

УДК 004.021, 004.94, 004.633

DOI: [10.26102/2310-6018/2023.43.4.023](https://doi.org/10.26102/2310-6018/2023.43.4.023)

## Особенности программной реализации методики трансформации молекулярных систем

Ю.А. Смирнова✉, А.Н. Марьенков

*Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева, Астрахань,  
Российская Федерация*

**Резюме.** В статье проведен анализ проблемы трансформации моделей молекулярных систем (МС) относительно любого элемента этой системы, где под моделью молекулярной системы понимается формализованное компьютерное представление геометрических координат атомов молекулы. Анализ показал, что существующее программное обеспечение, используемое в процессе моделирования молекулярных взаимодействий, не позволяет проводить трансформации МС. При этом процесс трансформации МС значительно усложняется с увеличением количества элементов в рассматриваемых системах. В работе авторами предложена новая методика трансформации МС, основанная на преобразовании МС в молекулярный граф, где под преобразованием понимается перестроение графа относительно новой вершины. Обоснована необходимость автоматизации процесса анализа и обработки формализованного представления трансформируемой МС. Кроме того, описан алгоритм работы программного модуля, основанный на методике трансформации. Приведена демонстрация разработанного программного продукта на примере трансформации молекулы метионина, получены молекулярный граф и трансформированная МС. Программный продукт позволил значительно сократить время, затраченное на трансформацию МС. Кроме того, полученное программное обеспечение позволяет сохранять формализованное компьютерное представление структуры трансформированной молекулы. Повторное использование ранее трансформированного представления структуры молекулы метионина в дальнейшем позволит повысить эффективность и увеличить скорость при моделировании взаимодействия метионина с другими молекулярными системами.

**Ключевые слова:** молекулярные системы, синтез молекулярных систем, методика трансформации, конвертация данных, перестроение молекулярных систем, молекулярный граф, формализованное представление, программа.

**Благодарности:** исследование выполнено при поддержке Программы развития Астраханского государственного университета (Приоритет-2030).

**Для цитирования:** Смирнова Ю.А., Марьенков А.Н. Особенности программной реализации методики трансформации молекулярных систем. *Моделирование, оптимизация и информационные технологии*. 2023;11(4). URL: <https://moitvvt.ru/ru/journal/pdf?id=1440> DOI: 10.26102/2310-6018/2023.43.4.023

## Features of molecular system transformation technique program realization

Y.A. Smirnova✉, A.N. Marienkov

*Astrakhan State University named after V.N. Tatishchev, Astrakhan, the Russian Federation*

**Abstract.** The paper provides the analysis of molecular system model transformation problem with respect to any element of this system, where the molecular system (MS) is understood as a formalized computer representation of the geometric coordinates of the atoms in a molecule. The analysis has demonstrated that the existing software used to simulate molecular interaction does not enable MS transformation. At the same time, MS transformation becomes more complex as the number of elements

in the system increases. A new technique of MS transformation based on converting MS into a molecular graph is proposed, where the transformation is understood as a graph rearrangement with respect to a new vertex. The necessity of automating the process of analysis and processing of the formalized representation of the transformed MS is substantiated. In addition, the algorithm of the program module based on the transformation technique is described. The demonstration of the developed software product using the example of transformation of methionine molecule is given, the molecular graph and formalized computer representation of the obtained MS are presented. The software product helps to save a formalized computer representation of the transformed molecule structure. Repeated use of the methionine molecule structure representation transformed earlier will further improve efficiency and speed in modeling the interaction of methionine with other molecular systems.

**Keywords:** molecular systems, synthesis of molecular systems, transformation technique, data conversion, rearrangement of molecular systems, molecular graph, formalized representation, program.

**Acknowledgements:** the research was supported by the Astrakhan State University Development Program (Priority-2030).

**For citation:** Y.A. Smirnova, A.N. Marienkov. Features of molecular system transformation technique program realization. *Modeling, Optimization and Information Technology*. 2023;11(4). URL: <https://moitvvt.ru/ru/journal/pdf?id=1440> DOI: 10.26102/2310-6018/2023.43.4.023 (In Russ.).

