

# **ИСКУССТВЕННЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ КАК ИНСТРУМЕНТ ВИРТУАЛЬНОГО СКРИНИНГА НА ОСНОВЕ ОДНОКЛАССОВОЙ КЛАССИФИКАЦИИ**

**П.В. Карпов, И.И. Баскин, П.В. Палюлин, Н.С. Зефирова**

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова*

Применение виртуального скрининга позволяет ранжировать соединения по степени их прогнозируемой активности. Сам расчет осуществляется на основе некоторой модели, которая определяет, активно ли тестируемое соединение или нет. При построении модели традиционно учитываются как активные соединения (примеры), так и неактивные контрпримеры. Хотя и существуют методы поиска по химическому подобию, в которых определение активности рассматриваемого соединения основывается на близости к классу активных структур, они работают лишь на гладких поверхностях «структура-свойство».

Методы одноклассовой классификации требуют только наличие активных соединений для построения модели. Такая модель в состоянии отличать структуры моделируемого класса от всех остальных структур.

Особая архитектура искусственных нейронных сетей, в которой один из промежуточных слоев имеет значительно меньшую размерность по сравнению с соседними слоями, а вход сети в точности совпадает с выходом, может применяться для виртуального скрининга на основе одноклассовой классификации. Сеть сначала кодирует входные данные в пространство значительно меньшей размерности, тем самым выделяя главные компоненты, а затем декодирует обратно. По величине ошибки восстановления можно судить о том, насколько хорошо рассматриваемое соединение соответствует образу моделируемой мишени, закодированному в среднем слое сети.

Применение метода искусственных нейронных сетей для одноклассовой классификации проводилось на базе для оценки моделей виртуального скрининга DUD (Directory Of Useful Decoys). Полученные высокие значения площадей под ROC-кривыми указывают на работоспособность и применимость предлагаемого подхода.