UDC 547.964:591.481.8:615.33
SCOPUS CODE 1701
https://doi.org/10.36073/1512-0996-2019-4-43-55

ანტიმიკრობული პეპტიდების ამოცნობა პირდაპირი გავრცელების ნეირონული ქსელით

ნინო მჭედლიშვილი მართვის სისტემების დეპარტამენტი, საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი, საქართველო, 0160, თბილისი, მ. კოსტავას 75
E-mail: ninomchedlishvili@gtu.ge

მარიამ ჩხაიძე ხელოვნური ინტელექტის დეპარტამენტი, საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი, საქართველო, 0160, თბილისი, მ. კოსტავას 75
E-mail: m.chkhaidze@gtu.ge

სოფიო ბარნოვი მართვის სისტემების დეპარტამენტი, საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი, საქართველო, 0160, თბილისი, მ. კოსტავას 75
E-mail: s.barnovi@gtu.ge

რეცენზენტები:

ქ. კოტრიკაძე, სტუ-ის ინფორმატიკისა და მართვის სისტემების ფაკულტეტის ასოც. პროფესორი
E-mail: ketino27@gmail.com

მ. ახობაძე, სტუ-ის ინფორმატიკისა და მართვის სისტემების ფაკულტეტის ასოც. პროფესორი
E-mail: meakhobadze@yahoo.com

ანოტაცია. პეპტიდების არსებული ბაზის საფუძველზე ანტიმიკრობული პეპტიდების ამოცნობა, რომელიც მეტად აქტუალური ამოცანაა, ხელს უწყობს ახალი ანტიბიოტიკების ფორმირების პრობლემას. ამპ-თა გავრცელების არეალი მოიცავს ორგანიზმების ფართო ევოლუციურ სპექტრს. ანტიმიკრობული პეპტიდების უნარი ებრძოლოს და გაანადგუროს სხვადასხვა ტიპის ბაქტერიები, სოკოები თუ მიკროორგანიზმები საშუალებას აძლევს მეცნიერებს გამოიყენონ ამპ-ები ახალი ანტიბიოტიკების შექმნის პროცესში.

გადმოცემული და აღწერილია ამპ-თა ამოცნობის პროცესი ხელოვნური ნეირონული ქსელებით. ამოცნობის პროცედურები – ნეირონეული ქსელის სწავლება და ამოცნობა ხორციელდება პროგრამა Matlab-ის გამოყენებით.

ასევე აღწერილია ამპ-თა და არაამპ-თა ამინომჟავური თანამიმდევრობების სიმრავლეების (შერჩევები) შექმნის პროცესი;

ნეირონული ქსელების სწავლებისათვის შერჩეული და გამოყენებულია პირდაპირი გავრცელების ნეირონული ქსელი, რომელიც სრულდება რამდენიმე ალგორითმით. კვლევისას მიღებული შესა-

ბამისი შედეგების ყველა ალგორითმის შემთხვევაში მოცემულია ალგორითმების შედარებაც.

გააანალიზებული და შეფასებულია ამპ-თა და არა ამპ-თა ამინომჟავური თანამიმდევრობების (რეალიზაციების) სიმრავლეებში (სახეებში) აღმწერი ნიშნები.

საკვანძო სიტყვები: ამოცნობა; ანტიმიკრობული პეპტიდები; ნეირონული ქსელები.

შესავალი

ანტიმიკრობული პეპტიდები (ამპ) ცოცხალი ორგანიზმის დაცვითი ფუნქციის განმახორციელებელი მოლეკულებია. მათი ძირითადი ფუნქცია ორგანიზმში შეჭრილი პათოგენური მიკროორგანიზმების (ბაქტერიების, სოკოების, პარაზიტებისა და ვირუსების) განადგურებაა. ანტიმიკრობული პეპტიდები მოქმედებს როგორც გრამუარყოფით, ისე გრამდადებით ბაქტერიებზე, ასევე სოკოზე, ვირუსებსა და უმარტივესებზე. ამის გარდა, ანტიმიკრობული პეპტიდები ანტიმიკრობულ აქტიურობას ანტიბიოტიკებისადმი მდგრადი ბაქტერიების შტამების მიმართაც ავლენს [4]. მიუხედავად იმისა, რომ ამპ-თა ფართო სპექტრია იდენტიფიცირებული და შესწავლილი, სტრუქტურა-აქტიურობას შორის დამოკიდებულების ნათელი სურათი ჯერ კიდევ არაა შექმნილი. ასეთი მდგომარეობა უკავშირდება იმას, რომ ამპ-თათვის დამახასიათებელია ამინომჟავურ თანამიმდევრობათა და სივრცულ სტრუქტურათა დიდი მრავალფეროვნება და ასეთ არაერთგვაროვან სიმრავლეში რაიმე ზოგადი კანონზომიერების დადგენა გაძნელებულია [6][7]. სტრუქტურა-აქტიურობას შორის დამოკიდებულებების ცოდნა აუცილებელია ამპ-თა საფუძველზე ახალი ანტიბიოტიკების მიზანმიმართული პროექტირების განხორციელებისათვის. დღევანდელი მდგომარეობით, მონაცემთა ბაზები ამპ-თა შესახებ მხოლოდ თანამიმდევრობაზე დაფუძნებულ ანტიმიკრობული აქტიურობის წინასწარმეტყველებას გვთავაზობს. ასეთი წინასწარმეტყველება პირველი ეტაპია ახალი წამლის პროექტირების პროცესში [7].