## Введение

Изучение мира на микроуровне всегда представлялось довольно сложным, ресурсоемким и порой опасным для жизни. В то же время, благодаря развитию информационных и цифровых технологий открываются виртуальные лаборатории, где во время компьютерных исследований получают знания о строении сложных молекулярных структур, например, таких, как аминокислоты или белки. Стало возможным синтезировать новые, еще не открытые вещества, которые могли бы сильно упростить жизнь, послужить основой для разработки и моделирования новых лекарственных средств.

Существуют различные виды моделирования молекулярных систем. Например:

- проектирование молекулярной системы: определение желаемых химических и физических свойств, которыми должны обладать молекулы во время воздействия друг на друга;
- синтезирование: в зависимости от типа молекулярной системы, можно выбрать, соответствующий метод синтеза (механический синтез, растворительный синтез, электрохимический синтез и др.);
- моделирование реакций между реагентами в соответствии с выбранным методом синтеза;
- проведение квантово-химических вычислений;
- и др. [1-4].

В каждом из существующих видов моделирования молекулярных систем есть этап, где необходимо перебрать все элементы системы с точки зрения их взаимодействия с элементами других систем. Однако, например, чтобы рассмотреть взаимодействие двух молекулярных систем относительно конкретного элемента системы, необходимо учитывать все элементы системы, так как они связаны между собой и изменение одного элемента повлечет за собой изменение другого (могут измениться такие показатели, как энергия, длина связи, валентный угол и двугранный угол). Данный процесс трансформации МС относительно нового элемента системы является довольно трудоемким. При этом, чем больше элементов в системе, тем больше элементов нужно учесть при трансформации, что влияет на скорость образования трансформированных систем и приводит к увеличению времени на проведение квантово-химических расчетов.

На сегодняшний день существуют российские и зарубежные программные продукты, которые предоставляют возможность проводить вышеперечисленные виды моделирования по отдельности, однако ни один из них не позволяет решать задачу трансформации МС.

Структура МС в данных комплексах представлена в виде формализованного компьютерного представления. В каждой программе свой формат хранения структуры МС, и для проведения комплексного моделирования, особенно если требуется синтезировать сложную молекулу или промоделировать взаимодействие нескольких разных молекул [5], требуется обмен данными между несколькими программными продуктами, так как каждый из них отвечает за свою часть моделирования. Например:

1. Программный комплекс GAMESS [6] – предназначен для квантово-химического вычисления (расчета физических характеристик наноструктур и описания механизмов химических реакций).

2. Программный комплекс HyperChem [7] – предназначен для визуализации 3D-структуры соединений и возможности выполнения некоторых квантово-химических расчетов.

3. Интерпретатор ChemCraft [8] – графический инструментальный для подготовки исходной структуры МС.

4. И др.

Несмотря на наличие перечисленных программных продуктов, ни один из них не решает задачу трансформации молекулярной системы относительно всех ее элементов. В то же время исследователи нередко отмечают многочисленные затруднения при трансформации молекулярной системы, что является важной частью моделирования в процессе синтеза молекулярных систем [2, 3]. Кроме того, по мере усложнения структуры МС за счет увеличения количества атомов задача становится практически невыполнимой без использования специализированного программного обеспечения. Таким образом, можно говорить об актуальности разработки новой методики трансформации МС и программного обеспечения на ее основе, которые могут быть использованы совместно с уже существующими программными комплексами и расширять их функциональность.

### Модель МС

Для начала следует рассмотреть, как происходит само описание молекулы в виде МС. Любую МС можно записать в виде математического представления. Для этого обозначим МС через кортеж  $M$ :

$$M = \langle A, C \rangle, \quad (1)$$

где  $A$  – множество элементов системы:

$$A = \{A_1, A_2, A_i, \dots, A_N\} \quad (2)$$

$i$  – индексы элементов системы,

$N$  – количество элементов системы,

$C$  – связь между элементами  $i, j$ :

$$C = \{21, 32, 42, 53, \dots, ij\}, \text{ индекс } i > j. \quad (3)$$

Чтобы описать структуру молекулы в виде МС, необходимо представить ее в виде формализованной компьютерной записи. Существует множество таких способов записи, но самым распространенным является  $Z$ -матрица.  $Z$ -матрица представляет собой способ

представления координат атомов молекулярной системы. Такое представление также называют внутренними координатами. Это представление определяет каждый атом системы через атомный номер, длину связи, валентный угол и двугранный угол. Под связью в данном случае подразумевается не химическая связь, а вектор, направленный от одного атома к другому. Тем не менее, принято записывать  $Z$ -матрицу через длины и углы химических связей, так как такая запись позволяет описать не только расположение атомов относительно друг друга, но и связи этих атомов.

