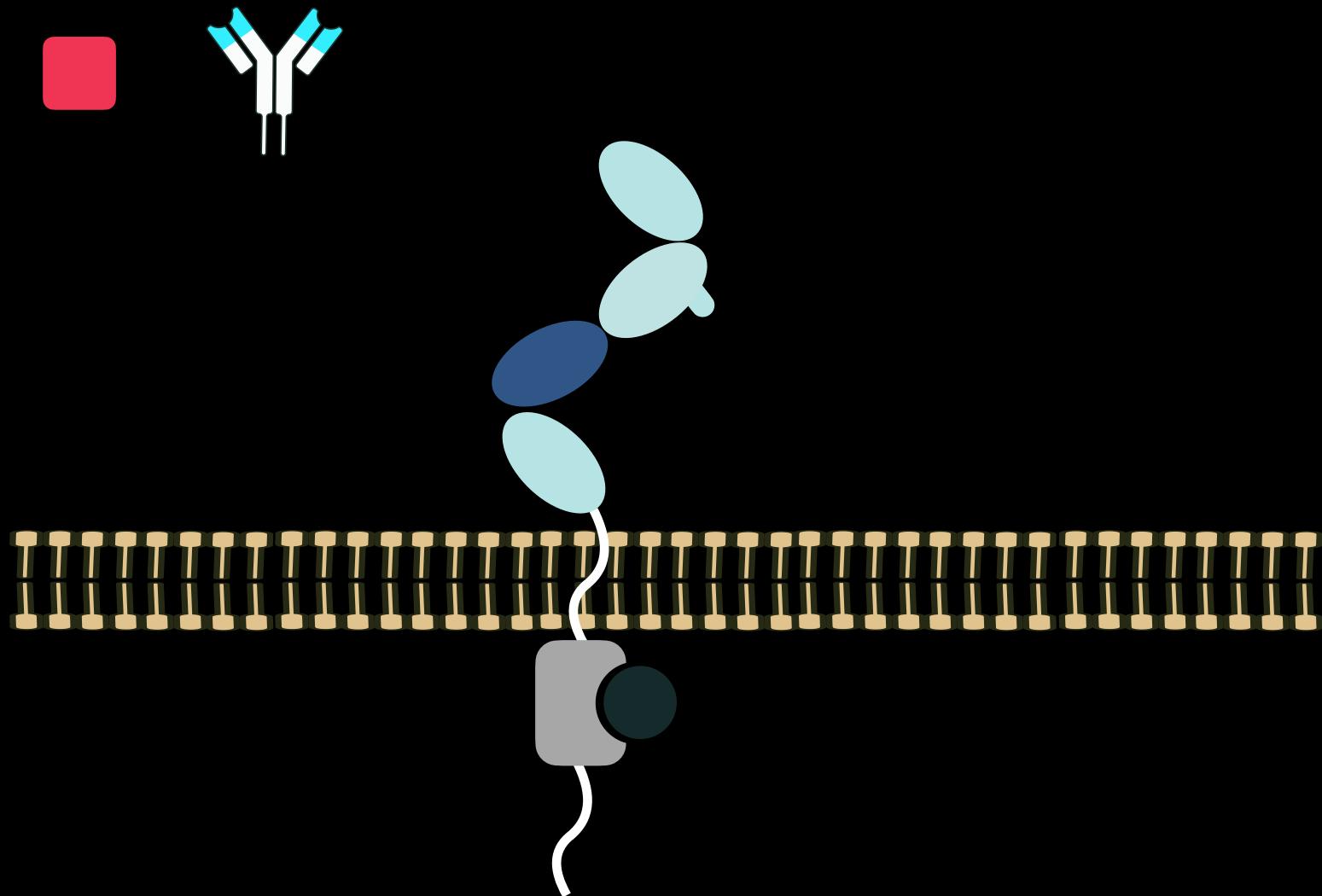






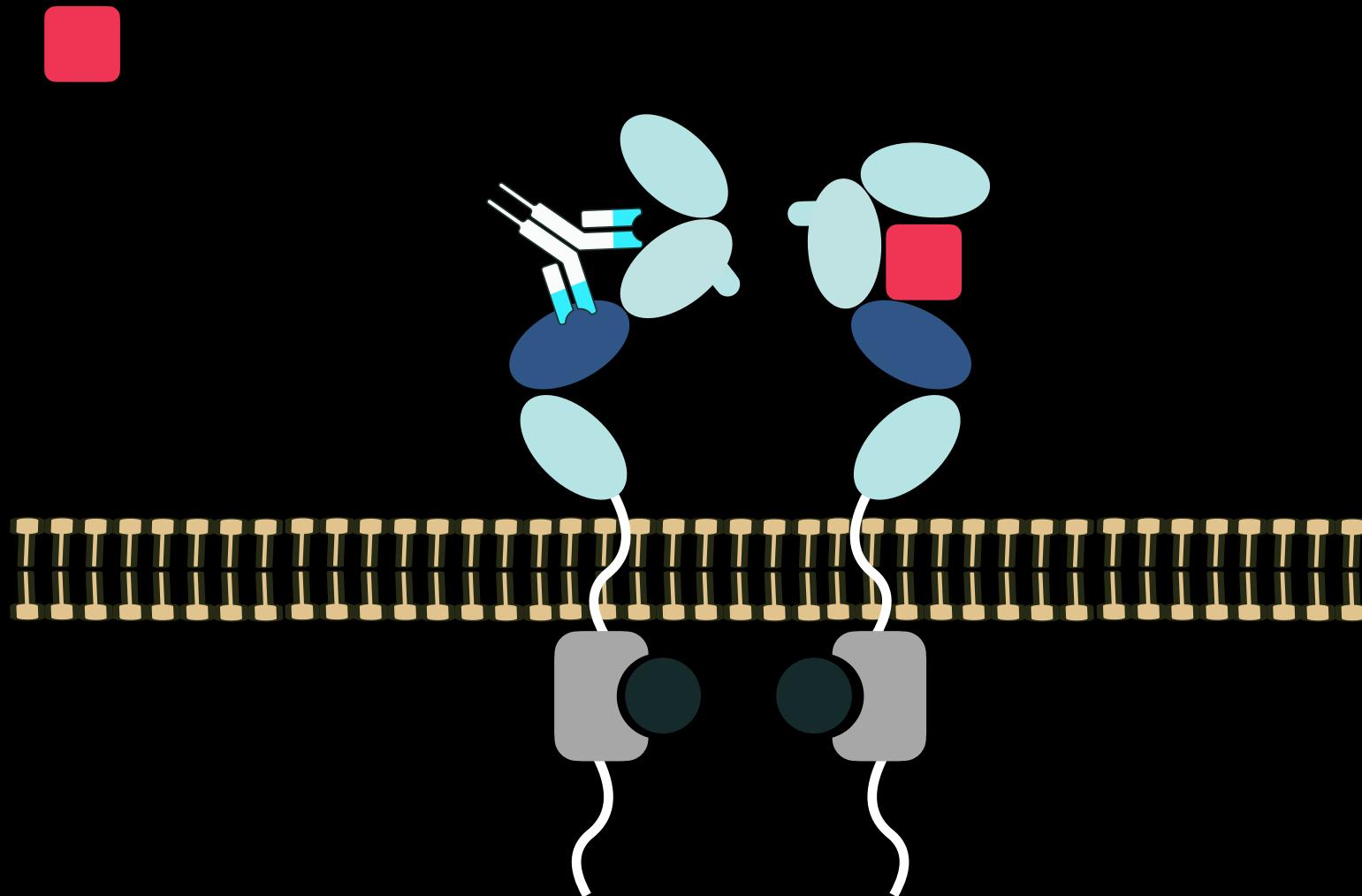
# Блокирование взаимодействий

BICCAD



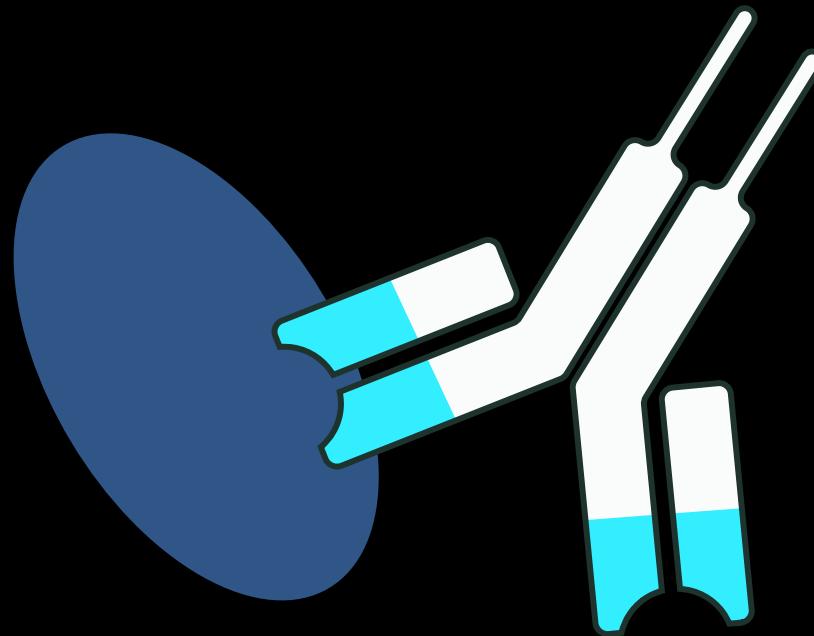
# Блокирование взаимодействий

BICCAD



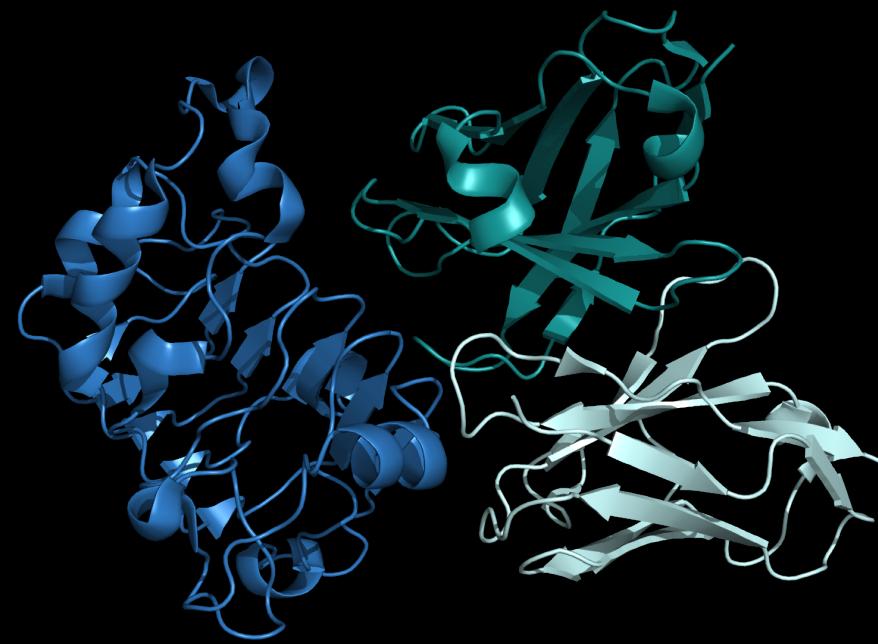
Как создать такой белок?

BICCAD



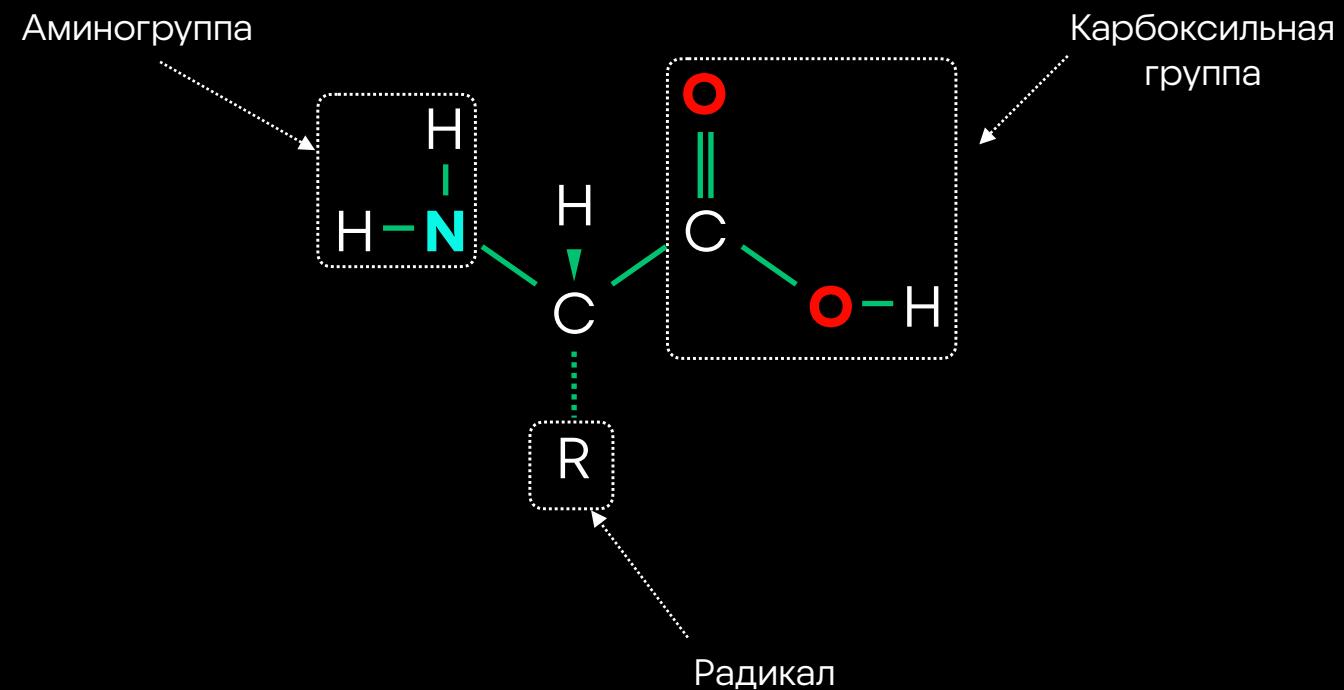
# Структура белка

BICCAD



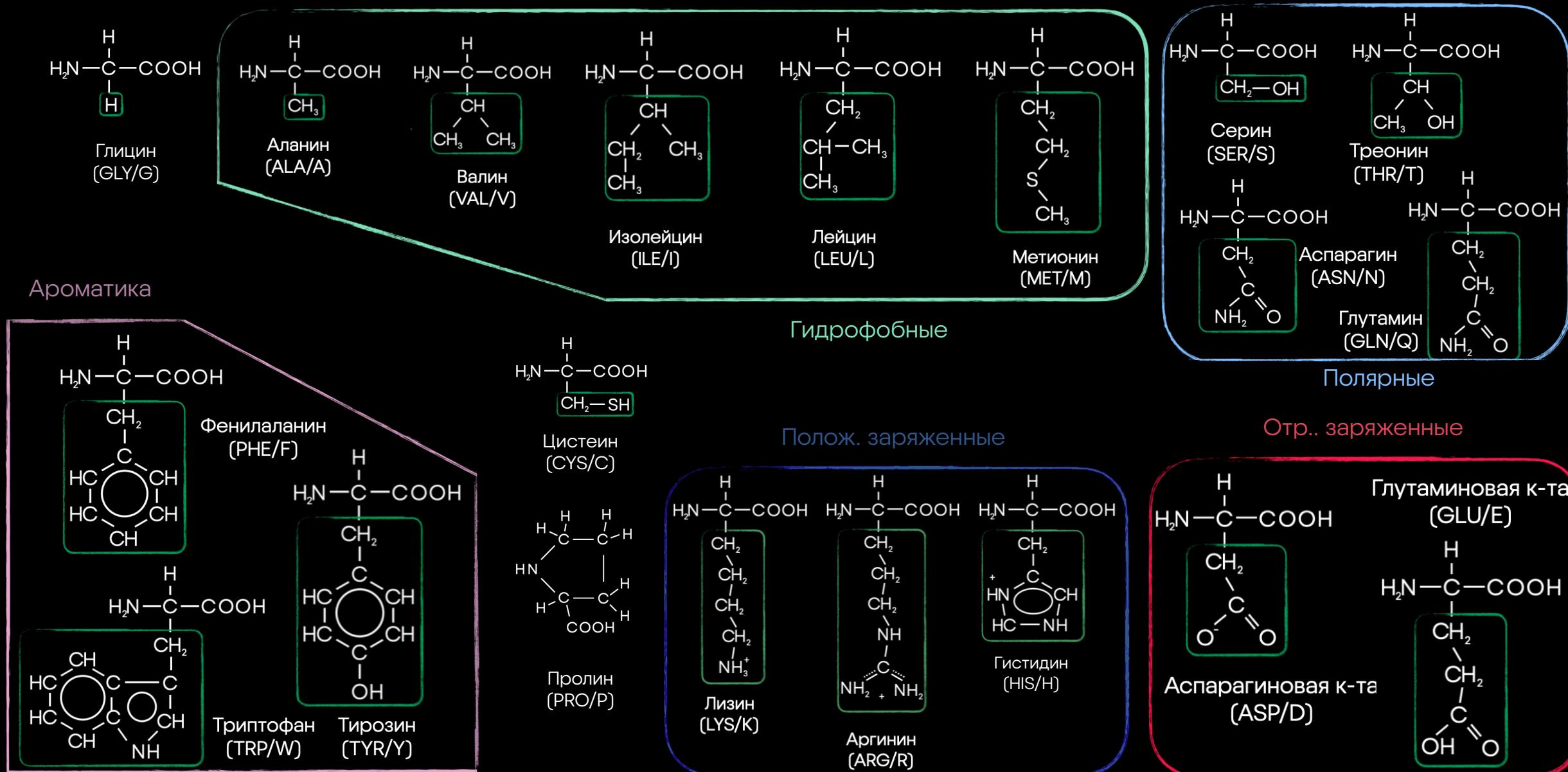
# Первичная структура: аминокислоты

BICCAD



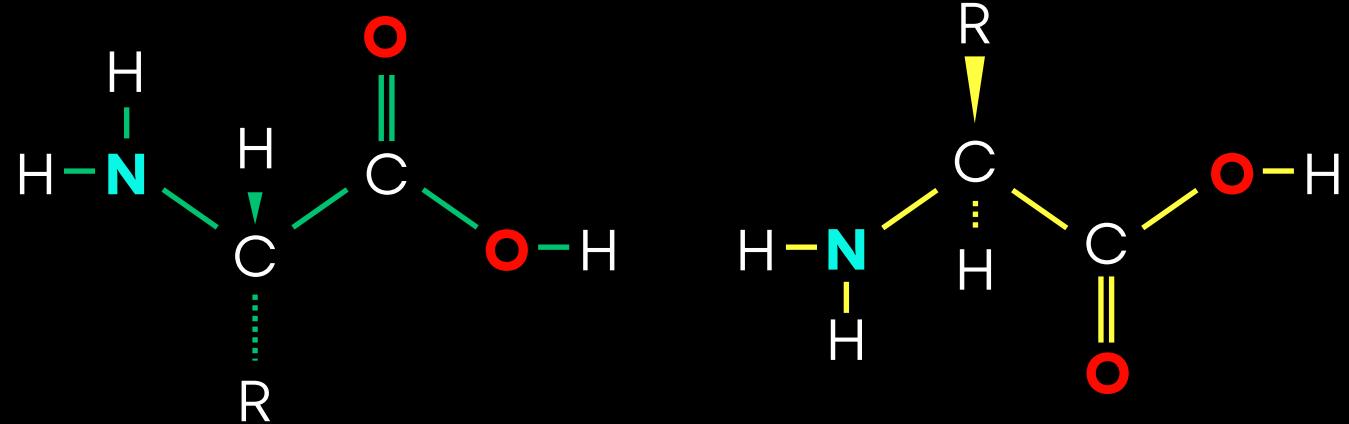
# Первичная структура: аминокислоты

BICCAD



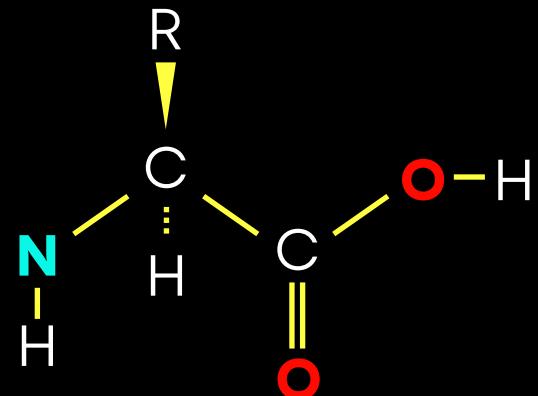
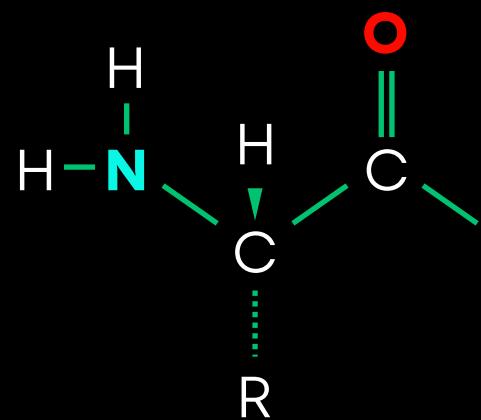
## Первичная структура: аминокислоты

BICCAD



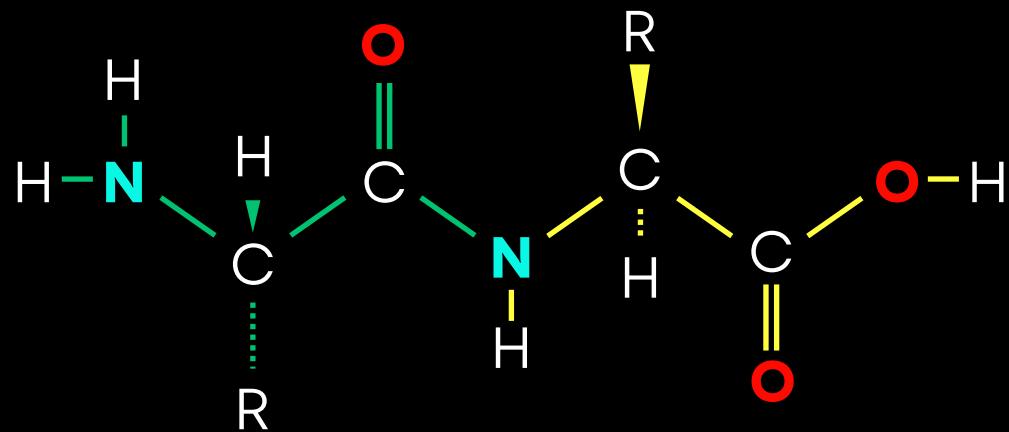
## Первичная структура: аминокислоты

BICCAD



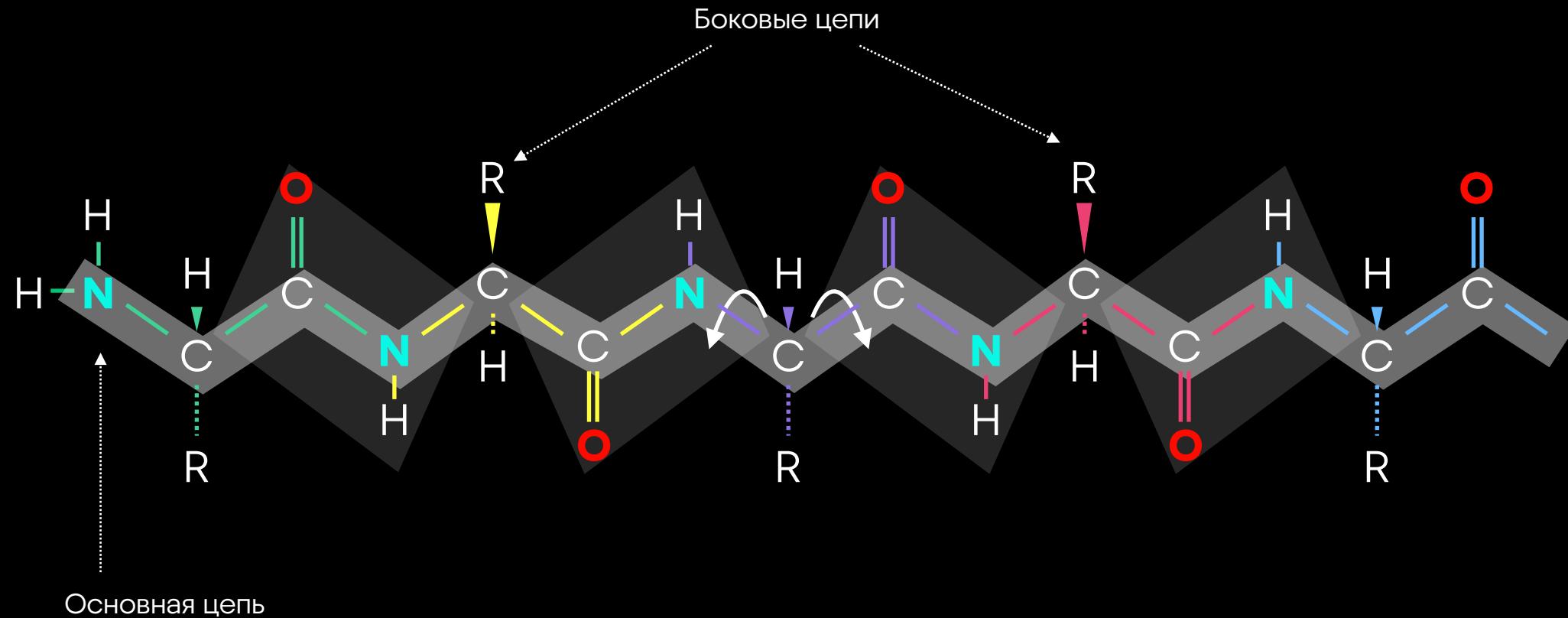
## Первичная структура: пептидная связь

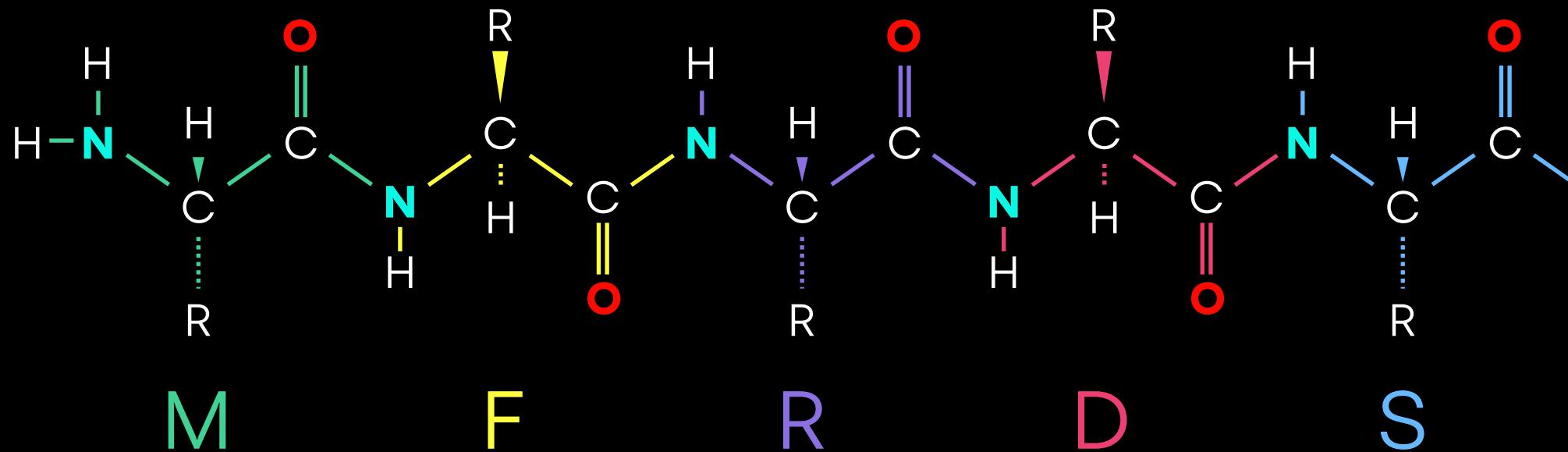
BICCAD



## Первичная структура: основная цепь

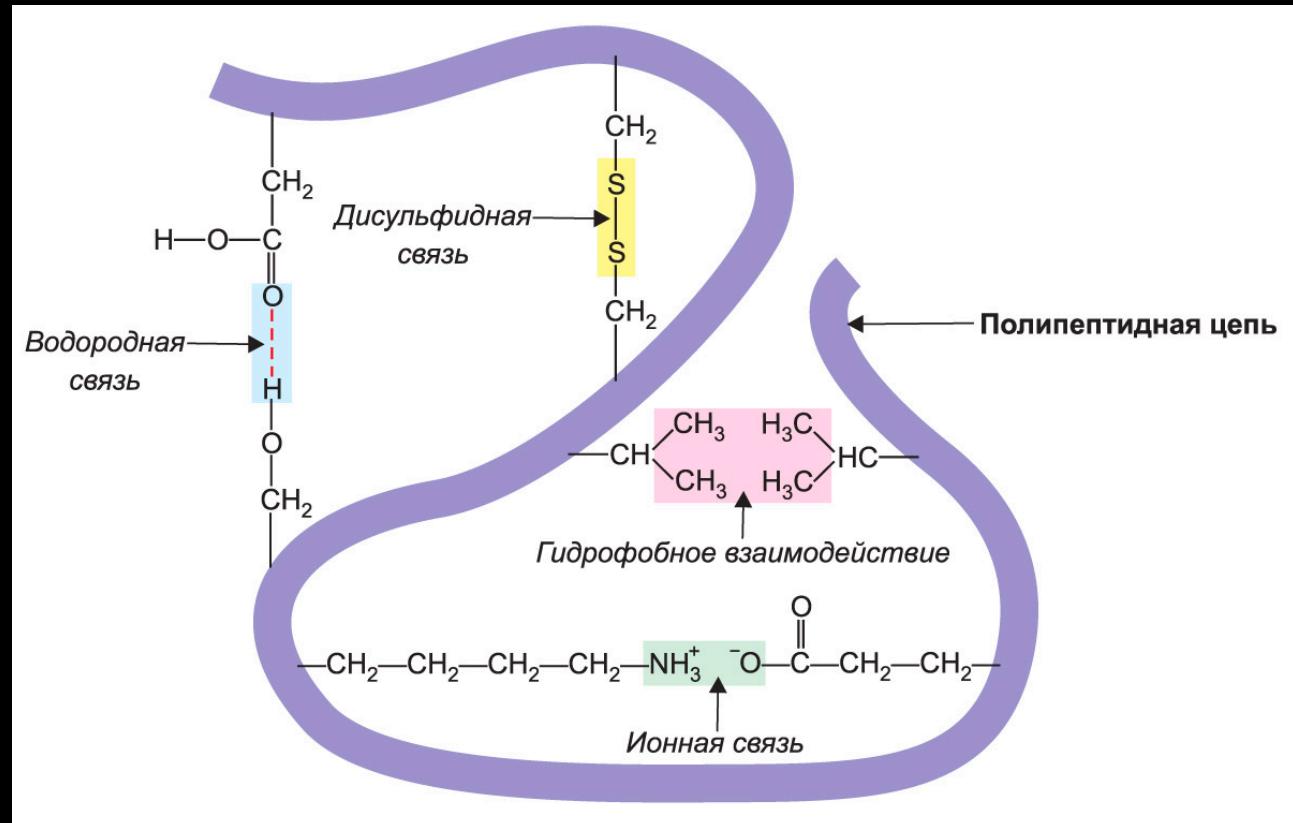
BICCAD





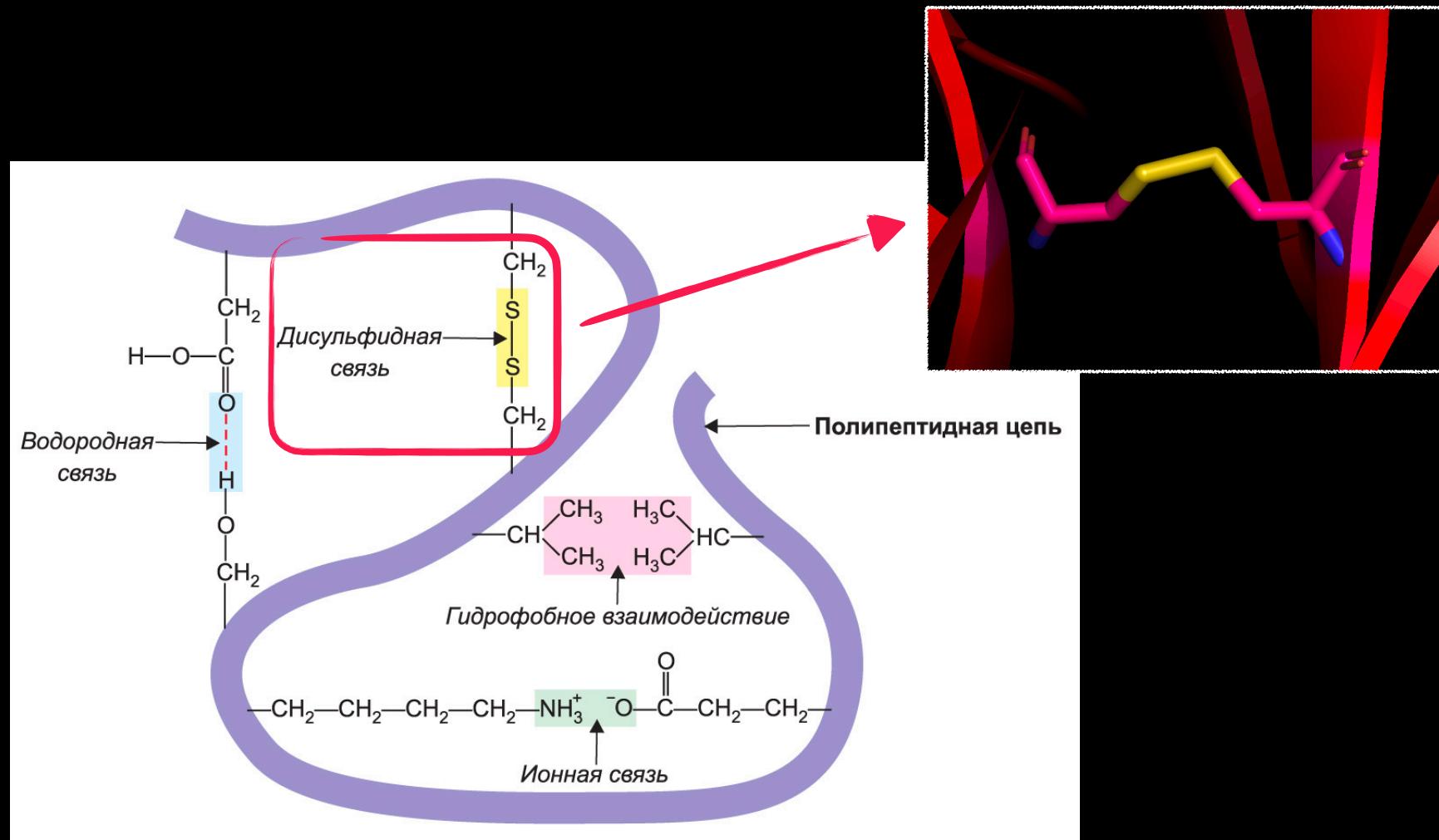
# Взаимодействия в белках

BICCAD



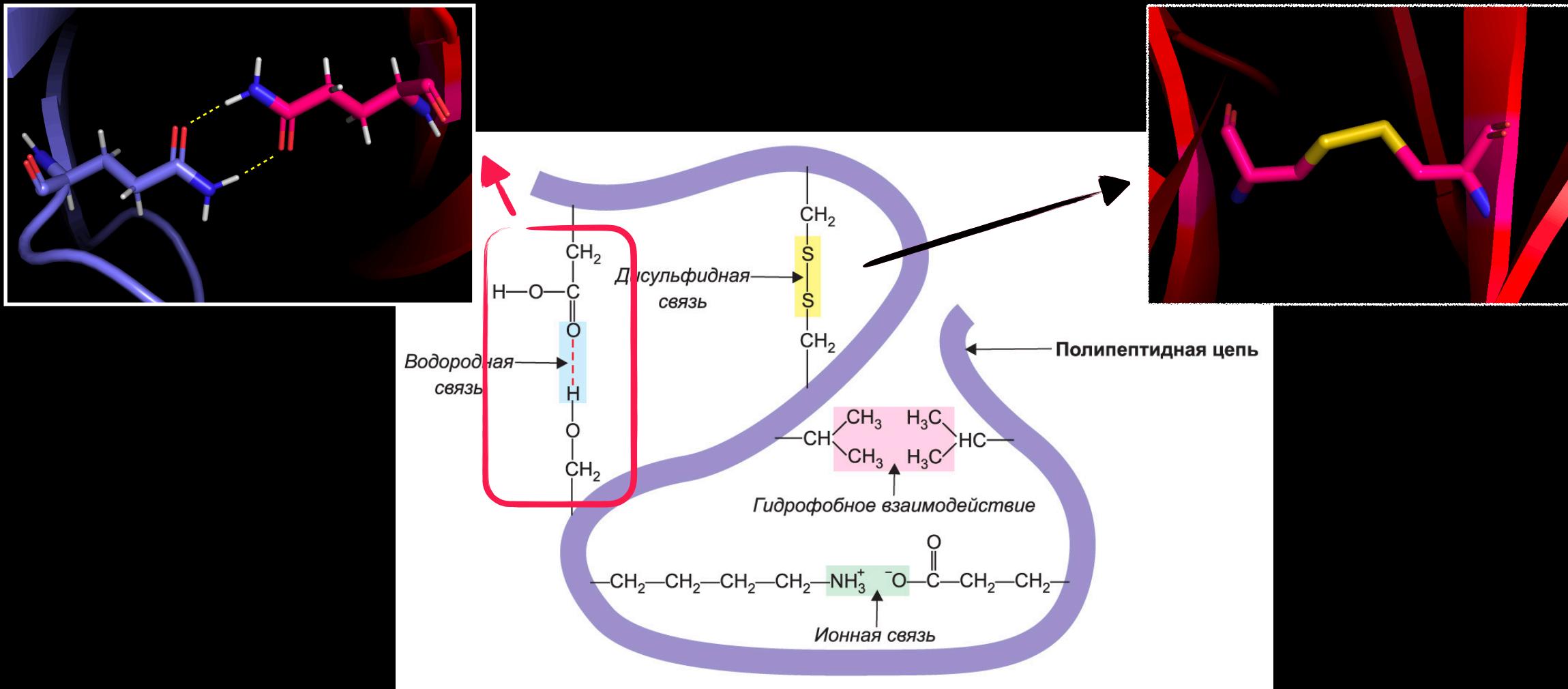
# Взаимодействия в белках

BICCAD



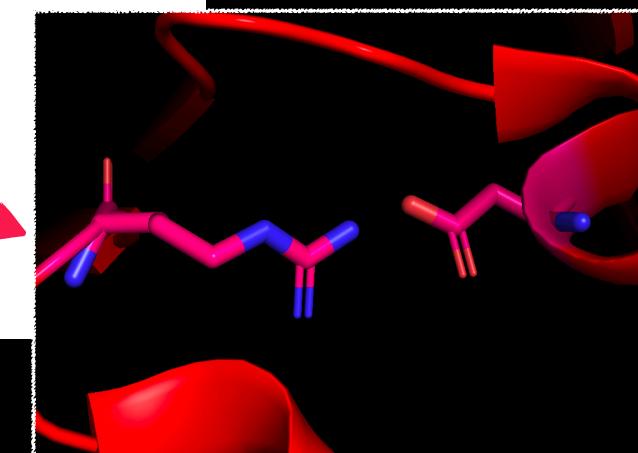
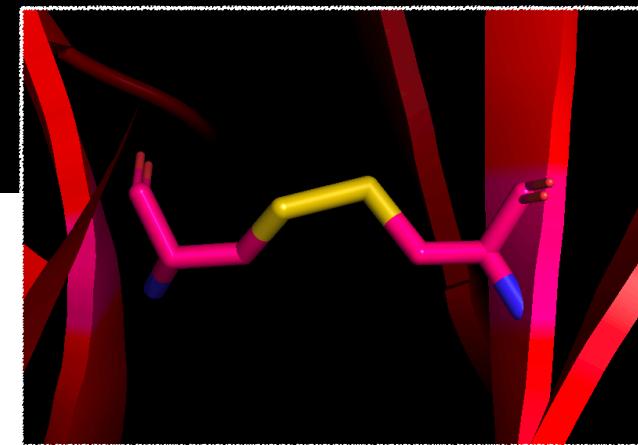
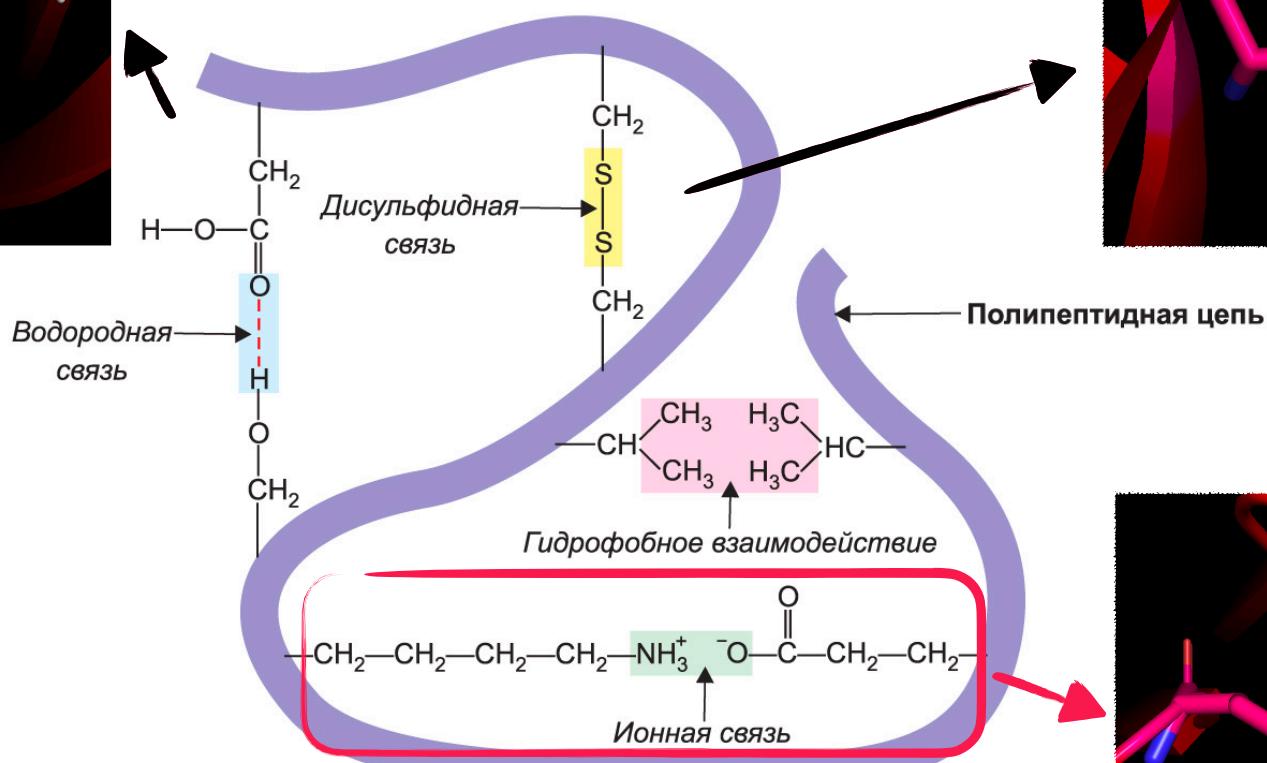
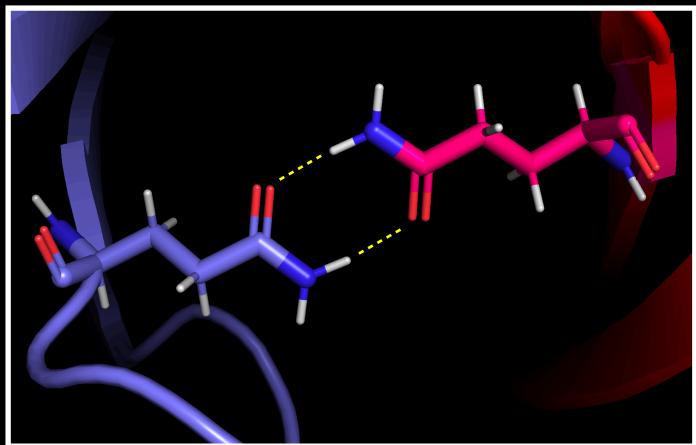
# Взаимодействия в белках

