

# ОБЗОР СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ РОЕВОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ДИЗАЙНА ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Г. А. Самигулина, Ж. А. Масимканова

Институт информационных и вычислительных технологий КН МОН РК,  
050010, Алма-Ата, Казахстан

---

УДК 51-76

В статье проведен аналитический обзор современных методов роевого интеллекта для прогнозирования зависимости „структура–активность“ (QSAR) химических веществ и компьютерного молекулярного дизайна новых лекарственных препаратов. Рассматриваются методы муравьиной и пчелиной колонии, а также алгоритм роя частиц для решения задачи выделения информативных дескрипторов. Приведены основные программные продукты для реализации формирования оптимального набора дескрипторов.

**Ключевые слова:** роевой интеллект, компьютерный молекулярный дизайн лекарств, QSAR, выделение информативных дескрипторов.

The article provides an analytical overview of modern methods of swarm intelligence for prediction of quantitative structure–activity relationship (QSAR) of chemical substances and computer-aided molecular design of new drugs. The methods of ant and bee colonies and particle swarm optimization for solution of problem of feature selection are considered. The main software products for realization of formation of optimum set of descriptors are given.

**Key words:** swarm intelligence, computer-aided molecular design, QSAR, feature selection.

**Введение.** С развитием и распространением современной техники и технологий вычислительная техника применяется во всех отраслях науки, в том числе и в медицине. Проектирование нового лекарства является сложным, многостадийным процессом, который занимает много времени и требует существенных трудовых и финансовых затрат, поэтому актуально использование суперкомпьютеров для решения проблемы обработки и анализа накопленных медицинских данных. Компьютерное молекулярное моделирование находит широкое применение при создании новых лекарственных препаратов, так как позволяет описывать и графически представлять на экране компьютера структуру белков, прогнозировать ее изменения в случае локальных структурных изменений [1]. Решением одной из основных проблем фармакологии является изучение зависимости между химическим строением веществ и их биологической активностью, что позволяет значительно сократить сроки разработки лекарств. Количественное отношение „структура–свойство/активность“ описывает математическое отношение между структурными атрибутами и целевой реакцией набора химических веществ. В 1960-е годы Хэнш [2] создал

---

Работа проводится по гранту „Компьютерный молекулярный дизайн лекарственных препаратов на основе иммуносетевого моделирования“ (2015–2017 гг.) в Институте информационных и вычислительных технологий КН МОН РК

QSAR (Quantitative Structure–Activity Relationship) модель, используя различные молекулярные дескрипторы физических, химических и биологических свойств, направленных на обеспечение вычислительных оценок биологической активности молекул. Правильное построение QSAR-модели зависит от качества исходного набора активных/неактивных соединений. Для проведения исследований QSAR необходимы исходные данные, состоящие из набора химических структур с известными значениями активностей. При поиске зависимостей „структура–активность“ химических соединений актуальной задачей является выбор оптимального набора дескрипторов, на основе которого строится QSAR-модель. Целью выделения оптимального набора дескрипторов является уменьшение размерности пространства дескрипторов. Построение адекватной модели на основе оптимального набора дескрипторов увеличивает вероятность принятия правильных решений [3]. Важным направлением в области QSAR стало применение подходов искусственного интеллекта [4], которые обеспечивают высокую точность прогнозирования химических соединений с данными структурами. С помощью методов искусственного интеллекта можно обрабатывать большие объемы данных. Поэтому методы искусственного интеллекта, такие как нейронные сети [5], эволюционные алгоритмы [6], искусственные иммунные системы [7], алгоритмы роевого интеллекта [8], нашли применение в решении задачи отбора информативных признаков.

Широко используются нейронные сети (НС) при поиске зависимости между структурами соединений и их биологической активностью [9–10]. Благодаря своей способности обучаться [11], объединять и обобщать данные, НС начали успешно применяться в химии в конце 1980-х годов. В статье [12] применяются нейронные сети для определения позитивных и негативных аллостерических модуляторов рецептора, которые участвуют в неврологических расстройствах, таких как болезнь Паркинсона, шизофрения и др. В исследовании [13] используют структурную информацию CYP2D6 для определения инвариантных сегментов и информативной выборки на основе нейронных сетей, результаты показывают 85 % точности прогнозирования.

В настоящее время методы роевого интеллекта являются перспективным направлением и вызывают интерес исследователей со всего мира, поэтому существует много публикаций по данной тематике. Они широко применяются в различных областях: в робототехнике, в оптимизационных задачах, в управлении беспилотным летательным аппаратом, а также во многих областях медицины и фармакологии [14]. Также эти алгоритмы нашли применение в решении задачи выделения информативных дескрипторов при построении QSAR-моделей. В основе методов роевого интеллекта лежит мультиагентная система [15]. Мультиагентная система состоит из множества взаимодействующих агентов. К методам роевого интеллекта, основанным на моделировании поведения живых существ, относятся: методы муравьиной и пчелиной колонии, алгоритм роя частиц, альтруизма [16], капель воды [17], кукушки [18], серых волков, летучих мышей, гравитационного поиска, светлячков, оптимизация передвижением бактерий [19], метод формирования реки, метод самоходных частиц, стохастический диффузионный поиск и алгоритм многороевой оптимизации. Наиболее распространенными из них являются методы муравьиной и пчелиной колонии, а также алгоритм роя частиц. Предложенные алгоритмы более эффективно исследуют пространство поиска, затрачивая при этом меньше времени, чем методы полного перебора. Также эти методы отличаются тем, что не требуют дополнительных параметров для целевой функции [20].

