

ВИКОРИСТАННЯ АЛГОРИТМУ ОПТИМІЗАЦІЇ МУРАШИНИХ КОЛОНІЙ ДЛЯ ВИРШЕННЯ ЗАДАЧІ QSAR

Коротач І. В., Лещинський В. О.

Харківський національний університет радіоелектроніки, Харків, Україна

В останні роки зростає потреба в нових методологіях видобутку даних, які можуть аналізувати та інтерпретувати великі обсяги даних. Методи штучного інтелекту, такі як штучні нейронні мережі, дерева класифікації та регресії, k-nearest neighbor алгоритми широко використовувались для аналізу та кореляції хімічних та біологічних даних. Багато з цих методів використовуються разом з оптимізаційними техніками, включаючи різні жадібні алгоритми, а також стохастичну оптимізацію такі підходи, як імітація відпау та генетичні алгоритми.

Особливу увагу цим методам надають сфери, які шукають нові, або не виявлені залежності у великих базах даних властивостей сполук [1]. Однією з таких сфер є QSAR. Іншими сферами можуть бути молекулярне моделювання та докінг.

Широке застосування та розвиток цих сфер надасть можливість зменшити залежність від випадкового характеру відкриттів та перейти до більш прогнозованих та кількісно обчислювальних методів.

Метою доповіді є аналіз і порівняння різних варіацій алгоритмів оптимізації мурашиних колоній та створення авторського алгоритму. До існуючих альтернатив відносять: Max-Min Ant System (MMAS), Elitist Ant system, Rank-based ant system, та інші. Основним аспектами порівняння є фактори швидкості знаходження результату, консистентності результатів, здатності адаптуватися до даних.

Для отримання результатів була обрана задача пошуку критичної температури у датасеті з 373 ароматичних сполук з 1497 дескрипторами.

В доповіді наводяться результати порівняння вище зазначених алгоритмів з загальноприйнятими методами вирішення задачі QSAR. Також наводиться авторський гібридний алгоритм.

Результати демонструють, що задача QSAR вирішена за допомогою алгоритмів оптимізації мурашиної колонії швидше, бо враховується фактор високої паралелізації та має велику кількість параметрів, що варіюють гнучкість використання. В той же час, алгоритми оптимізації мурашиної колонії мають більшу кількість стохастичних параметрів, що обумовлює гіршу стабільність результатів порівняно з класичними генетичними підходами.

Список літератури

1. Kellenberger, E., Rodrigo, J., Muller, P., Rognan, D.: Comparative evaluation of eight docking tools for docking and virtual screening accuracy. *Proteins* 57(2) (2004) 225–242.