BICCAD



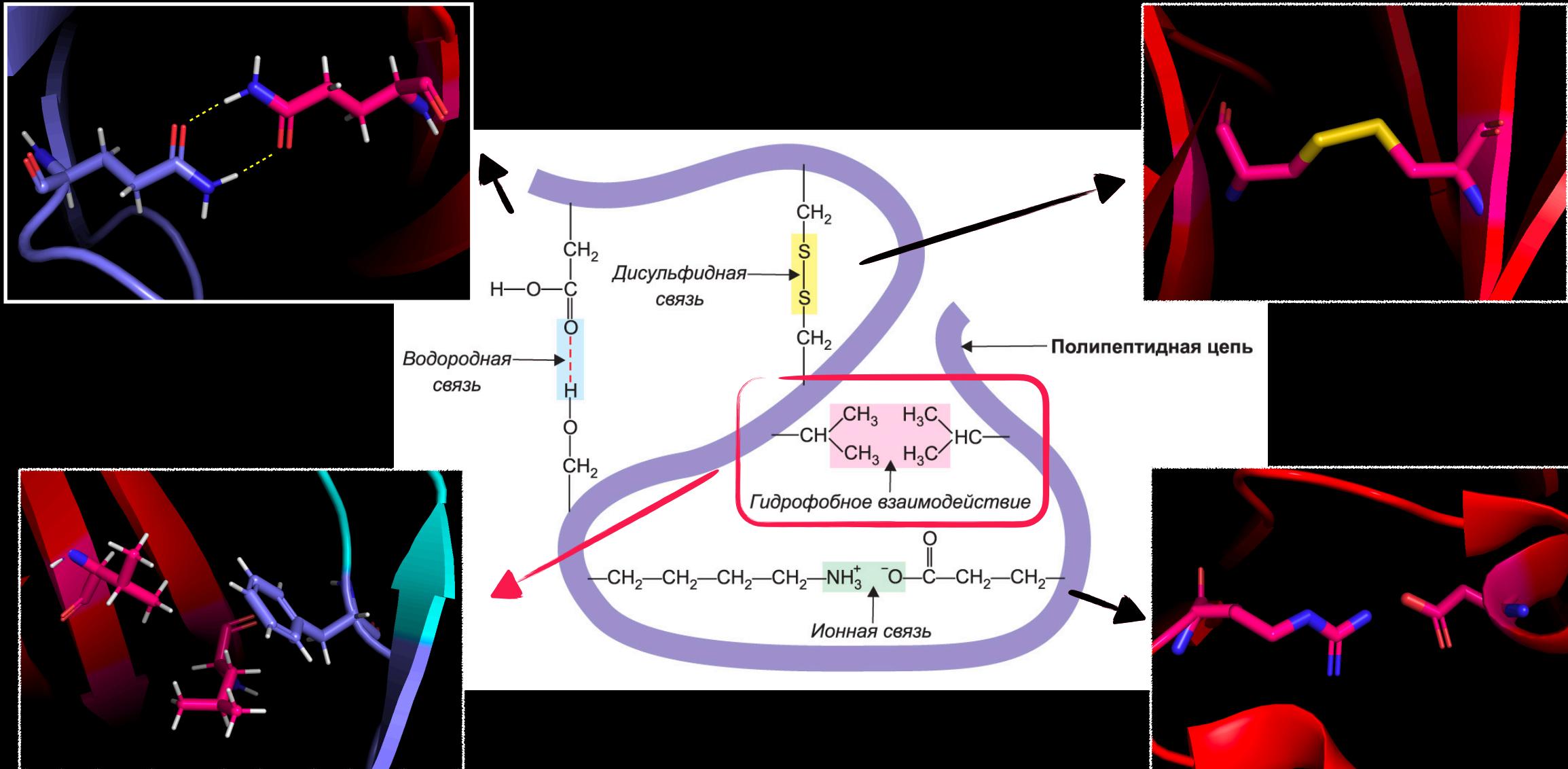
# Взаимодействия в белках

BICCAD



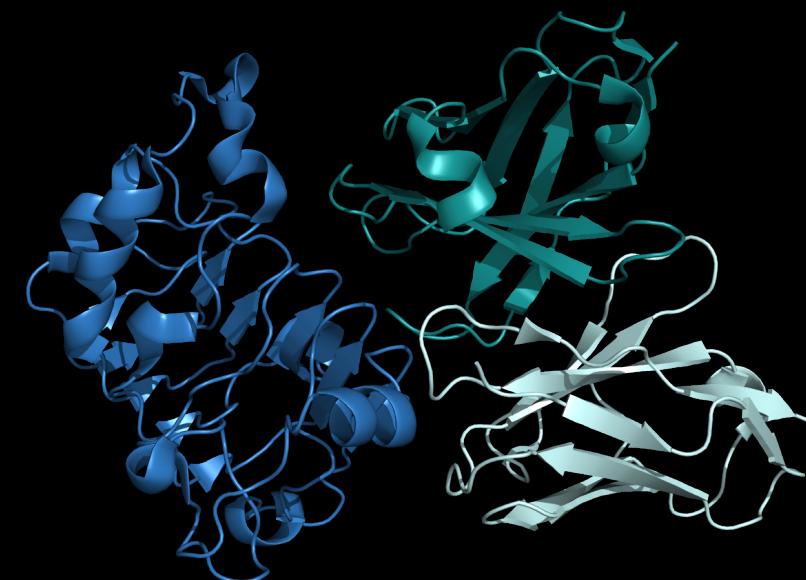
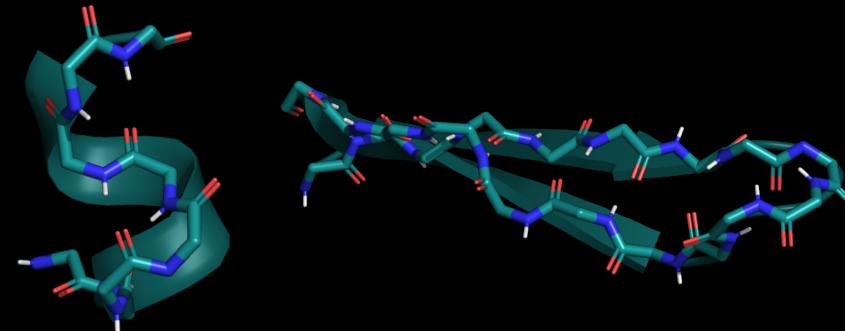
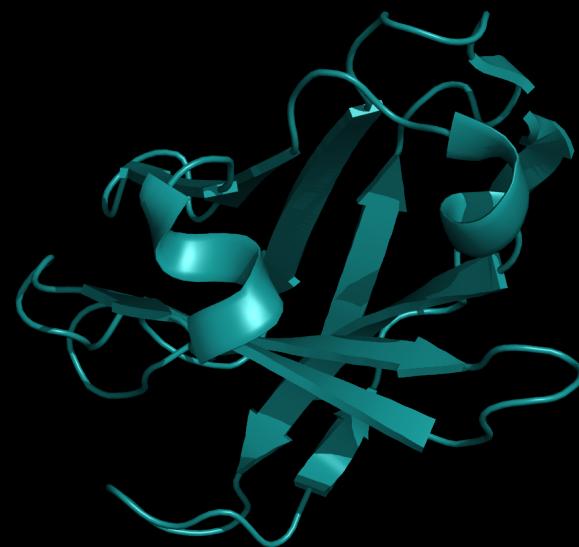
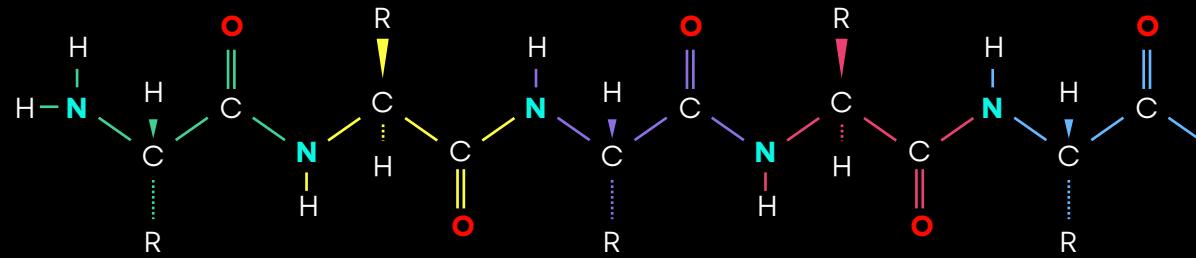
# Взаимодействия в белках

BICCAD



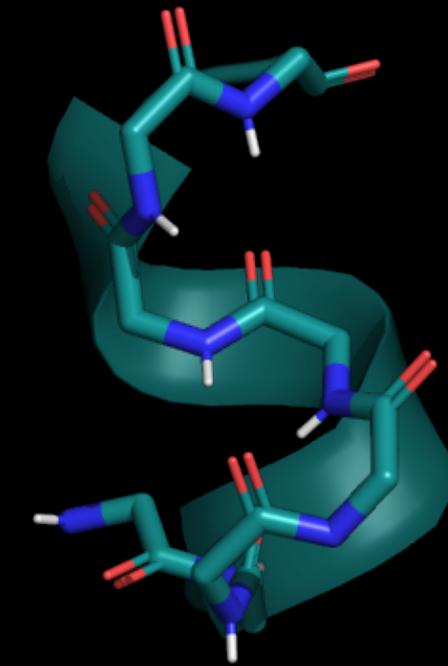
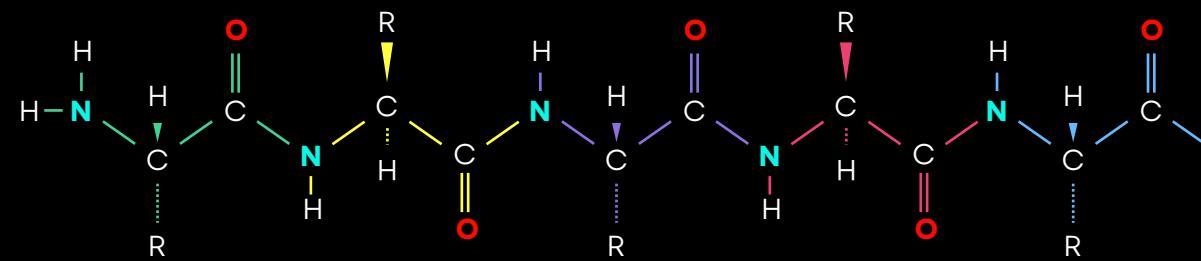
# Уровни структурной организации белков

BICCAD



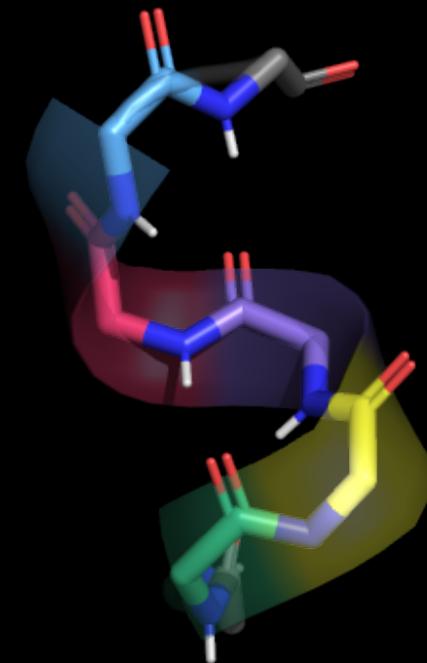
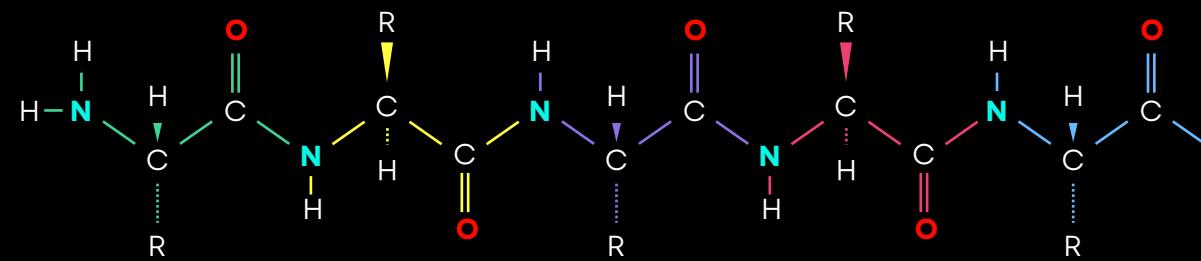
# Геометрия белка: инвариантность относительно движений

BIGCAD



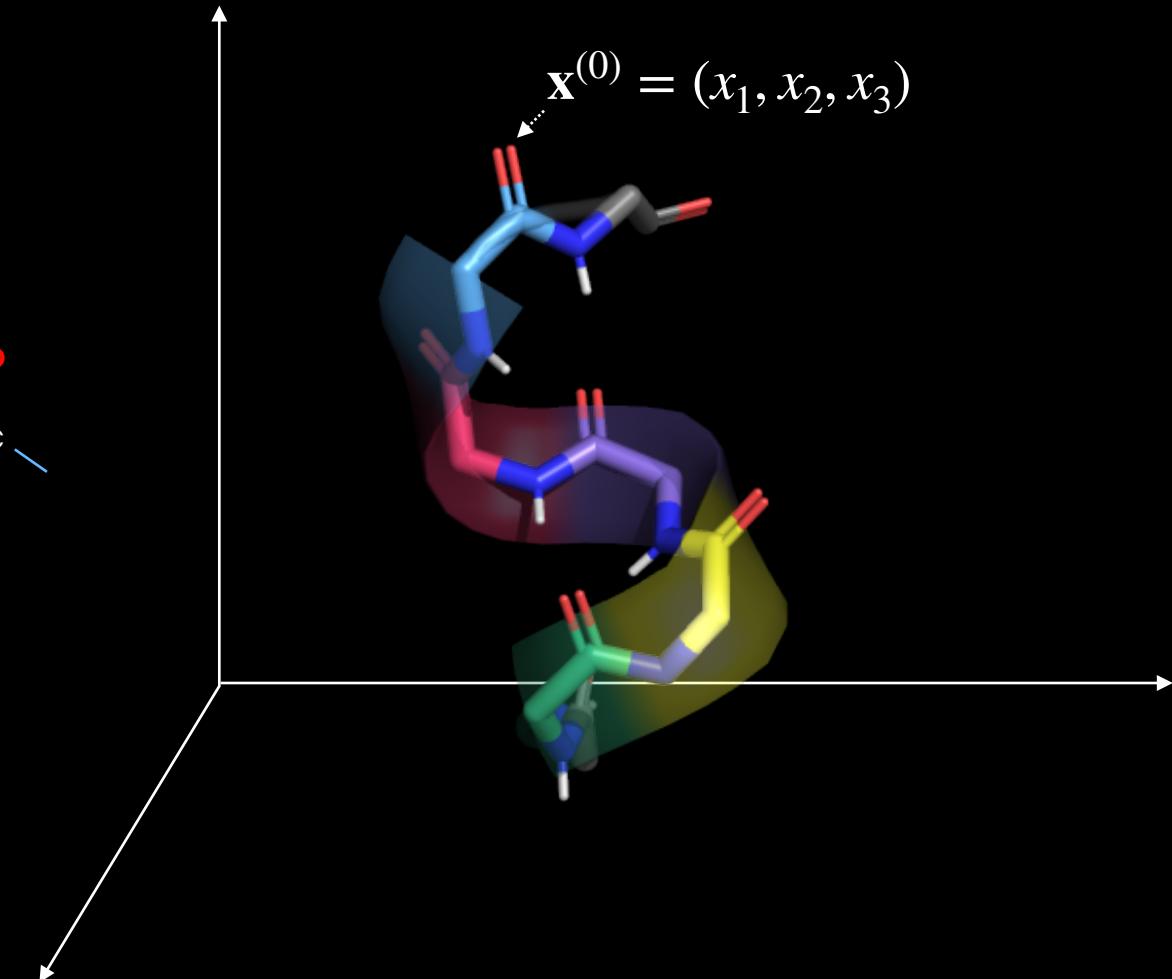
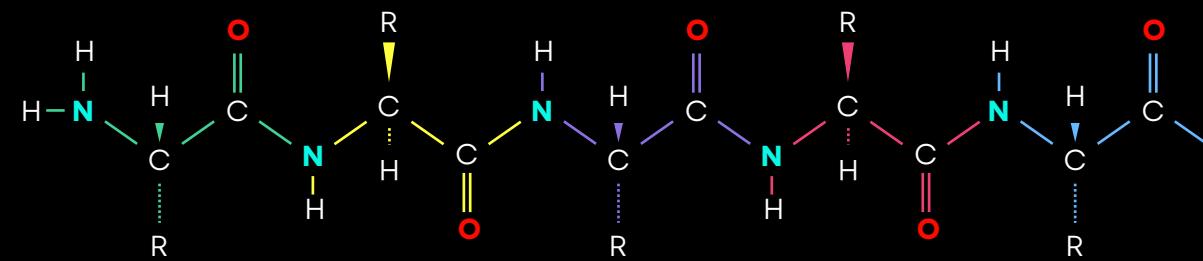
# Геометрия белка: инвариантность относительно движений

BIGCAD



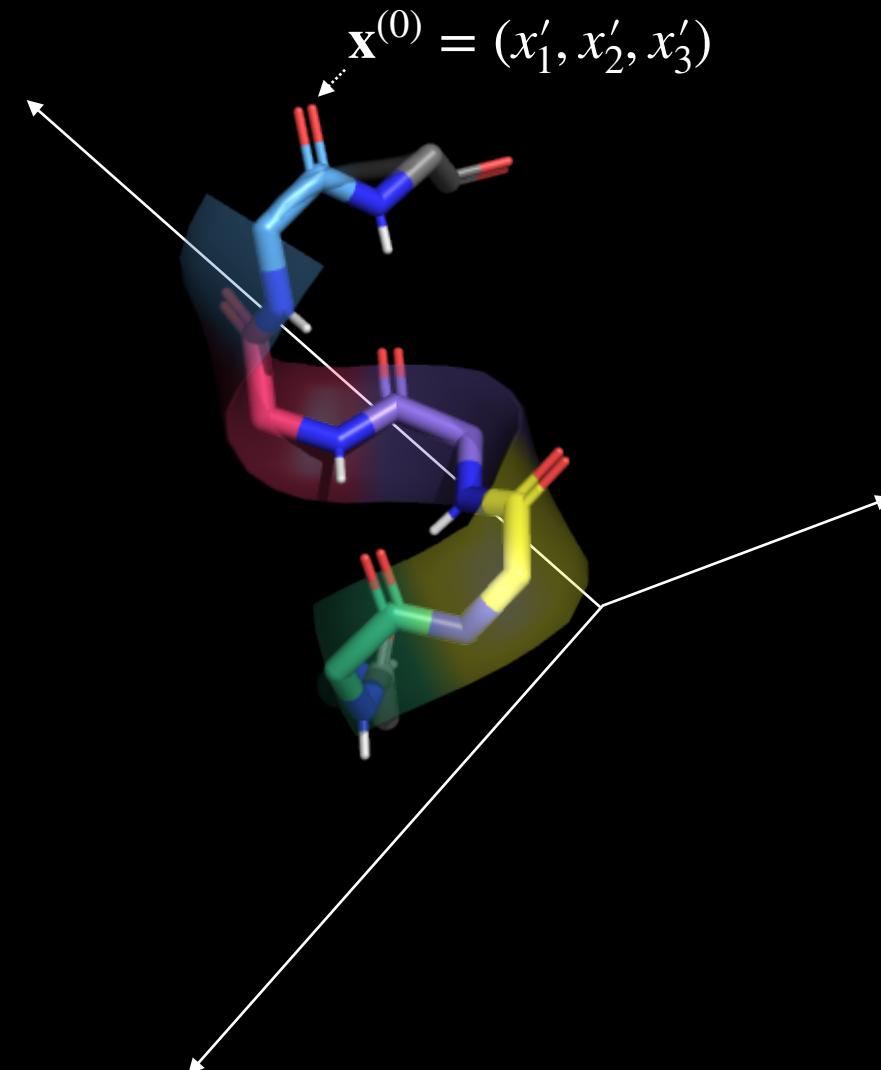
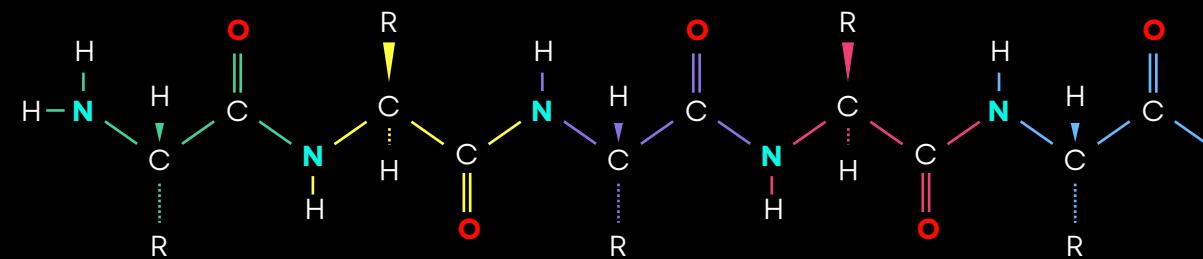
# Геометрия белка: инвариантность относительно движений

BICCAD



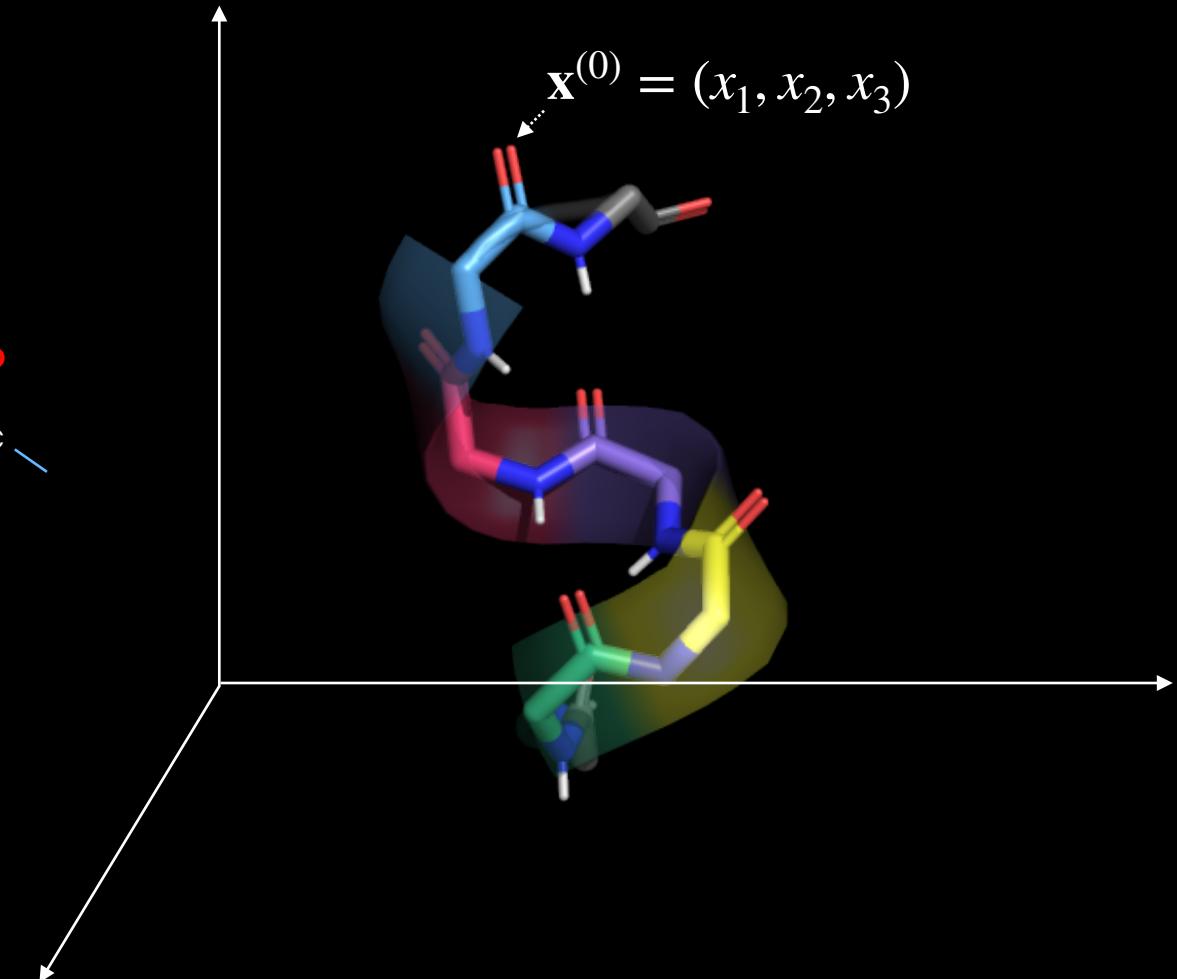
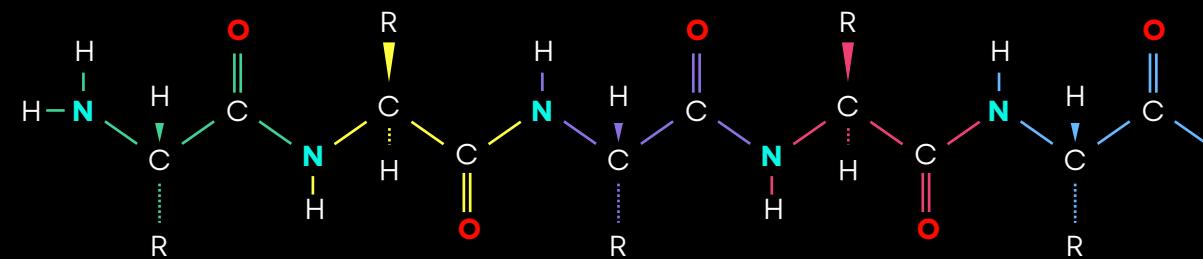
# Геометрия белка: инвариантность относительно движений

BIGCAD



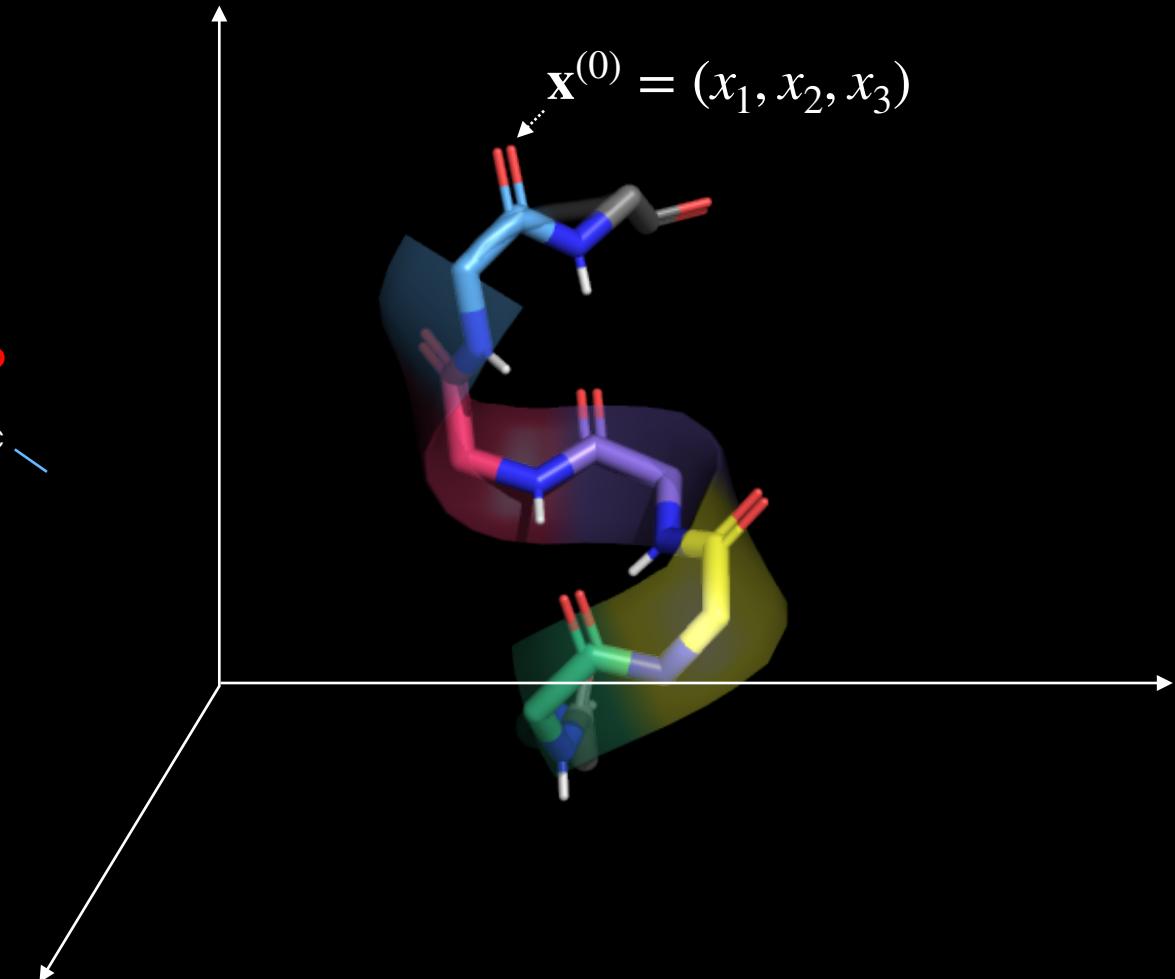
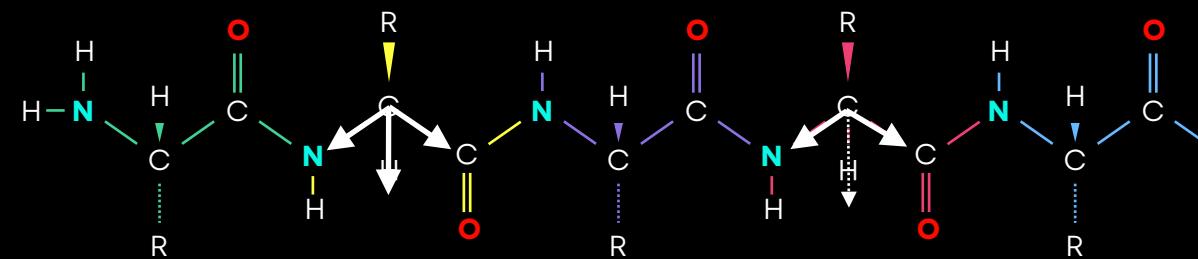
# Геометрия белка: положение и ориентация аминокислот

BICCAD



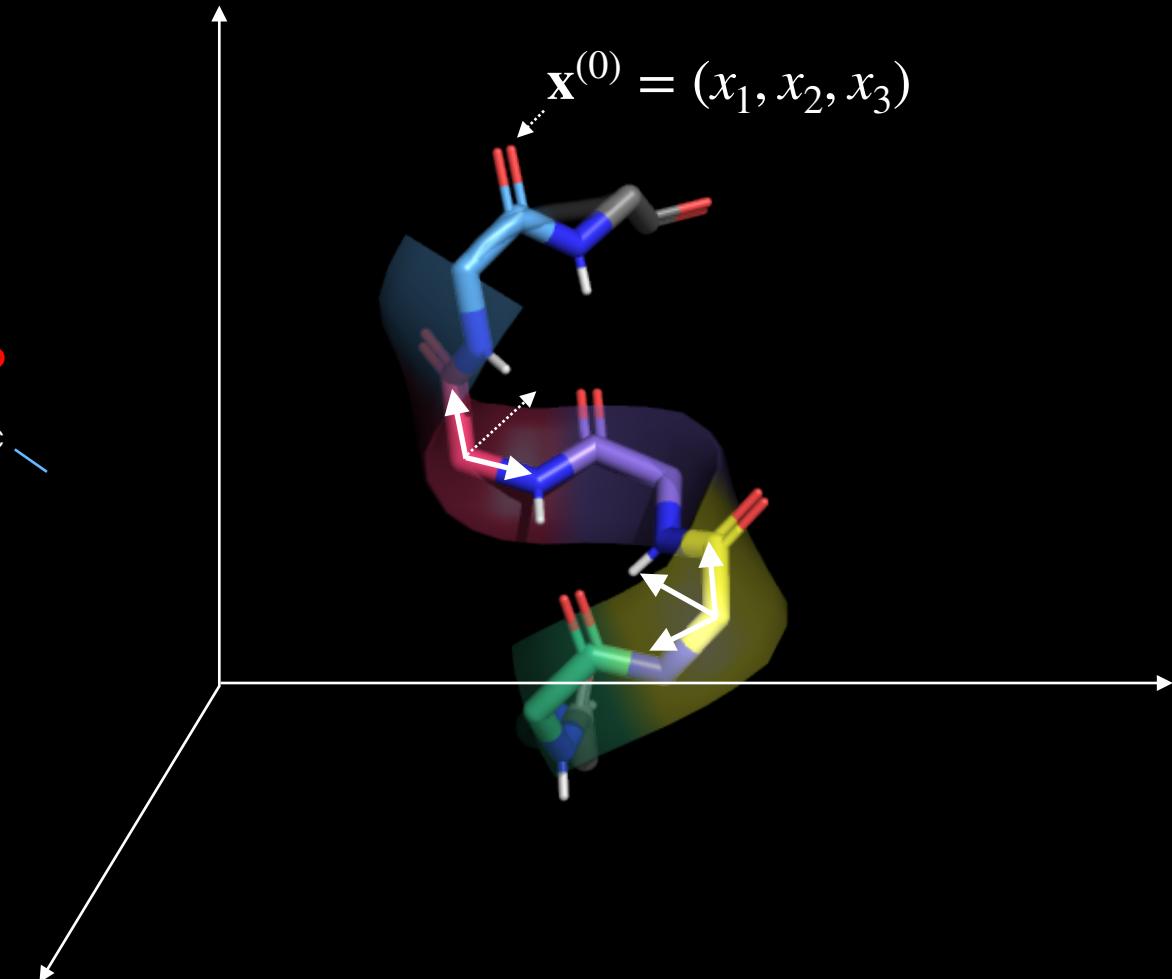
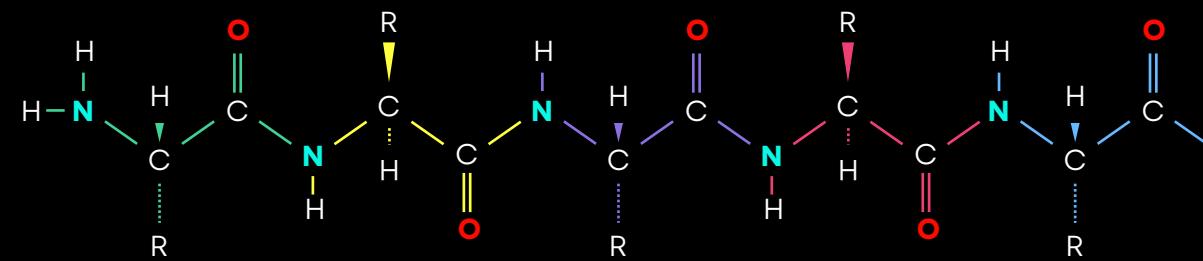
# Геометрия белка: положение и ориентация аминокислот

BICCAD



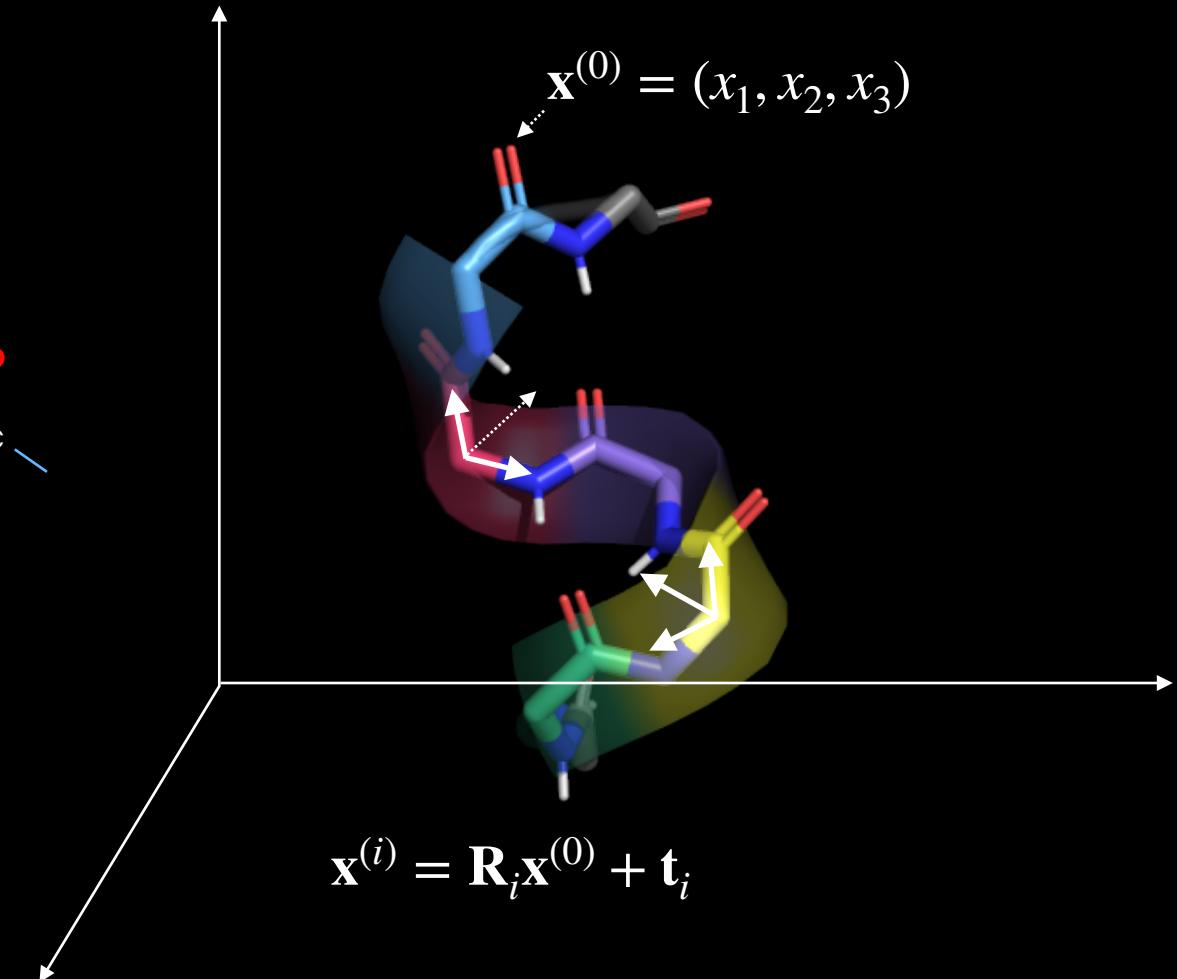
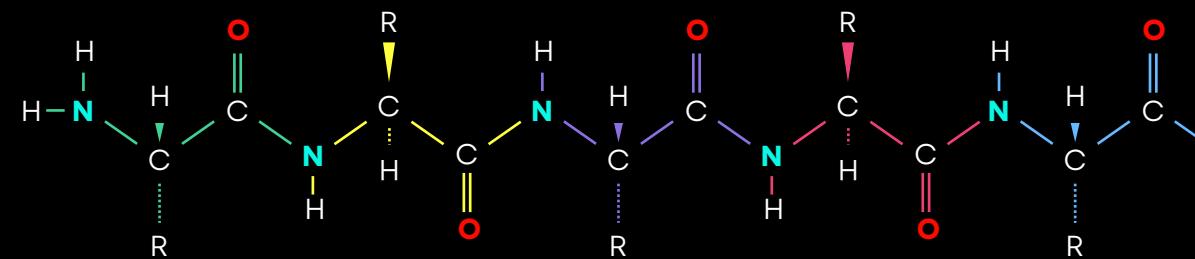
# Геометрия белка: положение и ориентация аминокислот