**1. Постановка задачи** формулируется следующим образом: необходимо провести аналитический обзор современных методов роевого интеллекта и программного обеспечения для решения задачи выделения информативных дескрипторов с целью прогнозирования зависимости „структура–активность“ (QSAR) химических веществ и компьютерного молекулярного дизайна новых лекарственных препаратов.

Существует много публикаций по данной тематике. В статье [21] рассматриваются алгоритмы роевого интеллекта для решения определенных задач биоинформатики, таких как кластеризация данных, предсказание структуры белка и молекулярного докинга. В работе [22] изучается хаотический алгоритм оптимизации и алгоритм оптимизации роя частиц (PSO — Particle Swarm Optimization) для улучшения точности классификации, которые используются в выборе наборов данных с определенными фармакодинамическими свойствами препарата. Результаты эксперимента показывают, что предложенный метод имеет хорошую обучаемость, способность к обобщению и точность классификации. В исследовании [23] ведется сравнительный анализ эволюционной оценки состояния в выборе и настройке свойств на основе адаптивного генетического алгоритма и алгоритма роя частиц адаптивной оптимизации. В работе [24] рассматриваются и обсуждаются алгоритмы роя частиц в задачах вторичного предсказания структуры, генного объединения в кластеры, энергетической минимизации и моделирования белка. В статье [25] ведется сравнительный анализ метода роя частиц и пчелиного алгоритма в решении задачи прогноза структуры белка. В работе [26] предлагается новый метод PSOVina (Particle Swarm Optimization Vina), который объединяет PSO с эффективным методом локального поиска Бройдена — Флетчера — Гольдфарб — Шеннон (Broyden — Fletcher — Goldfarb — Shannon, BFGS). В статье [27] ACO-MLR (Ant Colony Optimization — Multiple linear regression) используется для разработки алгоритма QSPR (Quantitative structure-property relationship), в которой главной проблемой является многомерное дескрипторное пространство. В работе [28] предлагается новый компьютерный молекулярный дизайн для разработки растворителей на основе алгоритма эффективной оптимизации колонии муравьев (EACO — Efficient ant colony optimization). В исследованиях [29] при классификации данных применяется пчелиный алгоритм для определения релевантного множества признаков.

**2. Метод муравьиных колоний** является одним из наиболее эффективных методов решения поисковых задач комбинаторной природы. Идея метода состоит в решении оптимизационной задачи путем применения не прямой связи между автономными агентами. Первая версия алгоритма была предложена Марко Дориго в 1992 году [30].

Алгоритм муравьиной колонии представляется в виде графа, а муравей является программным агентом [31]. Агент снабжается набором простых правил, которые позволяют ему выбирать путь в графе. Он имеет список узлов, которые он уже посетил. Муравей должен проходить через каждый узел только один раз [32].

Механизм функционирования колонии муравьев [33]:

1. Инициализация. Создается популяция агентов, которая распределяется по всем узлам графа. Произвольное разделение агентов между узлами позволяет иметь одинаковые шансы стать отправной точкой. Каждый муравей будет в случайном узле графа, и на каждую грань наносится некоторое ненулевое количество феромона. Феромон — химическое вещество, откладываемое при перемещении муравья как след.

2. Вычисление фитнес-функций. Фитнес-функция позволяет оценить степень приспособленности конкретных особей в популяции и выбрать из них наиболее приспособленных в соответствии с эволюционным принципом выживания „сильнейших“. Вычисление це-

левых функций и определение количества феромона, которое нужно нанести на грань, выполняется при первой итерации.

3. Перемещение агентов. Здесь каждый муравей выбирает узел для перехода. Определяется вес грани, который добавляется в маршрут агента.

4. Если выполняются условия останова, то на выход подается решение. В противном случае алгоритм возвращается к вычислению фитнес-функции.

В муравьином алгоритме процесс решения задачи характеризуется малой вычислительной сложностью и алгоритм обеспечивает требуемую точность решения. Основной особенностью рассматриваемого метода является то, что в процессе работы мера приоритетности каждого узла изменяется и определяется относительная важность каждого из информативных дескрипторов при каждой итерации [34, 35]. В процессе решения, достигая более детального изучения пространства поиска, растет точность прогнозирования. Недостатками являются трудный теоретический анализ в результате последовательности случайных решений и изменение распределения вероятностей при итерациях. Классический алгоритм, используя критерий оценивания индивидуальной информативности признаков, не учитывает совместное влияние всего набора на результат. Простота классического алгоритма (Ant colony optimization) позволила его усовершенствовать и использовать для решения различных задач. Модификация Elitist Ant System [36] отличается введением в алгоритм „элитных муравьев“. Для этого на каждой итерации алгоритма каждый из элитных муравьев проходит путь, являющийся самым коротким из найденных на данный момент, который позволяет сократить число итераций алгоритма. В основе алгоритма Ant-Q [37] лежит идея о том, что создается Q-таблица с весами граней. Определяется „полезность“ перехода по грани. В Ant Colony System [38] было усовершенствовано время обновления феромонов. Модификация Max-min Ant System [39] отличается вводом ограничений на максимальную и минимальную концентрацию феромонов на грани, которые крайне эффективно защищают алгоритм от преждевременной сходимости к субоптимальным решениям. К модификации ASrank в конце каждой итерации муравьи ранжируются в соответствии с длинами пройденных ими путей [40].