ექსპერიმენტული მედიცინის ინსტიტუტის ბიოინფორმატიკის ლაბორატორიაში შეიქმნა და განვითარების პროცესშია მონაცემთა ბაზა პეპტიდების ანტიმიკრობული აქტიურობისა და სტრუქტურის შესახებ (DBAASP), რომელშიც თავმოყრილია ინფორმაცია 4500-ზე მეტი პეპტიდზე. ბაზა იძლევა ექსპერიმენტით დადასტურებული ამპ (დადებითი) და არა-ამპ (უარყოფითი) სიმრავლეების ანუ სახეების ფორმირების შესაძლებლობას. ეს ხელს უწყობს წამლის პროექტირების მეთოდის ნაკლები დანახარჯებით შემუშავებას.

ამოცნობის მეთოდის შემუშავება ისეთი ნიშნებისთვის, რომლითაც მიღებული გვაქვს ძნელად განმხოლოებადი სახეთა სიმრავლეები, ძალიან აქტუალური და საჭირო კვლევაა [5].

დღეისათვის მსოფლიოში საკვლევი თემის აქტუალობიდან გამომდინარე ანტიმიკრობულ პეპტიდთა ამოცნობაზე მუშაობა ცხადია, მიმდინარეობს. ამ მხრივ განსაკუთრებით აღსანიშნავია თბილისში ექსპერიმენტული მედიცინის ინსტიტუტის ბიოინფორმატიკის განყოფილება. რაც შეეხება მსოფლიო მონაცემებს, ტარდება კვლევები ამპ-თა ამოცნობის ღრმა სწავლების, გენეტიკური ალგორითმების, ნეირონული ქსელების და სხვა მე-

თოდების გამოყენებით, თუმცა, ამოცნობის საჭირო სიზუსტე ვერ იქნა მიღწეული. შესაბამისად, კვლევები მიმართულია უმეტესად ამოცნობის მეთოდების ისე დახვეწისკენ, რომ მივიღოთ ამოცნობის მაქსიმალურად მაღალი საიმედოობა.

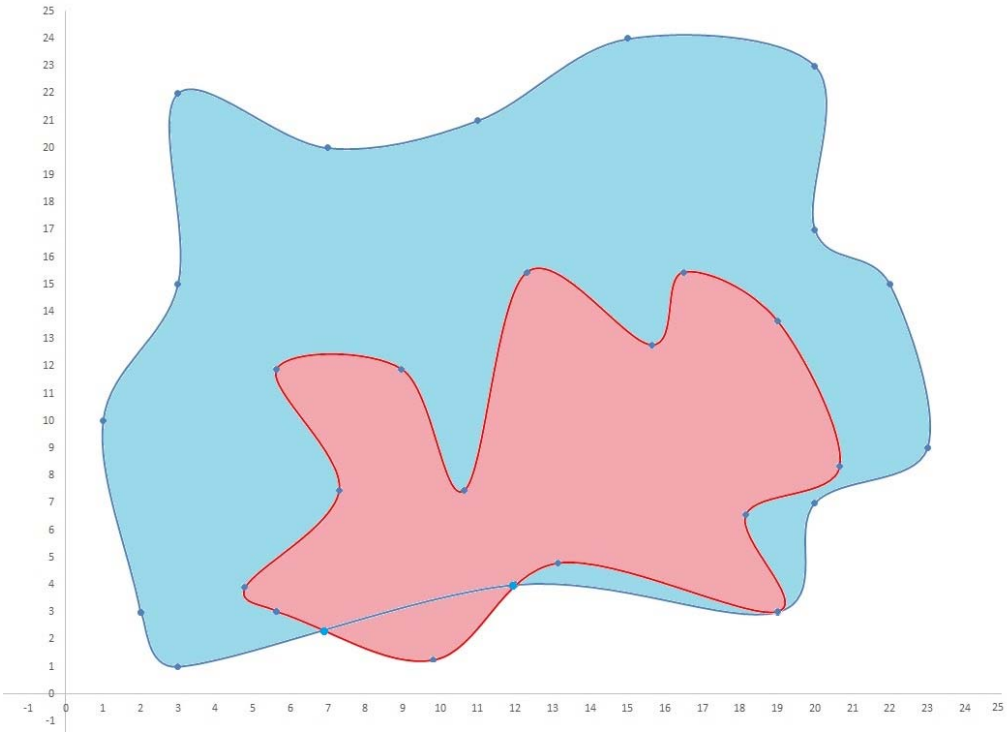
ძირითადი ნაწილი

ანტიმიკრობულ პეპტიდთა ამოცნობის პროცესი

ანტიმიკრობულ პეპტიდებს გააჩნიათ თავისი მახასიათებელი ნიშნები, რომლებიც გვეხმარება ნიშანთა სივრცის შედგენაში: Hydrophobic moment – ჰიდროფობიური მომენტი, Hydrophobicity – ჰიდროფობიურობა, Charge – მუხტი, Isoelectric point – იზოელექტრული წერტილი, Depth – მემბრანაში ჩაძირვის სიღრმე, Tilt angle – გადახრის კუთხე, Disordering – ორიენტაციით მემრანის ზედაპირის მიმართ, Linear moment – წრფივი მომენტი, Aggregation – აგრეგაცია.

შესაბამისად, განსახორციელებელი ამოცანებია: მონაცემთა ბაზის შედგენა; დაყოფა სასწავლო და საკონტროლო სიმრავლეებად, ვალიდაციური სიმრავლის ფორმირება. მონაცემთა წინასწარი დამუშავება; ამოცანის შესაბამისი ნიშანთა სივრცის შერჩევა; მონაცემთა წარმოდგენა რიცხვითი ფორმით და მათი ნორმირება;

ნიშანთა ანალიზისა და შეფასებისთვის თავდაპირველად შევადგინეთ ანტიმიკრობულ და არაანტიმიკრობულ პეპტიდთა სახეებისთვის მინი- და მაქსი- პორტრეტები. მიღებული შედეგები ყოველი ნიშნისათვის ასახავს ნიშანთა ცვლილების დიაპაზონს, ასევე შესაძლებელია მათი გამოყენება ამოცნობის და კლასტერირების (ან წინასწარი გადარჩევის) ეტაპებზე.