Формализованная схема для представления МС в виде  $Z$ -матрицы представлена в формуле 4:

$$Z = \begin{matrix} A_1^1 \\ A_2^1 & 1 & R_1 \\ A_3^1 & 2 & R_2 & 1 & \alpha_1 \\ A_i^1 & 3 & R_3 & 2 & \alpha_2 & 1 & \varphi_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_N^1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{matrix}, \quad (4)$$

где  $A_i$  – элемент системы (имя химического элемента);  $i$  – порядковый номер элемента системы;  $R$  – межатомное расстояние;  $\alpha$  – валентный угол, образуемый между элементами системы;  $\varphi$  – двугранный угол, образованный плоскостями.

На Рисунке 2 изображена часть структуры молекулы белка, представленная для работы с программным комплексом GAMESS. (Существуют и другие представления структуры МС, более подробно описанные в статье Смирновой Ю.А. [9]).

```

O1
C2 1 3.4638225
C3 2 1.5302824 1 129.3161846
O4 3 1.2127452 2 130.3329486 1 89.9411730
O5 3 1.3583917 2 113.5687875 4 179.3978500
N6 2 1.4899326 3 107.6518780 4 69.1671479
C7 1 1.2160389 2 33.7683835 3 34.9750549
C8 7 1.5383097 1 121.6623382 6 -173.0020241
C9 8 1.5339870 7 112.0668967 1 123.8623003
S10 9 1.8155057 8 115.2857304 7 -74.5465671
.....
S77 61 2.5822514 26 168.4598604 23 -167.0392574
H78 77 1.2927946 61 94.9068377 26 121.4411395
H79 77 1.2909273 78 93.7726498 61 -104.0075841
    
```

Рисунок 2 – Часть МС молекулы белка формате данных GAMESS  
Figure 2 – MS part of the protein molecule in GAMESS data format

Синтез нового вещества происходит при установке связи между молекулами двух разных веществ.

Так, чтобы смоделировать процесс синтеза двух МС, нужно установить связь между двумя элементами различных МС между собой. Причем для одного и того же элемента одной системы можно установить несколько разных связей с разными элементами другой системы.

Например: основная система  $M_1$  состоит из  $n = 3$  элемента, и система  $M_2$  состоит из  $m = 3$  элемента:

$$M_1 = \{a_1, a_2, a_3\}; M_2 = \{\beta_1, \beta_2, \beta_3\}. \quad (5)$$

Тогда количество элементов в кортеже (L) из объединения двух систем будет рассчитано по формуле:

$$L = n \cdot m = 3 \cdot 3 = 9. \quad (6)$$

Кортеж объединения будет выглядеть:

$$M_1 \cap M_2 = \{\alpha_1\beta_1, \alpha_1\beta_2, \alpha_1\beta_3, \alpha_2\beta_1, \alpha_2\beta_2, \alpha_2\beta_3, \alpha_3\beta_1, \alpha_3\beta_2, \alpha_3\beta_3\}. \quad (7)$$

Чтобы установить соединение между конкретными элементами, нужно для МС М<sub>2</sub> трансформировать Z-матрицу так, чтобы в первой строке матрицы стоял элемент, с которым устанавливается связь. Поскольку Z-матрица, являясь набором связанных между собой элементов, каждый из которых имеет входы и выходы, а также каждый последующий элемент может быть описан только с использованием элементов, лежащих в строке Z-матрицы выше него, то проблема заключается в том, что при трансформации матрицы изменение одного элемента приведет к изменению других связанных элементов.