BICCAD



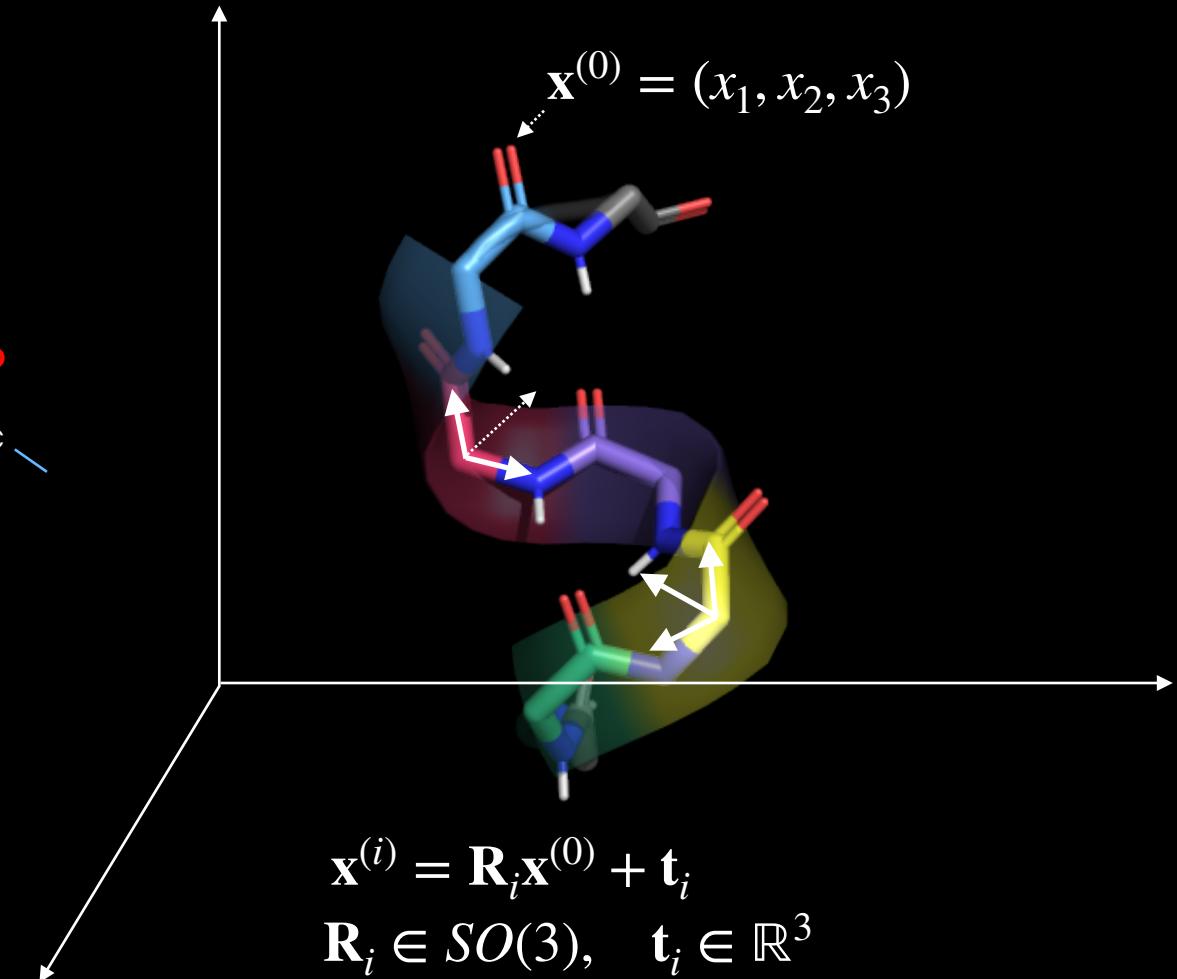
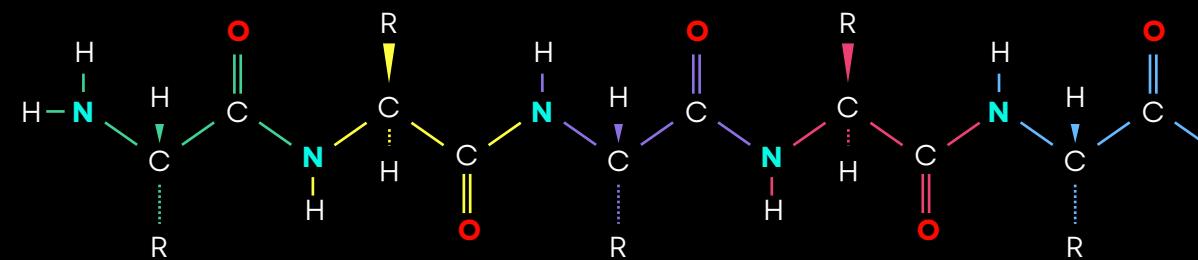
# Геометрия белка: положение и ориентация аминокислот

BICCAD



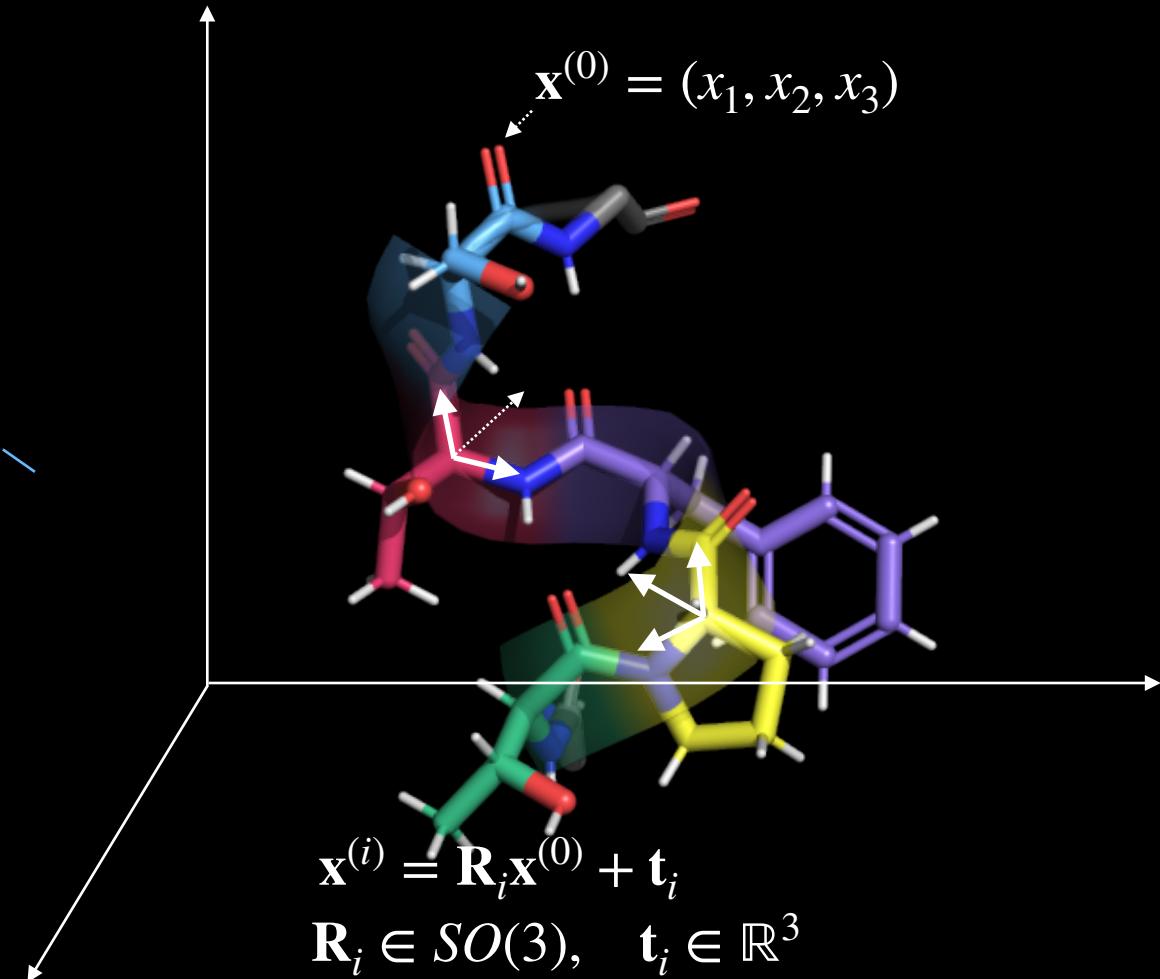
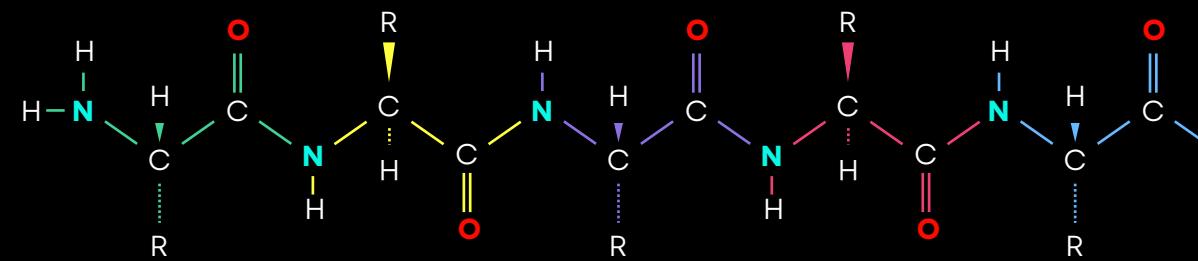
# Геометрия белка: положение и ориентация аминокислот

BICCAD



# Геометрия белка: положение и ориентация аминокислот

BICCAD



# От последовательности к аффинности

BICCAD

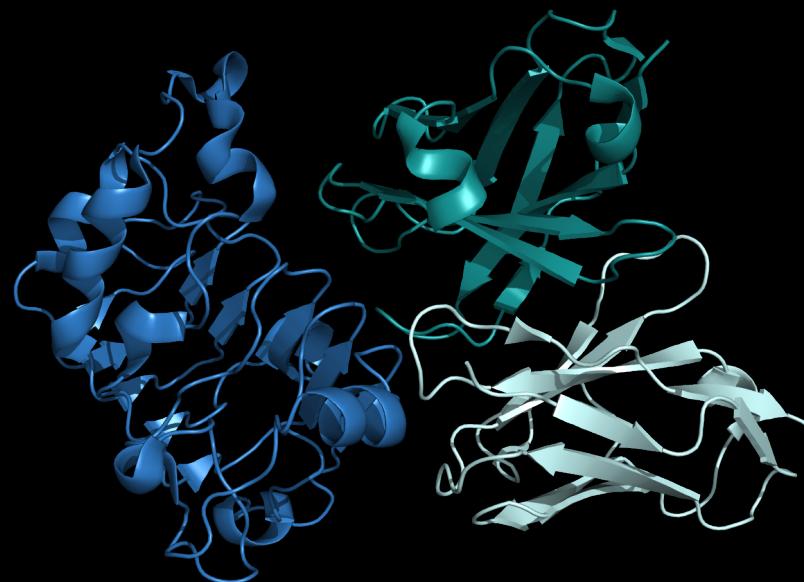
KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



$K_d$

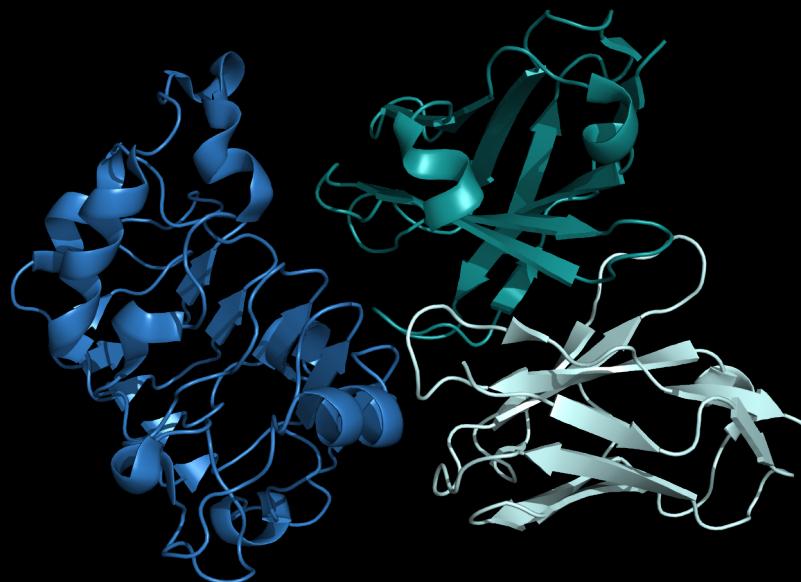
# Мера аффинности: константа диссоциации

BICCAD



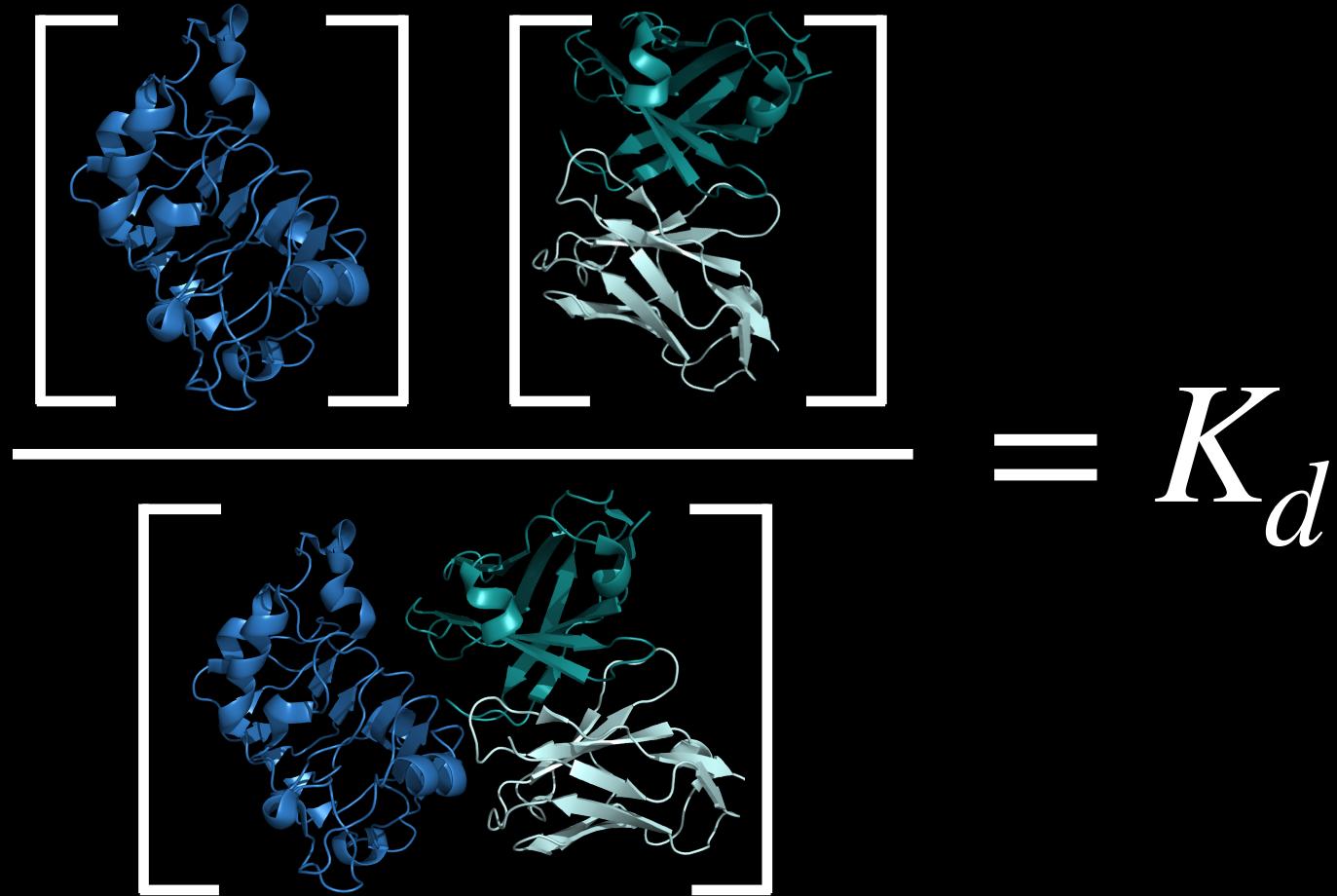
# Мера аффинности: константа диссоциации

BICCAD



## Мера аффинности: константа диссоциации

BICCAD



# От последовательности к аффинности

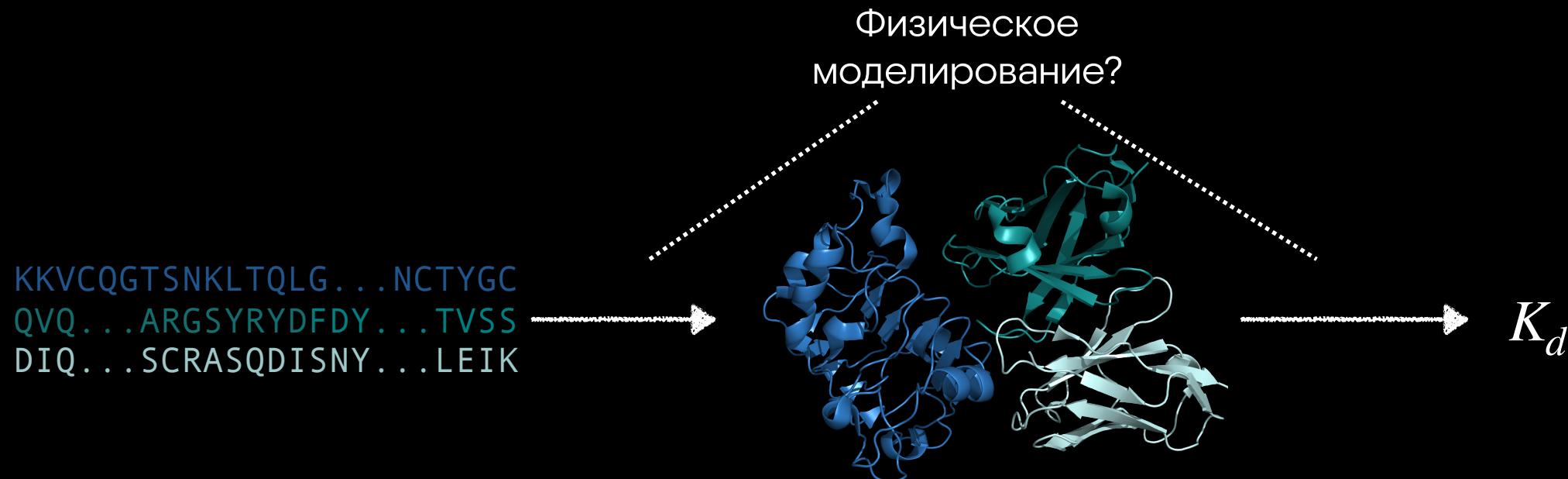
BICCAD

KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK

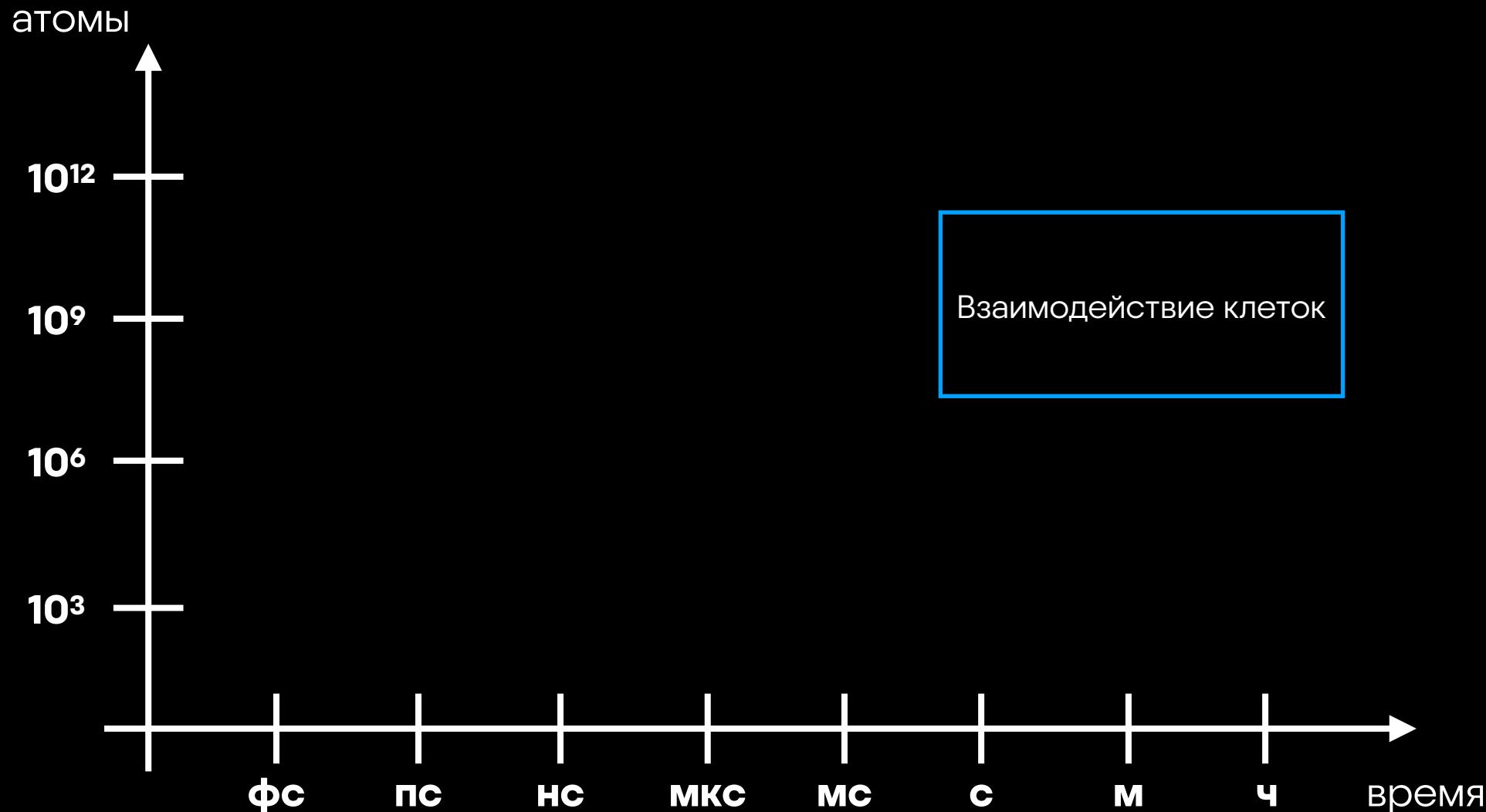


# От последовательности к аффинности

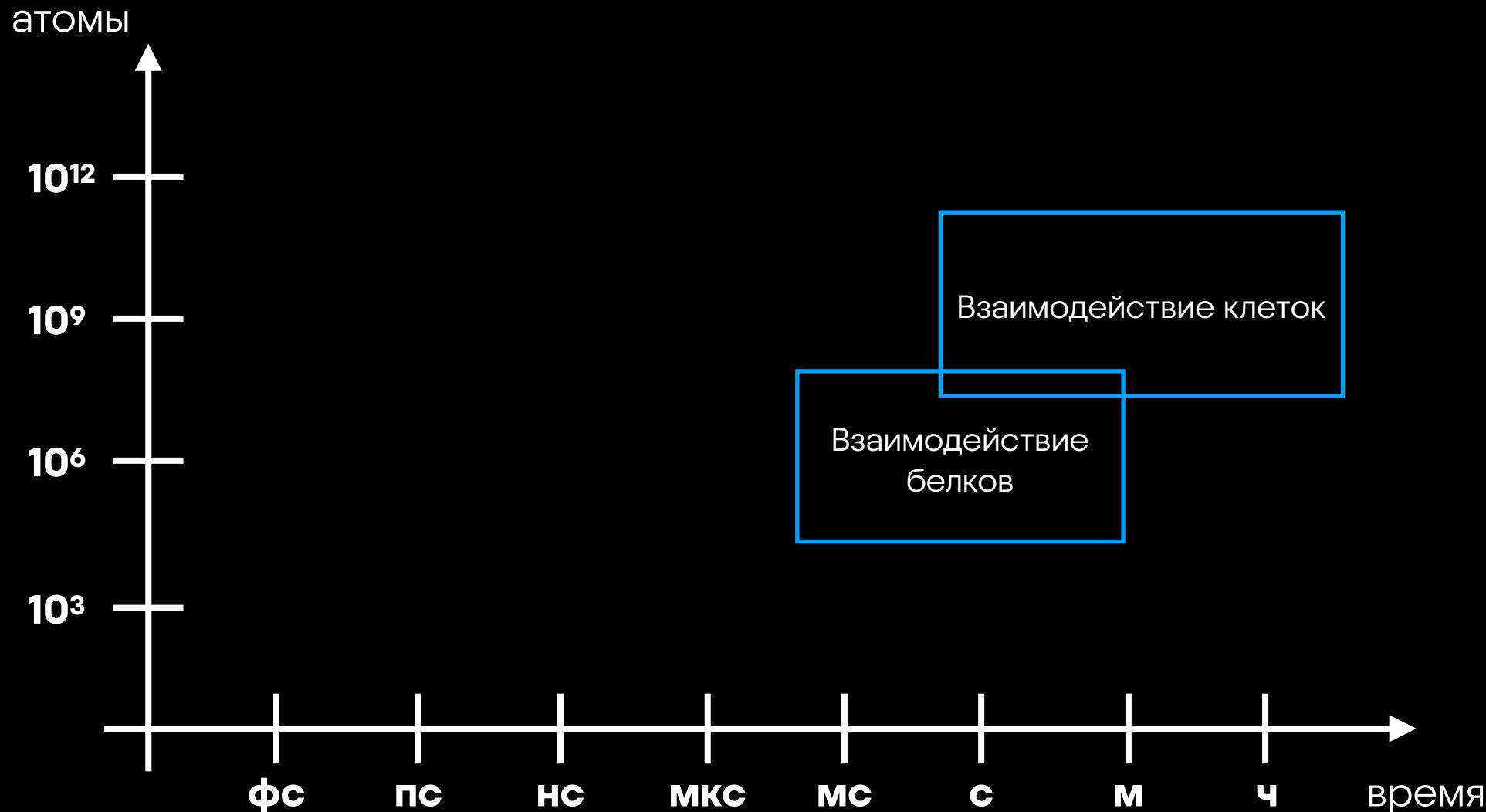
BICCAD



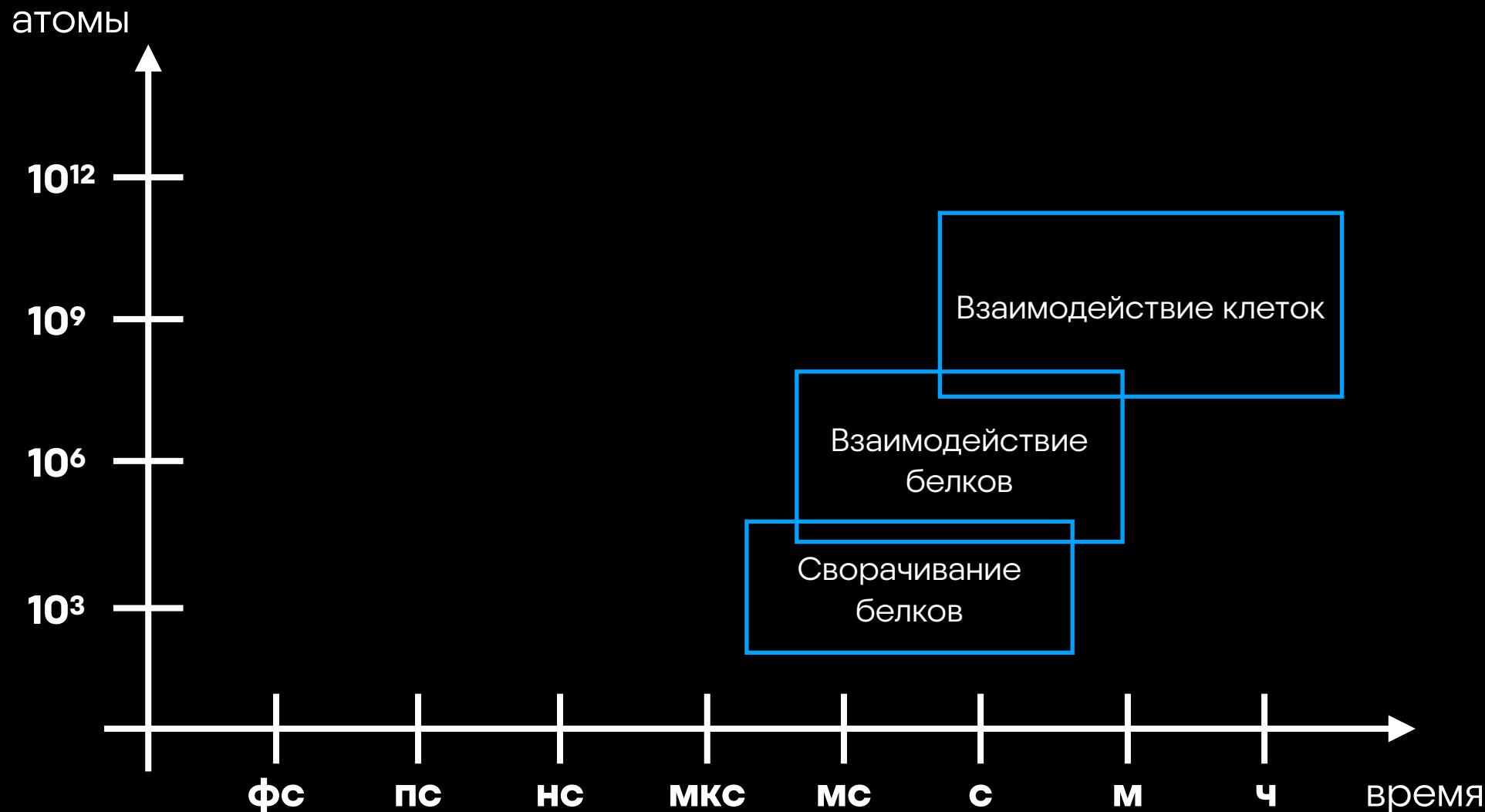
## Размеры атомных систем и длительность процессов



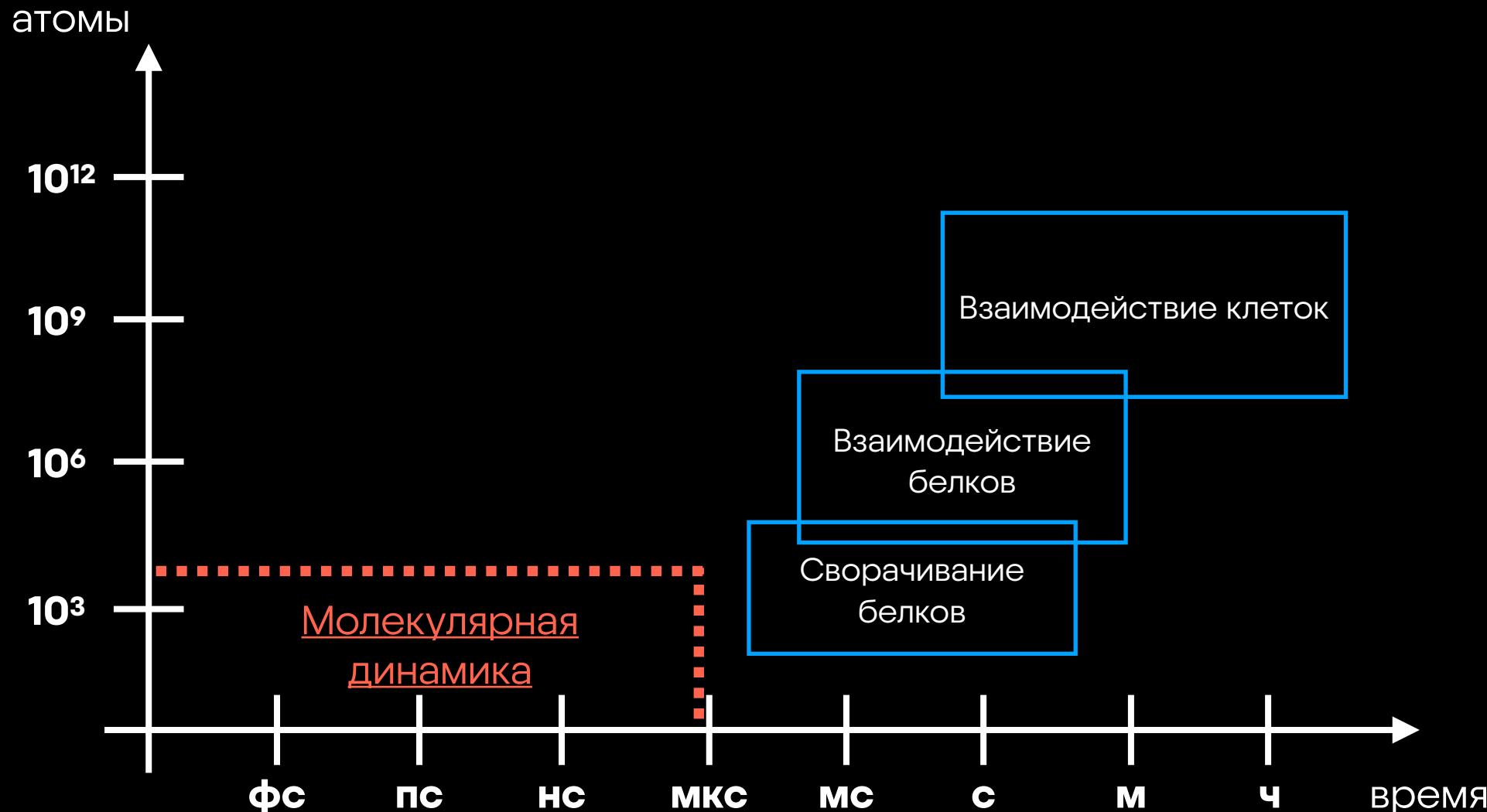
## Размеры атомных систем и длительность процессов



## Размеры атомных систем и длительность процессов



## Размеры атомных систем и длительность процессов

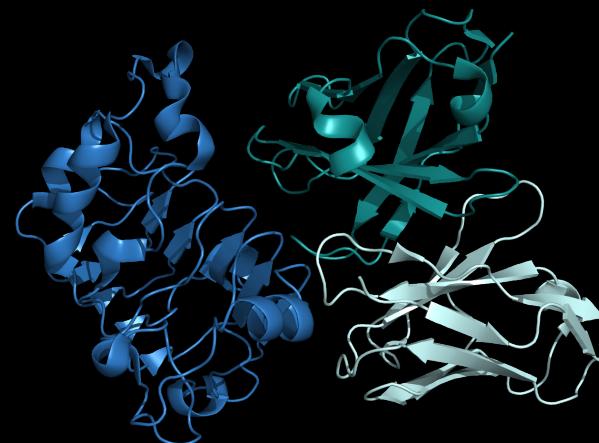


# От последовательности к аффинности через машинное обучение

BICCAD

KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK

Предсказание  
структуры

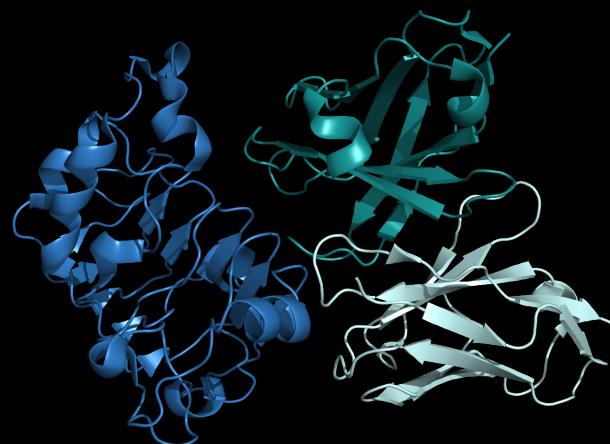


$$\longrightarrow K_d$$

Предсказание  
аффинности

# Предсказание аффинности по структуре комплекса

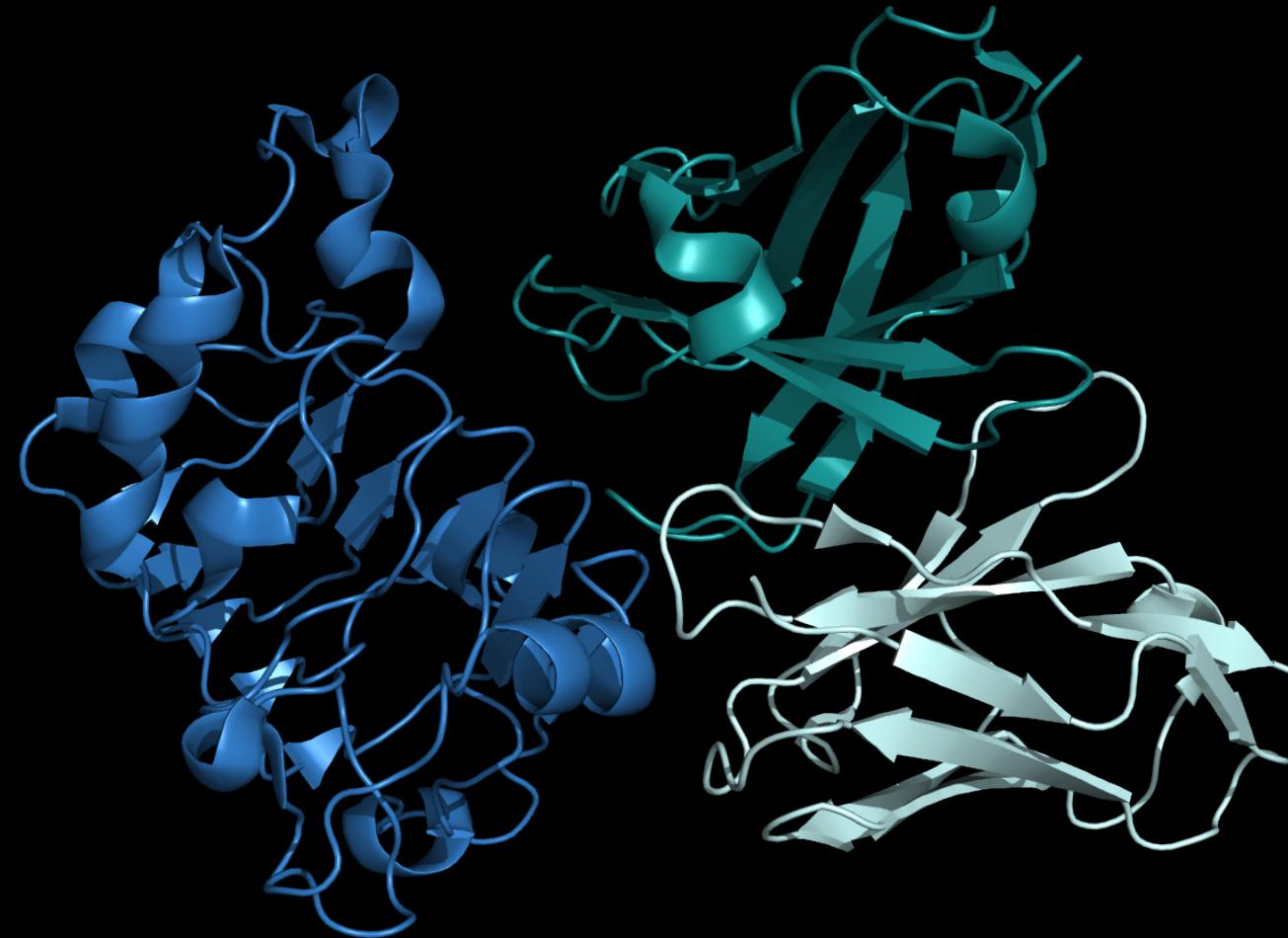
BICCAD



$$K_d$$

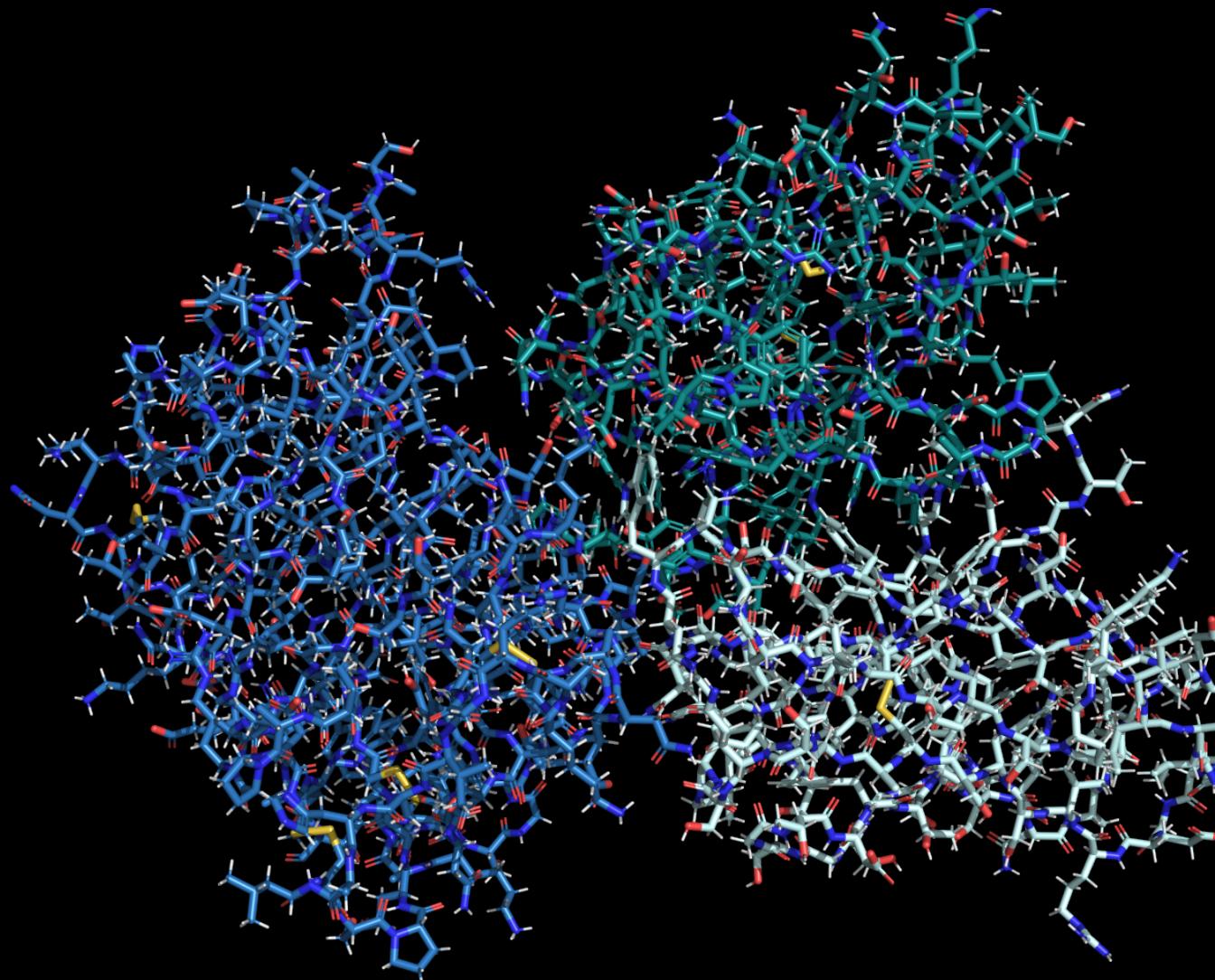
# Предсказание аффинности по структуре комплекса