სურ. 1. ამპ და არაამპ-თა მინი და მაქსი პორტრეტები

1-ელ ცხრილში ასახული შედეგების გრაფიკული ფორმა მოცემულია 1-ელ სურათზე. ძნელი შესამჩნევი არ არის, რომ მიუხედავად იმისა, რომ ამოსაცნობად გვეძლევა მხოლოდ ორი სახე, სახეთა სიმრავლეებში შემავალი რეალიზაციებით (სახეთა აღწერებით) ვიღებთ ძნელად განმხოლოებად სახეთა სიმრავლეებს. შესაბამისად, ეს ფაქტი ართულებს დასმულ ამოცანას.

ცხრილი 1

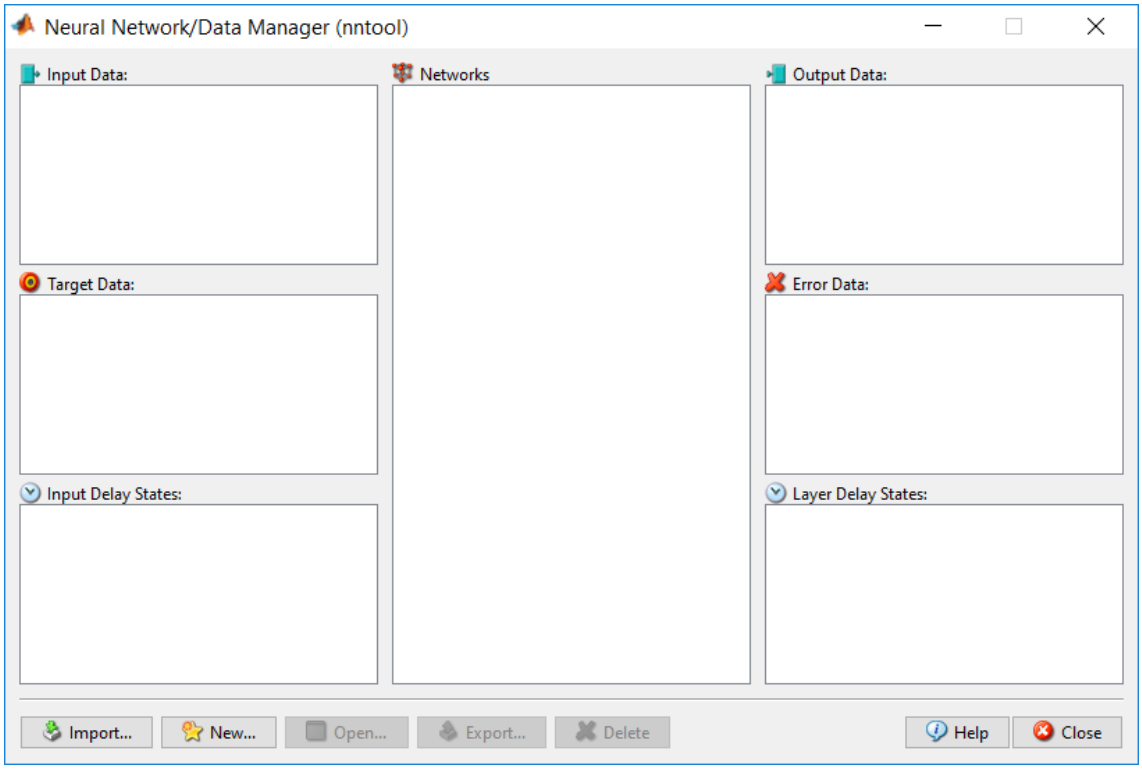
ამპ	Max	Min	არაამპ	max	min
Hydrophobic Moment	2,15489	0,02615	Hydrophobic Moment	2,0951	0,06645
Hydrophobicity	2,24636	-2,24529	Hydrophobicity	1,69769	-3,09
Charge	11	1	Charge	12	-4
Isoelectric Point	14	9,58006	Isoelectric Point	14	2,79
Depth	30	6	Depth	30	2
Tilt angle	145	5	Tilt angle	172	5
Disordering	0,76334	-1,57445	Disordering	0,98179	-1,32678
Linear Moment	0,56142	0,1575	Linear Moment	0,56992	0
Aggregation	659,32397	0	Aggregation	1004,04999	0

მიღებული საბოლოო შედეგები გამოიყენება შემდგომ კვლევებში იმ მოთხოვნით, რომ ამოცნობის საიმედოობა უნდა იყოს რაც შეიძლება მაღალი, და აღწევდეს 100%-ს. შესაბამისად, ეს ორი ფაქტორი, ამოცნობის მისაღები მაღალი სიზუსტე, და ამოსაცნობ სახეთა განმხოლოების სირთულე დასმულ ამოცანას მეტად ართულებს და მეტად მნიშვნელოვანს ხდის.

ამოცნობის პროცესი სრულდება ხელოვნური ნეირონული ქსელებით. ნეირონული ქსელის არქიტექტურის ფორმირების დასრულების შემდეგ უნდა მოხდეს წონისა და წანაცვლების საწყისი მნიშვნელობების მოცემა ანუ, სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, უნდა მოხდეს ქსელის ინიციალიზაცია. ასეთი პროცედურა ხორციელდება **init** მეთოდის საშუალებით **network** კლასის ობიექტებისათვის. ამ მეთოდის გამოძახების ოპერატორს შემდეგი სახე აქვს: ***net = init (net)*** [1][2].

