

АНОТАЦІЯ

Кваліфікаційна робота присвячена пошуку інгібіторів SIRT1 людини методами *in silico*. У середовищі аналітичної платформи KNIME 4.1.0 з використанням R 3.6.0. створено та параметризовано протокол для проведення машинного навчання. Побудовано та валідовано низку моделей машинного навчання: нейронних мереж, баєсових класифікаторів, дерев рішень, для пошуку нових інгібіторів SIRT1 людини. Найкращі моделі були використані для віртуального скринінгу бібліотеки низькомолекулярних органічних сполук, кількість яких становила більше 3 мільйонів хімічних сполук. Результати віртуального скринінгу було проаналізовано і відібрано 21 556 сполук, що ідентифіковані моделями як активні. Відносно цих сполук проведено віртуальний скринінг методом молекулярного докінгу, проведено рескоринг комплексів “ліганд-білок”. Згідно результатів молекулярного докінгу відібрано 100 сполук на тестування *in vitro*. У результаті тестування виявлено 4 сполуки, що зв’язуються із SIRT1 людини. Серед цих 4 сполук, 1 проявляє селективність щодо SIRT1 людини. Для цієї сполуки встановлено значення IC_{50} 0.09 μ M.

Робота викладена на 50 сторінках, містить 2 таблиці та 11 рисунків. Список використаних джерел включає 76 робіт.

Ключові слова: SIRT1, резистентність до хіміотерапії, машинне навчання, віртуальний скринінг.