Например, для описания положения пятого (5) элемента какой-то системы М<sub>2</sub> нужно использовать данные о положении четвертого (4), третьего (3) и первого (1) элементов, так как известно, где они расположены. Основываясь на данных об этих элементах, возможно описать положение (5) элемента. Таким образом, описание положения атомов молекулы в пространстве происходит наращиванием данных от самого первого атома, расположенного в центре координат, до последнего атома в ветке, относительно которого уже невозможно описать ни один атом.

Данный процесс, в силу своей трудоемкости и необходимости учета большого количества параметров, трудно реализуем и требует значительных усилий от исследователя. Поэтому для более эффективной и быстрой работы с элементами предлагается представить данную связанную последовательность в виде молекулярного графа.

Молекулярный граф (МГ) – это неориентированный граф, находящийся во взаимно-однозначном соответствии с описанием молекулярной системы таким образом, что вершинам графа соответствуют элементы системы, а ребрам графа – связи между этими элементами [10-11]

### Математическая модель молекулярного графа

Представим МГ в виде математического представления:

$$G = (V, E), \quad (8)$$

где V – множество вершин:

$$V = \{A_1, A_2, \dots, A_m\} \wedge (A_m \in M_2). \quad (9)$$

Как было сказано ранее, чтобы установить соединение между конкретными элементами, нужно для МС М<sub>2</sub> трансформировать Z-матрицу, поэтому в модели графа рассматривается МС М<sub>2</sub>.

E – множество ребер:

$$E = \{R_{ij}\}, \quad (10)$$

где i, j – номера инцидентных вершин, R – длина ребра (межатомное расстояние A<sub>i</sub>, A<sub>j</sub>).

Под трансформацией молекулярного графа будем считать его перестроение, начиная с новой вершины. На основе трансформированного графа формируется новое формализованное описание МС относительно нужного элемента.

## Методика трансформации МС относительно любого элемента системы

Ввиду вышесказанного, методику трансформации МС относительно любого элемента предлагается разбить на несколько последовательных шагов:

Шаг 1. Формирование массива данных на основе компьютерного файла с Z-матрицей.

Данный шаг представляет собой анализ исходного файла с целью формирования данных согласно формуле 1 для получения формализованного компьютерного представления согласно формуле 4 (Z-матрица).

Шаг 2. Формирование новой последовательности с нужным элементом в начале.

Так как структуру МС  $M_2$  можно представить в виде МГ  $H$ , который является множеством, состоящим из кортежей. Данные кортежи содержат информацию о:  $V_i$  – вершинах графа,  $E_i$  – длинах ребер. И на основе этих данных создается новый граф  $G$ , с однотипной структурой, но с разными номерами вершин. На Рисунке 3 представлен пример трансформации.

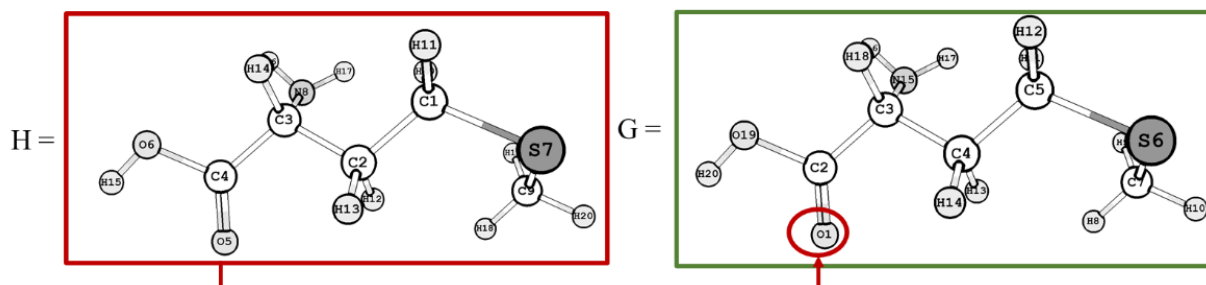


Рисунок 3 – Пример преобразования МГ, начинающегося с вершины O5  
Figure 3 – Example of molecular graph transformation starting from vertex O5

Шаг 3. Формирование Z-матрицы с нужным элементом в начале.

Данный шаг представляет собой анализ полученного на прошлом этапе МГ  $G$ , с целью формирования на его основе нового формализованного компьютерного представления МС  $M_2$ .

Шаг 4. Проверка на существование полученной молекулярной системы.