**3. Алгоритм роя частиц** может рассматриваться как многоуровневая система, в которой каждая частица-агент обменивается информацией по простым правилам [41]. В этом методе агентами являются частицы, которые в каждый момент времени имеют в пространстве параметров некоторое положение и скорость. В задаче прогнозирования на основе метода роя частиц повышение точности и адаптивности осуществляется за счет автономного экспертно-эвристического выбора наиболее перспективного слоя частиц среди трех виртуальных слоев для дальнейшего целенаправленного поиска базового слоя роя частиц. Базовым слоем считается тот, для которого оценка показателя информативности является максимальной. Метод роя частиц позволяет проводить более емкий обмен информацией между частицами-агентами. В качестве связи используется так называемая общая память, суть которой в том, что каждая частица знает координаты наилучшей точки. То есть наилучшее решение, найденное роем в каждый момент времени, известно всем его частицам. В итоге на движение частицы влияет стремление к наилучшему среди всех частиц положению.

Базовый алгоритм роя частиц представлен ниже:

1. Генерация начальных положений и скоростей, в которых создается вектор равномерно распределенных случайных величин и произвольно выбирается наилучшая позиция частицы.

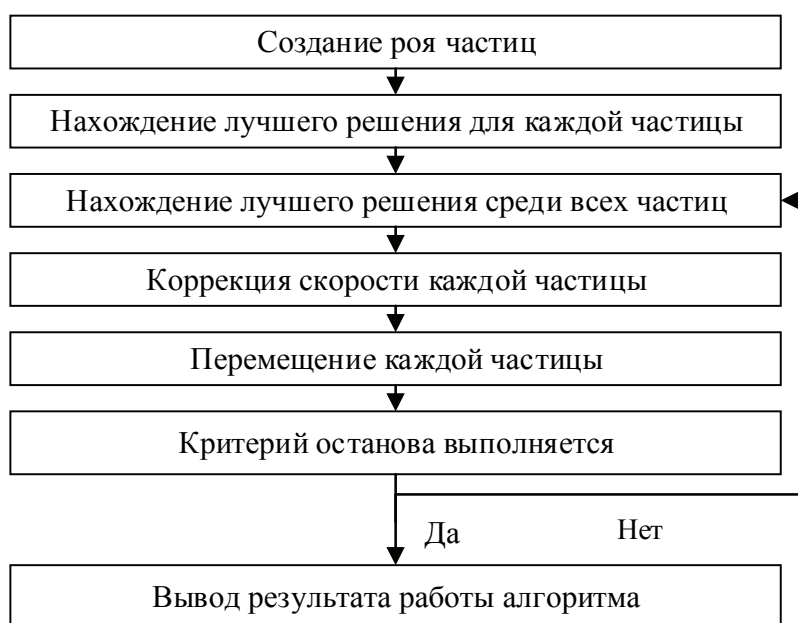


Рис. 1. Структурная схема алгоритма роя частиц

2. Вычисление фитнес-функций и определение наилучшего положения.
3. Миграция осуществляется на основе стохастического поведения частиц.
4. Проверка условия завершения, которая происходит в результате достижения заданного числа итераций [42].

Критерием останова могут быть: достижение максимально допустимого количества итераций, нахождение приемлемого решения, отсутствие существенного улучшения значения целевой функции на протяжении некоторого количества итераций [43].

Структурная схема алгоритма роя частиц представлена на рис. 1.

Алгоритм роя частиц был предложен Ж. Кеннеди и Р. Эберхартом в 1995 году [44], однако затем был предложен целый ряд его модификаций. Ниже рассмотрены наиболее примечательные из модификаций. Алгоритм LBEST [45] тщательно исследует пространство поиска, однако является более медленным, чем классический алгоритм (Particle Swarm Optimization). При этом, чем меньшее число соседей учитывается при формировании вектора скорости, тем ниже скорость сходимости алгоритма, но тем эффективней он избегает субоптимальных решений. В алгоритме Inertia Weighted PSO [46] было изменено правило обновления векторов скоростей частиц. Алгоритм Time-Varying Inertia Weighted [47] показывает, что частицы сначала исследуют область поиска экстенсивно, находя множество субоптимальных решений, а со временем все более концентрируются на исследовании их окрестностей. Возрастание инерции способствует сходимости алгоритма на поздних стадиях работы. Алгоритм Canonical PSO отличается способом вычисления векторов скоростей частиц, так как был введен дополнительный множитель для контроля скорости частицы. В модифицированном алгоритме Fully Informed Particle Swarm [48] важную роль играет информированность всех частиц, что ведет к повышению эффективности алгоритма.

