



Contribution ID: 207

Type: **Poster presentations**

Применение эволюционных и роевых алгоритмов оптимизации для решения модельной задачи предсказания структуры белка

Monday 10 September 2018 16:00 (1 hour)

Работа посвящена проблемам прогнозирования пространственной структуры белковых молекул, полипептидов и их комплексов. Предлагаемый нами метод основан на решении задачи оптимизации, в которой целевой функцией является потенциальная энергия молекулы, а параметрами оптимизации – длины связей между атомами и углы вращения. Главными особенностями таких задач является большая размерность и высокая вычислительная сложность. Проведенные предварительные исследования показали, что множество существующих алгоритмов оптимизации решают такую задачу неудовлетворительно. Типичное время вычисления задачи занимает от нескольких часов до нескольких дней. Кроме того, для корректного вычисления целевой функции требуется серьезное программное обеспечение. Эти факторы существенно усложняют процесс разработки эффективных алгоритмов для решения задачи предсказания структуры белков и их комплексов. В настоящей работе предлагается упрощенная, модельная задача укладки графа на плоскости, которая позволяет проводить расчеты быстрее и без использования специального программного обеспечения, разрабатывать новые и улучшать существующие алгоритмы оптимизации. В работе приводятся результаты численного исследования ряда алгоритмов роевой и эволюционной оптимизации при решении поставленной модельной задачи.

Author: BYSTROV, Maxim (Dubna State University)

Co-author: Dr ERSHOV, Nikolay (Moscow State University)

Presenter: BYSTROV, Maxim (Dubna State University)

Session Classification: Poster Session