ხელოვნური ნეირონული ქსელების სინთეზი შესაძლებელია განხორციელდეს როგორც რომელიმე დაპროგრამების ენაზე, ასევე სხვადასხვა სტანდარტული ბიბლიოთეკების და აპლიკაციების გამოყენებით. ჩვენ კვლევისათვის სამუშაო გარემოდ შევარჩიეთ პროგრამა Matlab [3].

სისტემა Matlab-ის გაფართოების NNT პაკეტის გრაფიკული ინტერფეისის გაშვება ხდება საბრძანებო ფანჯრიდან nntool ბრძანების შესრულებით. გამოდის ფანჯარა, რომელსაც ეწოდება მონაცემების და ქსელების მართვის ფანჯარა Neural Network/Data Manager:

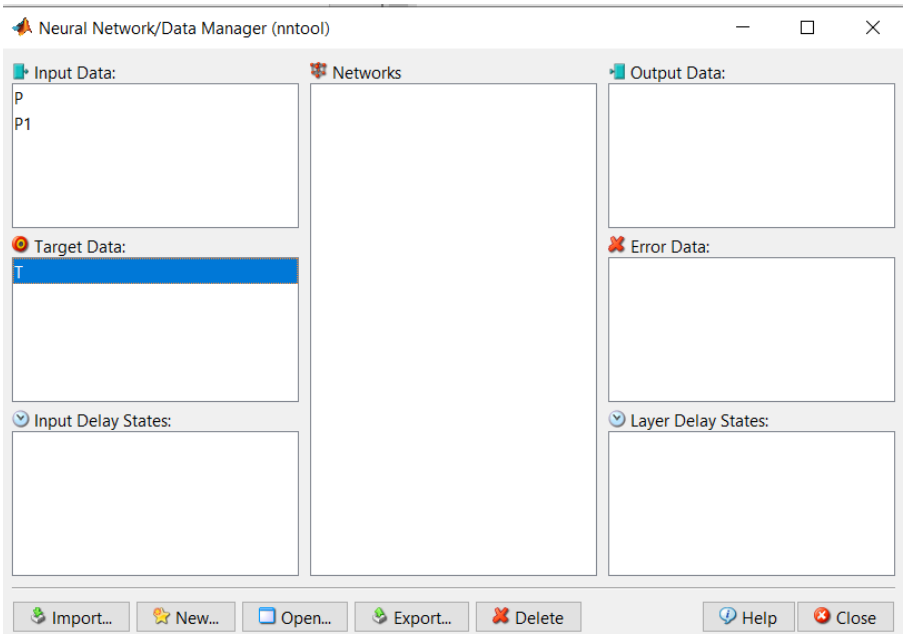


სურ. 2. მონაცემებისა და ქსელების მართვის ფანჯარა

ფანჯარას აქვს 7 ველი და რამდენიმე ფუნქციური ღილაკი: Help – დახმარება; Import – მონაცემების იმპორტირებისათვის Matlab სისტემის სამუშაო არიდან Nntool პაკეტის ცვლადების არეში; New… – ფანჯრის გამოძახება ახალი მონაცემების შესაქმნელად; Open – უკვე არსებულის გახსნისათვის; Export – მონაცემების იმპორტირებისათვის Nntool პაკეტის ცვლადების არიდან Matlab სისტემის სამუშაო არეში; Delete – არჩეული ობიექტის წაშლა; ველების სახელებია: Input Data – საწყისი მონაცემების შეტანა, Target Data – მიზნის მონაცემები, Input Delay States – შესასვლელი დაყოვნებები, Networks – ქსელები, Output Data - გამომავალი მონაცემები, Error Data – ცდომილებების მონაცემები, Layer Delay States ფენის დაყოვნების დრო. Nntool გრაფიკული ინტერფეისით შეიძლება სხვადასხვა ტიპის ქსელის შექმნა: Caskade-forward backprop – ქსელები პირდაპირი გავრცელებით; Competitive – კონკურენტუნარიანი; Elman backprop – ელმანის ქსელი; Feed-forward backprop – ქსელი უკუგავრცელებით; Generalized regression – განზოგადებული რეგრესიული; Hopfield – ჰოპფილდის ქსელი; Layer Recurrent რეკურენტული ფენა; Linear layer (design) – წრფივი ნეირონული ქსელი; LVQ – თვითორგანიზებადი LVQ-ქსელები; Perceptron – პერცეპტრონი; Radial basis – რადიალური საბაზისო ქსელები; და სხვ.

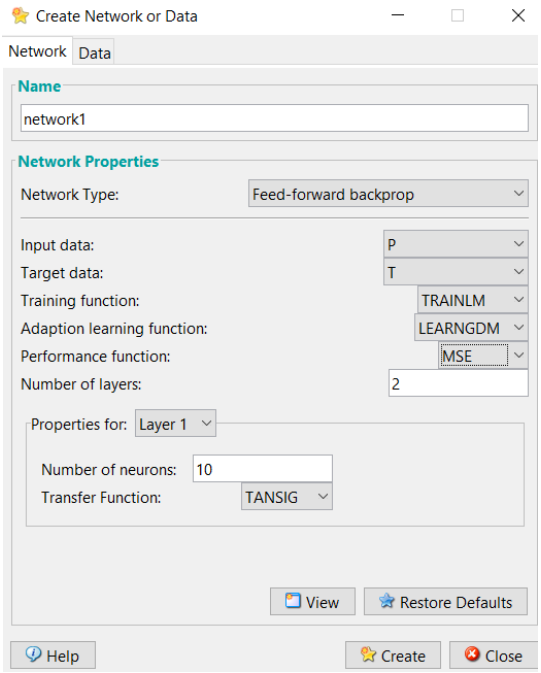
ჩვენს შემთხვევაში შევქმნათ პირდაპირი გავრცელების ქსელი (feed-forward backpropagation). შევიტანოთ საბრძანებო ფანჯრიდან:

