

## АНОТАЦІЯ

Кваліфікаційна робота присвячена пошуку сполук з антибактеріальною активністю щодо *Pseudomonas aeruginosa* методами машинного навчання. У середовищі аналітичної платформи KNIME 4.1.0 з використанням R 3.6.0. створено та параметризовано протокол для проведення машинного навчання. Уперше побудовано та валідовано низку моделей штучних нейронних мереж та баєсових моделей для пошуку нових сполук, активних щодо *P. aeruginosa*. Найкращі з них (2 двокласові нейронні мережі та 4 чотирьохкласові нейронні мережі) були використані для віртуального скринінгу бібліотеки низькомолекулярних органічних сполук, кількість яких становила більше 126 000. Результати віртуального скринінгу було проаналізовано і сполуки, що ідентифіковані моделями як активні, протестовані *in vitro*. У результаті тестування, виявлено 7 сполук, що проявляють антибактеріальну активність щодо *P. aeruginosa*, демонструючи відсоток інгібування росту бактеріальних клітин в діапазоні від 50,0% до 67,5%. Серед цих 7 сполук, 3 проявляють додаткову інгібувальну активність щодо інших патогенних мікроорганізмів, таких як *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli*, *Acinetobacter baumannii*, *Cryptococcus neoformans* та *Klebsiella pneumoniae*..

Робота викладена на 41 сторінці, містить 4 таблиці та 7 рисунків. Список використаних джерел включає 86 робіт.

**Ключові слова:** *Pseudomonas aeruginosa*, резистентність до антибіотиків, машинне навчання, віртуальний скринінг.