BICCAD



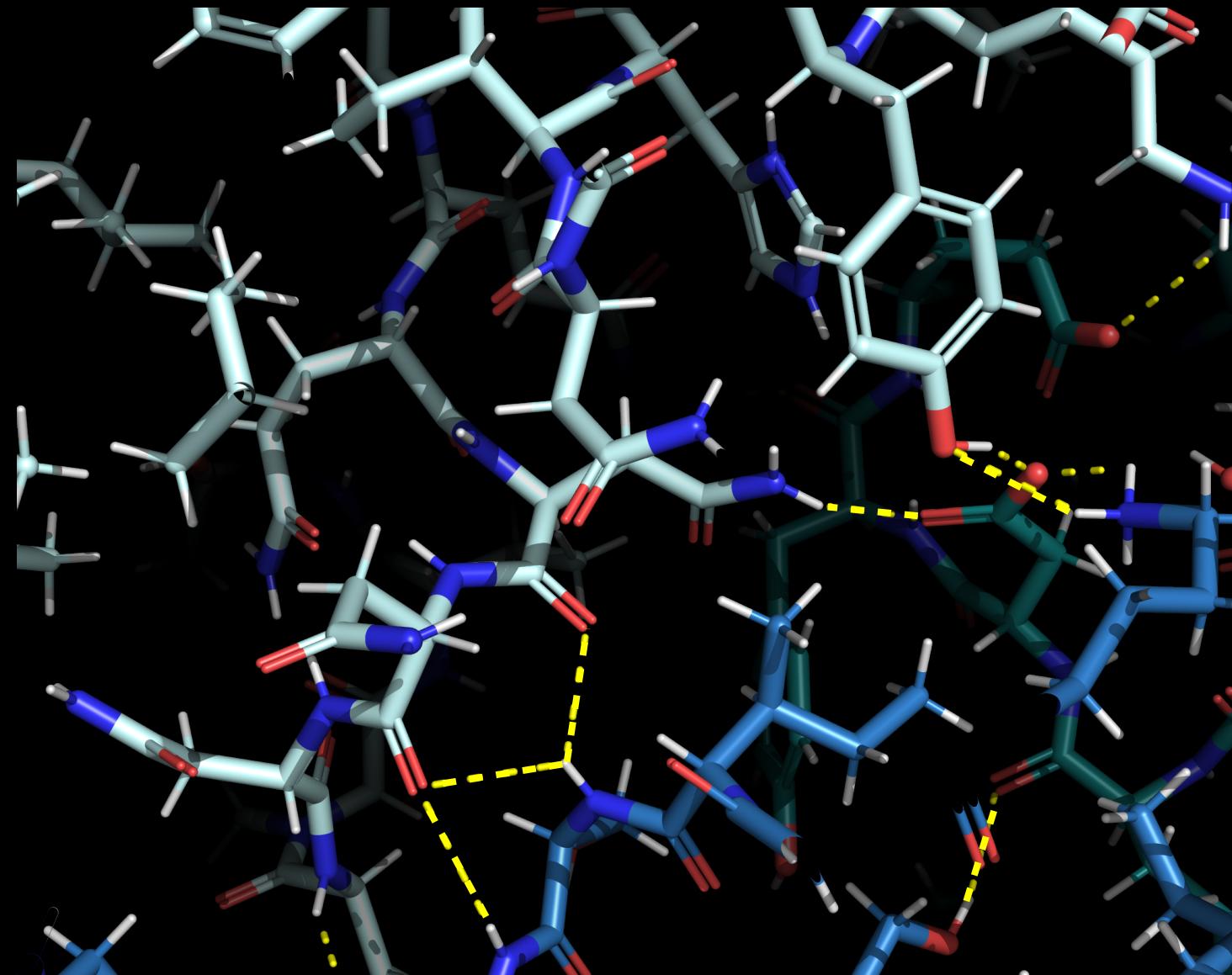
# Предсказание аффинности по структуре комплекса

BICCAD



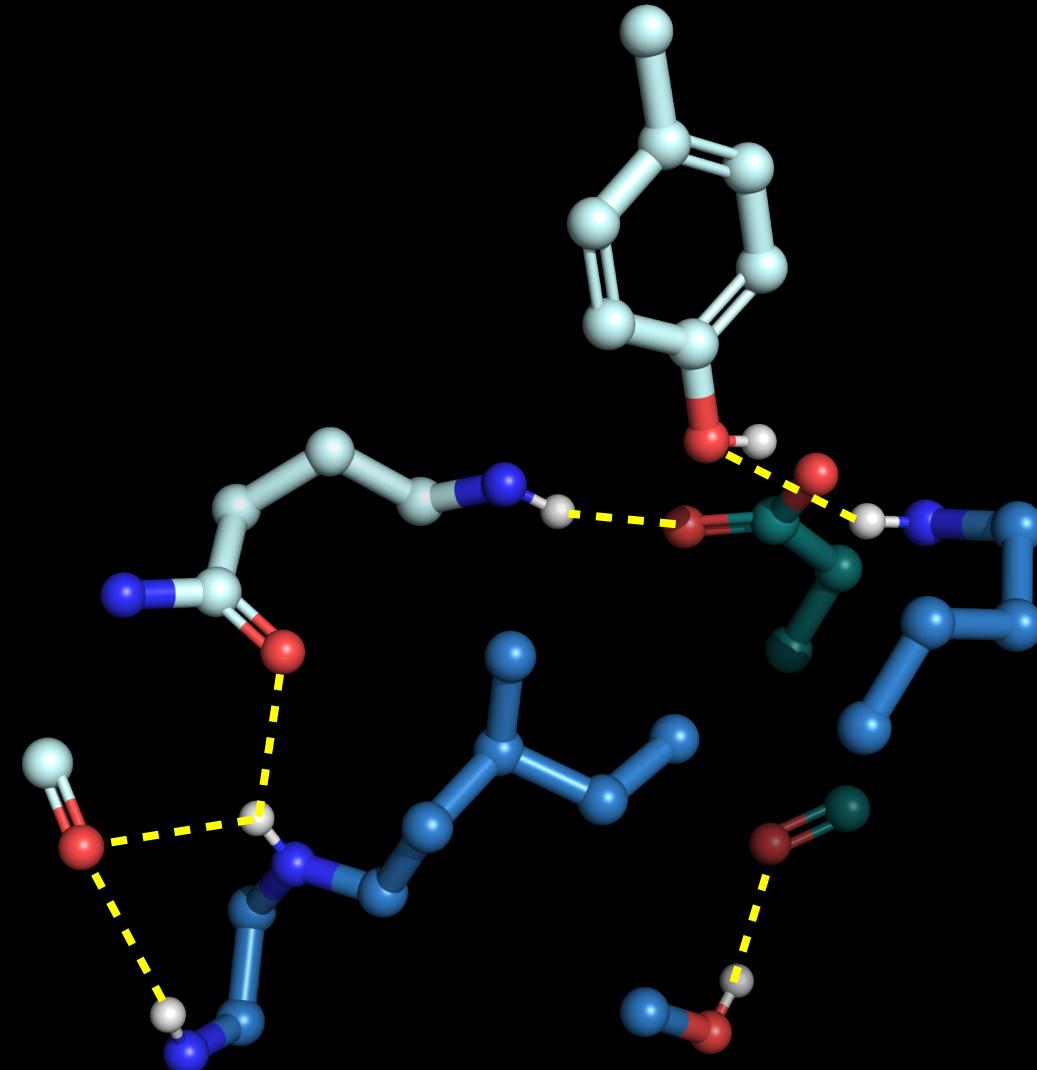
# Предсказание аффинности по структуре комплекса

BICCAD



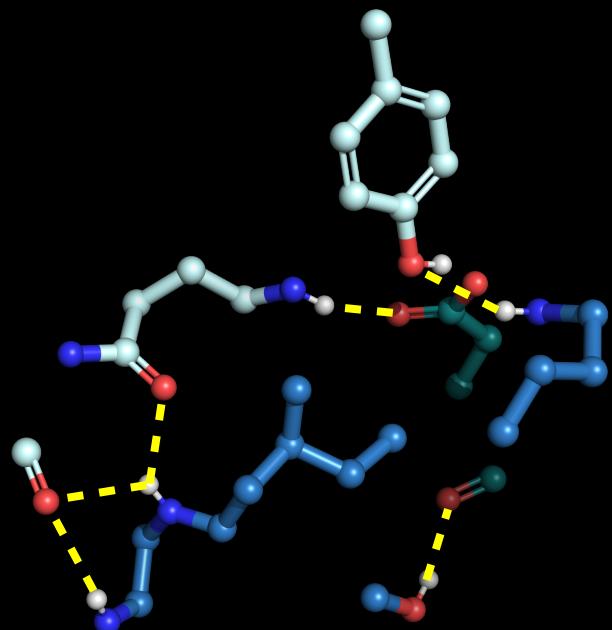
# Предсказание аффинности по структуре комплекса

BICCAD



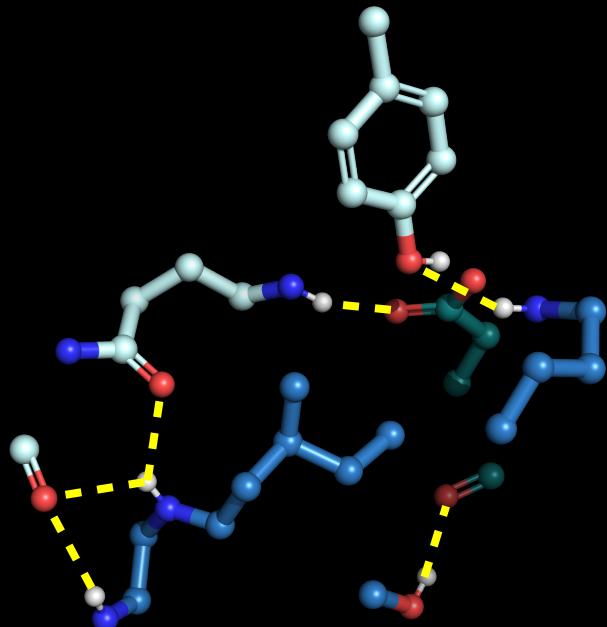
# Предсказание аффинности по структуре комплекса

BICCAD



# Предсказание аффинности по структуре комплекса

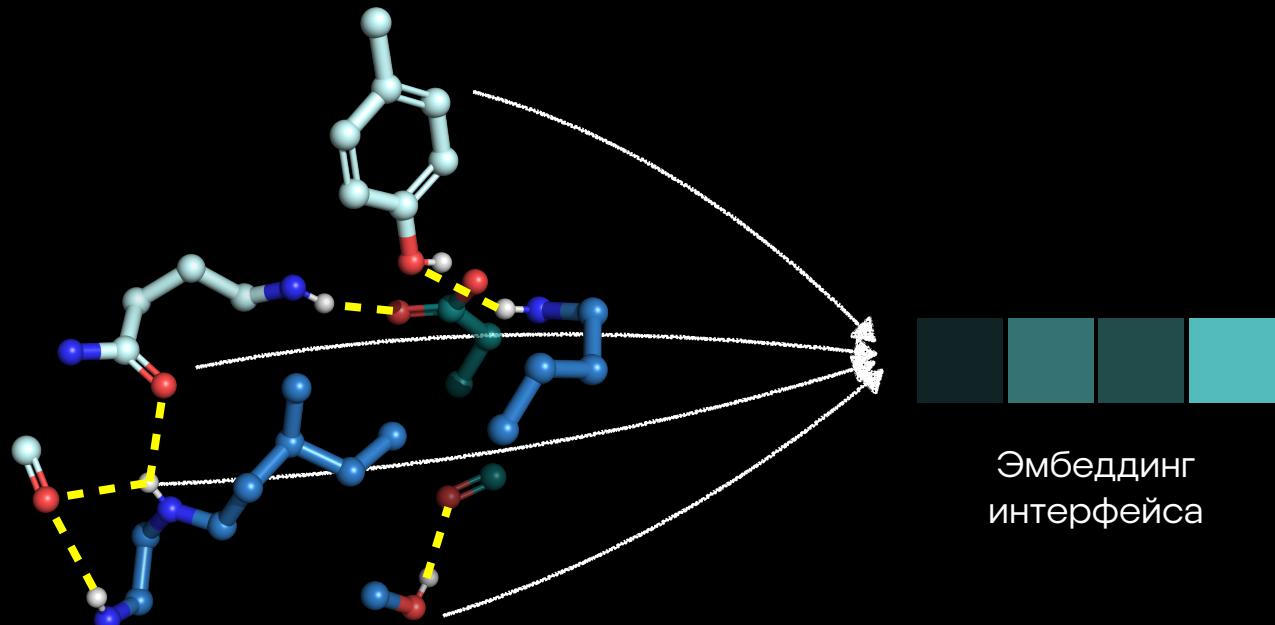
BICCAD



Эмбеддинг  
интерфейса

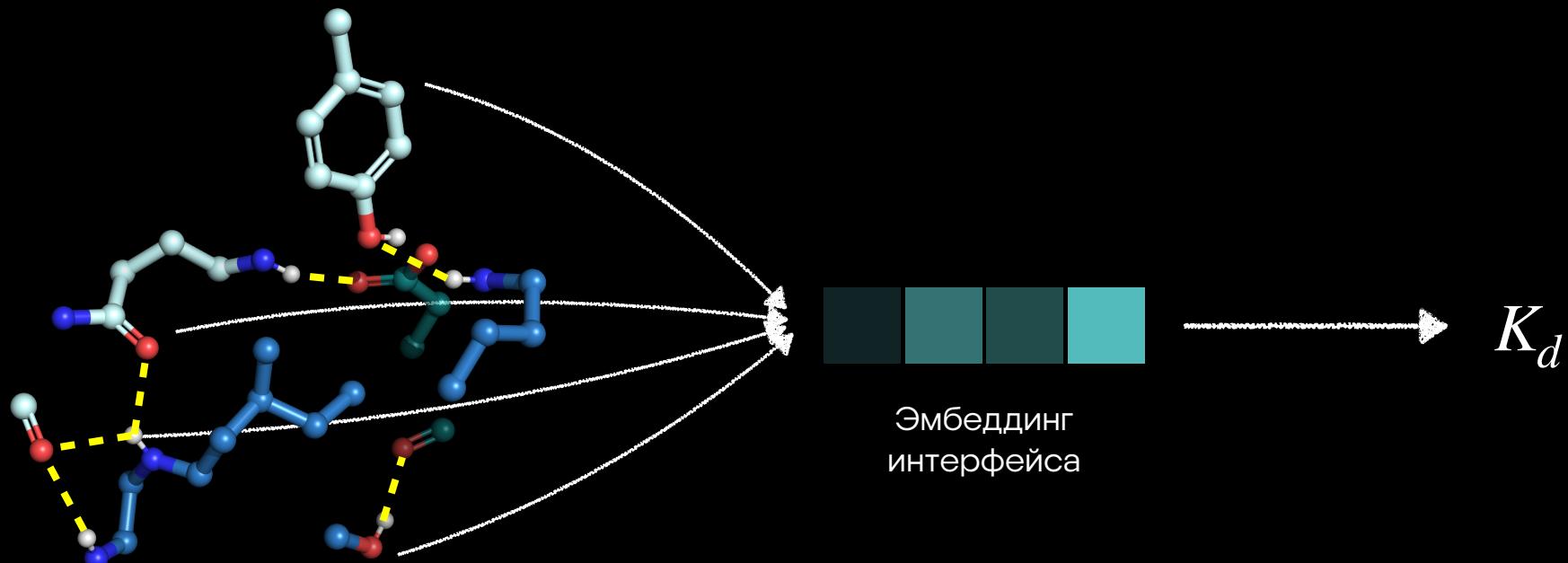
# Предсказание аффинности по структуре комплекса

BICCAD



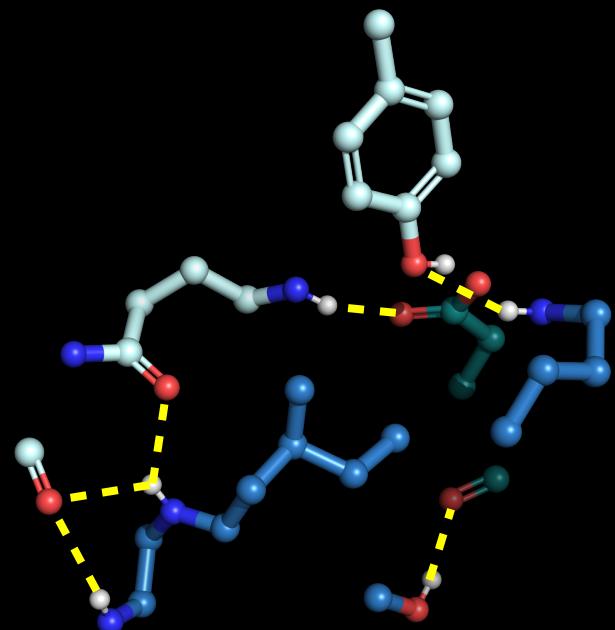
# Предсказание аффинности по структуре комплекса

BICCAD



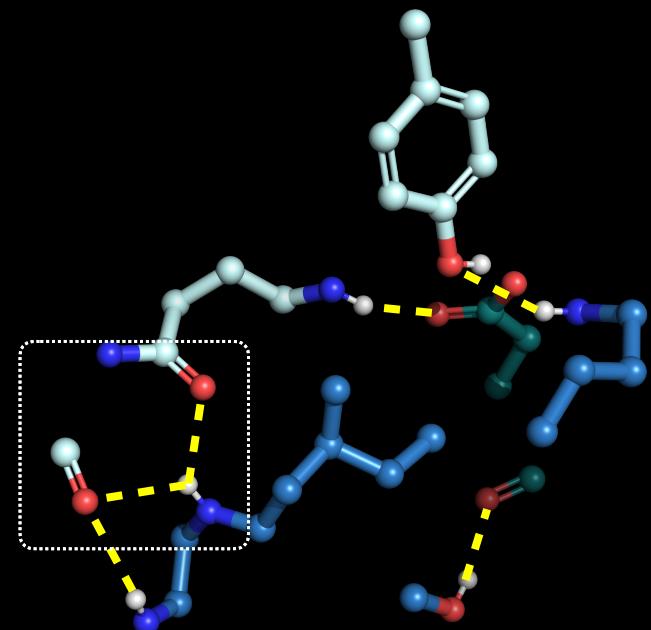
# Graph-level regression

BICCAD



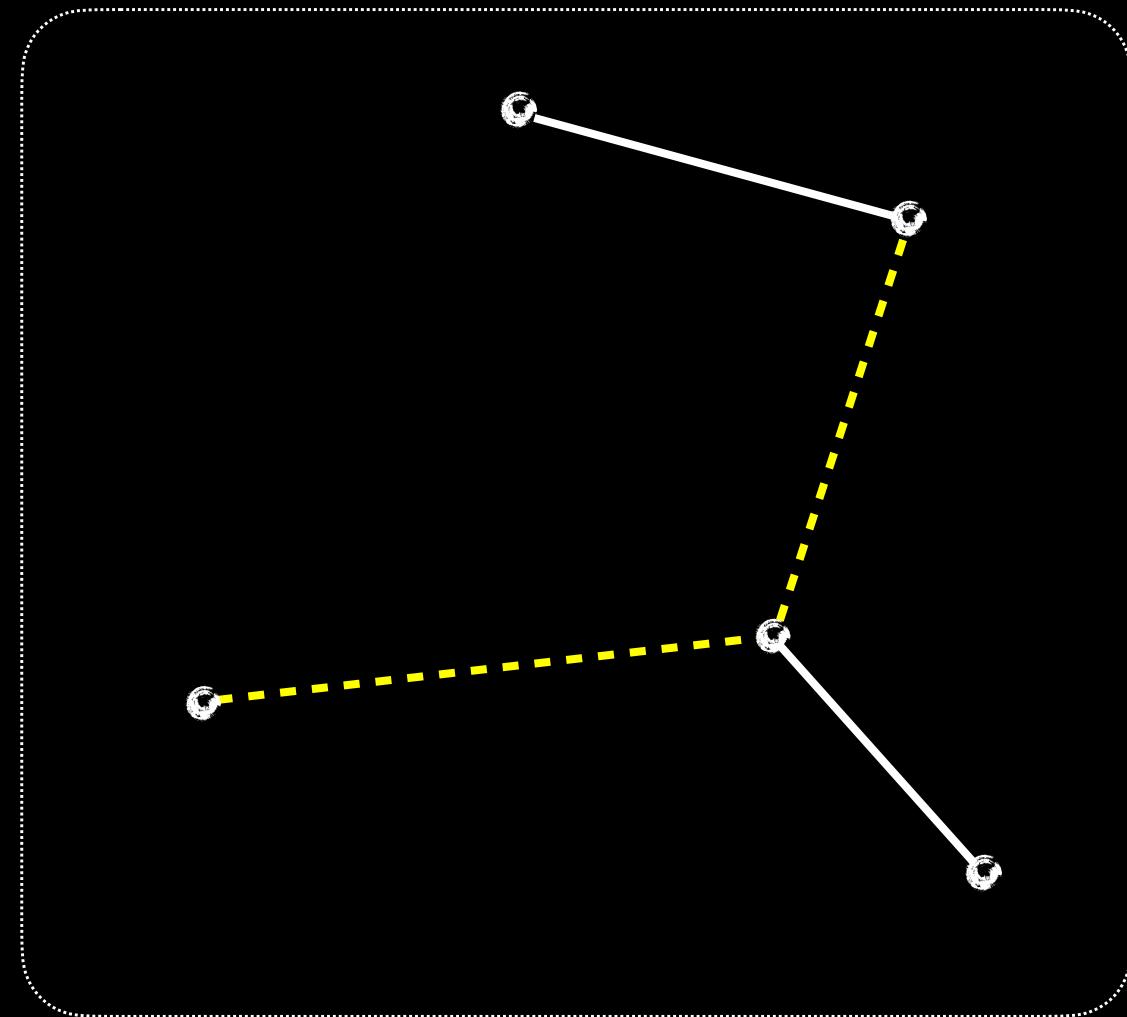
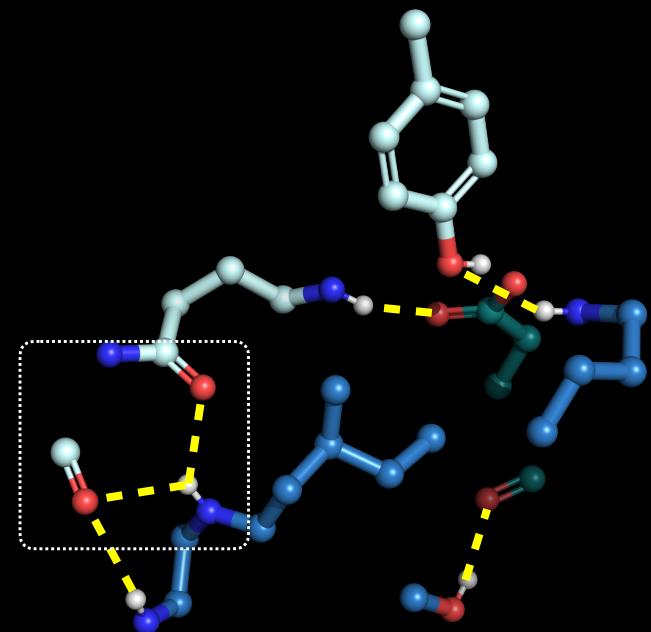
# Graph-level regression

BICCAD



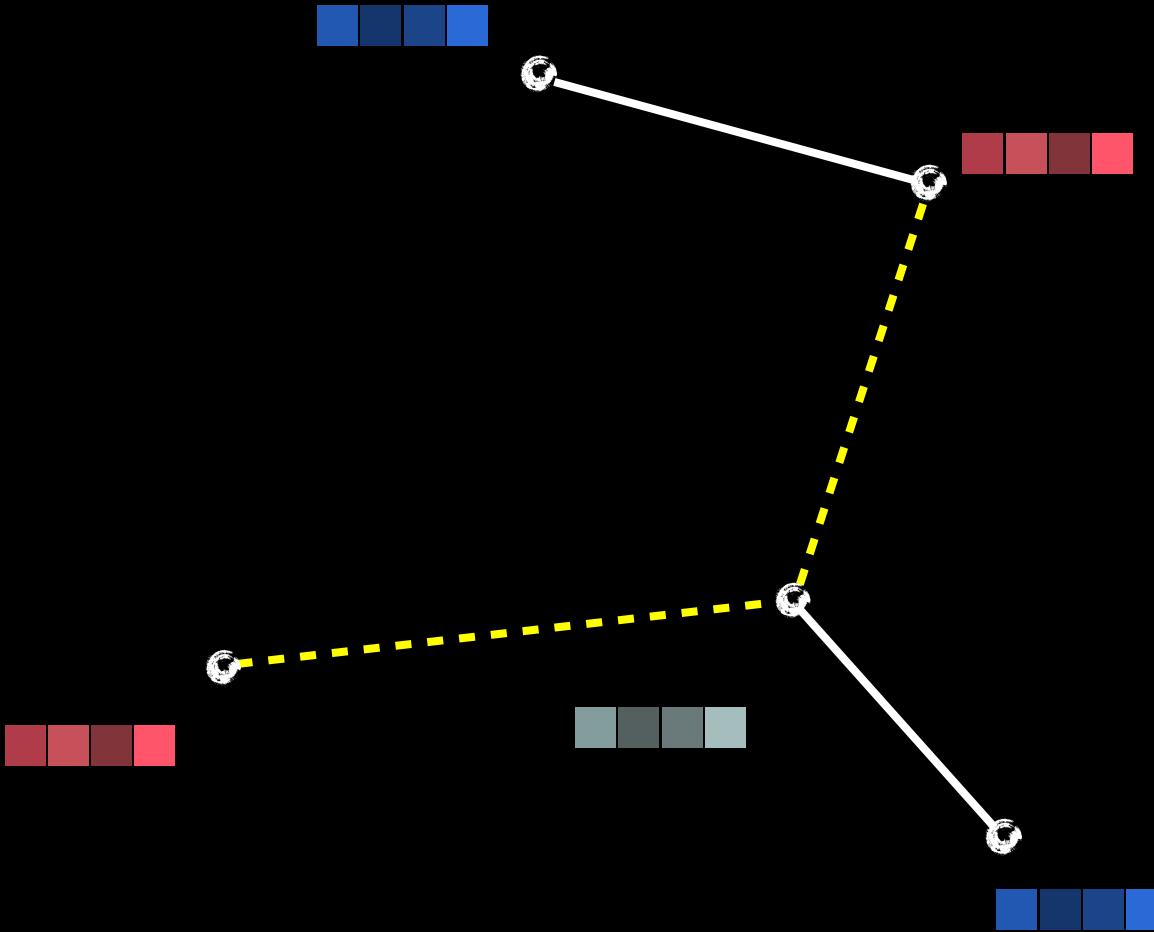
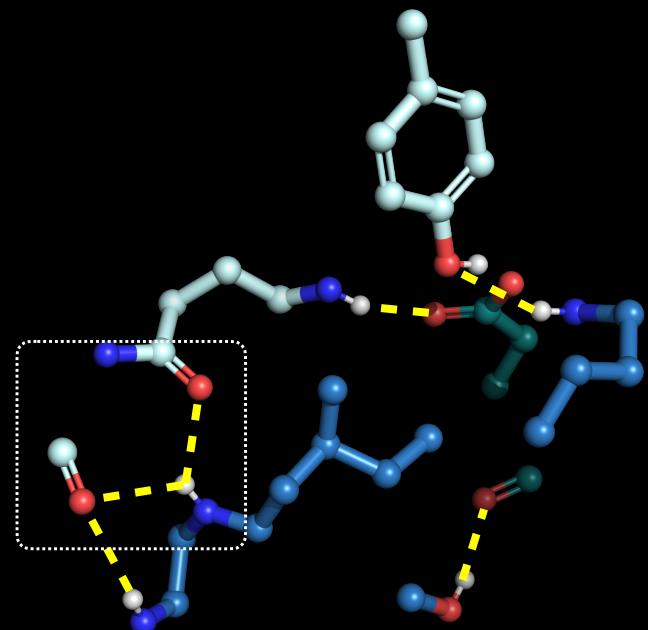
# Graph-level regression

BICCAD



# Graph-level regression

BICCAD



## 1. Message passing

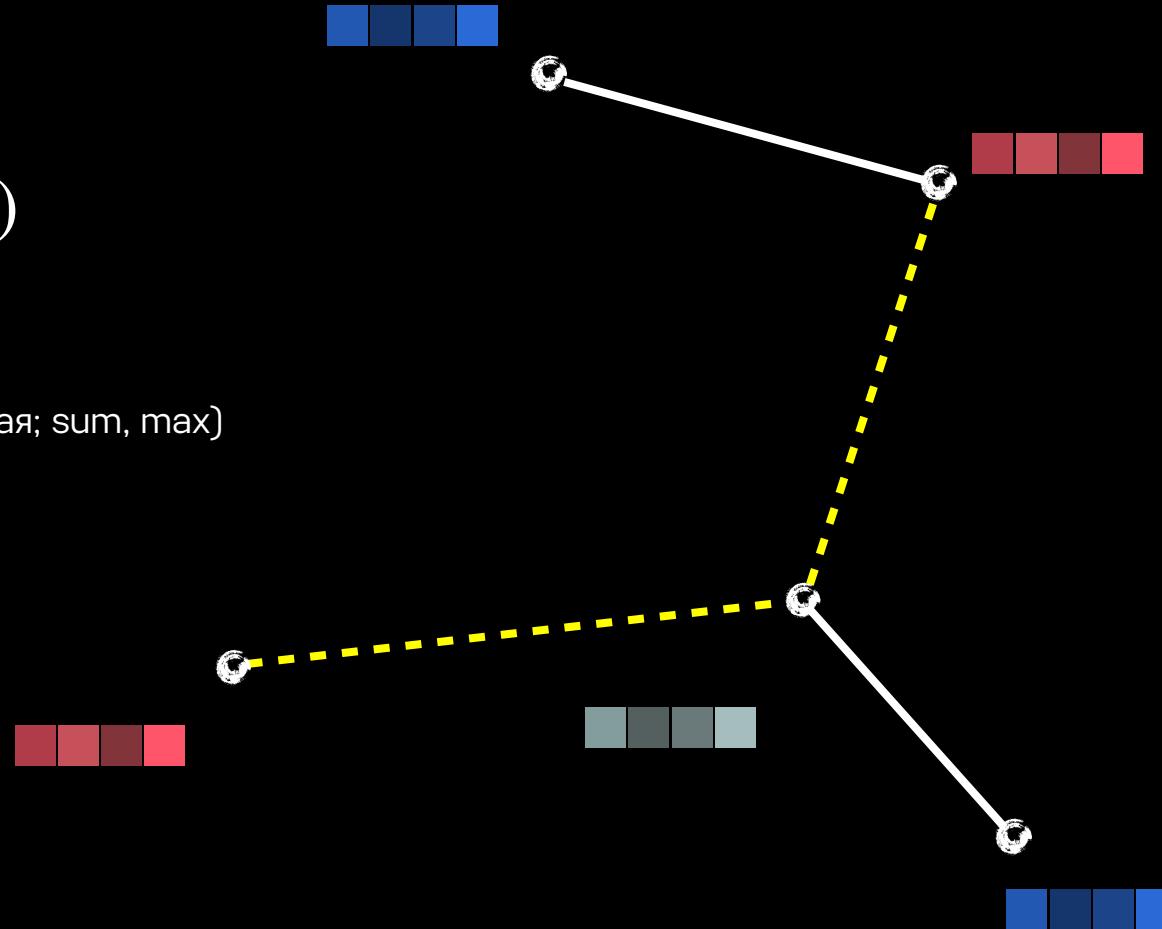
$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$



– функция агрегации (инвариантная; sum, max)

$j \in \mathcal{N}_i$  – соседи вершины  $i$

$f_\theta$  – функция сообщения



## 1. Message passing

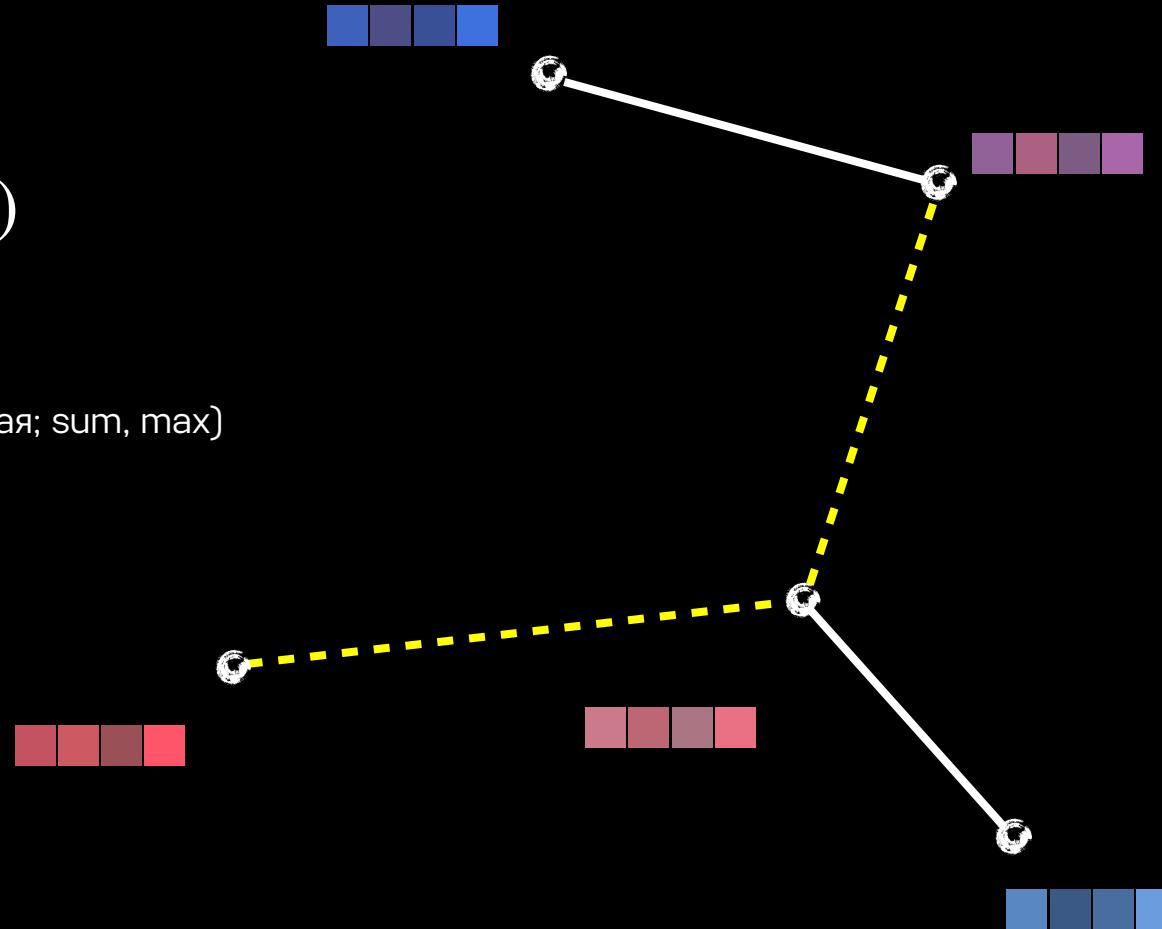
$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$



– функция агрегации (инвариантная; sum, max)

$j \in \mathcal{N}_i$  – соседи вершины  $i$

$f_\theta$  – функция сообщения

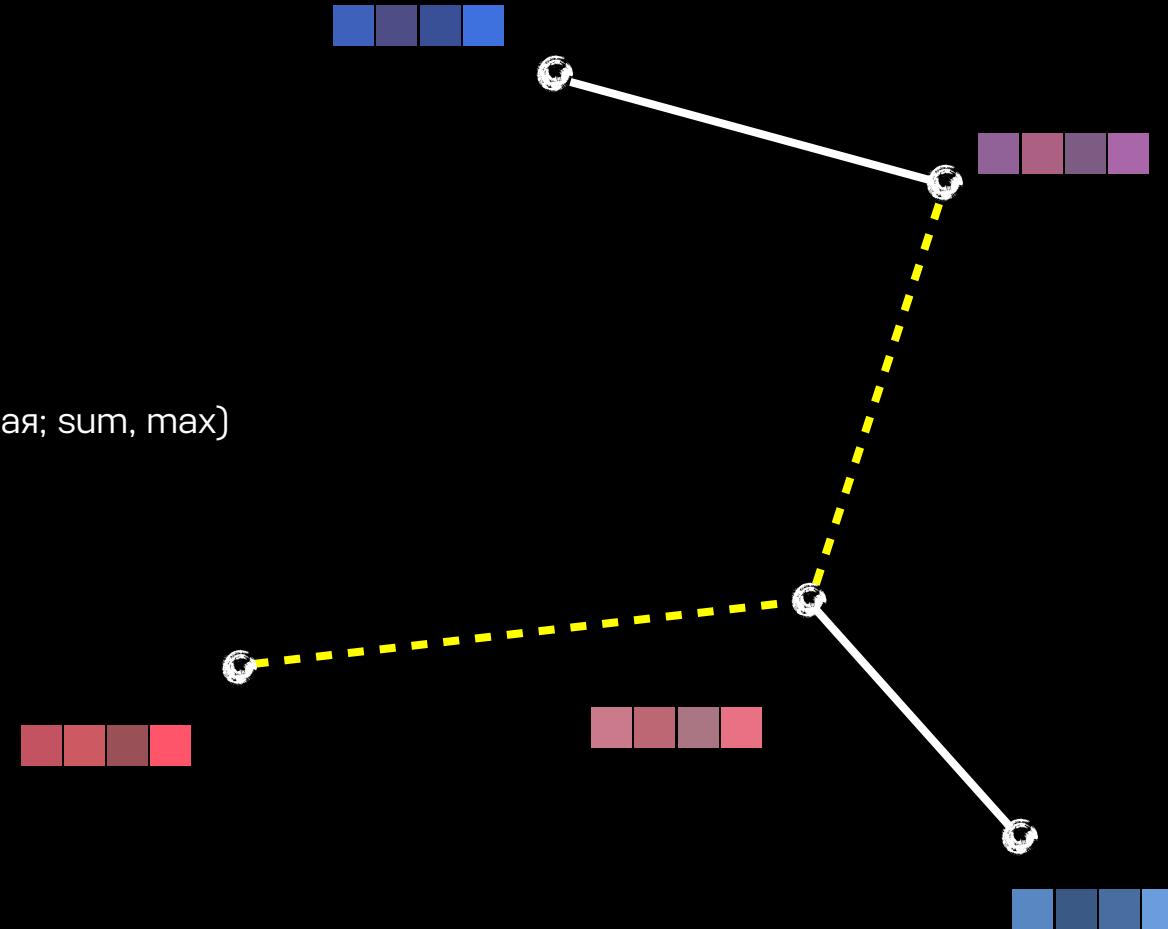


## 2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

$$\bigoplus_{j \in \mathcal{V}}$$

— функция агрегации (инвариантная; sum, max)

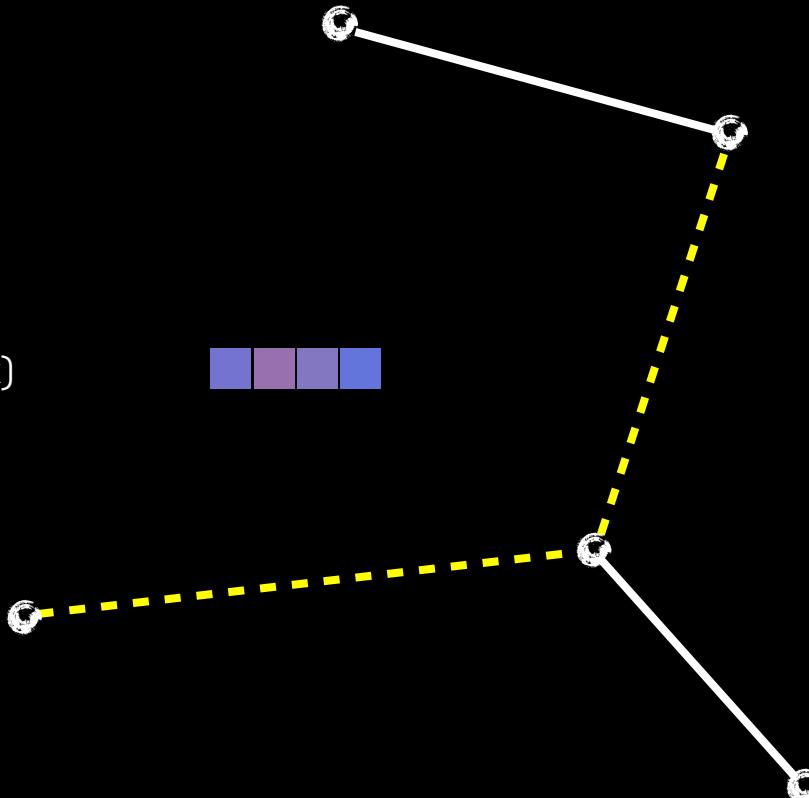


## 2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

$$\bigoplus_{j \in \mathcal{V}}$$

— функция агрегации (инвариантная; sum, max)



## 2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

$$\bigoplus_{j \in \mathcal{V}}$$

– функция агрегации (инвариантная; sum, max)



$$K_d$$

1. Message passing

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

1. Message passing

В свёрточных сетях

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

## 1. Message passing

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

В свёрточных сетях

Скалярное произведение кернела на патч с центром в пикселе  $i$

## 2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

## 1. Message passing

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

В свёрточных сетях

Скалярное произведение кернела на патч с центром в пикселе  $i$

## 2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

Global max pooling

1. Message passing

В рекуррентных сетях

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

1. Message passing

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

В рекуррентных сетях

Обновление рекуррентной ячейки

2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

## 1. Message passing

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

В рекуррентных сетях

Обновление рекуррентной ячейки

## 2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

Последнее состояние

1. Message passing

В трансформерах

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

1. Message passing

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

В трансформерах

Multi-head attention

2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

1. Message passing

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

В трансформерах

Multi-head attention

2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

Global avg pooling

1. Message passing

$$h_i^{(t+1)} = h_i^{(t)} + \bigoplus_{j \in \mathcal{N}_i} f_\theta(h_i^{(t)}, h_j^{(t)})$$

В трансформерах

Multi-head attention

2. Readout

$$h_{\mathcal{V}}^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{V}} h_j^{(t)}$$

Global avg pooling  
<CLS> token readout

# От последовательности к аффинности

BICCAD

KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD

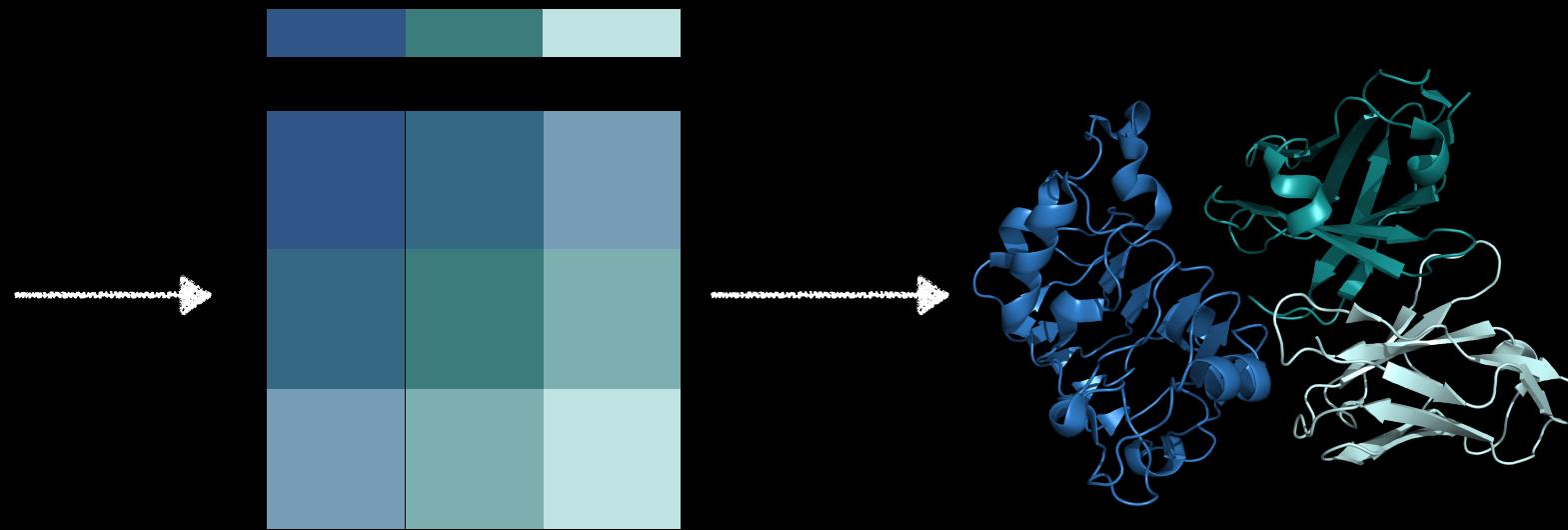
KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