**4. Алгоритм пчелиной колонии** является одним из эвристических алгоритмов для решения оптимизационных задач, который основан на имитации поведения колонии пчел при сборе нектара в природе. Алгоритм колонии пчел был предложен Д. Карабога в

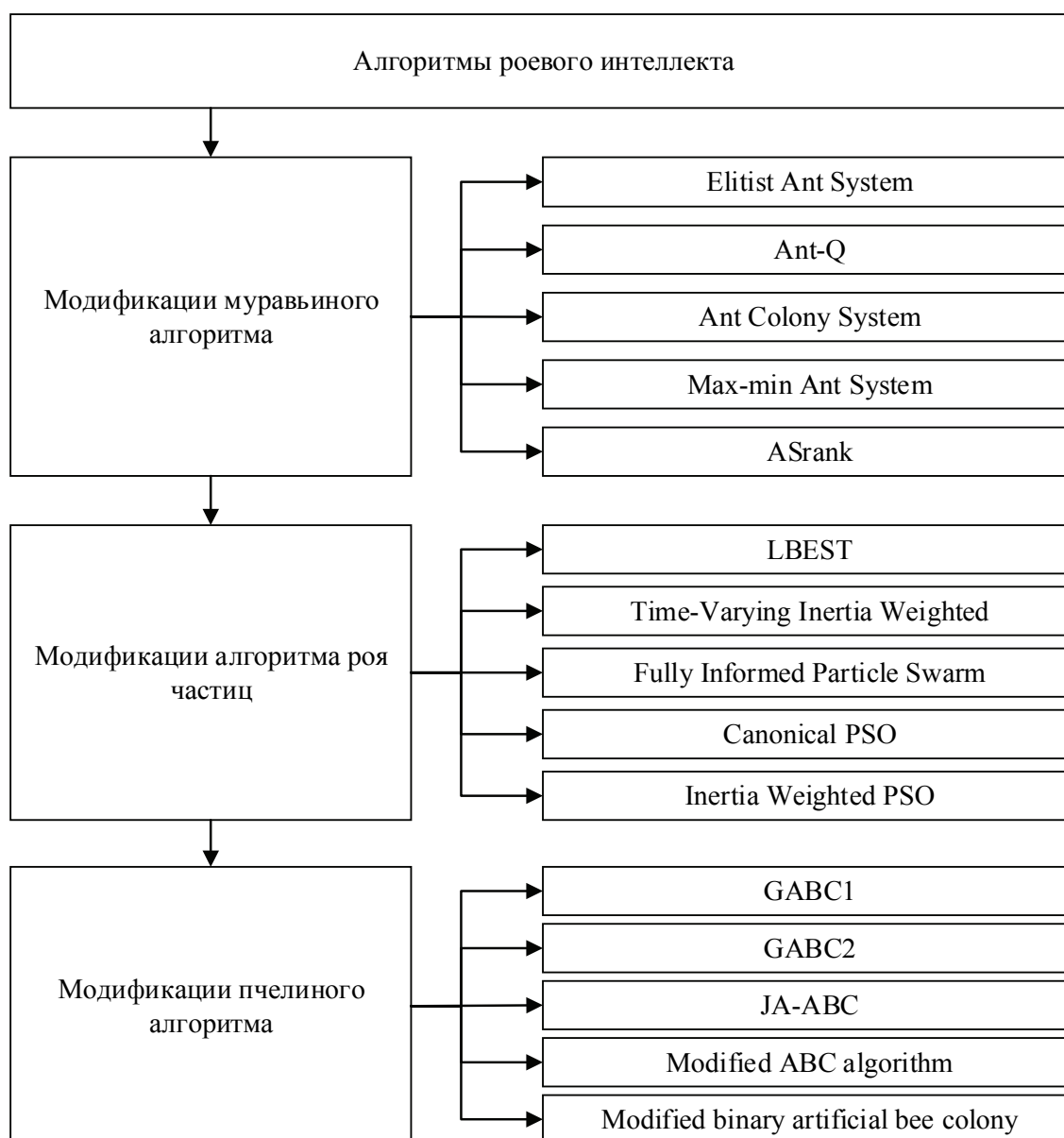


Рис. 2. Модификации алгоритмов роевого интеллекта

2005 году [49], в котором используется разбиение пчел на группы: рабочие пчелы, пчелы-разведчики, пчелы-исследователи.

Основные шаги алгоритма колонии пчел [50]: 1) определение местоположения источников нектара; 2) поиск рабочими пчелами новых источников и исследование лучшего; 3) выбор источника пчелой-исследователем, в зависимости от качества; 4) повтор пунктов 1–3 до тех пор, пока решение не перестанет улучшаться; 5) запоминание лучшего источника; 6) заполнение оставшейся части популяции; 7) повторение пунктов 2–6, пока не будет достигнуто условие выхода.