Необходимо с использованием сторонней программы провести квантово-химический расчет на предмет существования такой молекулярной структуры.

Формирование оптимизированной Z-матрицы, полученной при проведении квантово-химических расчетов.

Для дальнейшего использования полученной МС необходимо хранить оптимизированную молекулярную геометрию полученной системы.

## Программная реализация предложенной методики

Трансформация Z-матриц является важной частью процесса моделирования синтеза молекулярных систем. Она позволяет рассмотреть структуру системы с различных сторон (элементов). Поэтому необходимо создание алгоритма и программы трансформации МС в различные вариации относительно любого элемента системы, которые позволили бы быстро и эффективно трансформировать МС относительно любого элемента системы и проверять существование такой системы через квантово-химические расчеты.

Программа разработана на языке программирования Python 3.11 с использованием дополнительных библиотек OS и Tkinter для реализации интерфейса.

Алгоритм трансформации условно делится на пять основных этапов.

Первый этап. Сбор данных о МС и формирование Z-матрицы.

С использованием библиотеки OS считываются данные из файла, содержащего формализованное представление молекулы в виде Z-матрицы.

Анализируется содержимое файла, определяется начало матрицы по строке «THE CURRENT FULLY SUBSTITUTED Z-MATRIX IS» и ее окончание по пустой строке. Содержимое матрицы, расположенное между этими строками, копируется в оперативную память (двумерный массив). Дальнейшая работа ведется только с данным двумерным массивом.

Второй этап. Формирование МГ.

Для трансформации, как уже было сказано ранее, используется МГ, который позволяет применять к нему графовые алгоритмы. Для данной задачи было принято решение использовать алгоритм поиска в глубину (DFS).

Алгоритм перестроения МГ с применением метода поиска в глубину:

Создаем стек, куда добавляется стартовая вершина. (Начальный элемент, с которого будет строиться новый МГ, согласно шагу 2 предлагаемой методики).

Создаем массив, в него последовательно помещаются все вершины графа, начиная с первой, а нумерация элементов определяет нумерацию вершин в новом графе.

Пока стек не пуст: извлекаем вершину из вершины стека. Если вершина не была посещена (т. е. ее нет в созданном массиве п. 2), то поместим вершину в массив и удалим ее из стека. Относительно только что обработанной вершины начинаем искать соединенные с ней непосещенные вершины. Поместим все непосещенные соседние вершины в стек.

Повторяем шаги 3-4, пока не посетим все достижимые вершины.

Третий этап. Формирование новой Z-матрицы.

На этом этапе с использованием программы GAMESS происходит расчет устойчивой структуры [4]. Анализируется выходной файл программы GAMESS на наличие устойчивой структуры:

Если расчет прошел успешно, то переходим к четвертому этапу;

Иначе если расчет не прошел, то существование такой МС согласно квантово-химическим расчетам невозможно.

Четвертый этап. Формирование данных (Z-матрица).

Из выходного документа копируются данные оптимизированной Z-матрицы и на основе этих данных образуется двумерный массив и формируется трансформированная Z-матрица.

Пятый этап. Хранение.

Оптимизированная трансформированная Z-матрица в виде файла с расширением \*.txt. сохраняется в папке с начальной матрицей. Что позволяет в дальнейшем при использовании данной МС при моделировании взаимодействия избежать этап трансформации МС, что приводит к уменьшению времени, затраченного на моделирование.

### **Апробация программной реализации**

Проведем трансформацию молекулы «Метионин». В молекуле «Метионин» 20 элементов – следовательно, необходимо составить 19 трансформированных матриц. Причем каждую из матриц нужно проверить на существование такой молекулярной структуры через квантово-химический расчет.

Рассмотрим начальную структуру формализованного описания (Z-матрица) молекулы «Метионин». На Рисунке 4 представлено описание формата данных программы GAMESS. Как видно из рисунка Z-матрица начинается с элемента «C1».