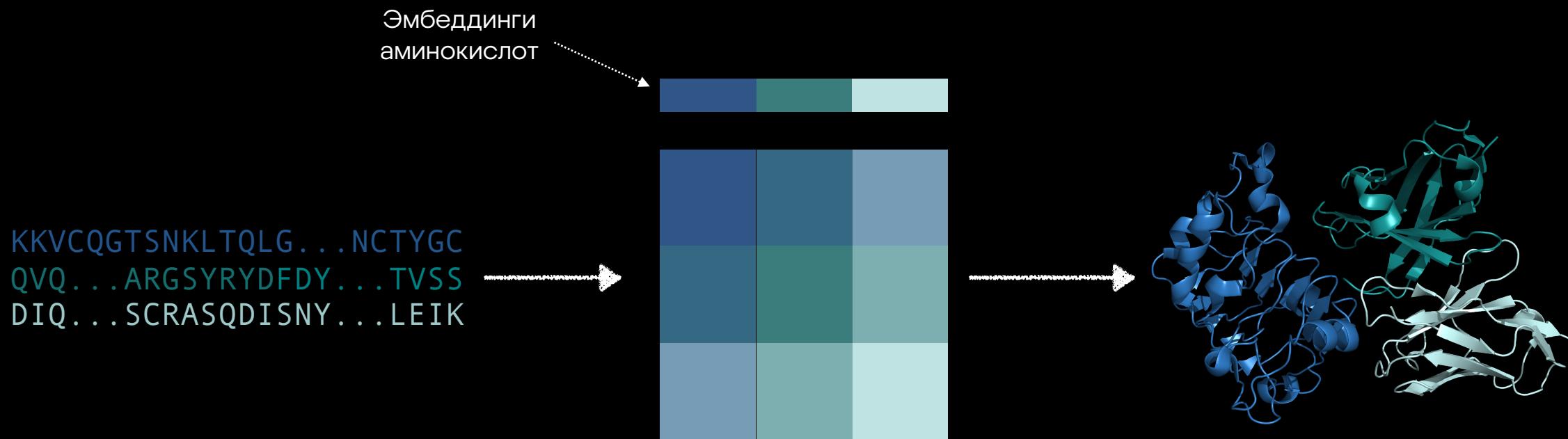
BICCAD

KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



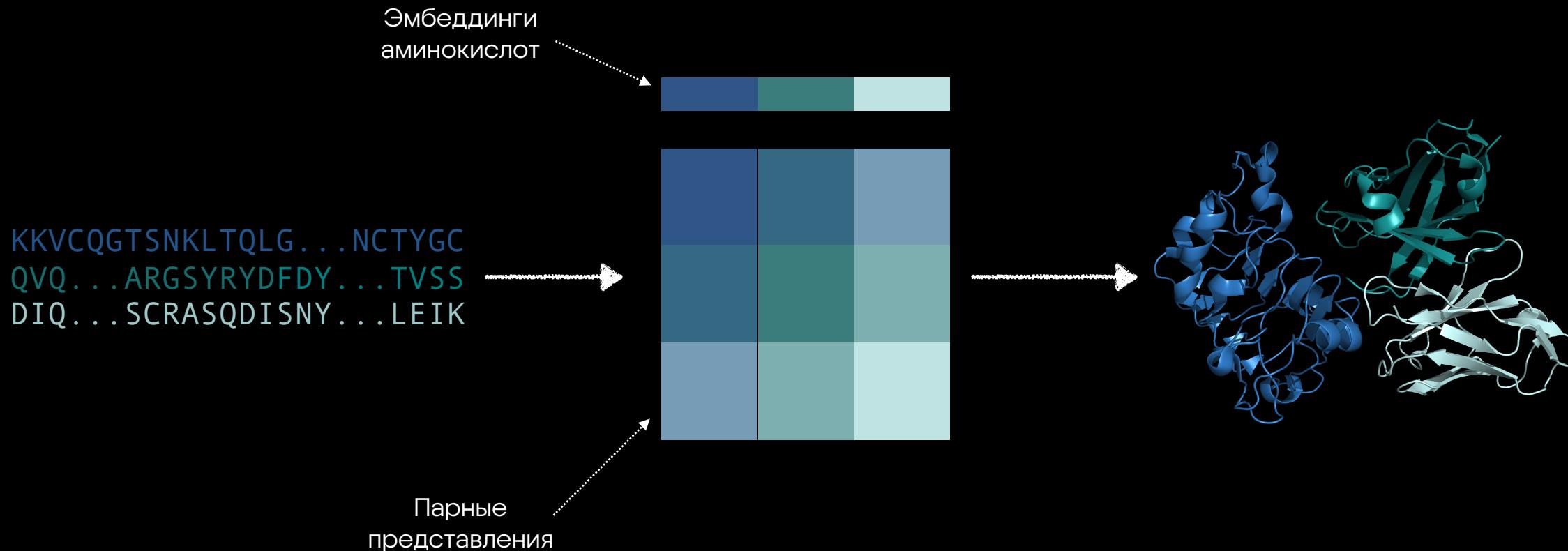
# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD



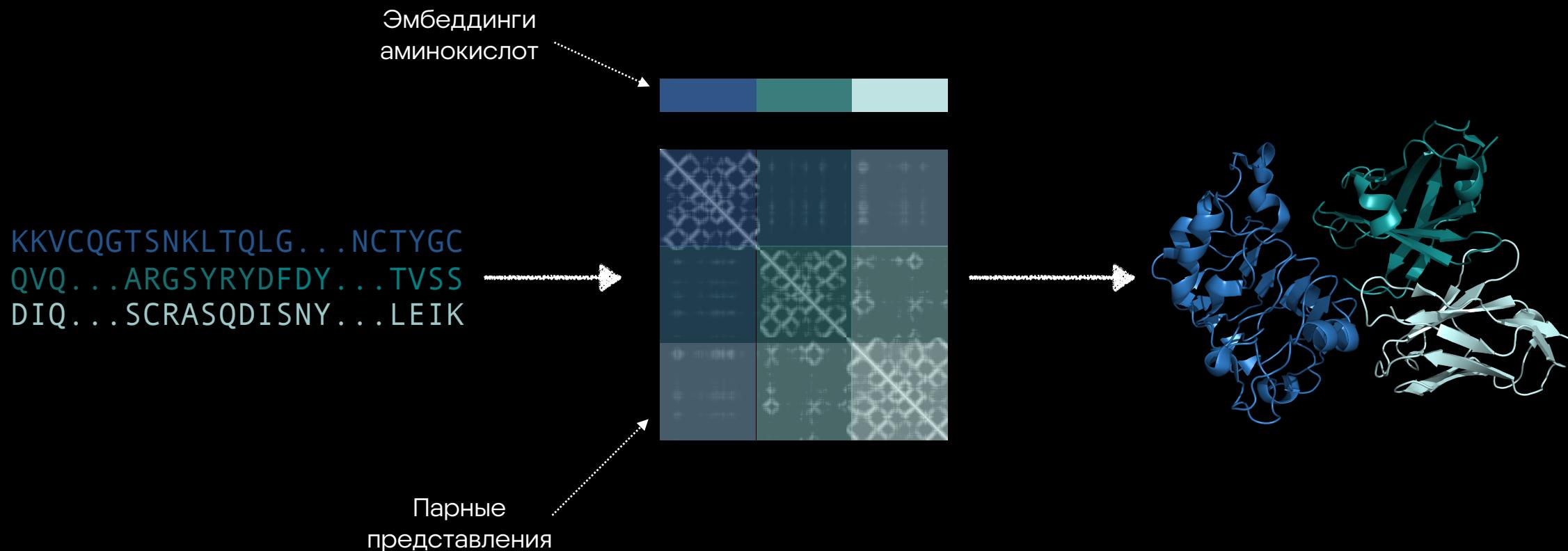
# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD



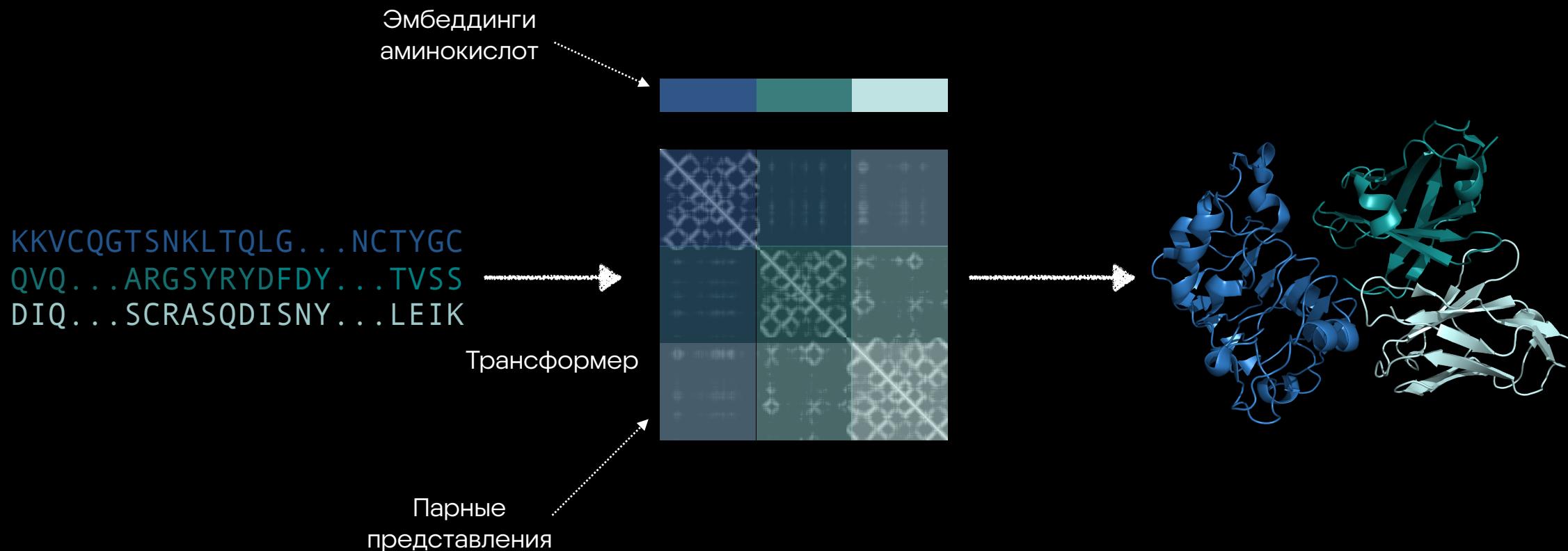
# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD



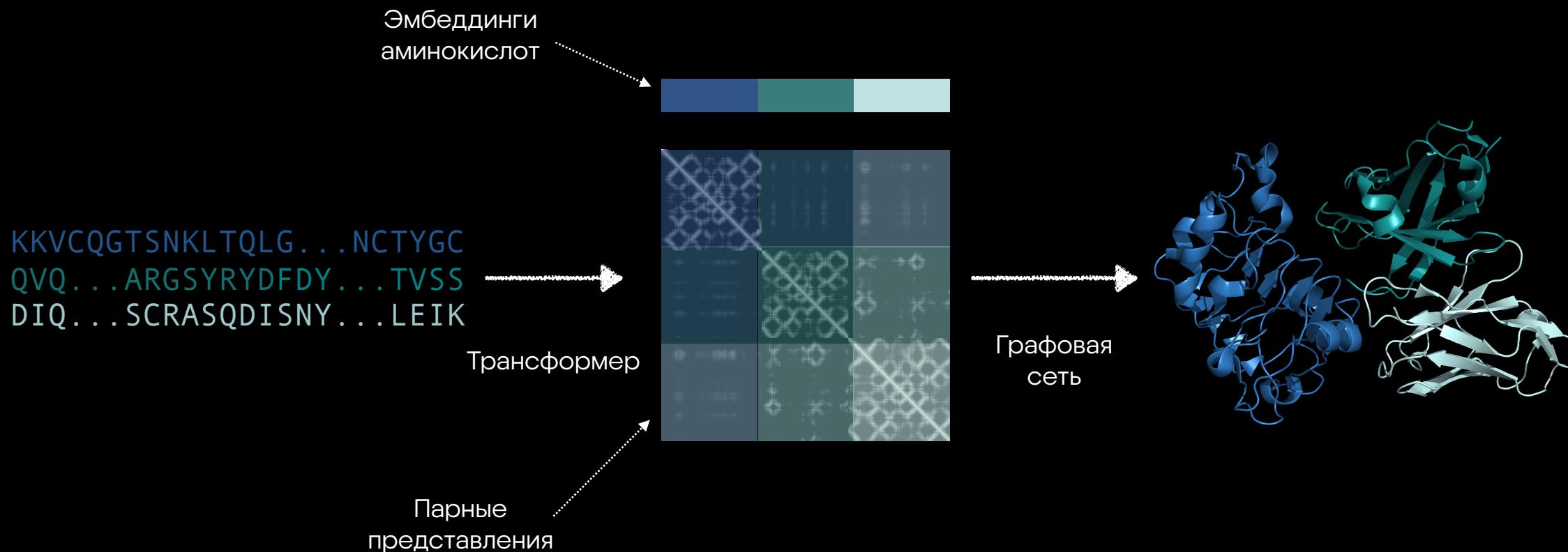
# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD



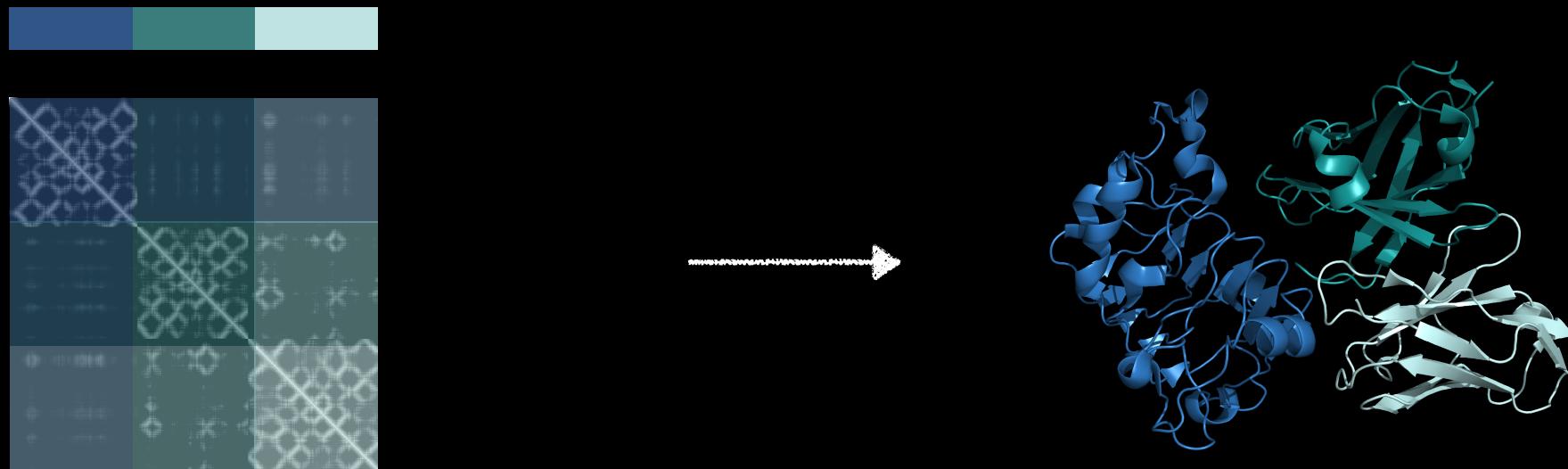
# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD



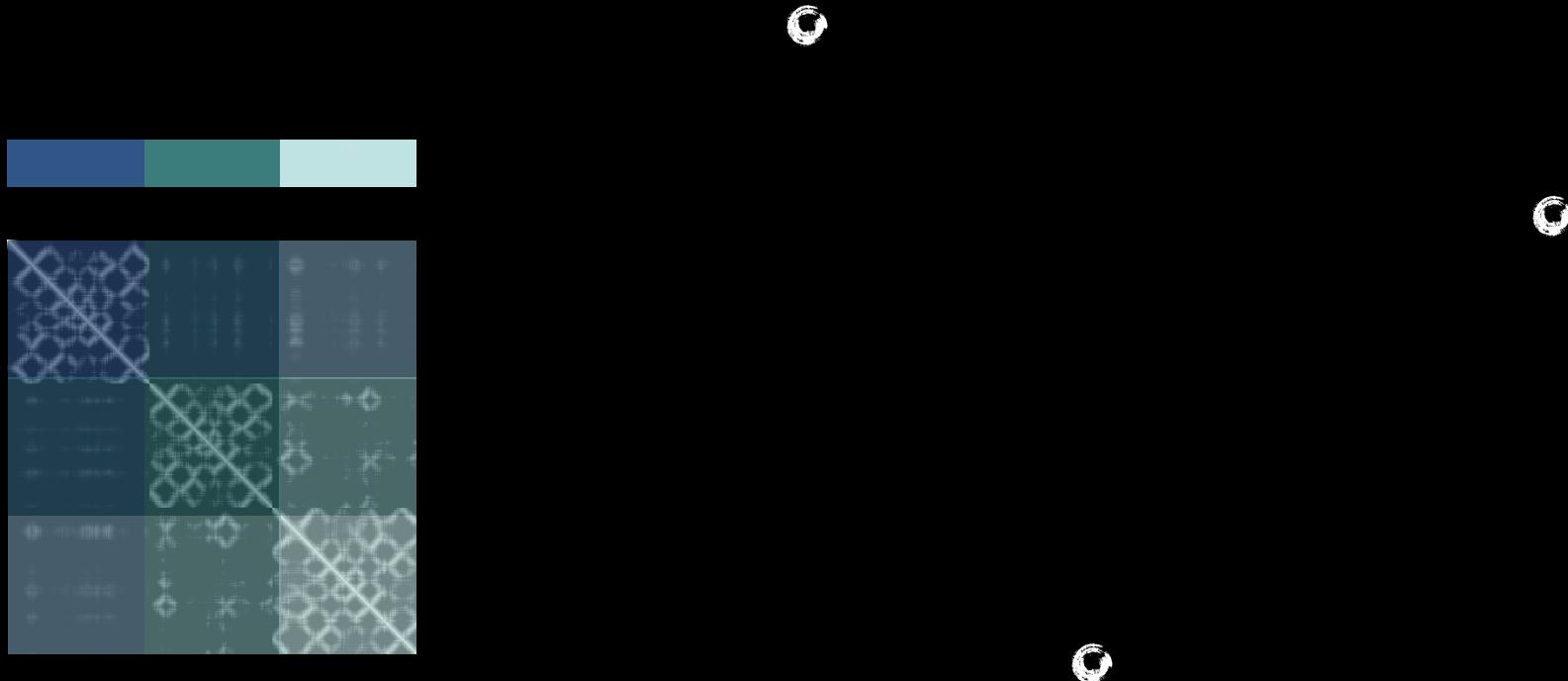
# Графовая сеть

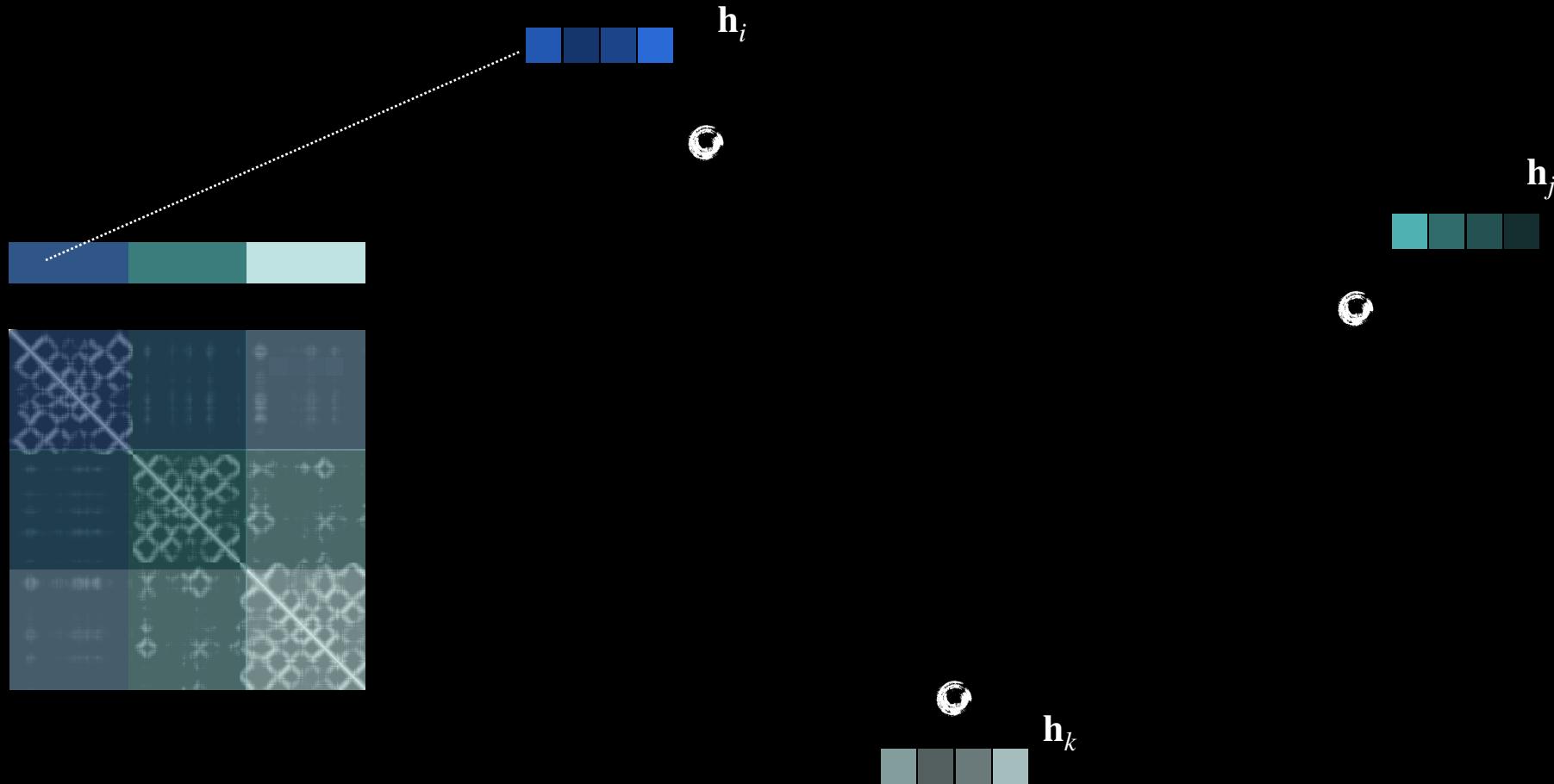
BICCAD



# Графовая сеть

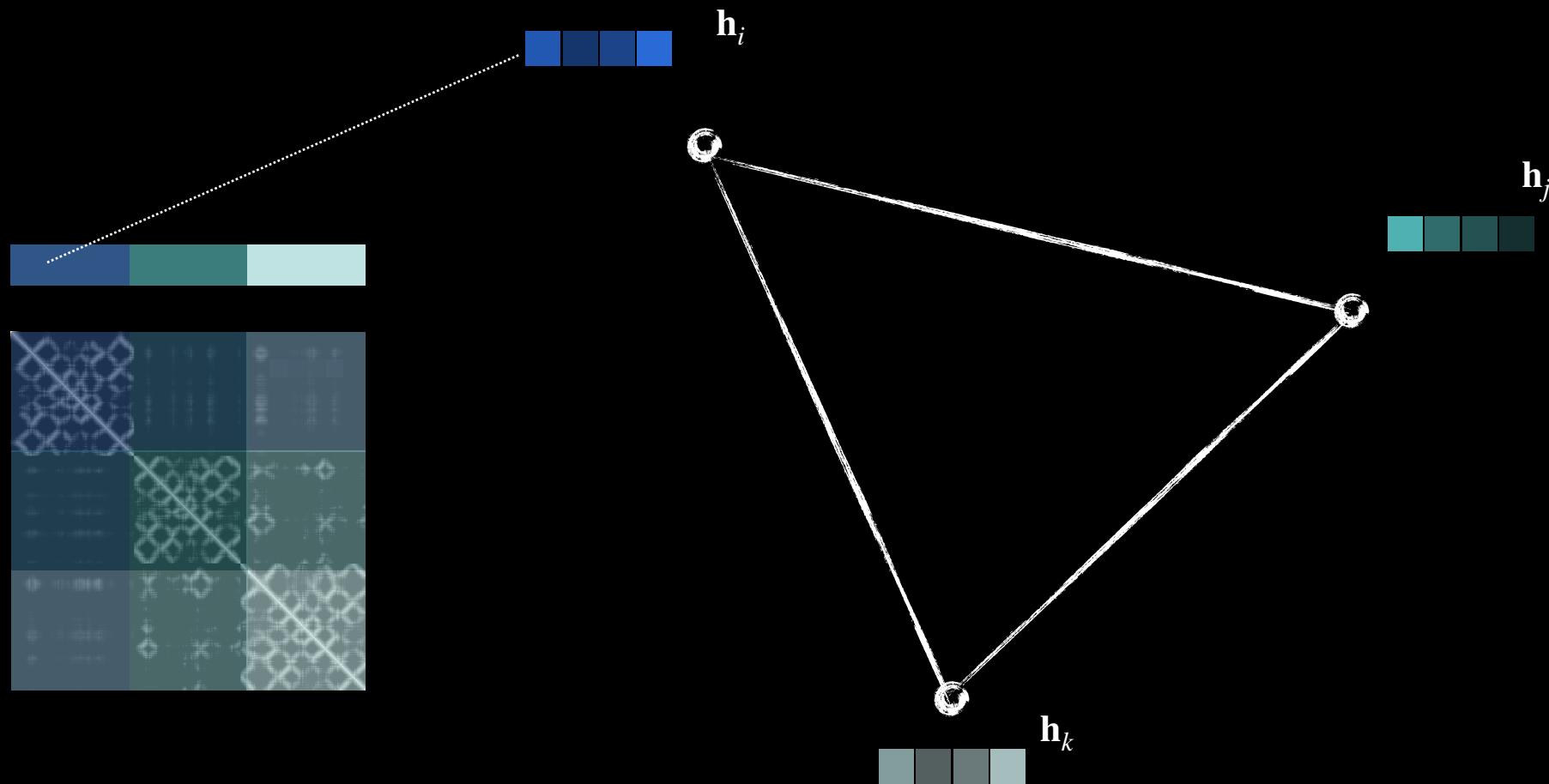
BICCAD





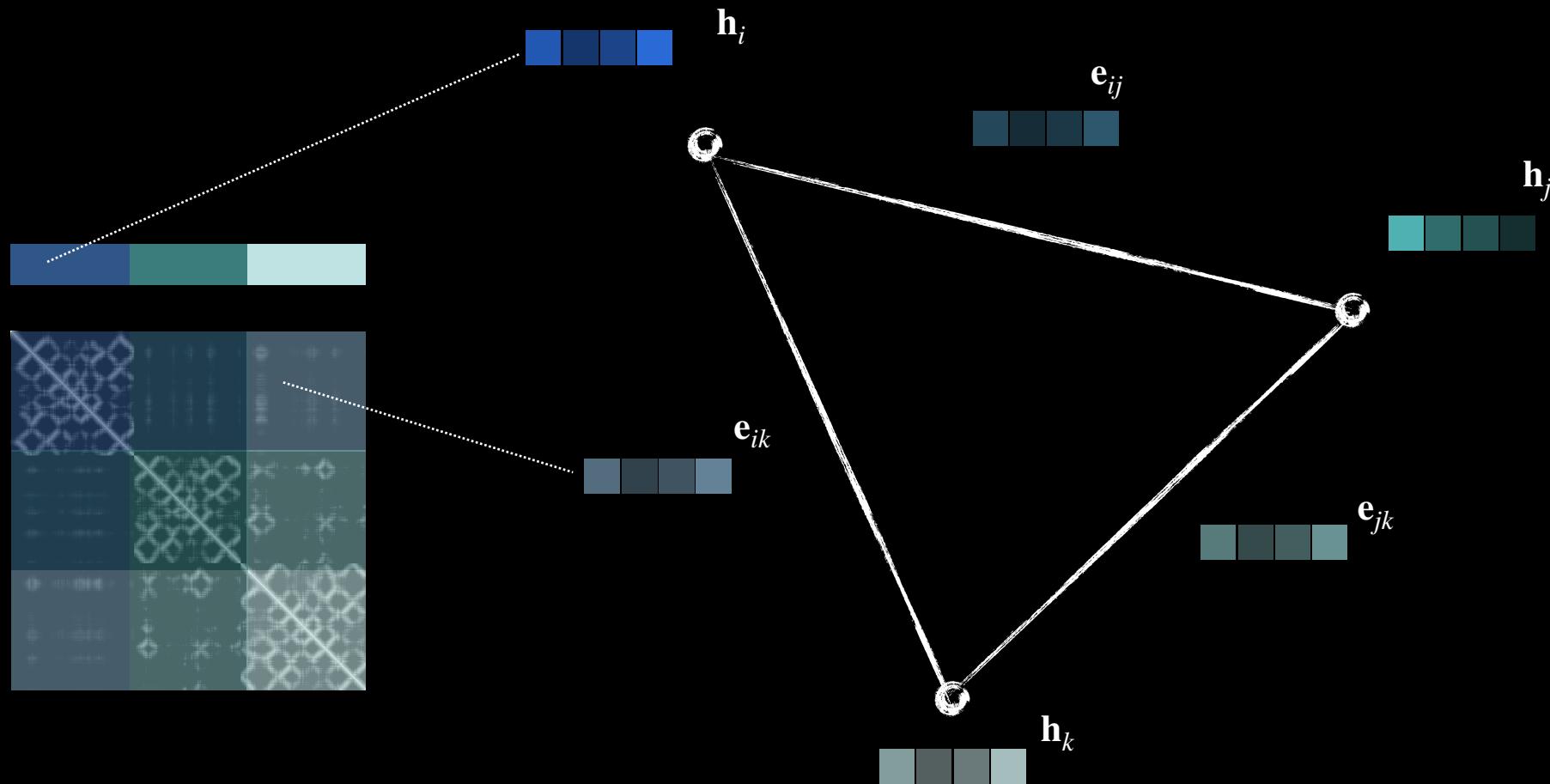
# Графовая сеть

BICCAD



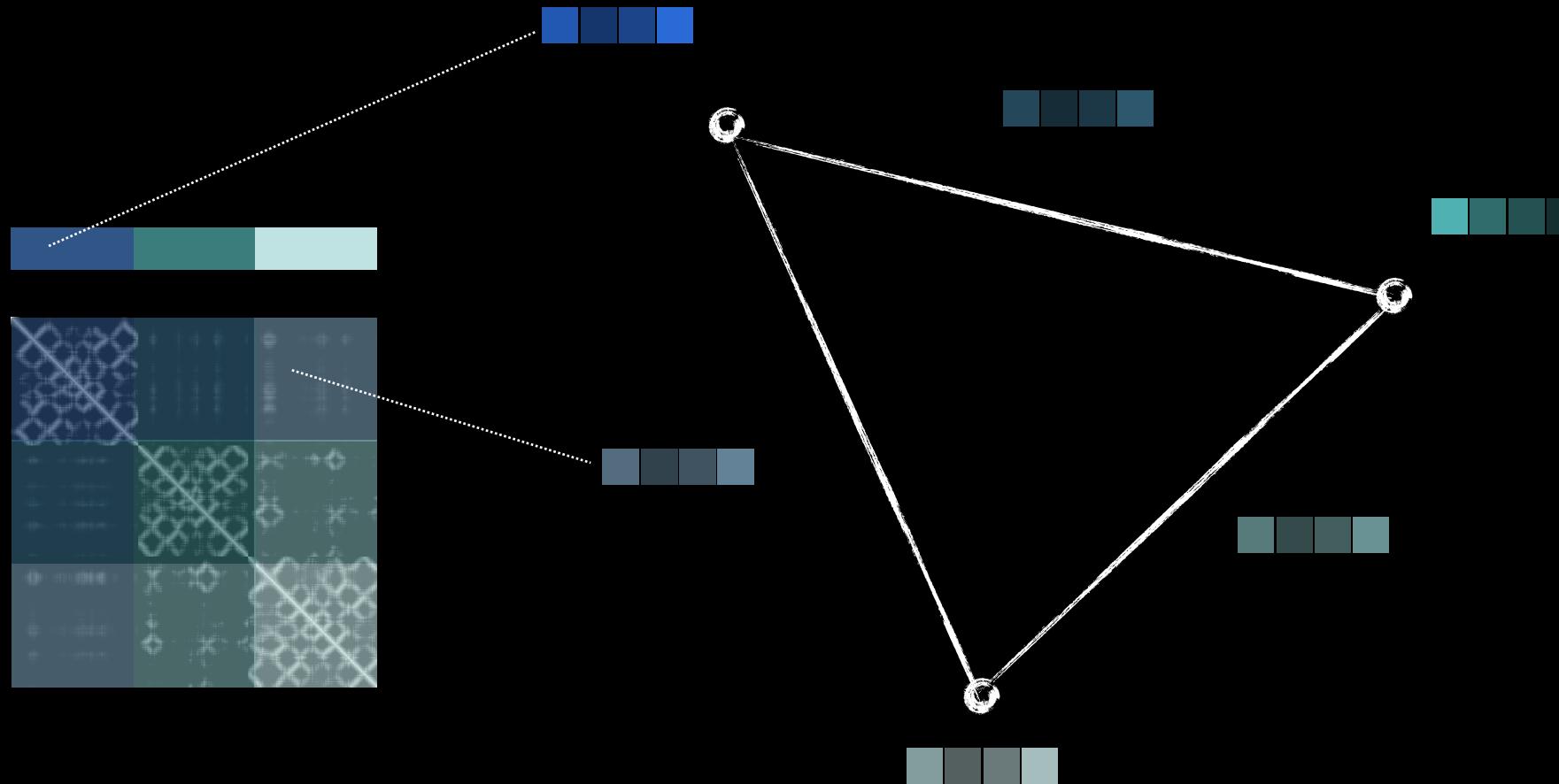
# Графовая сеть

BICCAD



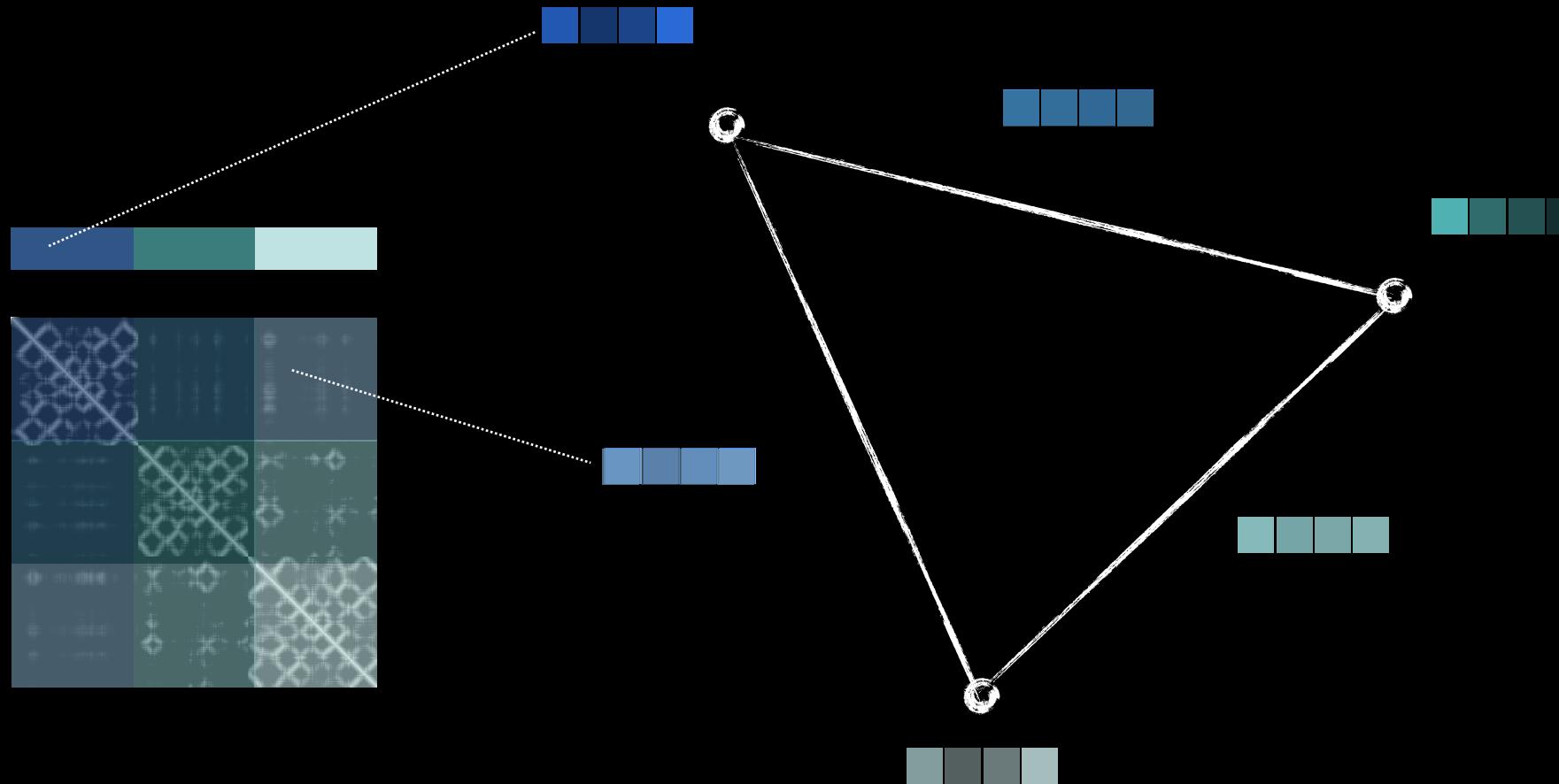
# Графовая сеть: обновление рёбер

BICCAD



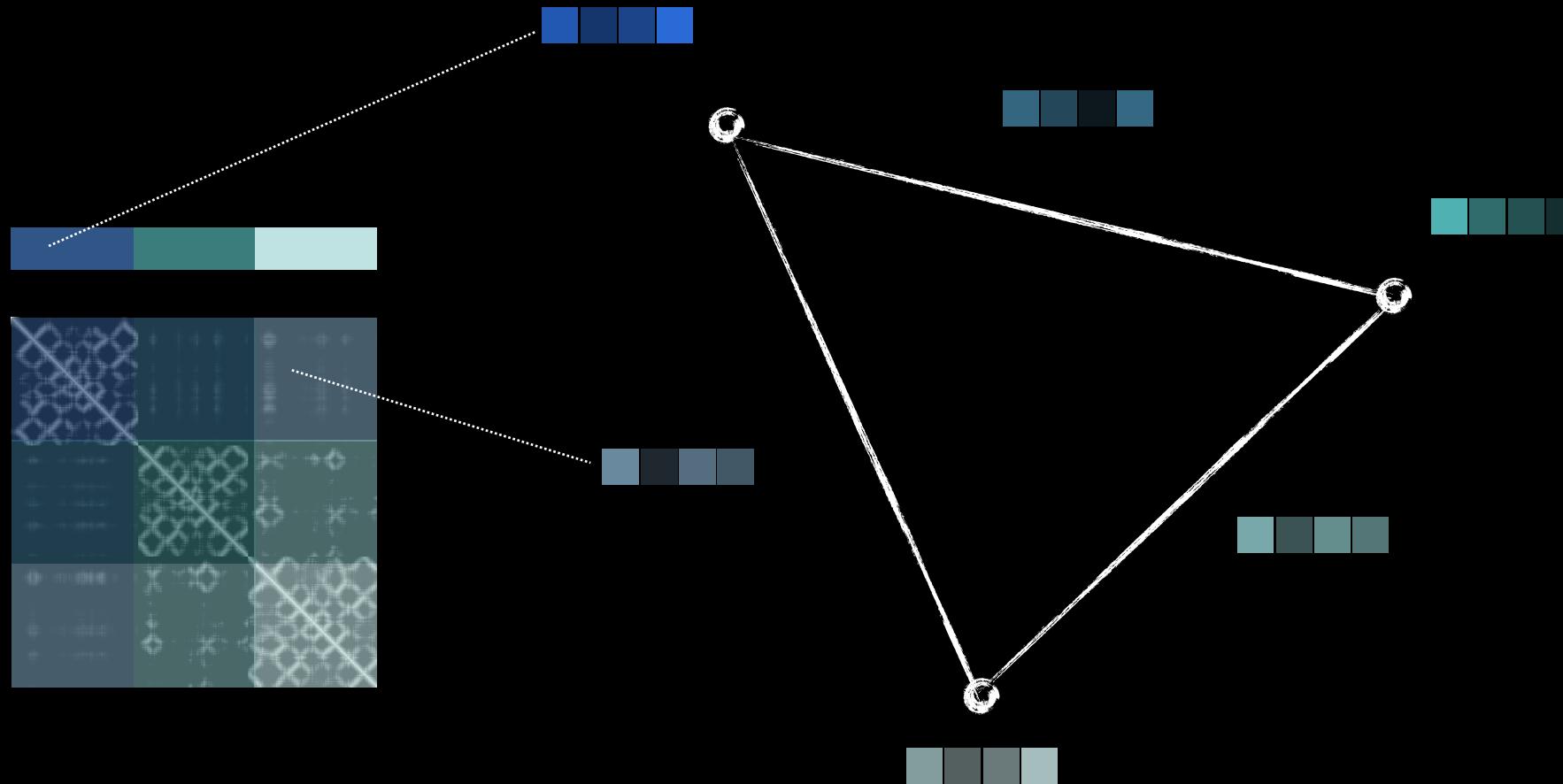
# Графовая сеть: обновление рёбер

BICCAD



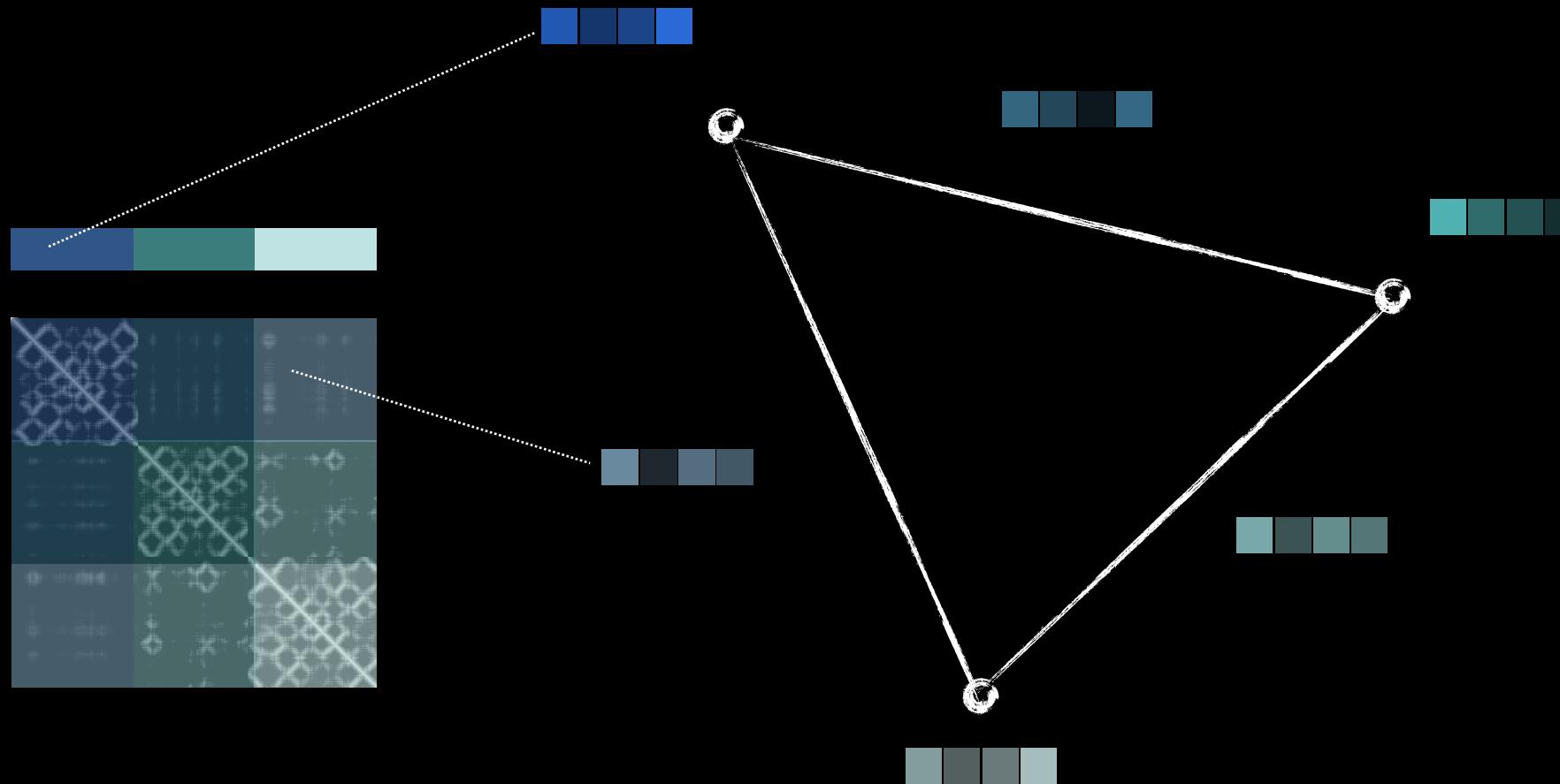
# Графовая сеть: обновление рёбер

BICCAD



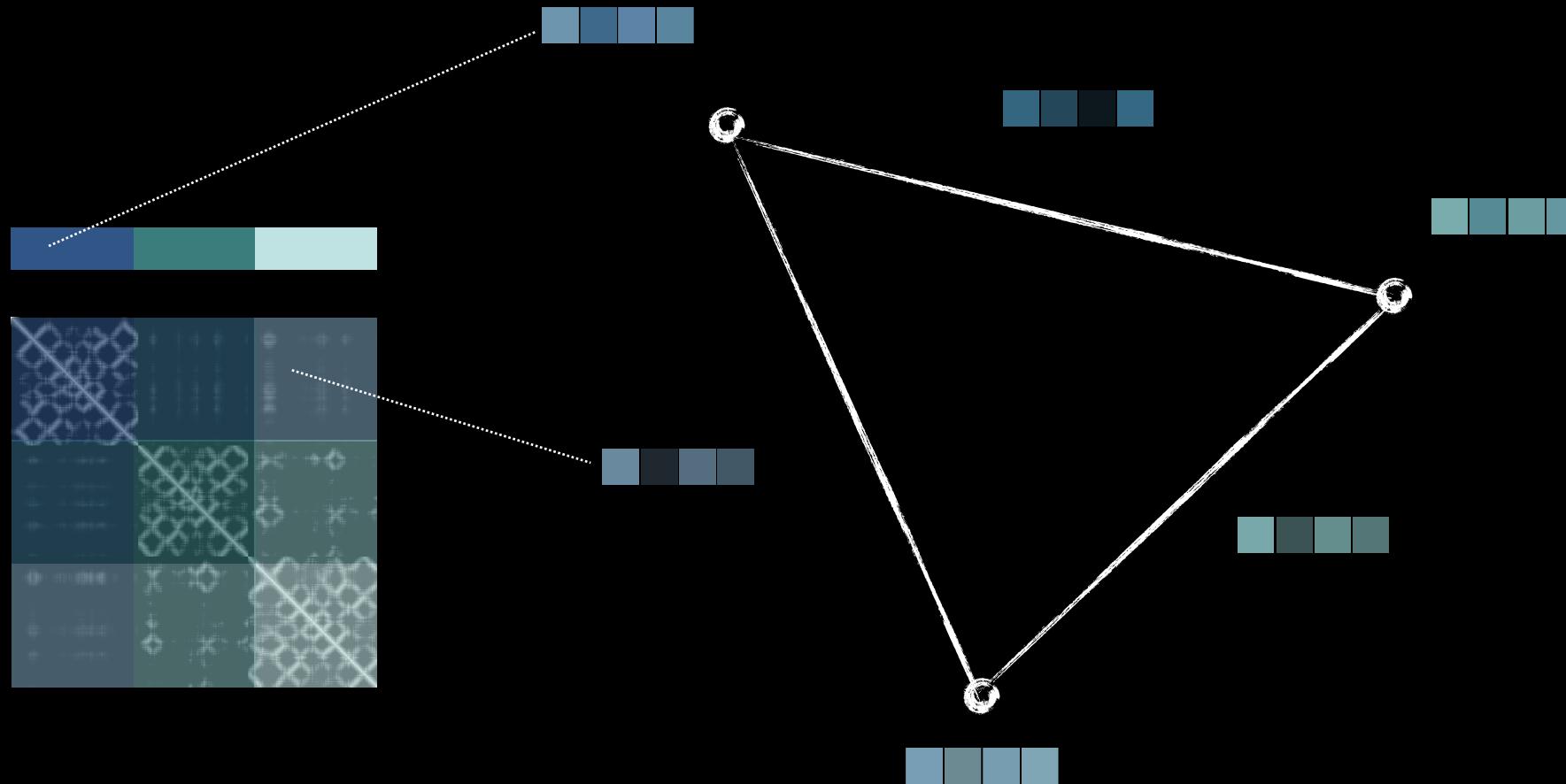
# Графовая сеть: обновление вершин

BICCAD



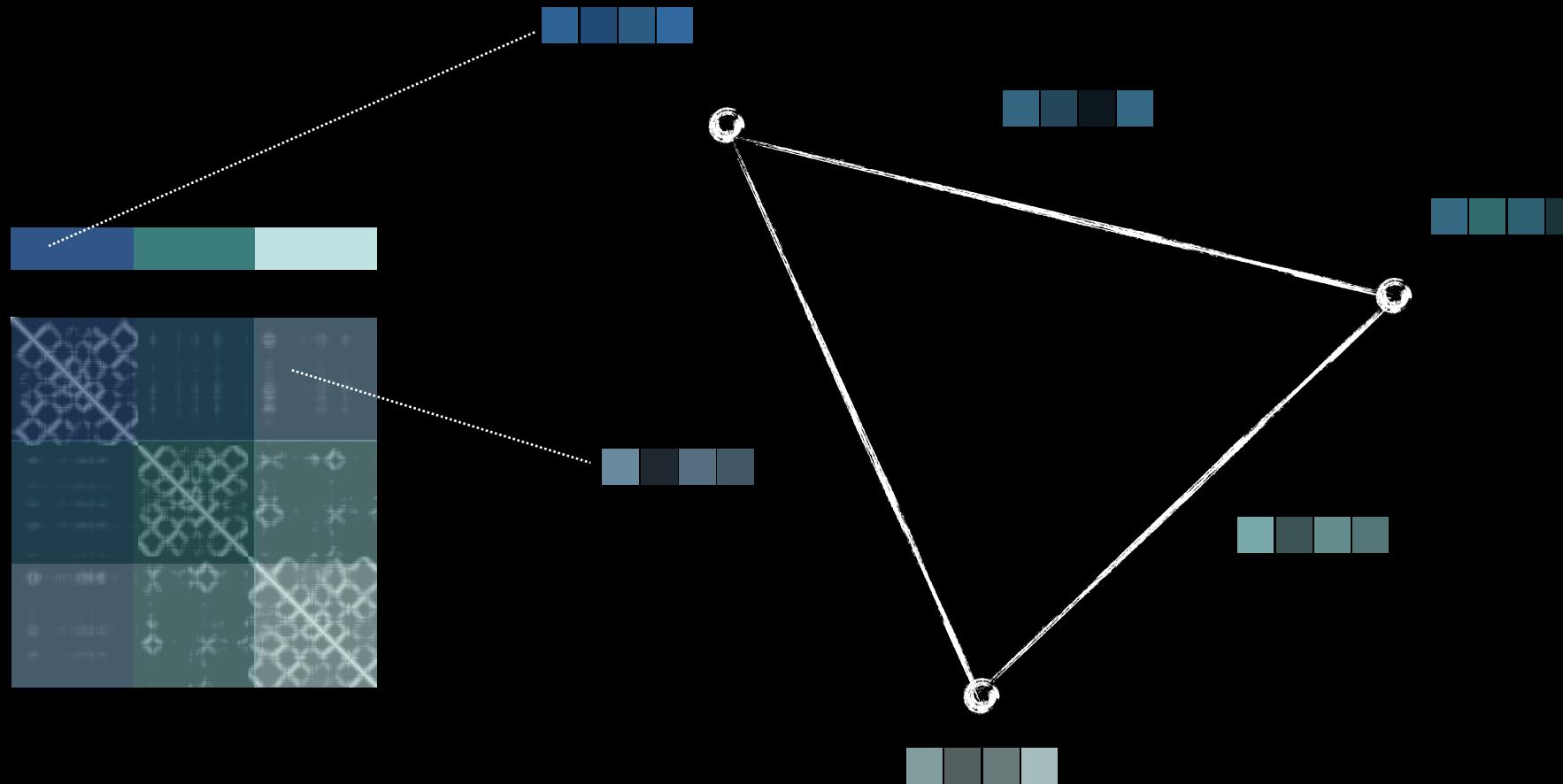
# Графовая сеть: обновление вершин

BICCAD



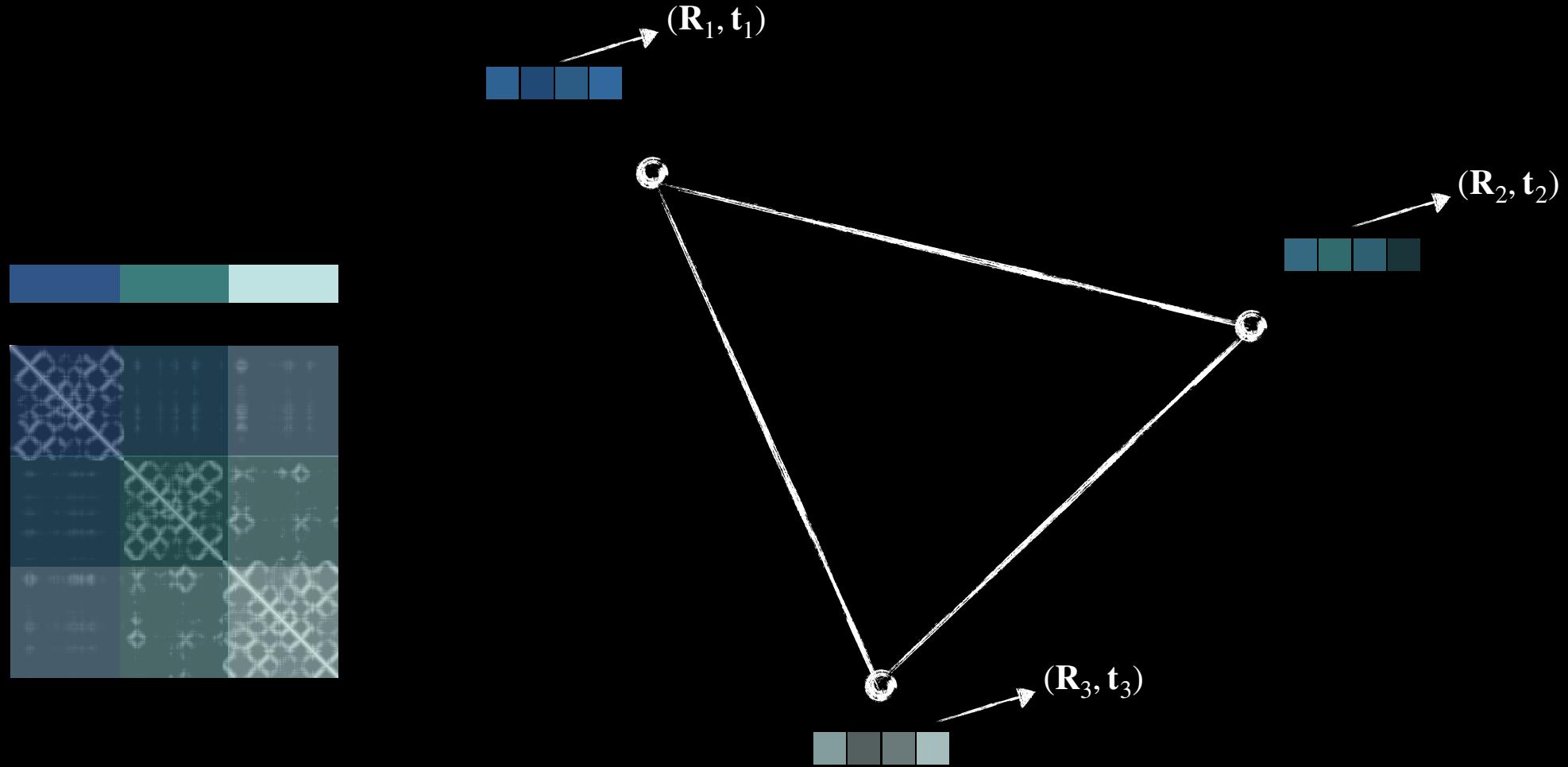
# Графовая сеть: обновление вершин

BICCAD



# Графовая сеть: предсказание положения аминокислот

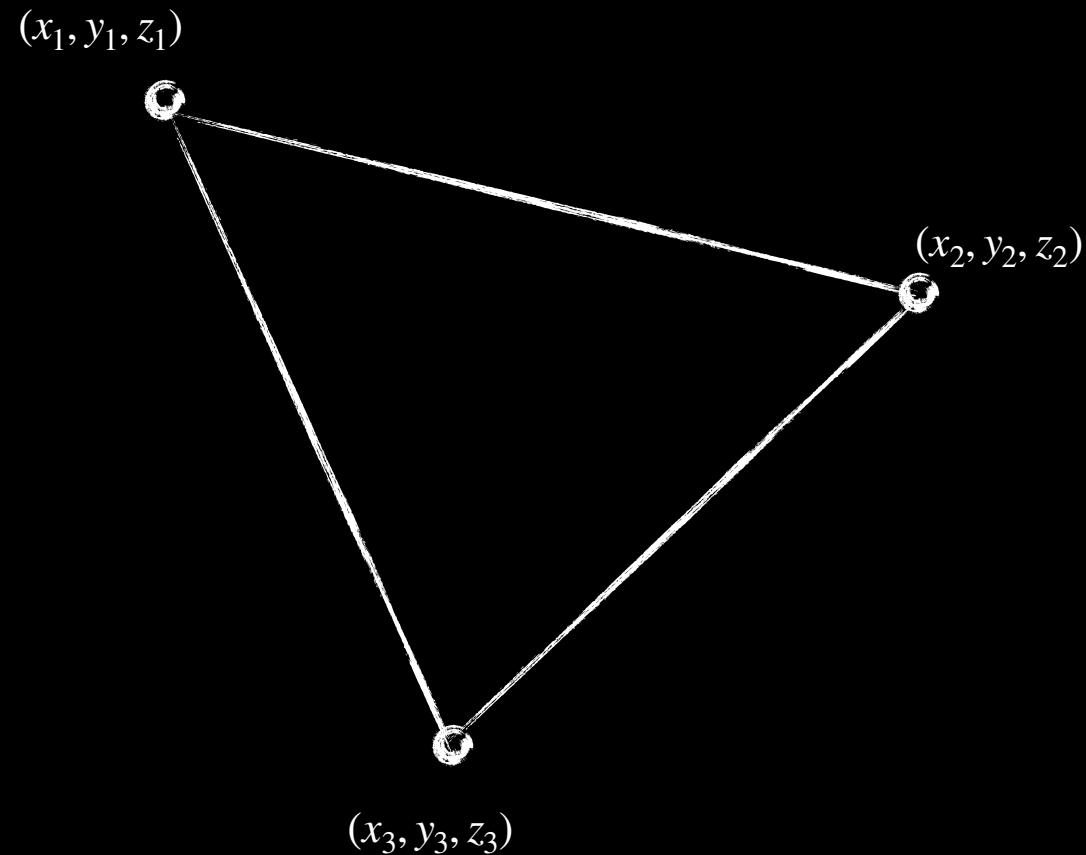
BICCAD



$$R_i \in SO(3), \quad t_i \in \mathbb{R}^3$$

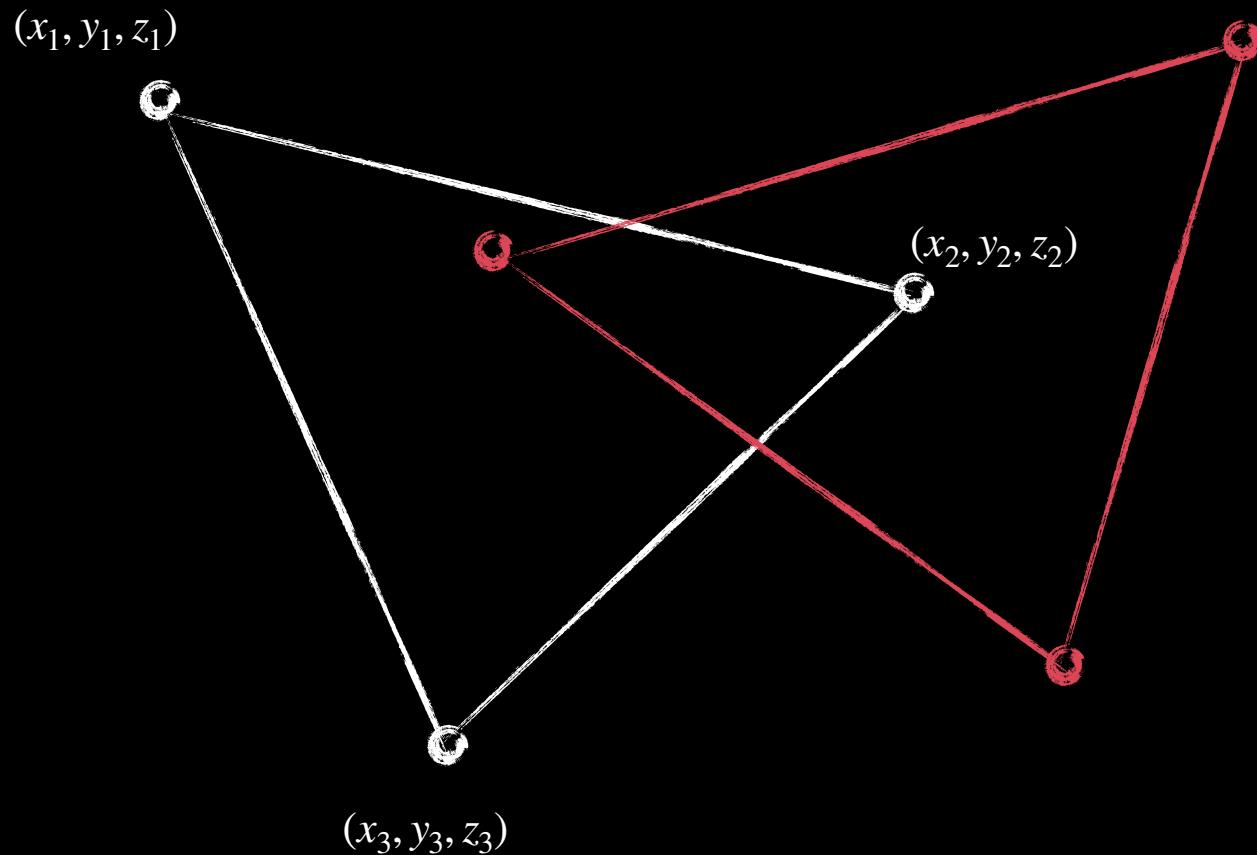
# Графовая сеть: ошибка предсказания

BICCAD



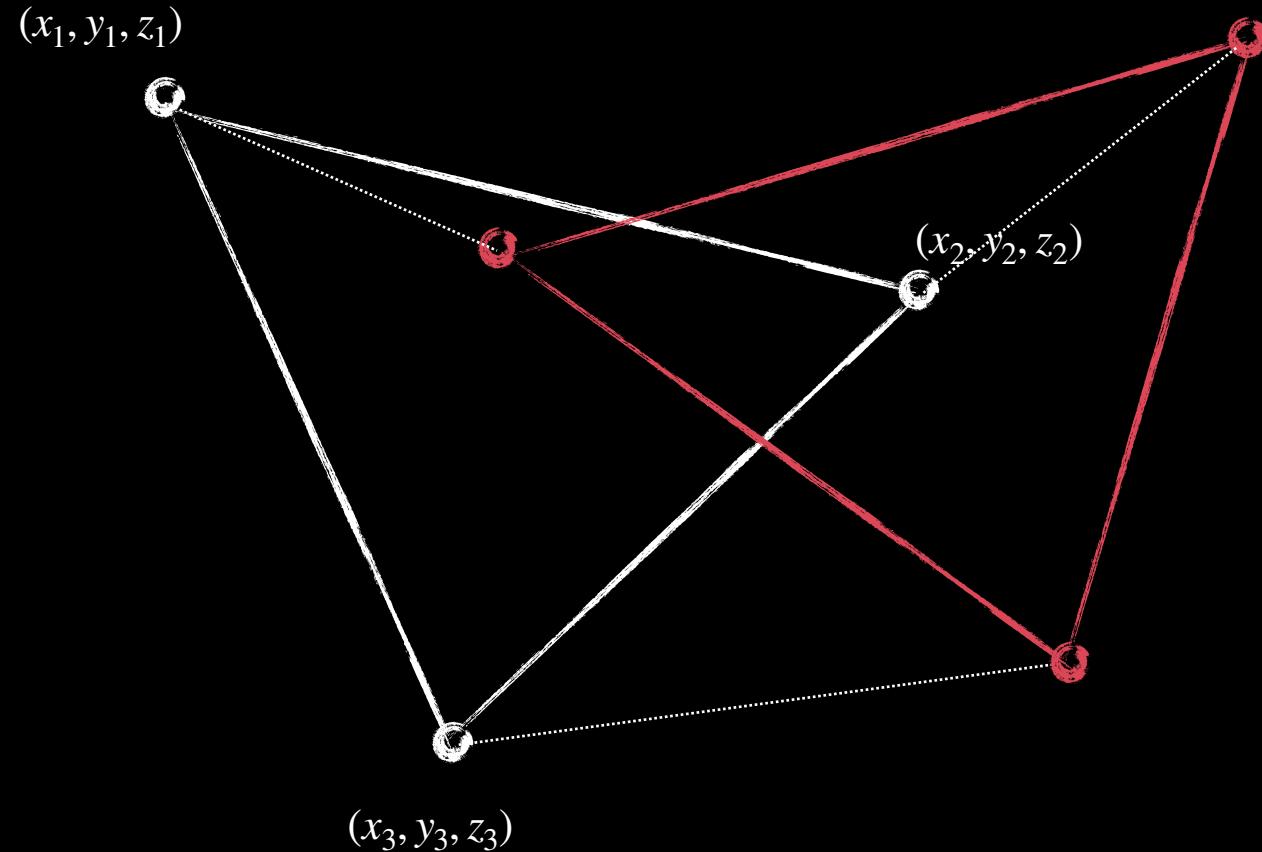
# Графовая сеть: ошибка предсказания

BICCAD



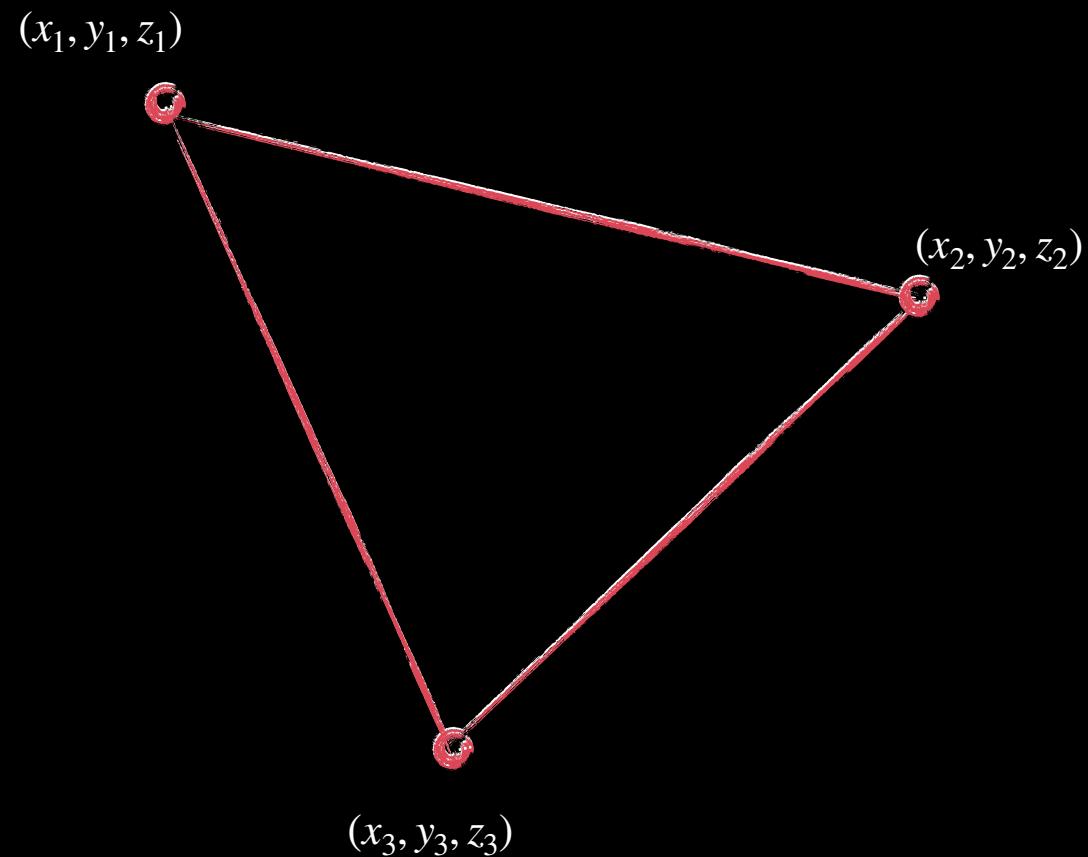
# Графовая сеть: ошибка предсказания

BICCAD



# Графовая сеть: ошибка предсказания

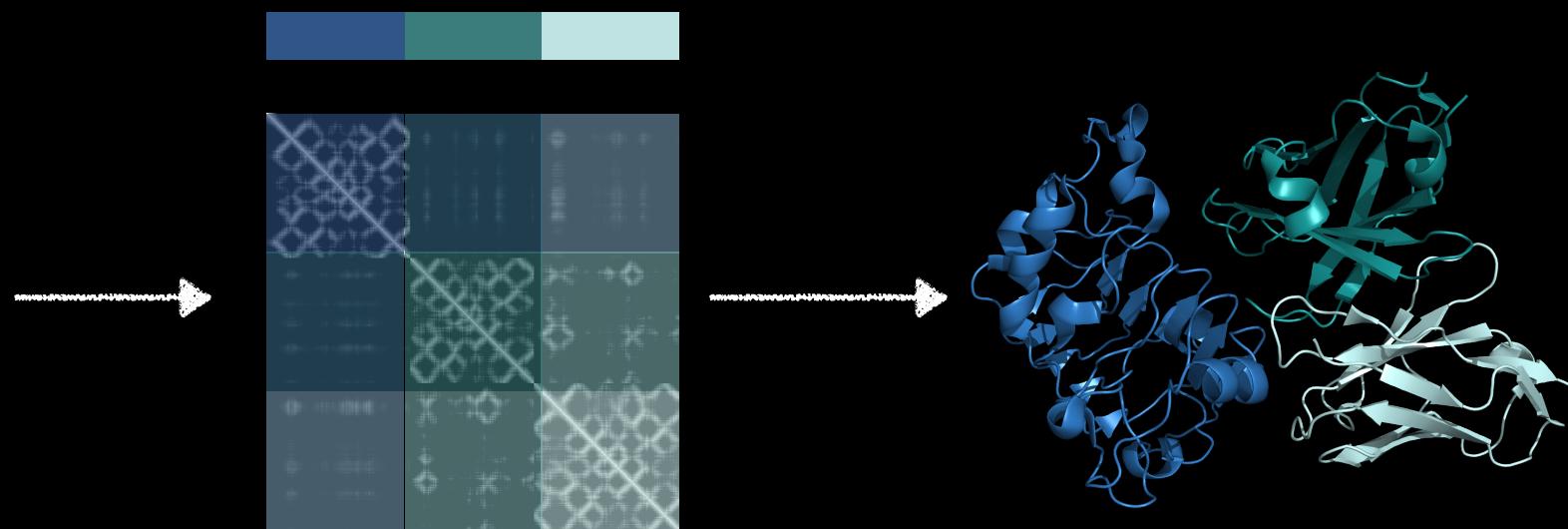
BICCAD



# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD

KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD

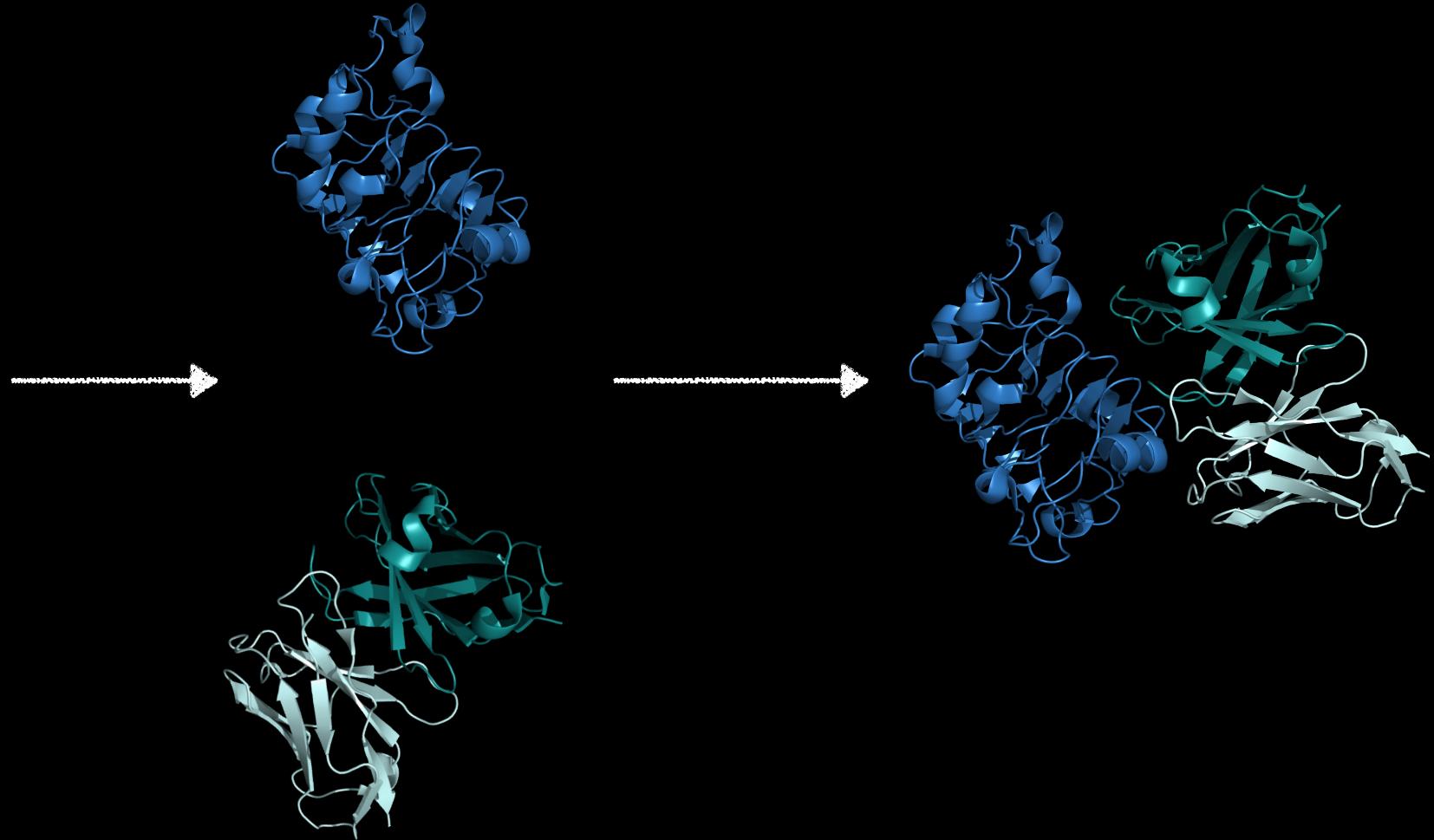
KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

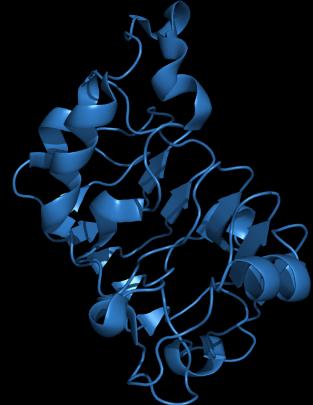
BICCAD

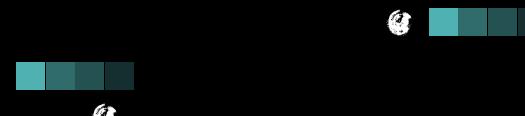
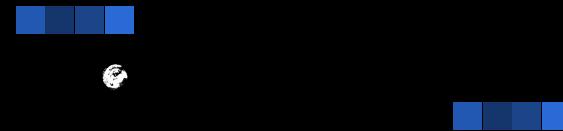
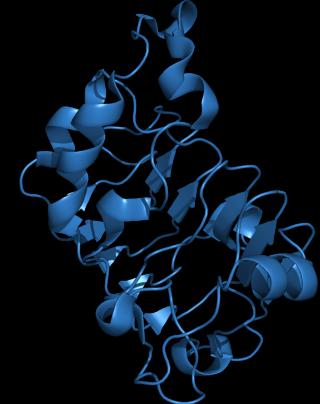
KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK

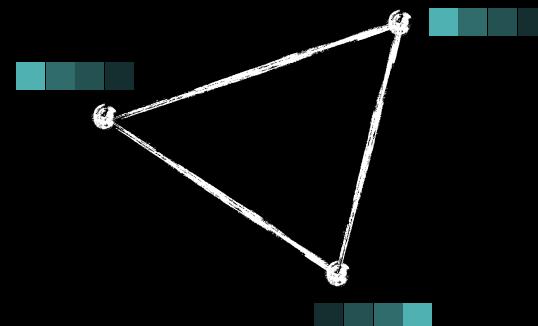
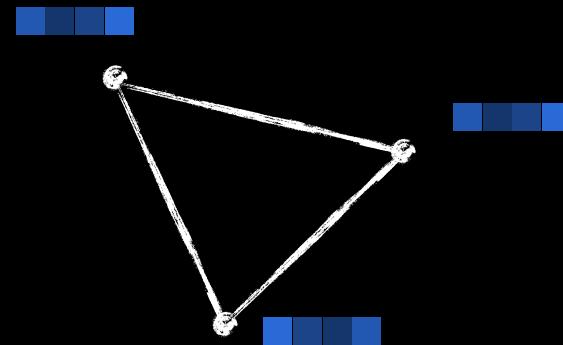
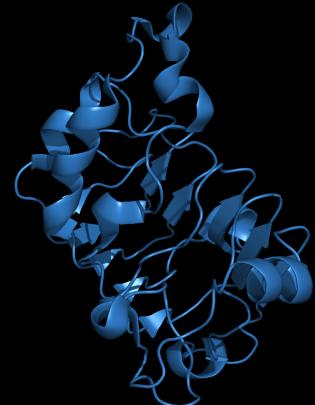


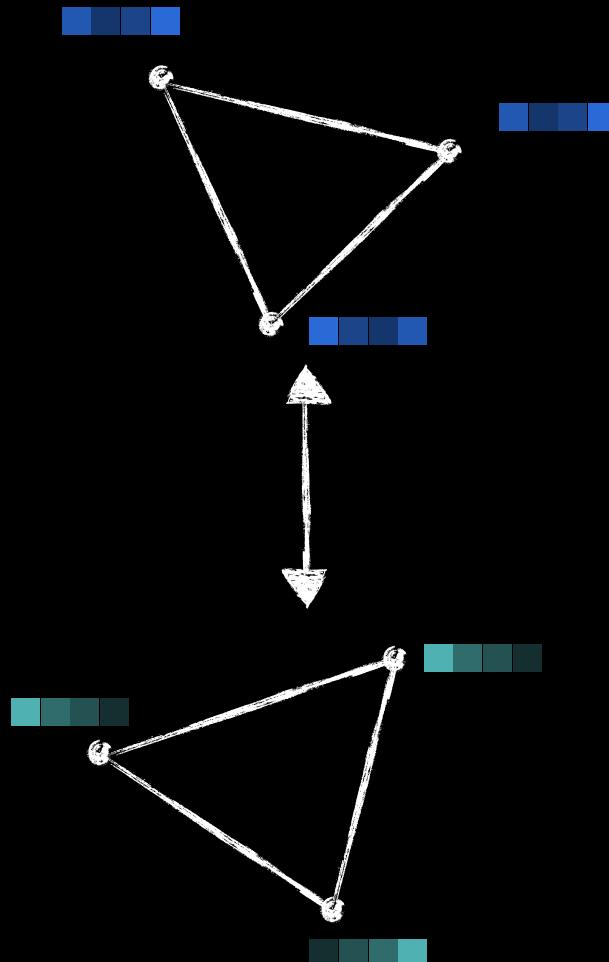
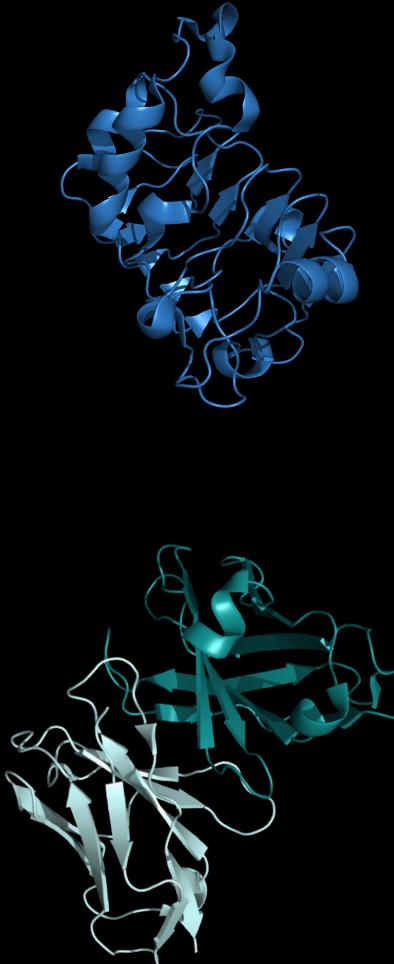
Докинг

BICCAD



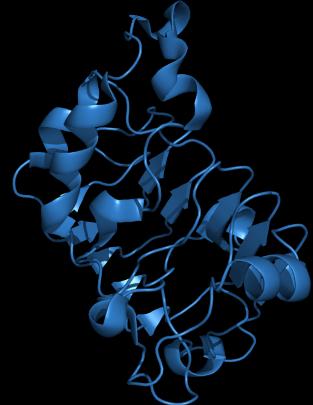


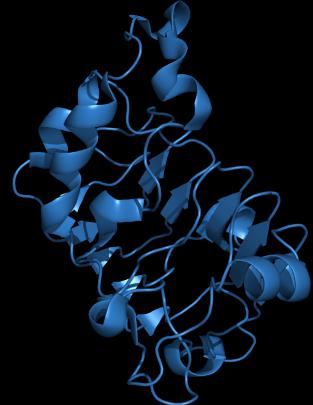




Докинг

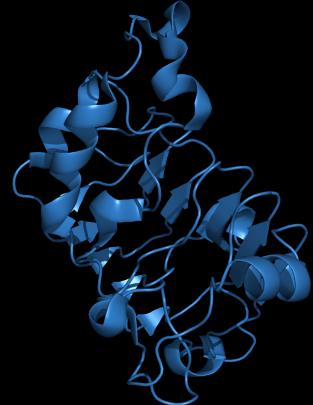
BICCAD



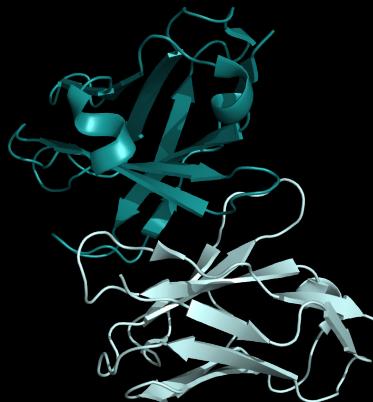


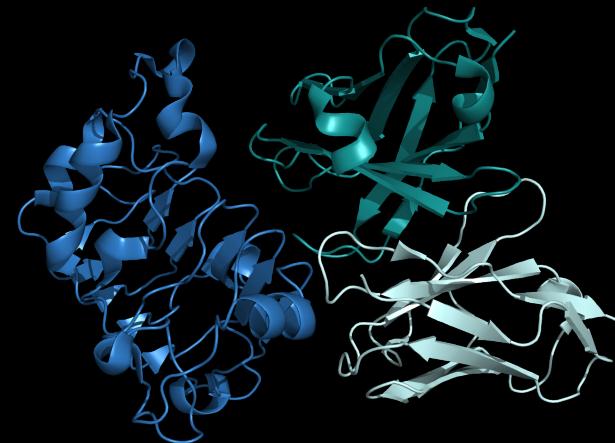
$$\xrightarrow{\text{[Color Gradient]}} \mathbf{R} \in SO(3), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}^3$$





$$\xrightarrow{\text{[Color Swatches]}} \mathbf{R} \in SO(3), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}^3$$