Алгоритм GABC1 и GABC2 [51] часто используется для решения задачи глобальной оптимизации. В модификаций JA-ABC [52] была улучшена скорость сходимости и предусмотрена способность алгоритма избежать преждевременной сходимости. Алгоритм ABC

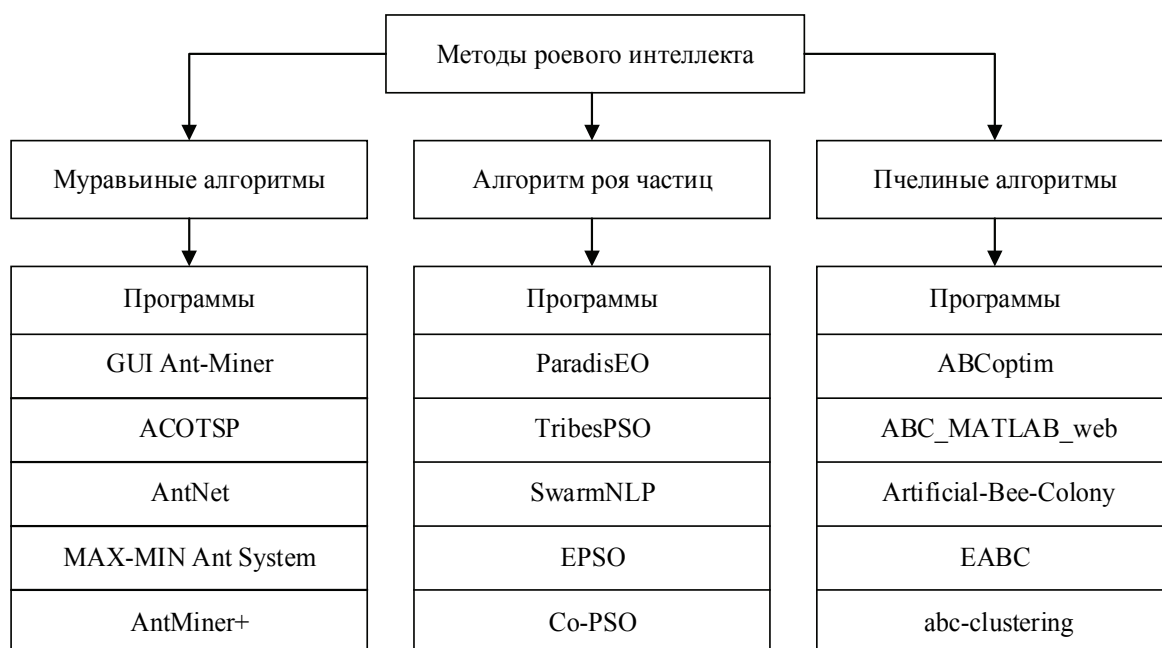



Рис. 3. Программы на основе роевого интеллекта

[53] использует правила Деба, состоящие из трех простых эвристических правил и вероятностной схемы выбора выполнимых решений, основанных на их значениях фитнес-функции. Алгоритм Modified Binary Artificial Bee Colony [54] использует новый механизм, основанный на измерении несходства между бинарными строками для генерации новых решений.

На рис. 2 приведены основные модификации алгоритмов роевого интеллекта.

**5. Программное обеспечение.** Алгоритмы роевого интеллекта широко используются на практике, поэтому имеются программные комплексы на основе муравьиных колоний, которые используются во многих приложениях (рис. 3.): GUI Ant-Miner [55], ACOTSP [56], AntNet [57], MAX-MIN Ant System [58], AntMiner+ [59] и др. Пакеты прикладных программ на основе роя частиц: ParadisEO [60], TribesPSO [61], EPSO [62], SwarmNLP [63], Co-PSO [64] и др. Приложение ParadisEO  это программное обеспечение, посвященное проектированию, реализации и анализу метаэвристики для многокритериальной оптимизации. Программный продукт EPSO (Evolutionary Particle Swarm Optimization) является гибридной системой на основе эволюционного алгоритма и метода роя частиц. Программа SwarmNLP визуализирует оптимизацию роя частиц по многократным критериям. Эта программа является хорошим инструментом для решения задачи на основе оптимизации роя частиц и визуализации пространства решения. Программный пакет Co-PSO включает в себя расширяемые библиотеки тестовых функций и графов, определяющих топологии соседства, которые могут быть использованы алгоритмами роя частиц. В результате работы программа Co-PSO строит график изменения значений целевой функции с ростом числа итераций для частицы-победителя, а также графики изменения размеров частиц в функции номера итерации. Также существует программное обеспечение на основе пчелиных алгоритмов: ABCoptim [65], ABC\_MATLAB\_web [66], Artificial-Bee-Colony [67], EABC [68], abc-clustering и др.

Отличительной чертой алгоритмов роевого интеллекта являются косвенный обмен информацией между агентами, децентрализованность и отсутствие необходимости вычисления производных, также они не требуют перебора всех возможных решений. Алгоритм муравьиных колоний может использоваться совместно с генетическими алгоритмами [69]. Также разработаны гибридные системы алгоритма роя частиц и метода ближайших соседей или метода опорных векторов [70].

**Заключение.** Приведенные алгоритмы роевого интеллекта и программное обеспечение, их реализующее, с успехом применяются в задачах выделения информативных дескрипторов. Очевидно, что роль компьютерного моделирования на разных этапах создания новых лекарств будет возрастать, а совершенствование выбора оптимального набора дескрипторов позволит минимизировать исследования, сделав дизайн лекарств эффективнее, быстрее и дешевле.