>> nntool



სურ. 3. სასწავლო და საკონტროლო რეალიზაციების შეტანა

ავირჩიოთ ღილაკი "New…", გამოვა ფანჯარა, რომელსაც ვავსებთ ამოცანის შესაბამისად. name ველში შევიტანთ ქსელის სასურველ სახელს, დავუშვათ net1, ვირჩევთ ქსელის ტიპს. შემდეგ მოვნიშნავთ შესასვლელ და მიზნობრივ ფუნქციებს, ნეირონის რაოდენობას ქსელებში, დასწავლის ფუნქციას, ფენების რაოდენობას, ნეირონების რაოდენობას და სხვ.



სურ. 4. ქსელის ტიპის არჩევა

Network Type ველში ჩამონათვალში ვირჩევთ ქსელის ტიპს. ჩვენს შემთხვევაში ავირჩიოთ feed-forward backpropagation;

Input data და Output data მოვნიშნავთ შესაბამისად შესავალ და გამოსავალ მასივებს;

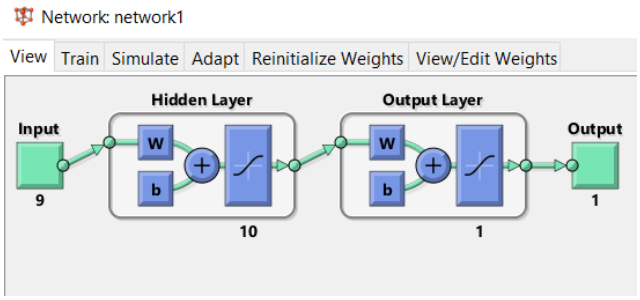
Training fuction ველში ვირჩევთ დასწავლის ფუნქციას Levenberg-Marquardt (trainLM) – ეს ალგორითმი რეკომენდებულია რთული ამოცანების გადასაწყვეტად;

Number of layers ვირჩევთ ფენების რაოდენობას (2 შრიანი);

Properties for layer ველში რიგრიგობით ვირჩევთ ფენების რიგს და შეგვაქვს Number of neurons ველში ნეირონების შესაბამისი რაოდენობა (10 ნეირონი);

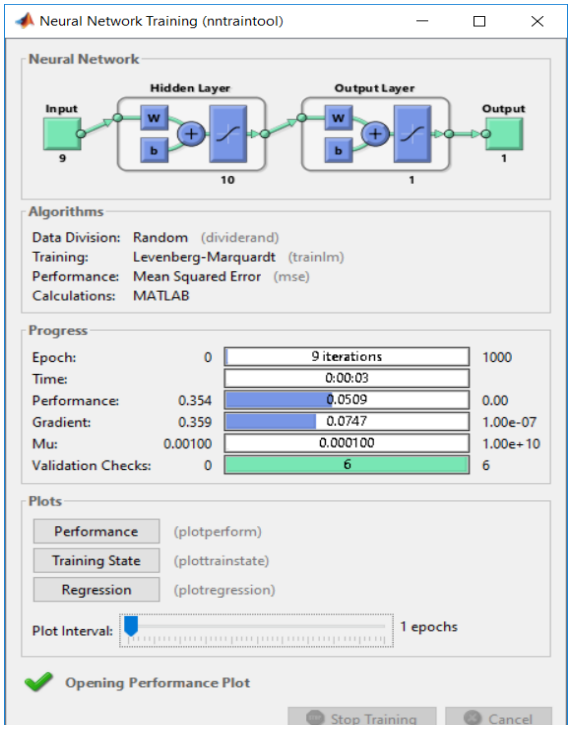
Transfer Function ველში ვირჩევთ აქტივაციის ფუნქციას (TANSIG ჰიპერბოლური ტანგენსი);

როგორც ვხედავთ ქსელს აქვს ცხრა შესასვლელი, ათი ნეირონი, აქტივაციის ფუნქცია არის ჰიპერბოლური ტანგენსი (tansig). გადავიდეთ ქსელის შექმნის პროცესზე, რის შემდეგ ძირითად ფანჯარაში გამოჩნდება ქსელის სახელი network1.



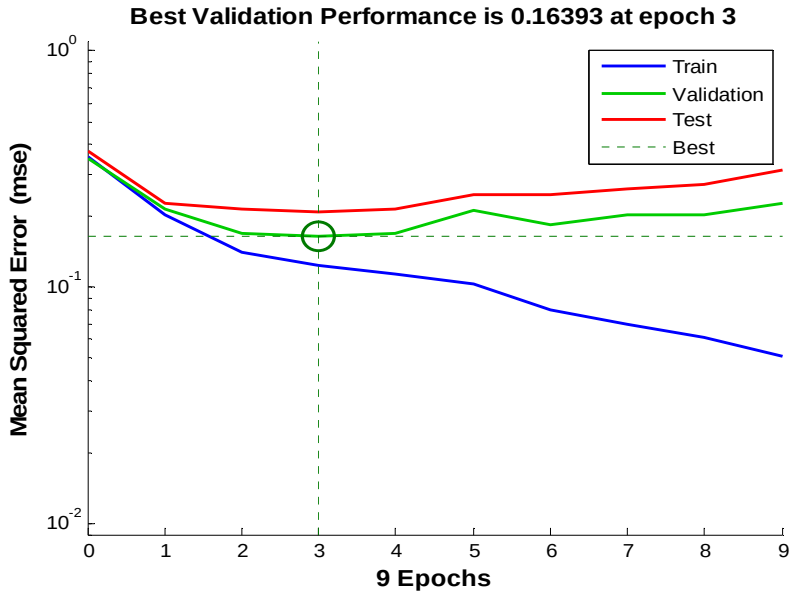
სურ. 5. ქსელის სტრუქტურული სქემა

განვახორციელოთ ქსელის დასწავლის პროცესი. ამისთვის გავააქტიუროთ შექმნილი ქსელი და გადავიდეთ Train ჩანართში. მოვნიშნოთ მონაცემები, დავტოვოთ ან შევცვალოთ გამოსასვლელის (network1_outputs) და შეცდომის (network1_errors) მონაცემების სახელები.