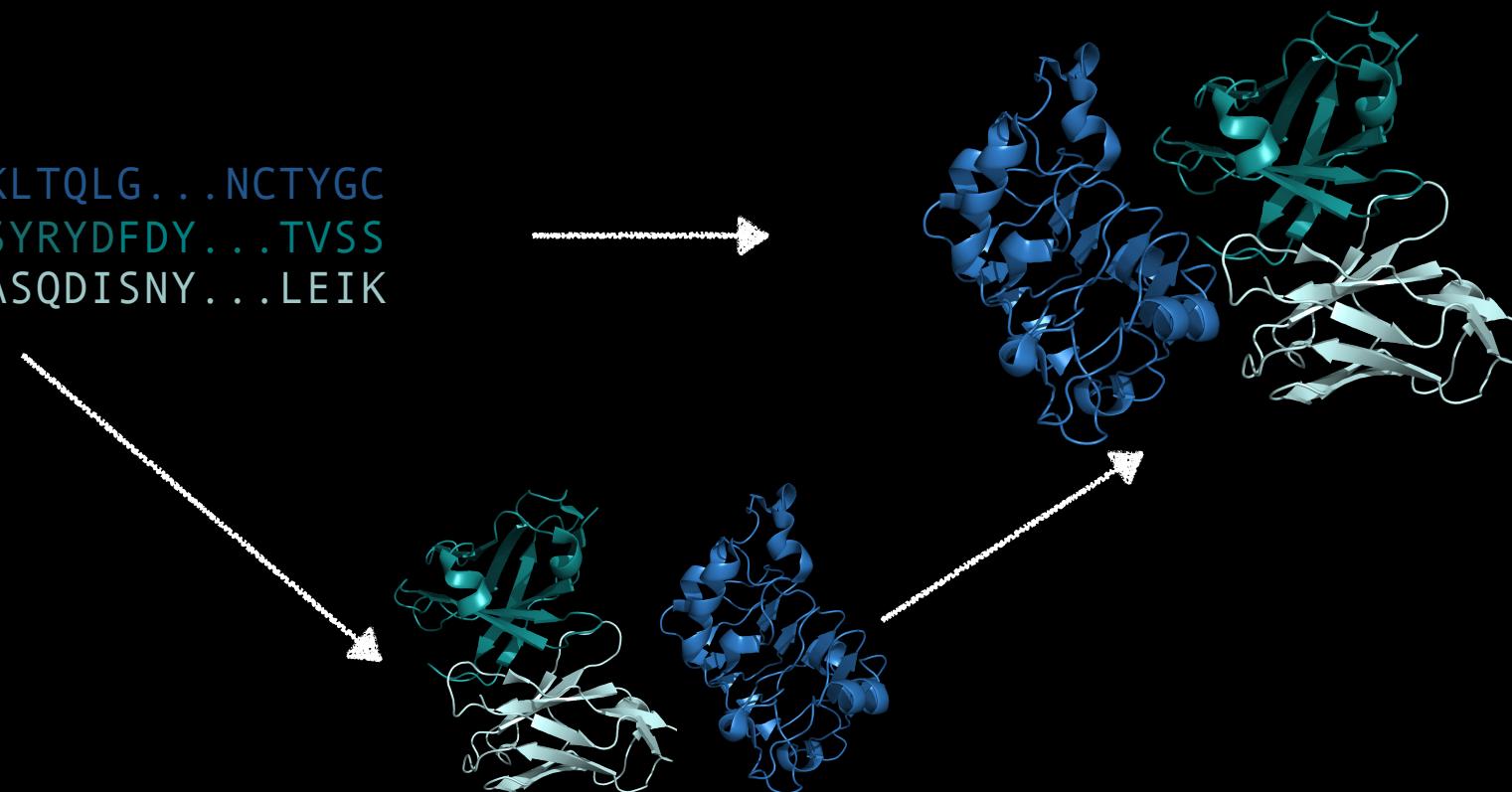


$$\xrightarrow{\text{[Color Swatches]}} \mathbf{R} \in SO(3), \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}^3$$

# Предсказание трёхмерной структуры комплекса

BICCAD

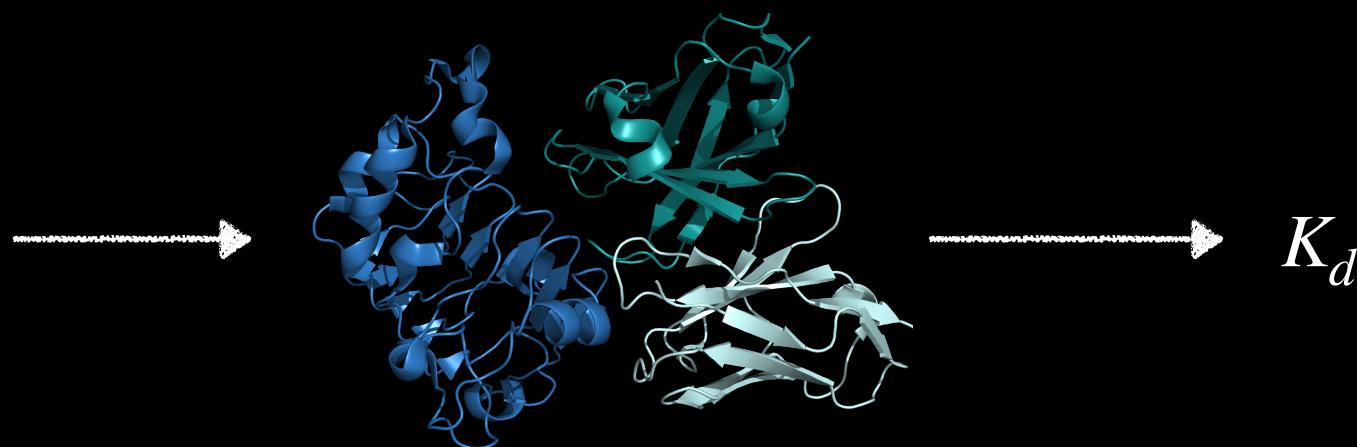
KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



# От последовательности к аффинности

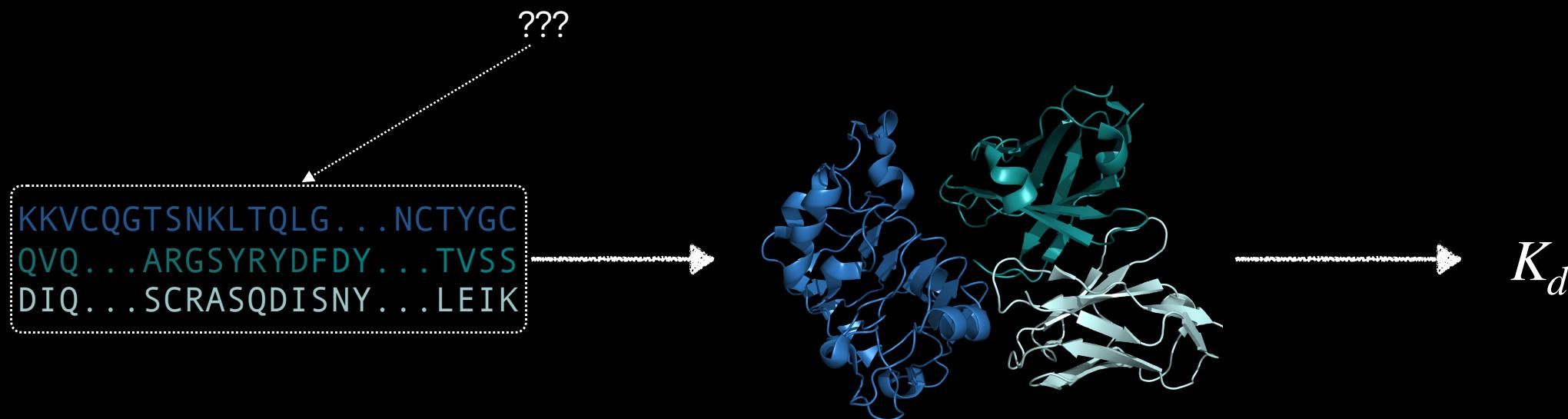
BICCAD

KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK

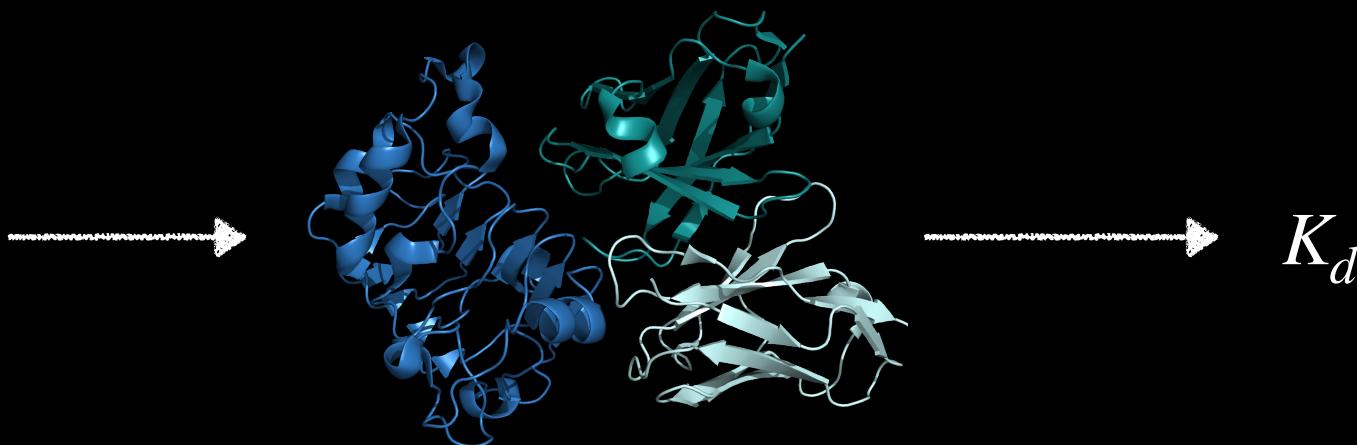




# Генерация как задача оптимизации

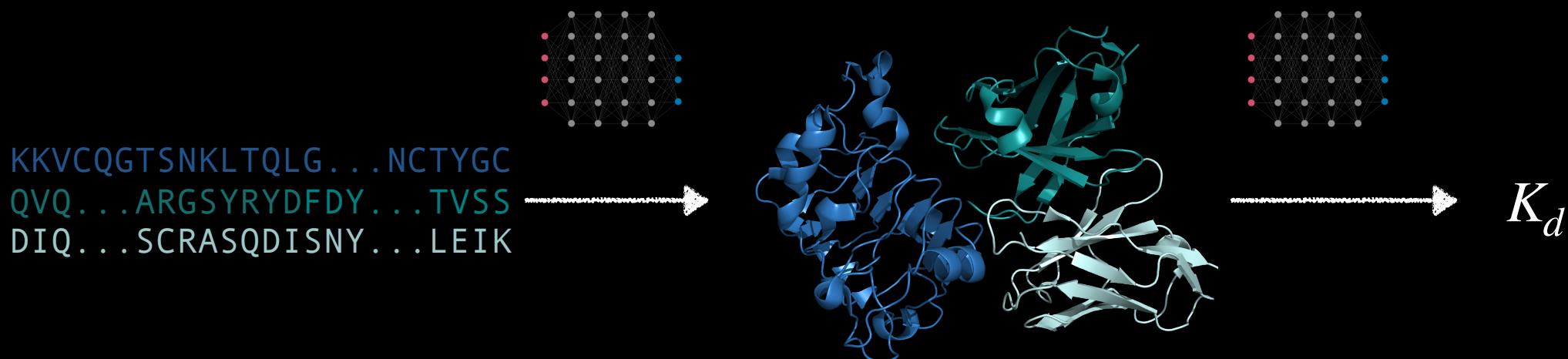
BICCAD

KKVCQGTSNKLTQLG...NCTYGC  
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIQ...SCRASQDISNY...LEIK



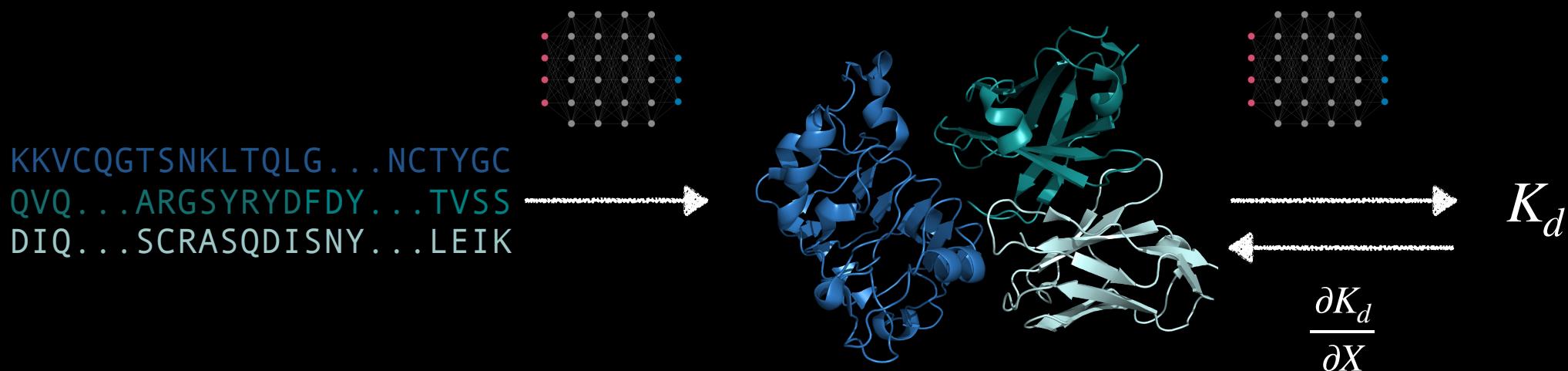
# Генерация как задача оптимизации

BICCAD



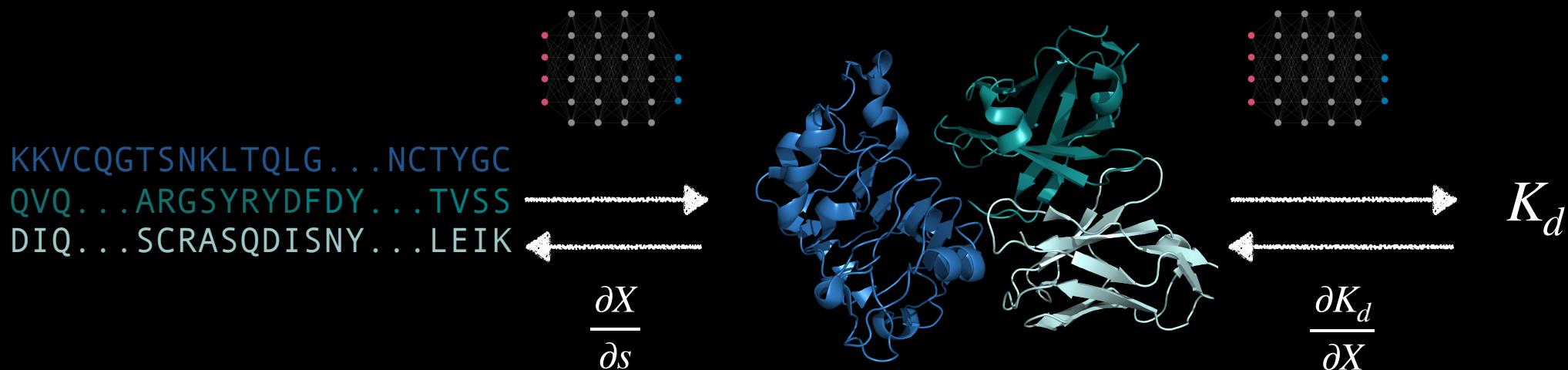
# Генерация как задача оптимизации

BICCAD



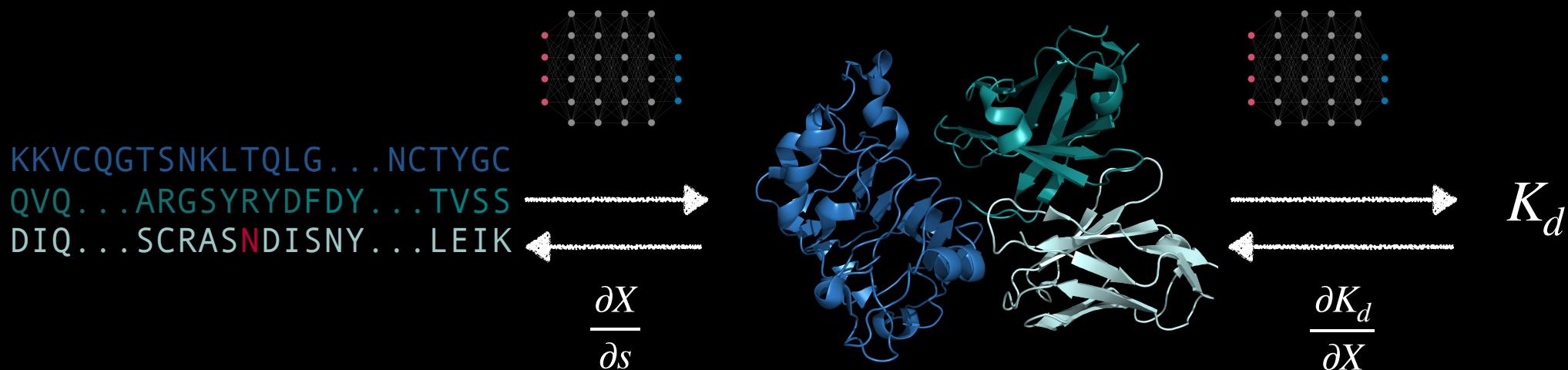
# Генерация как задача оптимизации

BICCAD



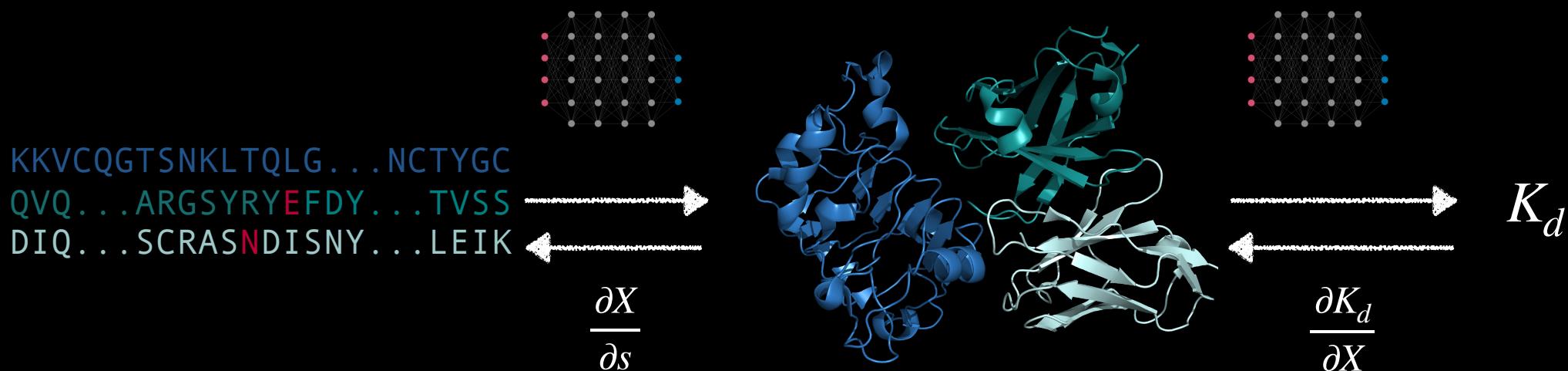
# Генерация как задача оптимизации

BICCAD



# Генерация как задача оптимизации

BICCAD

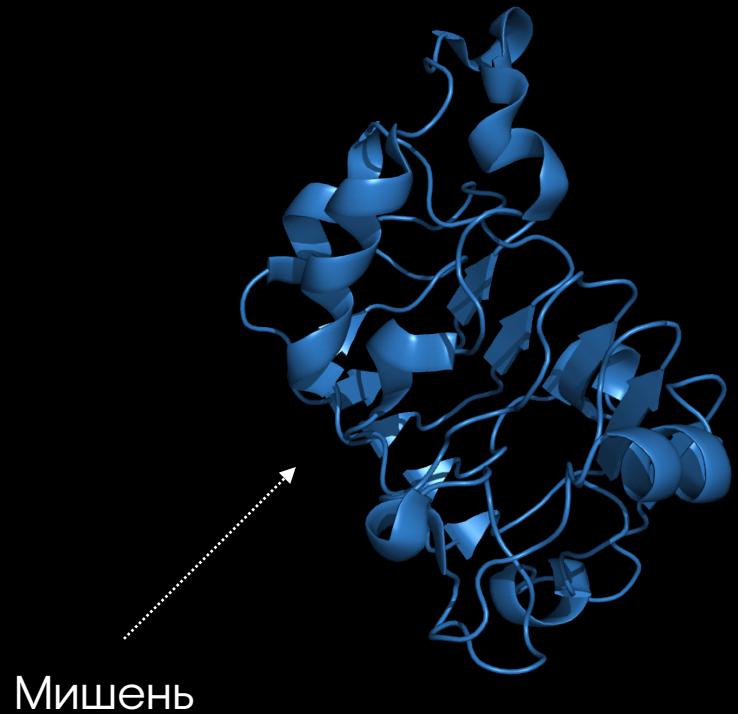


# **Генерация последовательности по структуре мишени**

**BIGCAD**

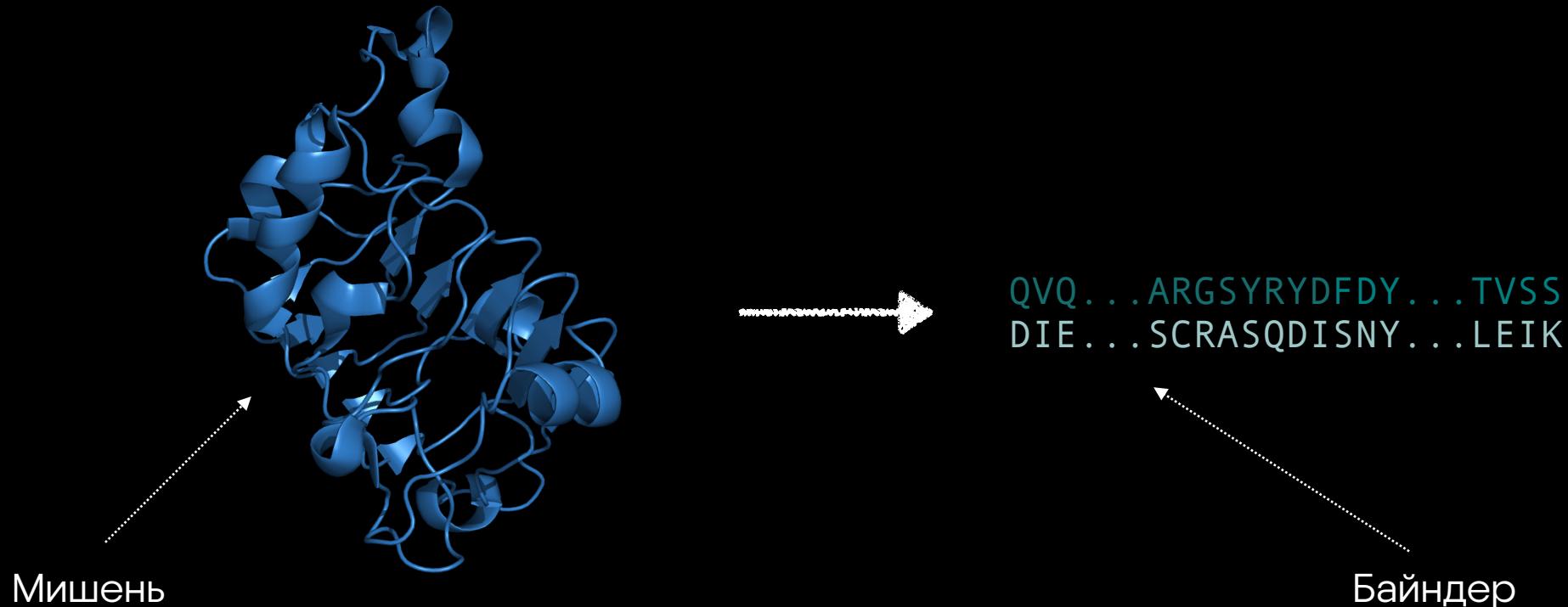
# Генерация последовательности по структуре мишени

BICCAD



# Генерация последовательности по структуре мишени

BICCAD



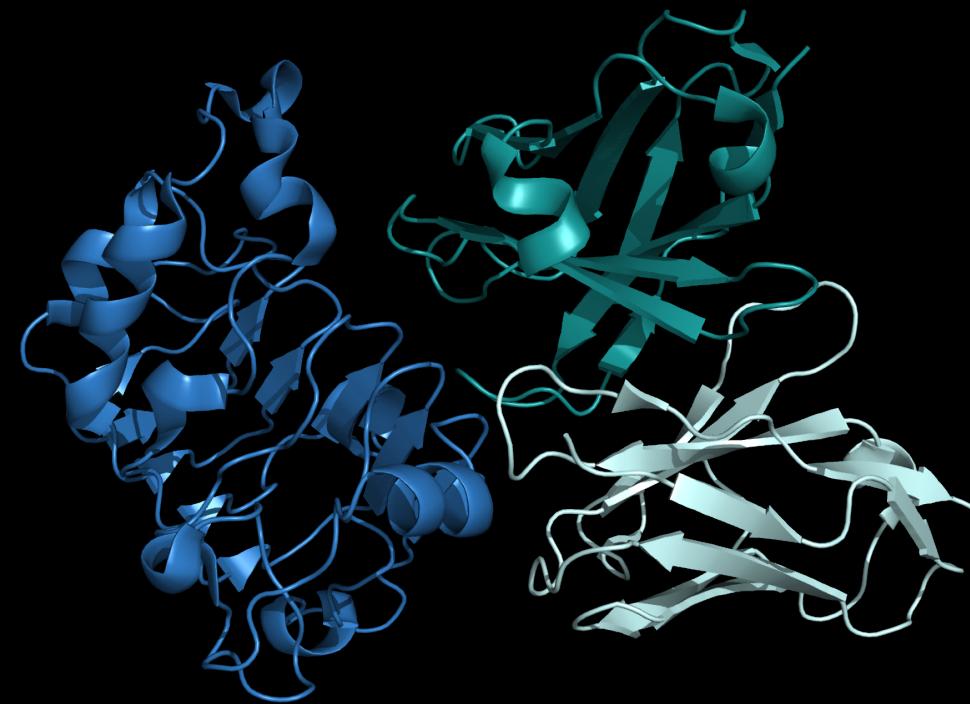
# Промежуточный шаг: генерация структуры основной цепи