## Список литературы

1. RADCHENKO E. V., DYABINA A. S., PALULIN V. A., ZEFIROV N. S. Prediction of pharmacokinetic parameters for diverse drug compounds // Proceedings of the 19-th EuroQSAR; Knowledge Enabled Ligand Design. Vienna: Austria. 2012. P. 76–79.
2. SLIWOSKI G., KOTHIWALE S., MEILER J., LOWE E. W. Computational Methods in Drug Discovery // Pharmacological reviews. 2014. N 66. P. 334–395.
3. GOLLA S., NEELY B., WHITEBAY E., MADHALLY S., ROBINSON R., GASEM K. Virtual design of chemical penetration enhancers for transdermal drug delivery // Chem. Biol. Drug Design. 2012. P. 478–487.
4. CHIN YEE L., CHUN WEI Y. Current Modeling Methods Used in QSAR/QSPR // Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR. 2012. P. 1–31.
5. ГАЛЬБЕРШТАМ Н. М., БАСКИН И. М., ПАЛЮЛИН В. А., ЗЕФИРОВ П. С. Нейронные сети как метод поиска зависимостей структура-свойство органических соединений // Успехи химии. № 7. 2003. С. 86–96.
6. HRISTOZOV D., OPREA T., GASTEIGER J. Virtual screening applications: a study of ligand-based methods and different structure representations in four different scenarios // Journal Computer Aided Molecular Design. 2007. N 21. P. 617–640.
7. САМИГУЛИНА Г. А., САМИГУЛИНА З. И., ВУЙЦИХ В., КРАК Ю. В. Прогнозирование зависимости „структура–свойство“ новых органических соединений на основе искусственных иммунных систем // Проблемы управления и информатики. Киев: Институт кибернетики им. В. М. Глушкова. 2015. № 2. С. 81–88.
8. DAS S., АБРАНАМ А., KONAR A. Swarm Intelligence Algorithms in Bioinformatics // [Electron. res.]. <http://www.softcomputing.net/cib-web.pdf> (дата обращения 18.01.2016).
9. D. LIVINGSTONE. Artificial Neural Networks: Methods and Applications. Totowa: Humana Press. 2008. P. 249.
10. АСЧАРЬЯ С., СООП А., POLLI J. E., MACKERELL A. D. Recent advances in ligand-based drug design: relevance and utility of the conformationally sampled pharmacophore approach // Current Computing Aided Drug Design. 2011. N 7. P. 10–22.
11. GOODARZI M., FREITAS M. P., JENSEN R. Feature selection and linear/nonlinear regression methods for the accurate prediction of glycogen synthase kinase-3beta inhibitory activities // Journal Chemical Information Model. 2011. N 49. P. 824–832.
12. MUELLER R., DAWSON E. S., MEILER J., RODRIGUEZ A. L., CHAUDER B. A., BATES B. S., FELTS A. S., LAMB J. P., MENON U. N., JADHAV S. B. Discovery of 2-(2-benzoxazolyl amino)-4-aryl-5-цианопиримидин as negative allosteric modulators (NAMs) of metabotropic glutamate receptor

5 (mGlu<sub>5</sub>): from an artificial neural network virtual screen to an in vivo tool compound // *Chemical Medicine*. 2012. N 7. P. 406–414.

13. BAZELEY P. S., PRITHIVI S., STRUBLE C. A., POVINELLI R. J., SEM D. S. Synergistic use of compound properties and docking scores in neural network modeling of CYP2D6 binding: predicting affinity and conformational sampling // *Journal Chemical Information Model*. 2006. N 46. P. 2698–2708.

14. SAMIGULINA G. A., ABDENOVA A. M., MASIMKANOVA ZH. A. Development of QSAR methods based on artificial intelligence approaches // *Proc. of the 13th International conference information technologies and management*. Riga: Information Systems Management Institute, 2015. P. 83.

15. HINCHEY M. G., STERRITT R., ROUFF C. Swarms and Swarm Intelligence // *Computer Society „From Ants to People: an Instinct to Swarm“*. IEEE. 2007. N 40. P. 111–113.

16. WAIBEL M., FLOREANO D., KELLER L. A quantitative test of Hamilton's rule for the evolution of altruism // *PLoS Biology*. 2011. V. 9. N 5. P. 56–64.

17. SHAH-HOSSEINI H. The intelligent water drops algorithm: a nature-inspired swarm-based optimization algorithm // *International Journal of Bio-Inspired Computing*. Geneva: Inderscience Publishers. 2009. P. 71–79.

18. VALIAN E., MOHANNA S., TAVAKOLI S. Improved cuckoo search algorithm for feedforward neural network training // *International Journal of Artificial Intelligence & Applications (IJAlA)*. 2011. V. 2. N 3. P. 36–43.

19. DAS S., BISWAS A., DASGUPTA S., ABRAHAM A. *Bacterial Foraging Optimization Algorithm: Theoretical Foundations, Analysis and Applications* // *Foundations of Computational Intelligence*. Springer. 2009. V. 203. P. 23–55.

20. WAHONO R. S., SURYANA N., AHMAD S. Metaheuristic based on feature selection for software defect prediction // *Journal of software*. Academy publisher. 2014. V. 9. N 5. P. 1324–1333.

21. AGRAWAL S., SILAKARI S. A review on application of Particle Swarm Optimization in Bioinformatics // *Current bioinformatics*. 2015. V. 10. P. 401–413.

22. LIU F., ZHOU Z. A new data classification method based on chaotic particle swarm optimization and least square-support vector machine // *Chemometrics and intelligent laboratory systems*. 2015. P. 147–156.