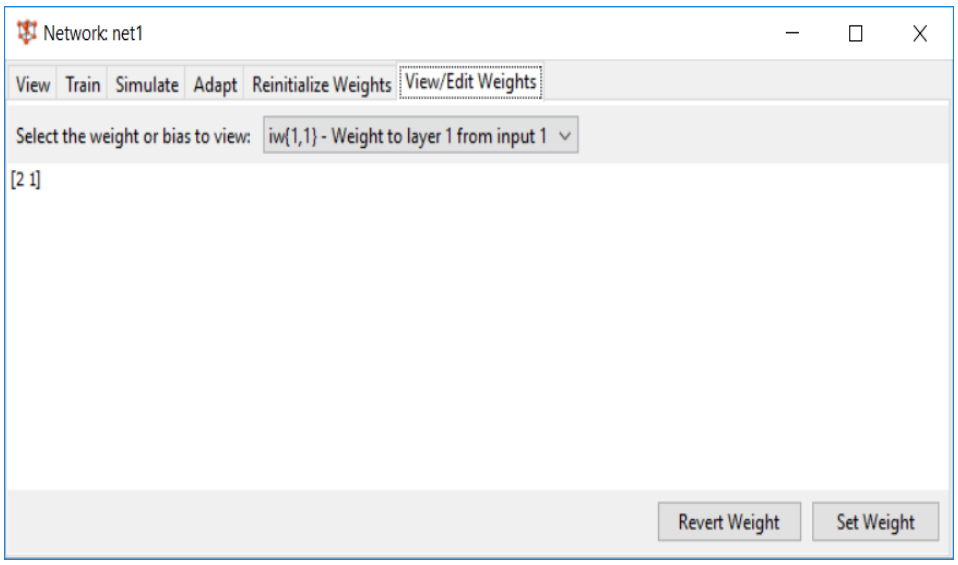
სურ. 6. ქსელის სწავლება

ამ ფანჯარაში ჩანს დასწავლის პროცესის მიმდინარეობა. როცა გამოსახულება ფანჯარაში გაჩერდება, დასწავლა დამთავრებულია. გამოსახულებიდან ჩანს, რამდენი იტერაცია და რა დრო დასჭირდა ქსელს. Perfomance ღილაკის დაჭერით გამოვა ფანჯარა, სადაც აისახება დასწავლის ცდომილების ცვლილება იტერაციების (ეპოქების) მიხედვით.



სურ. 7. ცდომილების ცვლილება

მოძებნილი წონის კოეფიციენტების ნახვა და რედაქტირება შეიძლება View/Edit Weights ჩანართზე. Data ჩანართში არის ცდომილების ნახვის საშუალება.



სურ. 8. ცდომილების ფანჯარა

ცხრილი 2

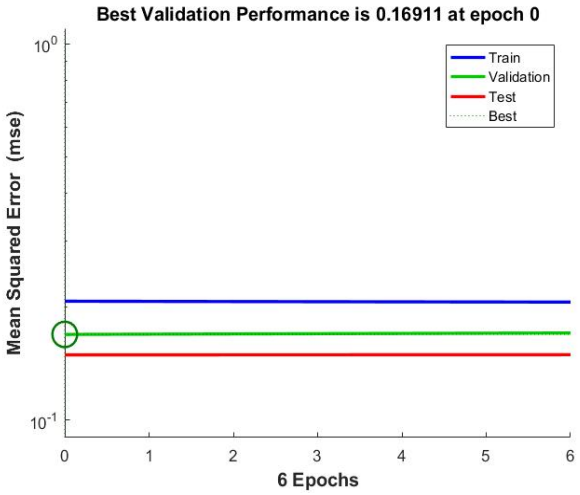
ქსელის გამოსასვლელზე მიღებული შედეგები

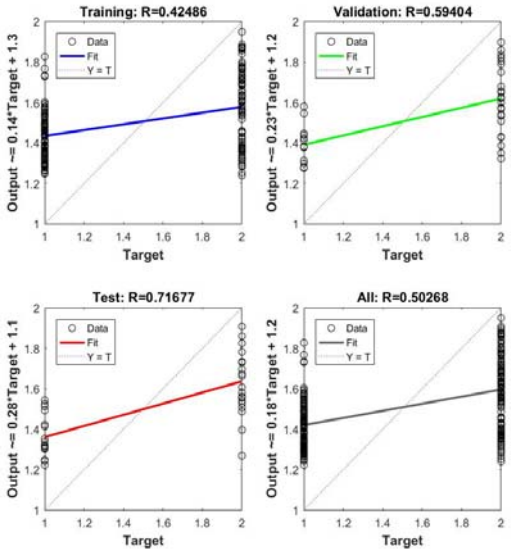
შედეგები მიღებულია არანორმირებული მნიშვნელობებისთვის:

I კლასი (10 შეცდომა)	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 1 1 2 1 1 1 1 1 2 2 1 2 2
II კლასი (13 შეცდომა)	2 1 2 1 2 2 2 1 1 2 2 2 1 2 2 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 1 2 2 1 1 2 2 2 2 2 2 2 1 2 2 2

პირველადი შედეგებისთვის ამ მონაცემებით საფუძველზე შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ გვაქვს 80% საიმედოობა.