BICCAD



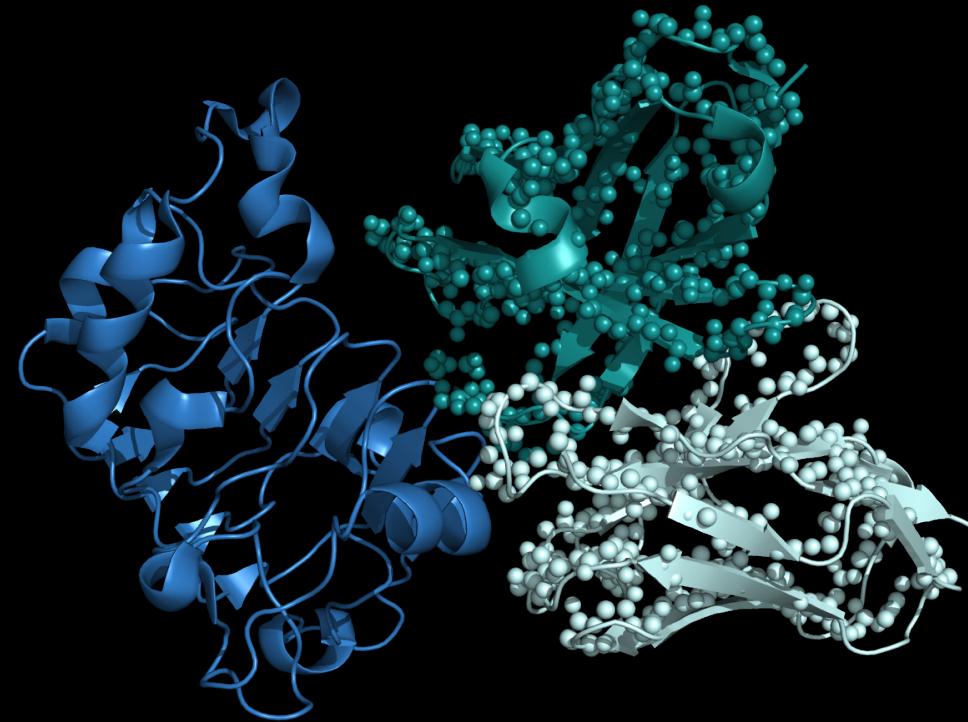
# Дизайн структуры основной цепи

BICCAD



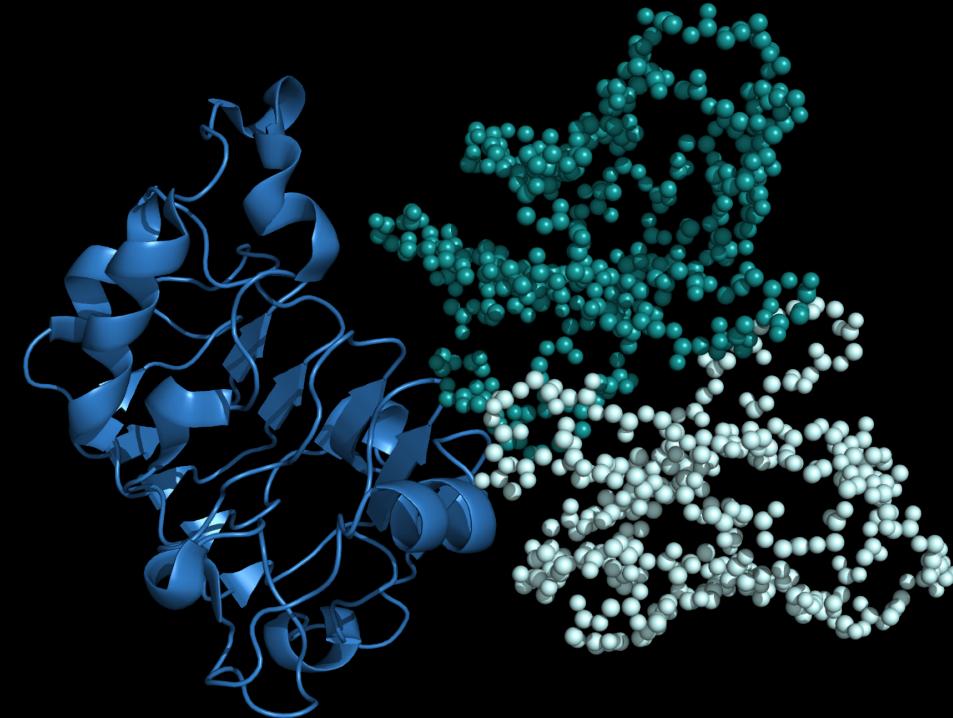
# Дизайн структуры основной цепи

BICCAD



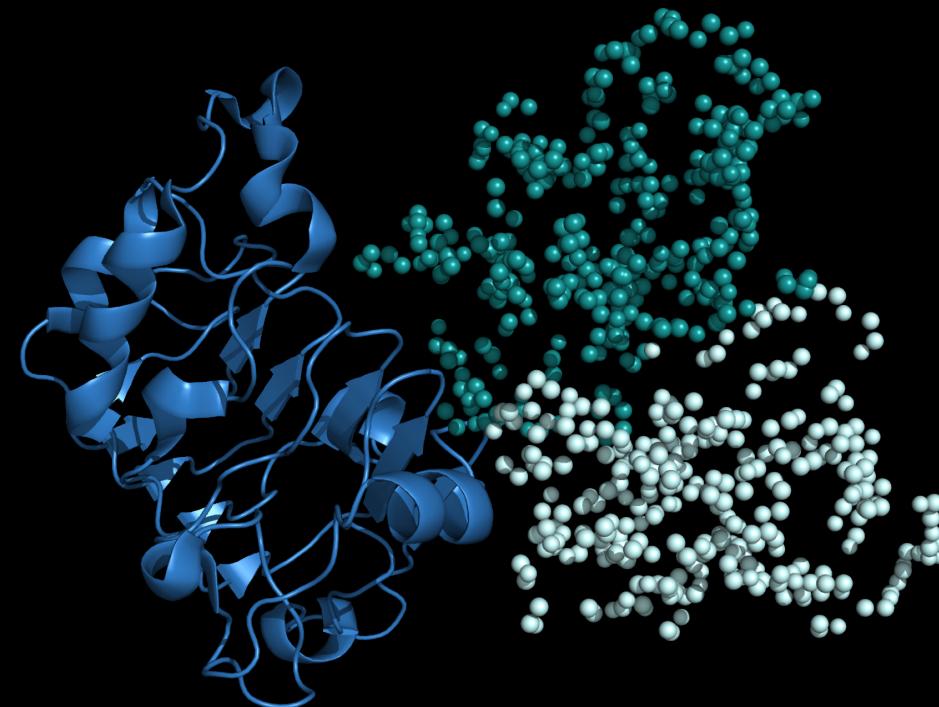
## Прямой процесс: добавление шума

BICCAD



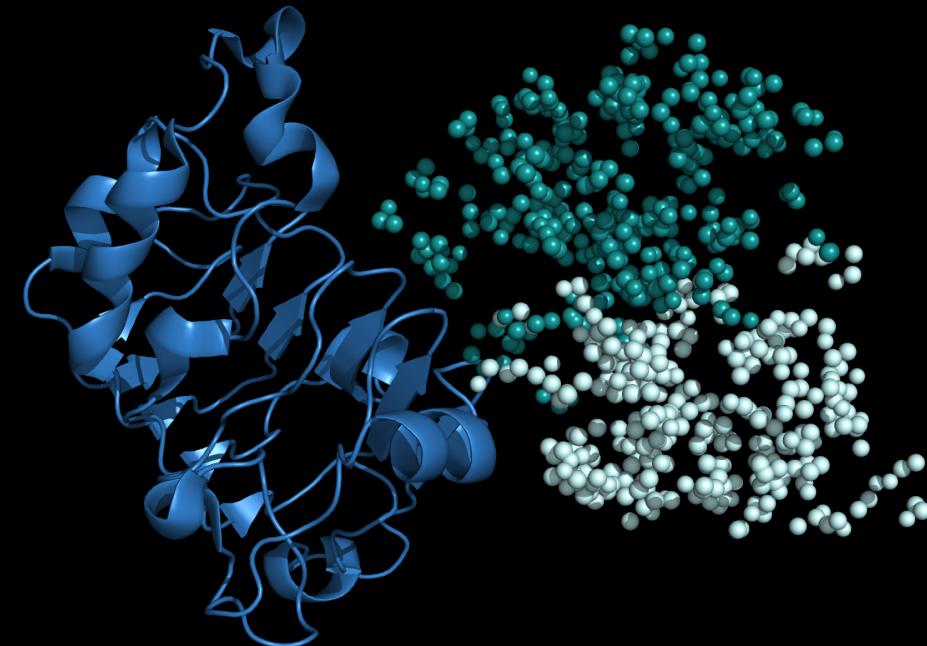
## Прямой процесс: добавление шума

BICCAD



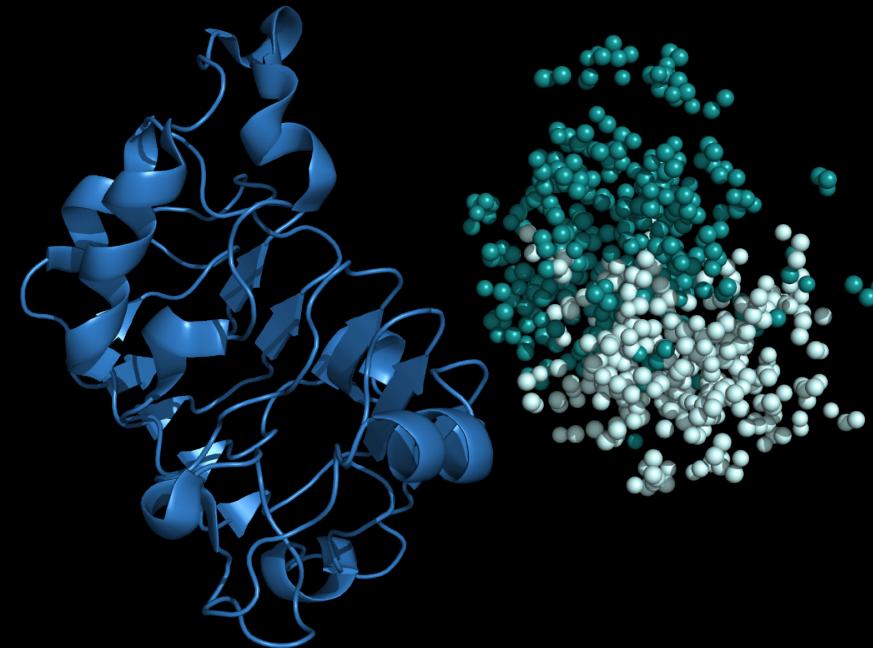
## Прямой процесс: добавление шума

BICCAD



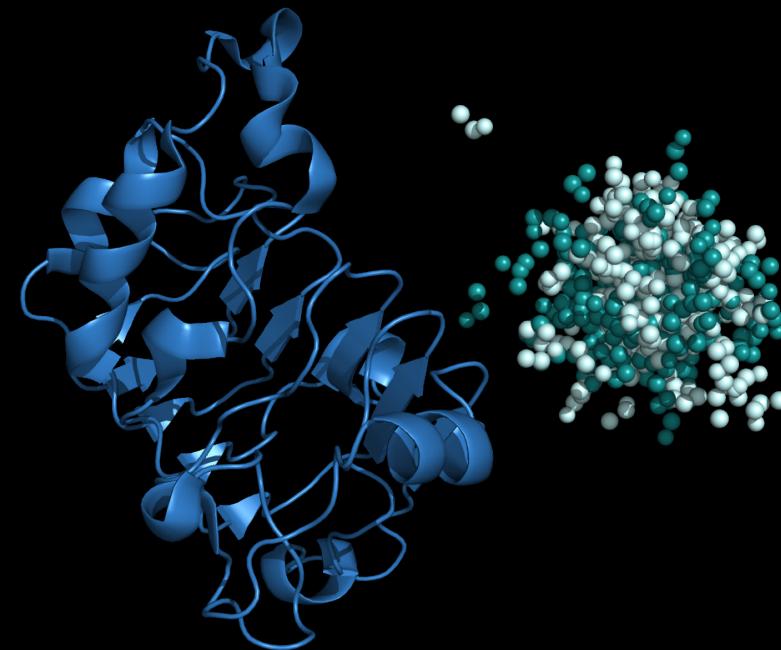
## Прямой процесс: добавление шума

BICCAD



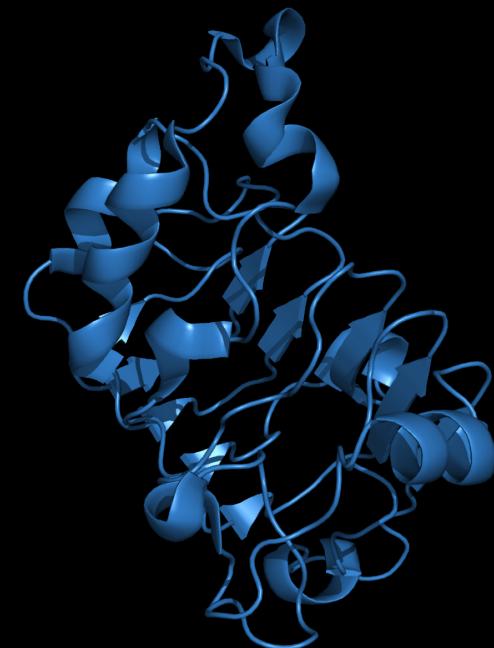
## Прямой процесс: добавление шума

BIGCAD



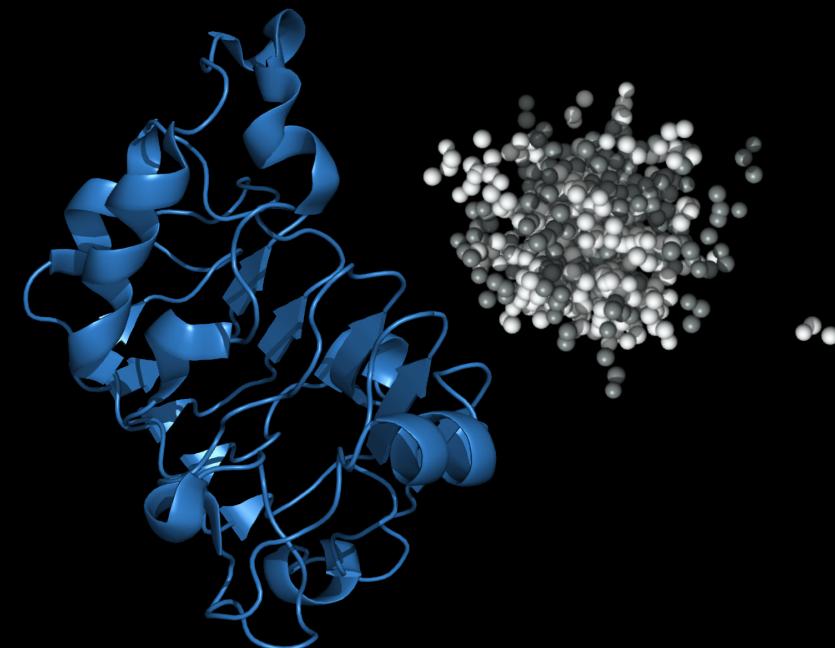
# Обратный процесс: удаление шума

BIGCAD



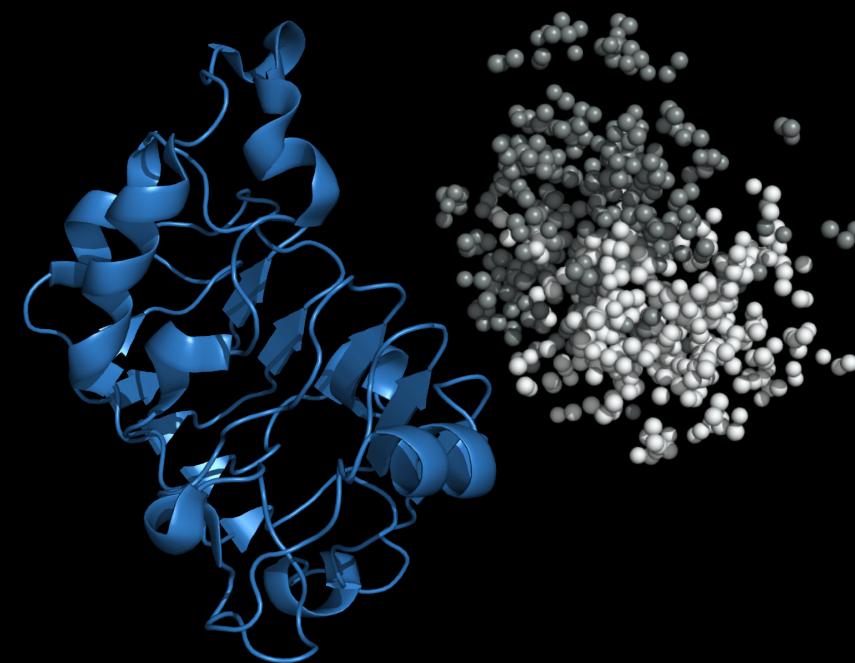
# Обратный процесс: удаление шума

BICCAD



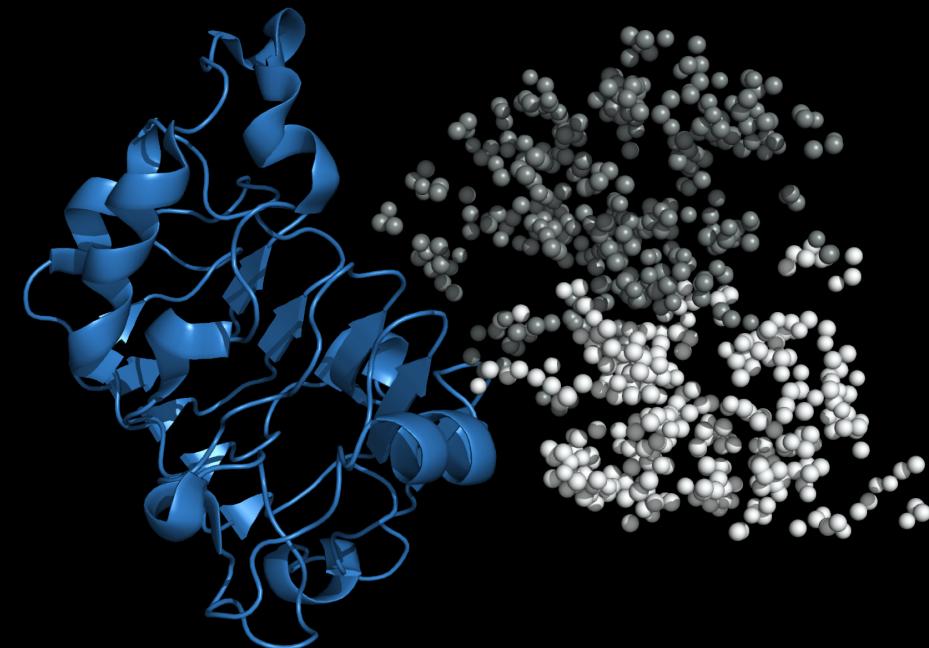
# Обратный процесс: удаление шума

BIGCAD



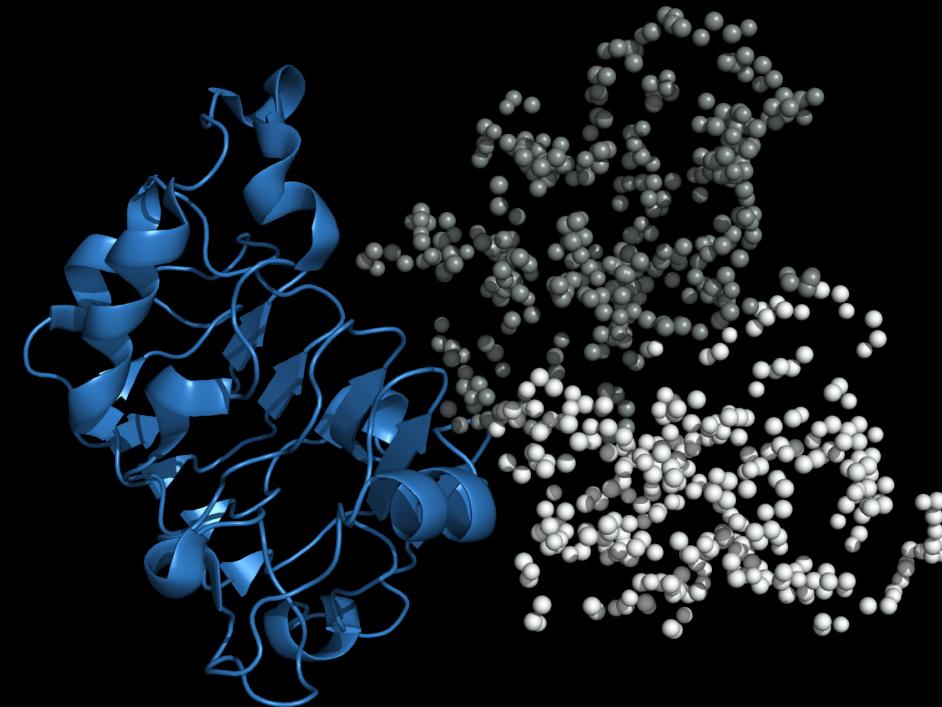
# Обратный процесс: удаление шума

BIGCAD



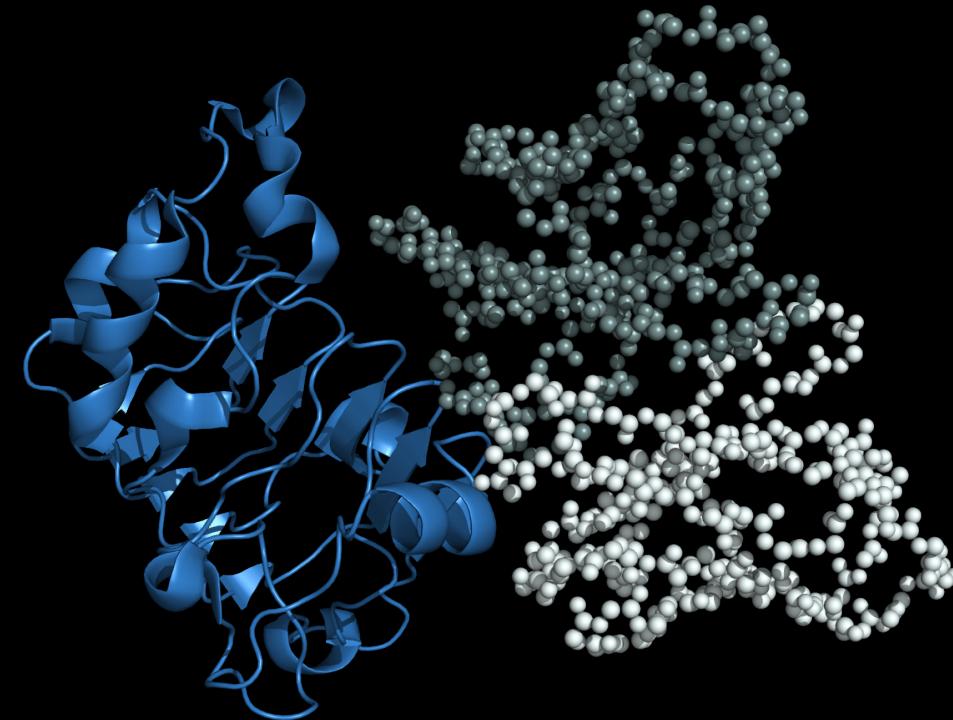
# Обратный процесс: удаление шума

BIGCAD



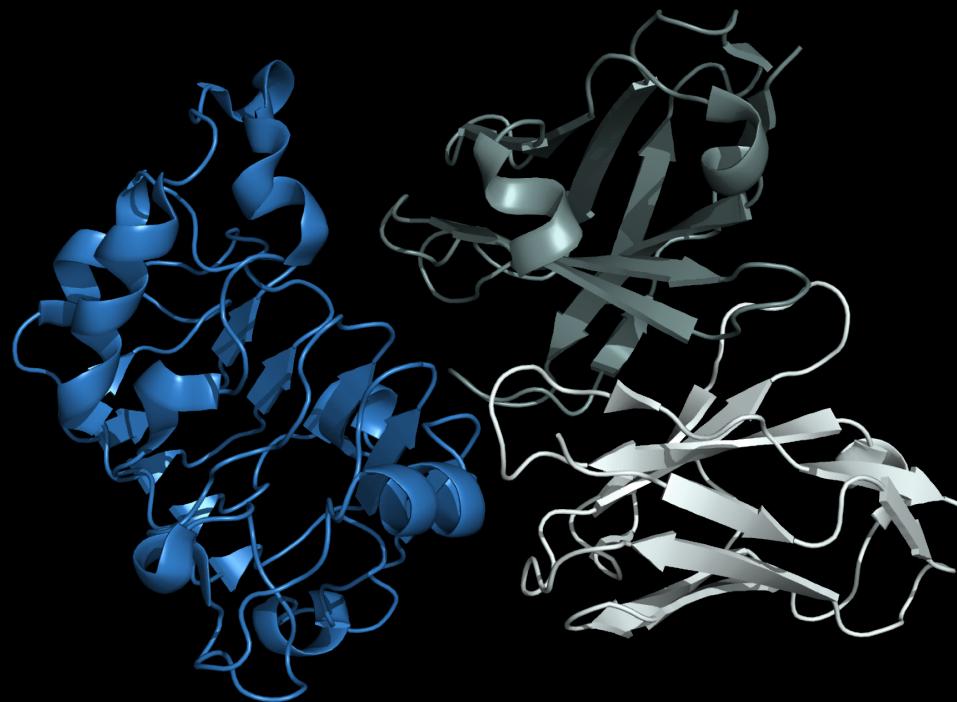
# Обратный процесс: удаление шума

BICCAD



# Дизайн последовательности по структуре

BICCAD

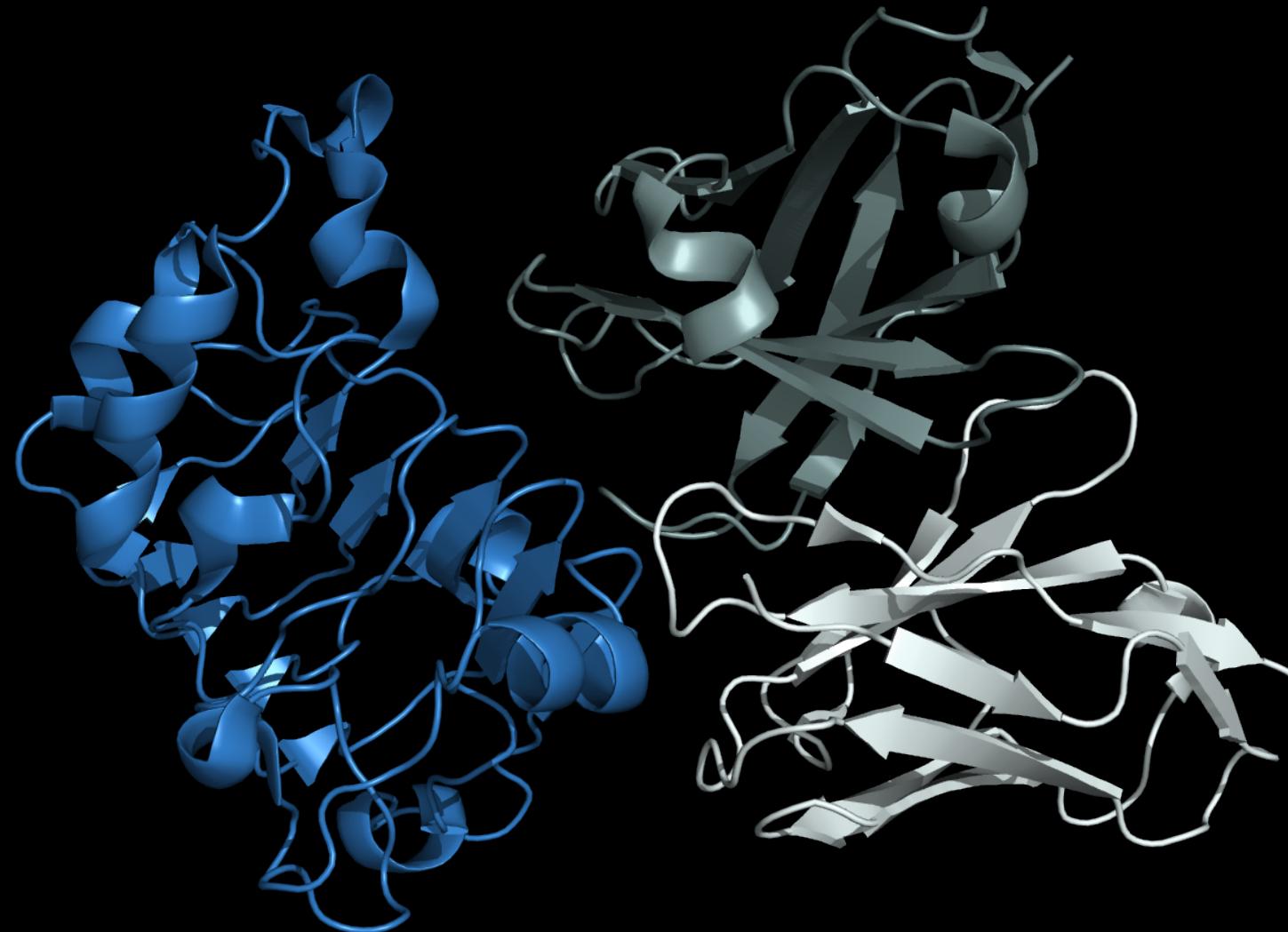


Дизайн  
последовательности

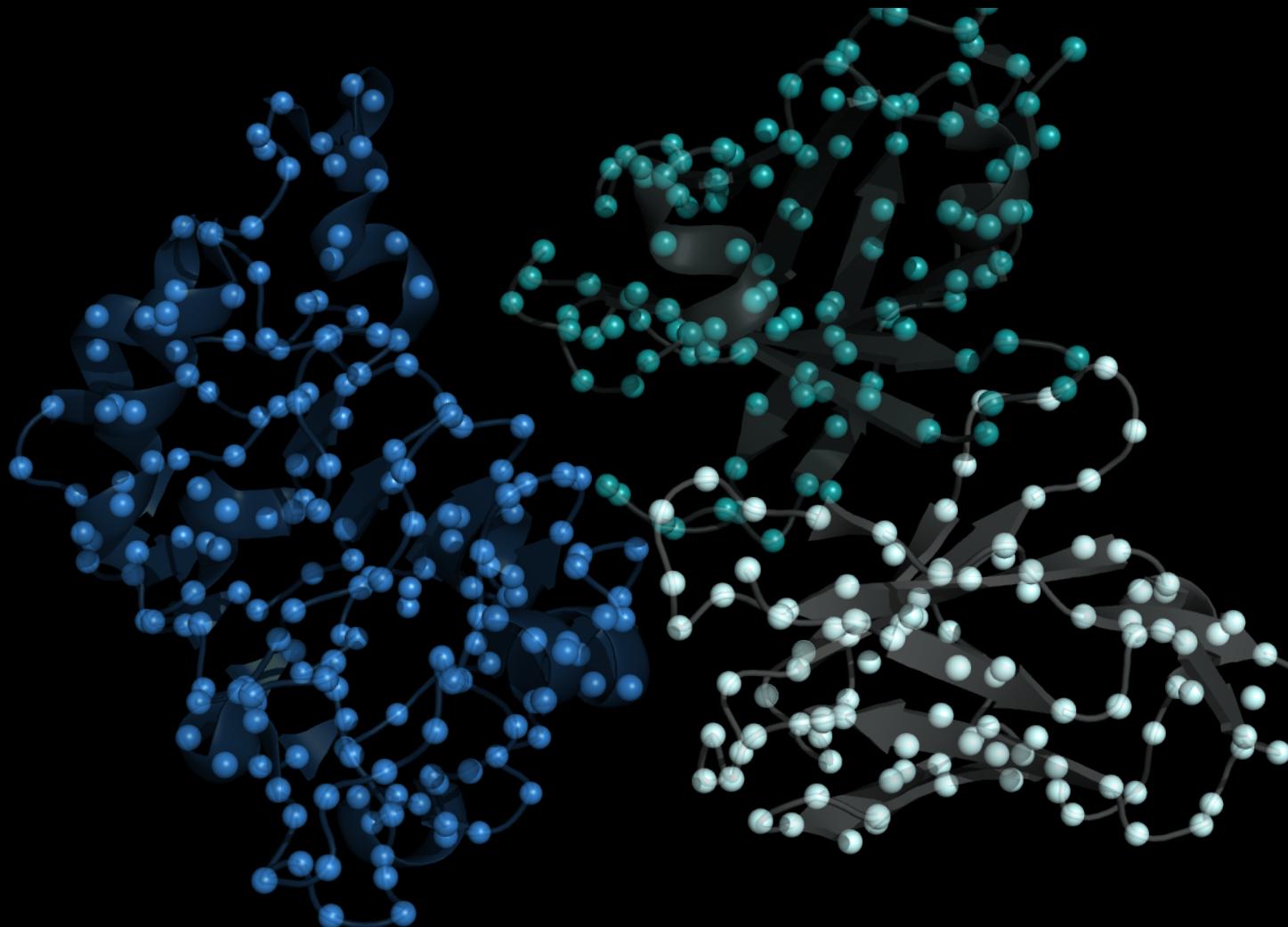
QVQ...ARGSYRYDFDY...TVSS  
DIE...SCRASQDISNY...LEIK

# Дизайн последовательности по структуре

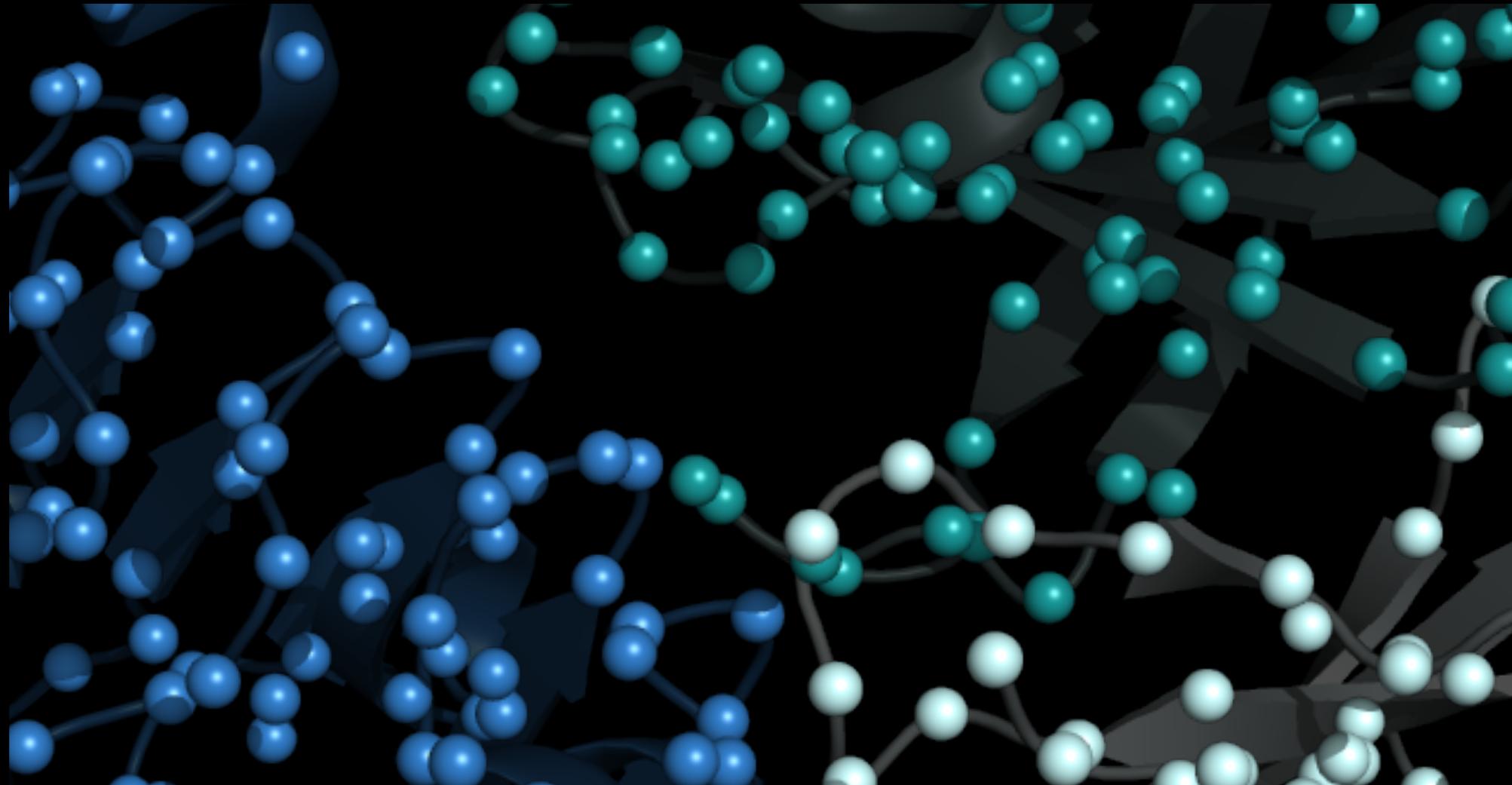
BICCAD



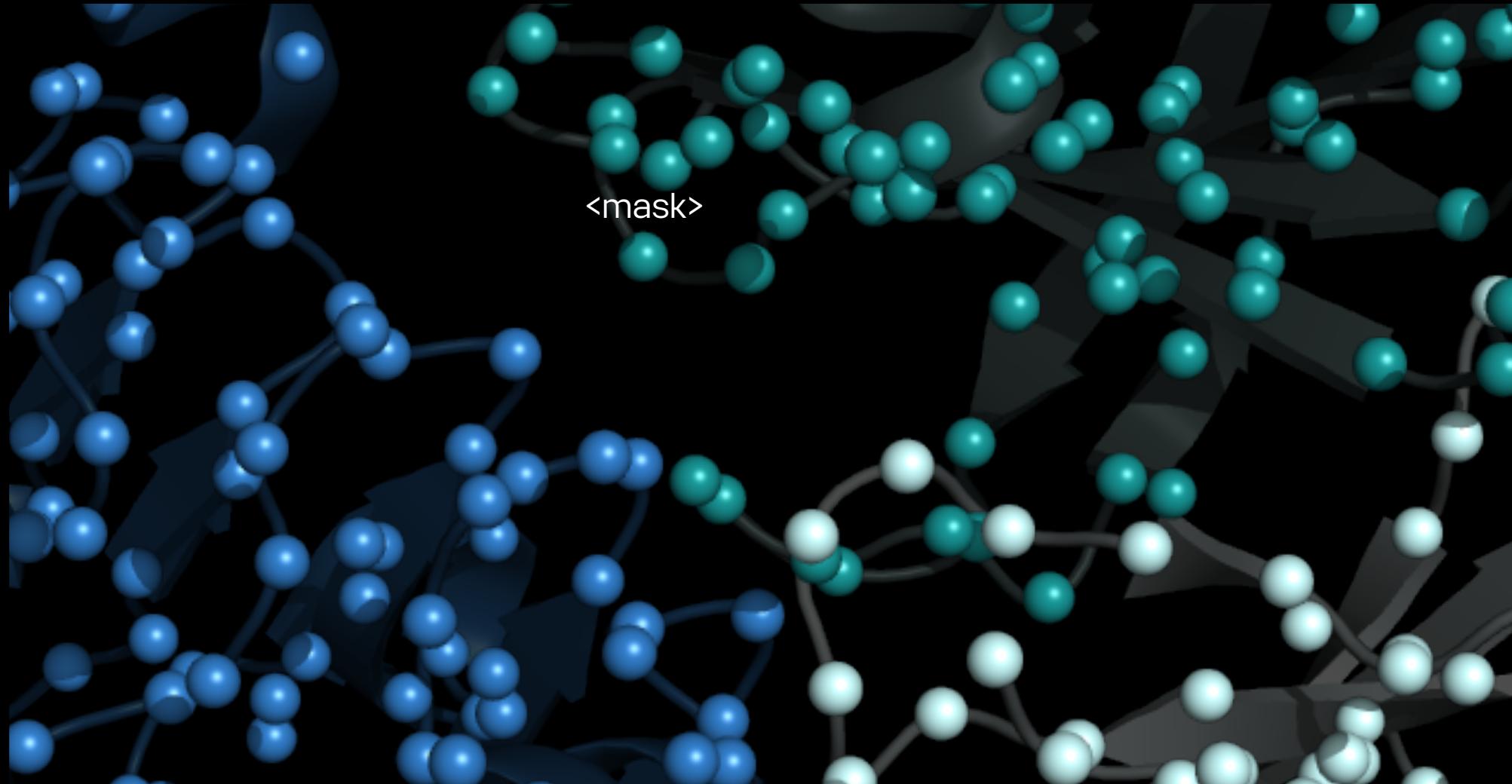
## Дизайн последовательности по структуре



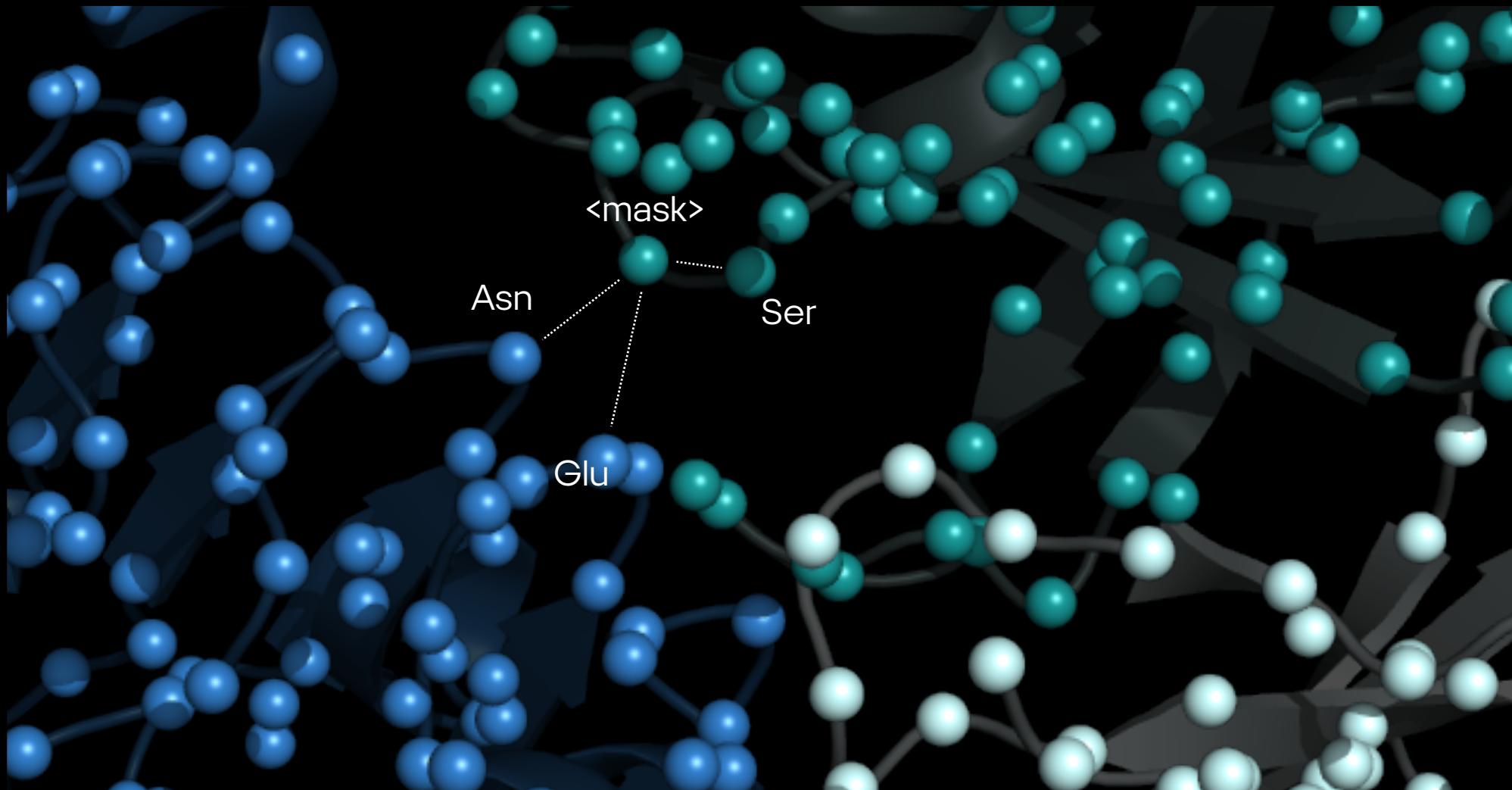
## Дизайн последовательности по структуре



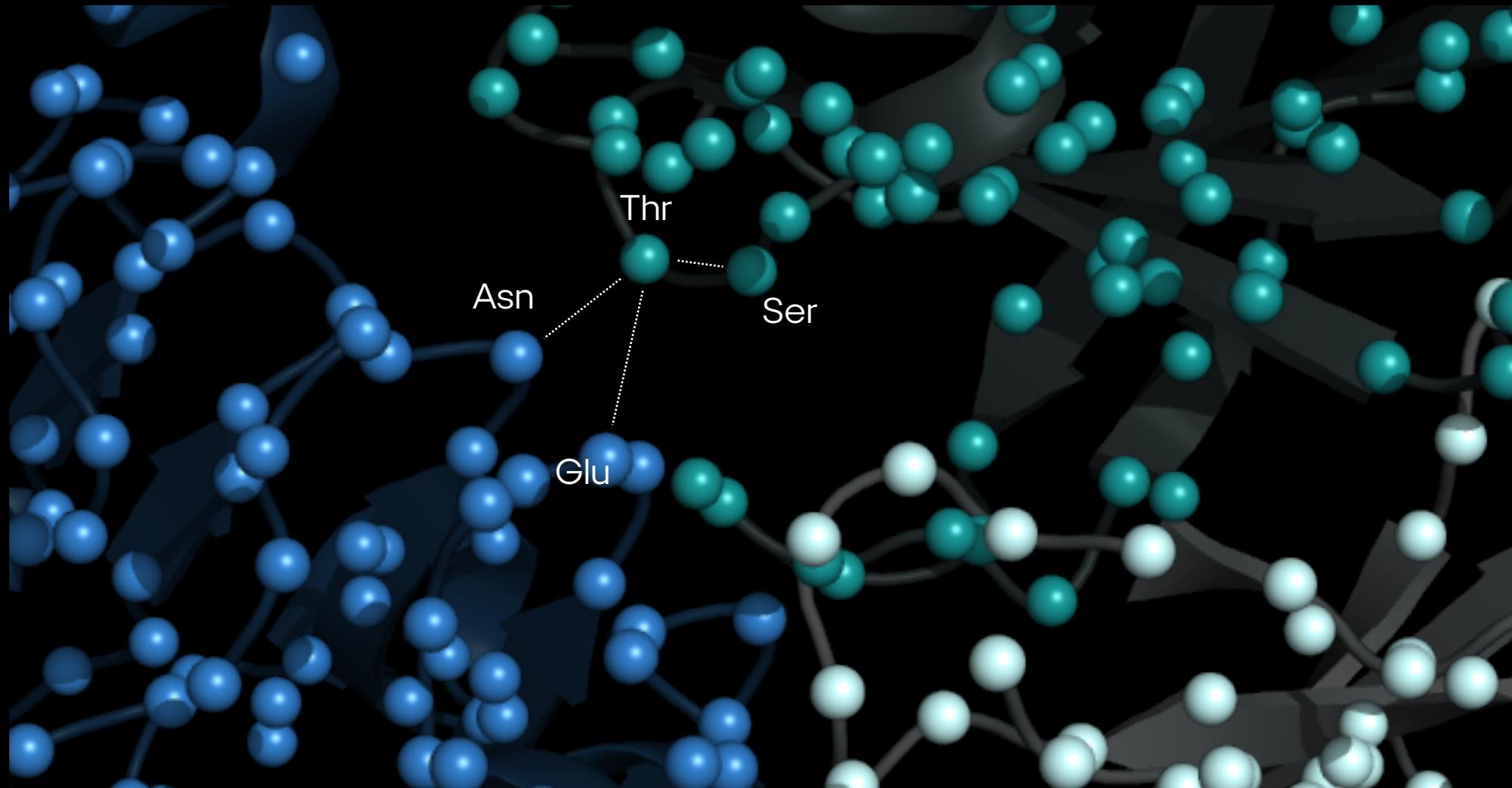
## Дизайн последовательности по структуре



## Дизайн последовательности по структуре



## Дизайн последовательности по структуре



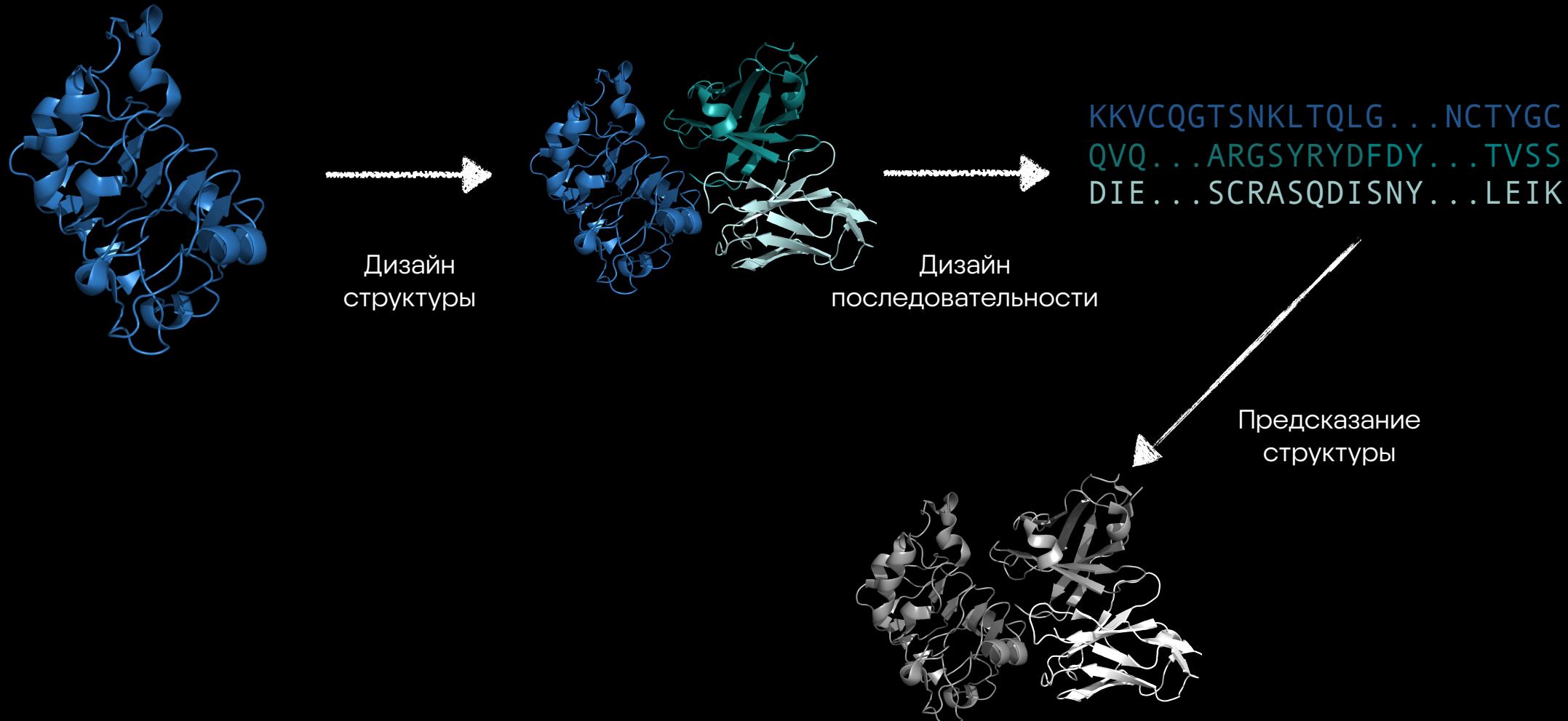
# Согласованность дизайна с предсказанием

BICCAD



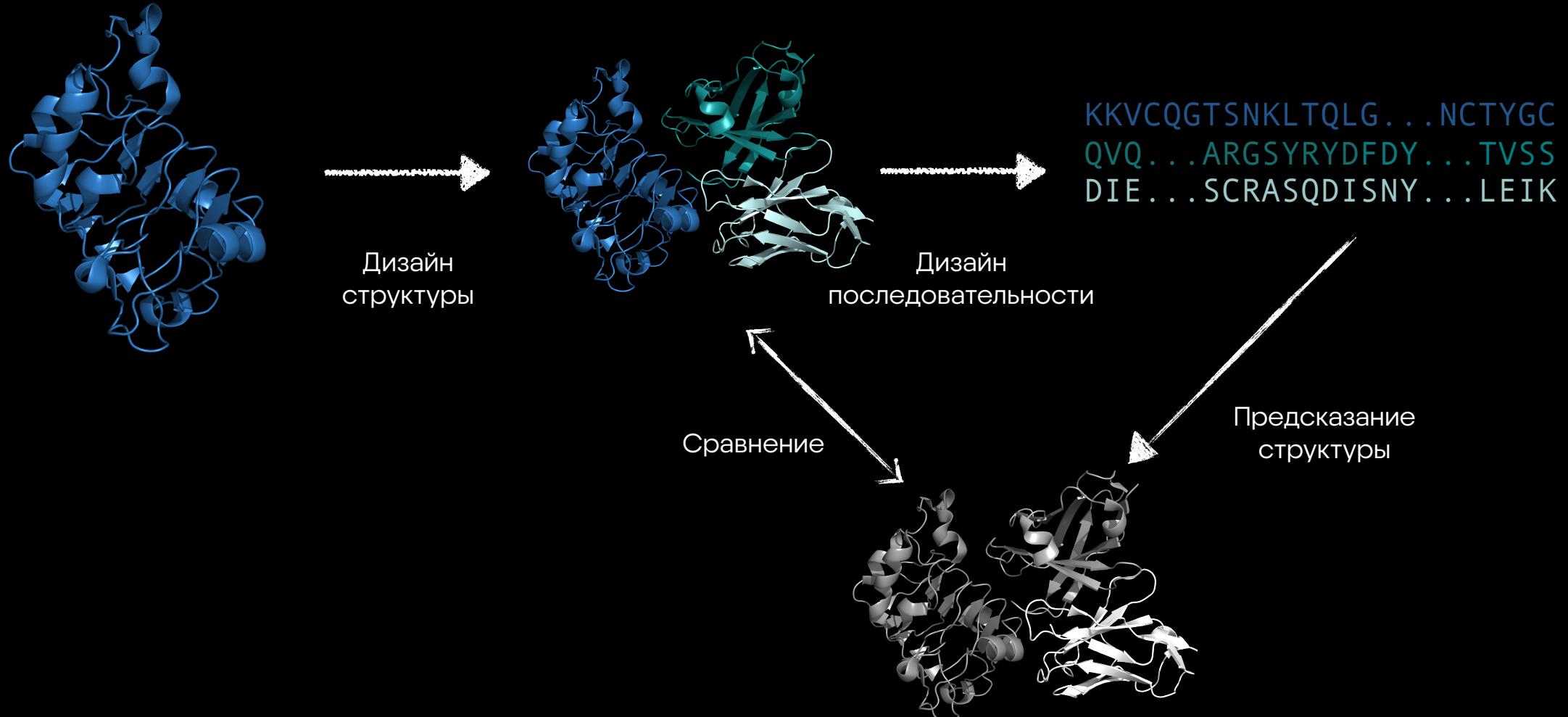
# Согласованность дизайна с предсказанием

BICCAD



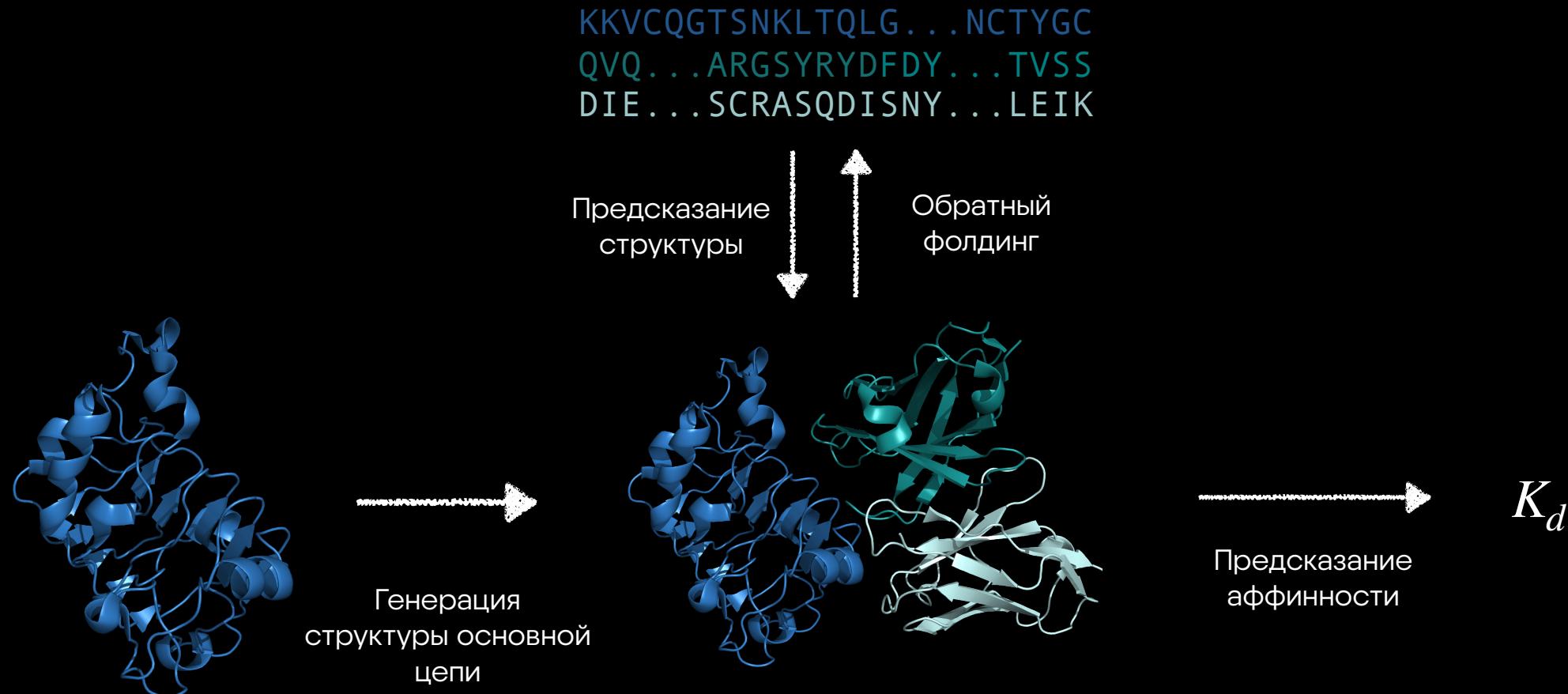
# Согласованность дизайна с предсказанием

BICCAD



# Резюме по задачам

BICCAD





**BICCAD**  
Biotechnology Company

[О программе](#)

[Учебный план](#)

[Поступление на программу](#)

[FAQ](#)



Магистерская программа

# Вычислительная биология и биоинформатика

Направление 01.04.02 – Прикладная математика и информатика

[Узнать больше](#)

