

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ИММУННОСЕТЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ДИЗАЙНА ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Самигулина Г.А., Чебейко С.В.

*Институт проблем информатики и управления Министерства
образования и науки Республики Казахстан*

Создание методов прогнозирования свойств новых химических соединений и направленный компьютерный молекулярный дизайн соединений с заданным набором свойств являются важнейшими и актуальными задачами биоинформатики.

Разработан иммунносетевой подход к моделированию зависимостей "структура-свойство" лекарственных препаратов. Предложенная интеллектуальная технология на основе искусственных иммунных систем позволяет уменьшить погрешности энергетических оценок и повысить достоверность прогноза зависимости "структура-свойство" химических соединений.

ВЫБОР КРИТЕРИЯ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ

Семенов С.Г.¹, Босько В.В.², Березюк И.А.²

¹Национальный технический университет

"Харьковский политехнический институт", г. Харьков,

²Кировоградский Национальный технический университет, г. Кировоград

В процессе решения задач управления информационными системами, анализе существующих технологий и исследовании новых подходов все чаще используются методы идентификации. При этом одним из актуальных вопросов при решении задач идентификации остается выбор критерия идентификации.

Проведенный анализ показал, что в системах идентификации информационных систем в настоящее время применяется множество критериев, причем в зависимости от подхода к задаче идентификации они могут структурно отличаться. Так при вероятностном подходе доминирующим является квадратичный критерий средних потерь от ошибки прогнозирования. Такой подход чаще всего используется для задач идентификации, сводящихся к получению беспоисковых алгоритмов параметрического оценивания. При функционально-множественном подходе кроме квадратичного функционала могут применяться также и другие виды нелинейных функционалов от ошибки прогнозирования (модульный, показательный, минимаксный и пр.).

В докладе отмечено, что для идентификации сложных динамических систем (например, информационной системы), в качестве критерия параметрической идентификации целесообразно использовать квадратичный функционал (локальный или интегральный), который рассматривается как функция Ляпунова для системы идентификации, при этом задачу идентификации информационной системы необходимо трактовать со структурно-функциональных позиций.