23. ZHANG J., CHEN W., ZHAN Z., YU W., LI Y., CHEN N., ZHOU Q. A survey on algorithm adaptation in evolutionary computation // *Frontiers of Electrical and Electronic Engineering*. 2012. V. 7. P. 16–31.

24. ALLIAS N., MOHAMED-NOOR M., ISMAIL N., DE SILVA K. A Hybrid Gini PSO-SVM Feature Selection: An Empirical Study of Population Sizes on Different Classifier // *Proceedings of First International Conference on Artificial Intelligence, Modelling & Simulation*. IEEE. 2013. P. 94–97.

25. ZAKARIA N., ABDULLAH R. A Comparison between Artificial Bee Colony and Particle Swarm Optimization Algorithms for Protein Structure Prediction Problem // *Neural Information Processing*. 2013. V. 8227. P. 331–340.

26. MARCUS C., FONG S., SIU W. I. PSOVina: The hybrid particle swarm optimization algorithm for protein-ligand docking // *Journal of bioinformatics and computational biology*. 2015. P. 154–157.

27. MORTEZA A., KOBRA Z., AZAM B. Ant colony optimization as a descriptor selection in QSPR modeling: Estimation of the k-max of anthraquinones-based dyes // *Journal of Saudi Chemical Society*. 2013. P. 2–5.

28. GEBRESLASSIE B. H., DIWEKAR U. M. Efficient ant colony optimization for computer aided molecular design: Case study solvent selection problem // *Computers & chemical engineering*. 2015. V. 78. P. 1–9.

29. SCHIEZARO M., PEDRINI H. Data feature selection based on Artificial bee colony algorithm // *EURASIP Journal on Image and Video processing*. 2013. P. 29–33.

30. COLORNI A., DORIGO M. Distributed Optimization by Ant Colonies // Actes de la première conférence européenne sur la vie artificielle. France: Elsevier Publishing. 1991. P. 134–142.
31. ЗАЙЦЕВ А. А., КУРЕЙЧИК В. В., ПОЛУПАНОВ А. А. Обзор эволюционных методов оптимизации на основе роевого интеллекта // Эволюционное моделирование, генетические и бионические алгоритмы. Известия ЮФУ. Технические науки. С. 7–12.
32. СУББОТИН С. А., ОЛЕЙНИК А. А., ЯЦЕНКО В. К. Отбор информативных признаков на основе модифицированного метода муравьиных колоний // Радіоелектроніка та інформатика. 2006. № 1. С. 65–68.
33. ОЛЕЙНИК АН. А., ОЛЕЙНИК АЛ. А., СУББОТИН С. А. Агентные технологии для отбора информативных признаков // Кибернетика и системный анализ. 2012. № 2. С. 113–125.
34. САМИГУЛИНА Г. А., АБДЕНОВА А. М., МАСИМКАНОВА Ж. А. Применение подходов искусственного интеллекта для решения задачи выделения информативных признаков // Материалы 11-й Международной Азиатской школы-семинара „Проблемы оптимизации сложных систем“. 2015. С. 567–572.
35. САМИГУЛИНА Г. А., МАСИМКАНОВА Ж. А. Выделение информативных признаков на основе муравьиных алгоритмов для иммуносетевого моделирования новых лекарственных препаратов // Труды XVIII Всесибирского семинара „Моделирование неравновесных систем (MNS-15)“. Красноярск. 2015. С. 89–93.
36. SORIN C. N., CONSTANTIN O., CLAUDIU V. K., I. CARABULEA. Elitist Ant System for Route Allocation Problem // Proceedings of 8-th WSEAS International Conference on Applied informatics and communications. Greece. 2008. P. 62–67.
37. GAMBARDELLA L. M., DORIGO M. Ant-Q: A Reinforcement Learning approach to the traveling salesman problem. Université Libre de Bruxelles. 1995. P. 1–10.
38. DORIGO M., GAMBARDELLA L. M. Ant Colony System: A Cooperative Learning Approach to the Traveling Salesman Problem // Transactions on Evolutionary Computation. IEEE. 1997. V. 1. N 1. P. 53–66.
39. STÜTZLE T. MAX MIN Ant System // Future Generation Computer Systems. 2000. V. 16. P. 889–914.
40. ZHANG T., YU S., ZHANG Y., TIAN W. Ant Colony System Based on the ASRank and MMAS for the VRPSPD // Wireless Communications, Networking and Mobile Computing. WiCom. 2007. P. 3728–3731.
41. KENNEDY J., EBERHART R. Particle Swarm Optimization // Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks. 1995. P. 1942–1948.
42. ОЛЕЙНИК А. А. Мультиагентный метод оптимизации с адаптивными параметрами // Искусственный интеллект. 2011. № 1. С. 83–90.
43. САМИГУЛИНА Г. А., МАСИМКАНОВА Ж. А. Построение оптимального набора дескрипторов для компьютерного молекулярного дизайна новых лекарственных препаратов на основе методов роевого интеллекта // Труды III Международной научной конференции „Современные тенденции развития науки и производства“. Зап.-сиб. науч. центр. 2016. С. 333–335.
44. EBERHART R. C., KENNEDY J. A new optimizer using particle swarm theory // Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science. 1995. P. 39–43.
45. SHI Y., EBERHART R. A modified particle swarm optimizer // Proceedings of the 1998 IEEE International Conference on Evolutionary Computation. 1998. P. 69–73.
46. SHI Y., EBERHART R. Empirical study of particle swarm optimization // Proceedings of the 1999 IEEE Congress on Evolutionary Computation. 1999. P. 1945–1950.
47. CLERC M., KENNEDY J. The particle swarm — explosion, stability, and convergence in a multidimensional complex space // Proceedings of IEEE Transactions on Evolutionary Computation. 2002. N 6. P. 58–73.

