

МУЛЬТИАГЕНТНАЯ SMART-СИСТЕМА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ НА ОСНОВЕ МОДЕЛЬНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ПОДХОДА И МОДИФИЦИРОВАННЫХ АЛГОРИТМОВ ИСКУССТВЕННЫХ ИММУННЫХ СИСТЕМ

Самигулина Г.А., Самигулина З.И.

*Казахстанско-Британский Технический Университет,
Институт информационных и вычислительных технологий,
г. Алматы*

В работе рассмотрены вопросы разработки мультиагентной Smart-системы ведения научных исследований для прогнозирования зависимости «структура-свойство/активность» (QSAR) лекарственных соединений на основе модифицированных алгоритмов искусственных иммунных систем на примере молекулярного дизайна новых лекарственных препаратов сульфаниламидной группы и модельно-ориентированного подхода. Разработаны необходимые требования к мультиагентной Smart-системе, которые должны учитываться при обработке многомерной структурной химической информации: объединение передовых методов в биомедицине и фармакологии, вычислительной технике, последних достижений искусственного интеллекта [1, 2] и применение онтологического подхода; использование современных баз данных химической информации; возможность обработки больших объёмов структурной химической информации; удобный и понятный для пользователя интерфейс; модульная структура и способность к расширению системы; достаточно высокая скорость обработки информации за счет применения параллельных технологий вычисления; возможность подключения к современным пакетам прикладных программ и библиотекам по обработке и визуализации больших объёмов данных.

Работа выполнена по гранту Комитета Науки Министерства Образования и Науки Республики Казахстан (2018 – 2020 гг.) по теме: «Разработка и анализ баз данных для информационной системы прогнозирования зависимости «структура-свойство» лекарственных соединений на основе алгоритмов искусственного интеллекта».

Литература:

1. Samigulina G.A., Samigulina Z.I. Development of multi-agent technology for prediction of the «structure-property» dependence of drugs on the basis of modified algorithms of artificial immune systems // Proceedings of International work-conference on bioinformatics and biomedical engineering (IWBBIO2018). Spain, Granada, 25-27 April 2018. – P. 1-2. **2.** Samigulina G.A., Massimkanova Zh.A. Multiagent system of recognize on the basis of modified algorithms of swarm intelligence and immune network modeling // Proceedings of the 12th International Conference Agents and Multi-agent Systems: Technologies and Applications (AMSTA-18). Australia: Springer, 20-22 June 2018. – P. 199-208.