



## ПРОГРАМНО-ТЕХНІЧНІ КОМПЛЕКСИ

УДК 004.05, 51-76, 57.087

**О.О. ЛЕТИЧЕВСЬКИЙ**

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна,  
e-mail: [oleksandr.letychevskiy@litsoft.com.ua](mailto:oleksandr.letychevskiy@litsoft.com.ua).

**В.А. ВОЛКОВ**

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна,  
e-mail: [vlad\\_volkov\\_98@yahoo.com](mailto:vlad_volkov_98@yahoo.com).

**Ю.Г. ТАРАСІЧ**

Херсонський державний університет, Херсон, Україна,  
e-mail: [yutarasich@gmail.com](mailto:yutarasich@gmail.com).

**Г.О. СОКОЛОВА**

Херсонський державний університет, Херсон, Україна,  
e-mail: [annetsokolova96@gmail.com](mailto:annetsokolova96@gmail.com).

**В.С. ПЕСЧАНЕНКО**

Херсонський державний університет, Херсон, Україна,  
e-mail: [volodymyr.peschanenko@litsoft.com.ua](mailto:volodymyr.peschanenko@litsoft.com.ua).

### СУЧАСНІ МЕТОДИ ТА ПРОГРАМНІ СИСТЕМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ЗАСТОСУВАННЯ АЛГЕБРИ ПОВЕДІНОК

**Анотація.** Розглянуто основні методи молекулярного моделювання та спеціалізоване програмне забезпечення для створення та дослідження молекулярних моделей. Наведено результати першого етапу побудови середовища для дослідження молекулярної і біомолекулярної взаємодії, що базується на формалізмі алгебри поведінки та інсерційного моделювання, а також результати експерименту застосування запропонованого підходу до моделювання ковалентного неполярного зв'язку.

**Ключові слова:** символічне моделювання, алгебраїчна поведінка, молекулярне моделювання.

#### ВСТУП

Галузь обчислювальної хімії та, зокрема, комп'ютерне моделювання впродовж декількох останніх десятиліть ефективно розвиваються, але залишаються джерелом важливих задач та областю застосування сучасних інформаційних технологій, таких як штучний інтелект, машинне навчання, наука про дані тощо. За цей час було створено десятки програмних систем, які використовують у різноманітних галузях, а саме: біології, хімії, фармакології, матеріалознавстві, нанотехнології.

У процесі розроблення всіх таких систем важливим є обраний підхід до представлення та моделювання молекулярної взаємодії, що визначає архітектуру та їхнє подальше використання. Для сприяння прогресу в розробленні інфраструктури відповідного програмного забезпечення, освіти, стандартизації та поширення передових практик було створено Molecular Sciences Software Institute. Зазвичай сучасні перспективні задачі — дизайн каталізаторів чи дослідження неструктурованих протеїнів, вимагають значних обчислювальних

© О.О. Летичевський, В.А. Волков, Ю.Г. Тарасіч, Г.О. Соколова, В.С. Песчаненко, 2022