48. MENDES R., KENNEDY J., NEVES J. The fully informed particle swarm: Simpler, maybe better" // Proceedings of IEEE Transactions on Evolutionary Computation. 2004. N 8 (3). P. 204–210.
49. KARABOGA D. D. An Idea Based On Honey Bee Swarm for Numerical Optimization // Technical Report-TR06. Erciyes University. 2005. С. 49.
50. ОЛЕЙНИК А. А., СУББОТИН С. А. Мультиагентный метод с непрямой связью между агентами для выделения информативных признаков // Искусственный интеллект. 2009. № 4. С. 75–82.
51. KONG X., LIU S., WANG Z. An Improved Artificial Bee Colony Algorithm ABC and Its Application // International Journal of Signal Processing, Image Processing and Pattern Recognition. 2013. V. 6. N 6. P. 259–274.
52. MOHAMAD-SALEH N., ABRO G. A Modified Artificial Bee Colony (JA-ABC) Optimization Algorithm // Proceedings of the 2013 International Conference on Applied Mathematics and Computational Methods in Engineering. 2013. P. 74–79.
53. KARABOGA D., AKAY B. A modified Artificial Bee Colony (ABC) algorithm for constrained optimization problems // Applied Soft Computing. 2011. V. 11. P. 3021–3031.
54. SINGHAL K., NARESH R., SHARMA V. A modified binary artificial bee colony algorithm for ramp rate constrained unit commitment problem // International Transactions on Electrical Energy Systems. 2015. V. 25. P. 3472–3491.
55. [Electron. res.]. <http://gui-ant-miner.soft112.com/> (дата обращения 27.03.2016)
56. [Electron. res.]. <https://github.com/epid/ACOTSP> (дата обращения 29.03.2016)
57. [Electron. res.]. <http://people.idsia.ch/~gianni/antnet.html> (дата обращения 30.03.2016)
58. KÖTZING T., NEUMANN F., SUDHOLT D., WAGNER M. Simple Max-Min Ant Systems and the Optimization of Linear Pseudo-Boolean Functions // FOGA'11. Austria. 2011. P. 59–67.
59. LIEFOOGHE A., JOURDAN L., LEGRAND T., HUMEAU J., TALBI E. ParadisEO-MOEO: A Software Framework for Evolutionary Multi-objective Optimization. Advances in Multi-objective Nature Inspired Computing // Studies in Computational Intelligence. Springer. 2010. V. 272. P. 87–117.
60. [Electron. res.]. <https://tribespsso.codeplex.com/> (дата обращения 14.03.2016)
61. GUO J., GONG J., XU J. Improved RBF Neural Network for Nonlinear Identification System // Proceedings of the 2009 International Workshop on Information Security and Application (IWISA 2009). Qingdao, China. 2009. P. 155–168.
62. [Electron. res.]. <https://github.com/swax/SwarmNLP> (дата обращения 29.02.2016)
63. [Electron. res.]. <http://www.copso.org.uk/> (дата обращения 19.02.2016)
64. [Electron. res.]. <https://github.com/gvegayon/ABCoptim> (дата обращения 18.03.2016)
65. [Electron. res.]. <http://mf.erciyes.edu.tr/abc/> (дата обращения 09.04.2016)
66. [Electron. res.]. <http://stackoverflow.com/questions/7451096/artificial-bee-colony-library> (дата обращения 29.03.2016)
67. GOEL P., SINGH D. Efficient ABC Algorithm for Dynamic Path Planning // International Journal of Computer Applications. 2014. V. 88. N 2. P. 21–27.
68. KARABOGA D., ÖZTURK C. A novel clustering approach: Artificial Bee Colony (ABC) algorithm // Journal Applied Soft Computing. 2011. V. 11. P. 652–657.
69. ZUKHRI Z., PAPUTUNGAN I. V. A hybrid optimization algorithm based on genetic algorithm and ant colony optimization // International Journal of Artificial Intelligence & Applications (IJAI). 2013. V. 4. N 5. P. 23–27.
70. HAMED Z., ABOOZAR K., HAMID M. Application of modified particle swarm optimization as an efficient variable selection strategy in QSAR/QSPR studies // Journal of chemometrics. 2012. P. 123–128.

*Самигулина Галина Ахметовна — доктор техн. наук,  
зав. лабораторией Института информационных  
и вычислительных технологий МОН РК;  
e-mail: galinasamigulina@mail.ru*

*Масимканова Жазира Аuezбеккызы — магистрант  
Казахского национального  
университета им. аль-Фараби;  
e-mail: masimkanovazh@gmail.com*

*Дата поступления — 29.04.2016*