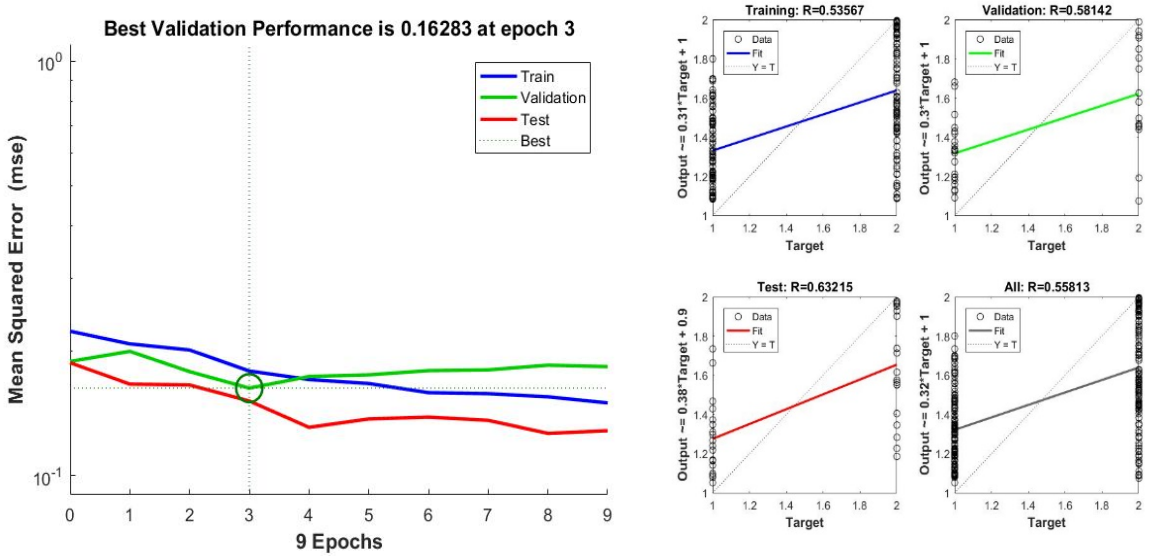
იგივე კვლევა ჩავატარეთ ისევ პირდაპირი გავრცელების სამშრიანი ქსელით, მხოლოდ დასწავლის ფუნქცია შევცვალეთ გრადიენტული მეთოდით (trainGD), აქტივაციის ფუნქცია ჰიპერბოლური ტანგენსით.





სურ. 10. გრადიენტული მეთოდი

შემდეგი კვლევა განვახორციელეთ მესამე მეთოდით ისევ პირდაპირი გავრცელების სამშრიანი ქსელით. დასწავლის ფუქნცია scaled conjugate backpropagation (traincg).



სურ. 11. scaled conjugate backpropagation-ის მეთოდის შედეგები

კვლევები ჩავატარეთ პირდაპირი გავრცელების ქსელით, მაგრამ განსხვავებული სასწავლო ალგორითმებითა და აქტივაციის ფუნქციით. ქვემოთ მოყვანილია თითოეული მათგანის შედეგები, რის შედეგადაც ვახდენთ დადგენას ქსელის მუშაობის ხარისხის შეფასებას შერჩეული კრიტერიუმების მიხედვით. ვითვალისწინებთ რამდენად სწრაფად და რა სიზუსტით მოახერხა ქსელმა ამოცნობა.

ცხრილი 3

სხვადასხვა მეთოდის საიმედოობა

Feed- forward backpropagation	
Levenberg-Marquardt	80%საიმედობა
Gradient algorithm	83% საიმედობა
scaled conjugate backpropagation	70% საიმედობა
Bayesian Regularization	75% საიმედობა

დასკვნა

როგორც ვნახეთ, ამოცნობის შედეგები ვარირებს 70%-დან 80%-მდე. უნდა ითქვას, რომ არსებული შეზღუდვების პირობებში, ეს შედეგი არის ძალიან კარგი, რადგანაც კვლევებისთვის საინტერესო მოსაზრებებიდან და კვლევის შემდგომი დაგეგმვისათვის ამოცნობის პროცედურებში არ ჩავრთეთ რამდენიმე პროცედურა. დასკვნის მიხედვით დაიგეგმა კვლევის შემდგომი პროცესი:

1. მივიღეთ ამოცნობის 80% იანი საიმედოობა.
2. კვლევის გაგრძელება აუცილებლად უნდა მოხდეს პროგრამა Matlab-ის ნეირონული ქსელების პაკეტების გამოყენებით;
3. ნეიროქსელი უნდა აეწყოს, სამშრიანი ნეირონული ქსელი გრადიენტული დაშვების ალგორითმით, აქტივაციის ფუნქციით ReLu, რითაც

მოსალოდნელია ამოცნობის 95%-იანი საიმედოობის მიღწევა;

4. შესრულდება კლასტერიზაცია ანუ წინასწარი გადარჩევის პროცედურა ნიშანთა მინი- და მაქსი- მნიშვნელობების მიხედვით. ეს საშუალებას მოგვცემს საწყისს ეტაპზევე მოვახდინოთ ზოგიერთი ამპ-ს ანუ უცნობი რეალიზაციის ამოცნობა.