C1						
C2	1	1.5186140				
C3	2	1.5340750	1	111.2014360		
C4	3	1.5252350	2	110.5401710	1	174.9682980
O5	4	1.2152150	3	130.0241350	2	20.8571100
O6	4	1.3556200	3	114.1199110	2	-158.6421060
S7	1	1.8164050	2	114.4939880	3	179.7066990
N8	3	1.4902510	2	110.9152130	1	-66.4332480
C9	7	1.8011660	1	103.4413400	2	-70.1524300
H10	1	1.1106040	2	109.6160820	3	54.7453370
H11	1	1.1075660	2	110.5641190	3	-61.9796200
H12	2	1.1106310	1	110.3317330	7	56.9968860
H13	2	1.1088000	1	110.1141170	7	-59.0067480
H14	3	1.1234060	2	108.3284490	1	56.7270020
H15	6	0.9522030	4	110.0332860	3	-178.2539870
H16	8	0.9968260	3	109.7776820	2	163.5946980
H17	8	1.0023940	3	108.3584150	2	43.4730650
H18	9	1.0964390	7	113.1142260	1	63.3085140
H19	9	1.0957600	7	112.8961170	1	-59.0607460
H20	9	1.0968890	7	107.4514730	1	-177.8927980

Рисунок 4 – Представление Z-матрицы молекулы «Метионин»

Figure 4 – Representation of the Z-matrix of methionine molecule

Для более наглядного и понятного представления структуры молекулы «Метионина» смоделируем ее 3d проекцию (Построим молекулярный граф) с использованием программы ChemCraft. Модель системы представлена на Рисунке 5.

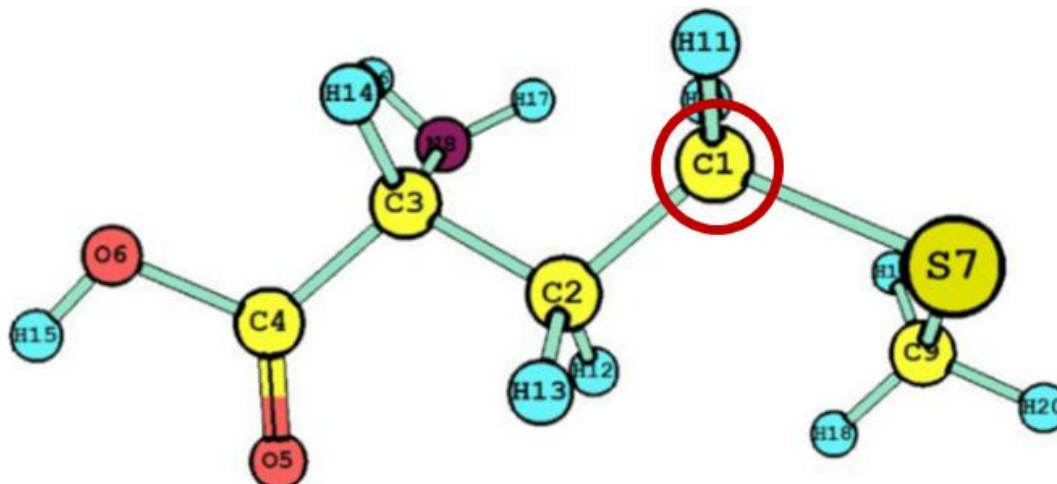


Рисунок 5 – Молекула «Метионин» в виде МГ, начинающегося с вершины C1

Figure 5 – Methionine molecule in the form of MG starting from C1 vertex



```

O1
C2 1 1.2152150
C3 2 1.5252350 1 130.0241350
C4 3 1.5340750 2 110.5401710 1 20.8571100
C5 4 1.5186140 3 111.2014360 2 174.9682980
S6 5 1.8164050 4 114.4939880 3 179.7066990
C7 6 1.8011660 5 103.4413400 4 -70.1524300
H8 7 1.0964390 6 113.1142260 5 63.3085140
H9 7 1.0957600 6 112.8961170 5 -59.0607460
H10 7 1.0968890 6 107.4514730 5 -177.8927980
H11 5 1.1106040 4 109.6160820 3 54.7453370
H12 5 1.1075660 4 110.5641190 3 -61.9796200
H13 4 1.1106310 5 110.3317330 6 56.9968860
H14 4 1.1088000 5 110.1141170 6 -59.0067480
N15 3 1.4902510 4 110.9152130 5 -66.4332480
H16 15 0.9968260 3 109.7776820 4 163.5946980
H17 15 1.0023940 3 108.3584150 4 43.4730650
H18 3 1.1234060 4 108.3284490 5 56.7270020
O19 2 1.3556200 3 114.1199110 4 -158.6421060
H20 19 0.9522030 2 110.0332860 3 -178.2539870
    
```