5. რეალიზაციათა სასწავლო და საკონტროლო ნაკრებებში გვაქვს რეალიზაციათა მცირე რაოდენობები, შესაბამისად (256) და (100). მაშასადამე, აუცილებლად ჩასატარებელია სამუშაოები საკვლევ მონაცემთა ბაზის გაზრდისათვის.

6. შეირჩევა მეთოდი და შესრულდება ნიშანთა ნორმირება.

ლიტერატურა

1. Archil Prangishvili, Oleg Namicheishvili, Archil Elizbarashvili. „Neural Networks", Technical University, 2007, Tbilisi (In Georgian).
1. Revi Chogovadze, Ramaz Khurodze, „Artificial Neural Networks", 2006, Tbilisi (In Georgian).
2. Dzin Suni, "The basics of bioinformatic", Ilias Saxelmwifo Universiteti, 2012, Tbilisi (In Georgian).
3. Otar Verulava, Ramaz Khurodze, "The basics of Recognition Systems Theory" Technical University, 2001, Tbilisi (In Georgian).
4. Martin T. Hagon, Howard B. „Demuth Neural Network Toolbox", 2016 by The MathWorks, Inc. (In English).
5. Guangshun Wang, Antimicrobial Peptides, Boston, USA, 2017. (In English).
6. S. Theodoridis, K. Koutroumbas. "Pattern Recognition", 2009, (In English).
7. Marvin L. "Neural Network with MATLAB", 2017, (In English).
8. Michael Paluszek, Stephanie Thomas, "MATLAB Machine Learning", 2017, (In English).
9. Phil Kim, "MATLAB Deep Learning", 2017, (In English).

UDC 547.964:591.481.8:615.33
SCOPUS CODE 1701

Recognition of antimicrobial antimicrobial peptides using feedforward neural network

Nino Mchedlishvili Department of Control Systems, Georgian Technical University, 77 M. Kostava str, 0160 Tbilisi, Georgia
E-mail: ninomchedlishvili@gtu.ge

Mariam Chkhaidze Department of Artificial Intelligence, Georgian Technical University, 77 M. Kostava str, 0160 Tbilisi, Georgia
E-mail: m.chkhaidze@gtu.ge

Sofio Barnov Department of Control Systems, Georgian Technical University, 77 M. Kostava str, 0160 Tbilisi, Georgia
E-mail: s.barnovi@gtu.ge

Reviewers:

K. Kotrikadze, Associate Professor, Faculty of Informatics and Control Systems, GTU
E-mail: ketino27@gmail.com

M. Akhobadze, Professor, Faculty of Informatics and Control Systems, GTU
E-mail: meakhobadze@yahoo.com

Abstract. The objective of this work is the recognition of antimicrobial peptides based on their existing base, which is the most important task contributing to the issues related to the formation of new antibiotics. The AMP spread area is characterized by a broad evolutionary spectrum of organisms.

The ability of antimicrobial peptides to destroy different types of bacteria, fungi or microorganisms allows scientists to use AMP to develop new antibiotics.

The work describes the process of recognition of artificial neural networks. Recognition procedures such as training and recognition of the neural network are performed using the program Matlab.

Also, the paper considers the process of formation of AMP and non-AMP amino-acid sequences (selections).

Feedforward neural network is selected and used for training of neuronal networks, which is evaluated by several algorithms.

There are reviewed the results obtained in the research in case of all algorithms. Comparison of algorithms is also given.

It is analyzed and evaluated the set of signs of the AMP and non-AMP sequences (realizations) as well.

Key words: Antimicrobial peptides; neural networks; recognition.

UDC 547.964:591.481.8:615.33
SCOPUS CODE 1701

Распознавание антимикробных пептидов с использованием неийронной сети прямого распространения

Нино Мчедлишвили Департамент систем управления, Грузинский технический университет, Грузия, 0160, Тбилиси, ул. М. Костава, 77
E-mail: ninomchedlishvili@gtu.ge

Мариам Чхаидзе Департамент искусственного интеллекта, Грузинский технический университет, Грузия, 0160, Тбилиси, ул. М. Костава, 77
E-mail: m.chkhaidze@gtu.ge

Софио Барнови Департамент систем управления, Грузинский технический университет, Грузия, 0160, Тбилиси, ул. М. Костава, 77
E-mail: s.barnovi@gtu.ge

Рецензенты:

К. Котрикадзе, ассоц. профессор систем управления и информатики ГТУ
E-mail:

М. Ахобадзе, профессор систем управления и информатики доктор технических наук ГТУ
E-mail:

Аннотация. В данной работе ставится задача - распознавание антимикробных пептидов на основе их существующей базы, что является наиболее важной задачей и способствует формированию проблем новых антибиотиков. Зона распространения АМП характеризуется широким эволюционным спектром организмов.

Способность антимикробных пептидов бороться и уничтожать различные виды бактерий, грибки или микроорганизмы позволяют ученым использовать АМП для разработки новых антибиотиков.

В работе описан процесс распознавания АМП с искусственных нейронных сетей. Процедуры распознавания - обучение и распознавание нейронной сети осуществляется с помощью программы Matlab.

Также в работе описан процесс формирования аминокислотных последовательностей АМП и не-АМП (выборки);

Нейронная сеть прямого распространения выбрана и используется при исследовании нейронных сетей, что осуществляется несколькими алгоритмами. Рассмотрены результаты, полученные при исследовании для всех алгоритмов. Также рассмотрено сравнение алгоритмов.

Проанализирован и оценен набор признаков последовательностей АМП и не-АМП (реализации).

Ключевые слова: антимикробные пептиды; нейтронные сети; распознавание.

განხილვის თარიღი 16.062019
შემოსვლის თარიღი 19.06.2019
ხელმოწერილია დასაბეჭდად 17.12.2019