Рисунок 6 – Представление Z-матрицы молекулы «Метионин», начинающегося с элемента O5

Figure 6 – Representation of the Z-matrix of methionine molecule starting with element O5

Для более наглядного и понятного представления структуры молекулы «Метионина» относительно элемента O5 на Рисунке 7 представлен МГ.

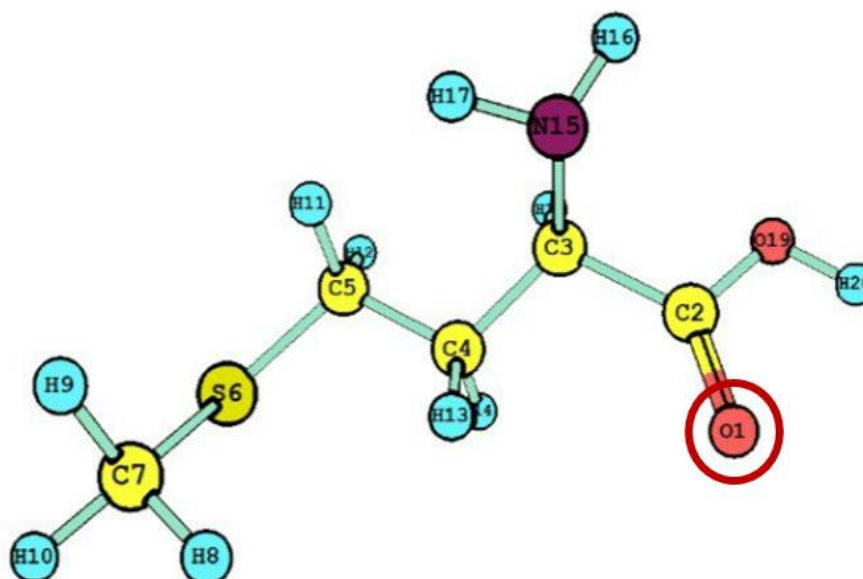


Рисунок 7 – Молекула «Метионин» в виде МГ, начинающегося с вершины O5

Figure 7 – Methionine molecule in the form of MG starting from O5 vertex

Запустим программный продукт еще раз и трансформируем граф относительно элемента H14. На Рисунке 8 представлен МГ, полученный на основе трансформированного формализованного описания.

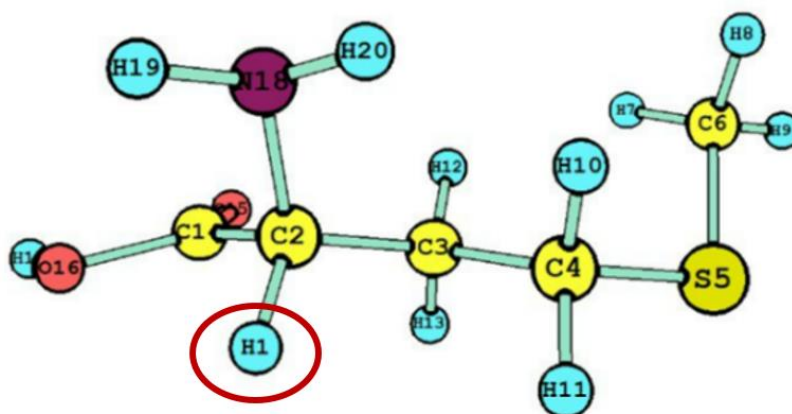


Рисунок 8 – Молекула «Метионин» в виде МГ, начинающегося с вершины H14  
Figure 8 – Methionine molecule in the form of MG starting from H14 vertex

Как можно заметить по этим трем моделям, МГ визуальнo выглядит также, но вершины переобозначены и Z-матрица поменяла свои значения – таким образом трансформация прошла успешно.

Отметим, что для проведения трансформации матрицы вручную исследователь должен выполнить следующий алгоритм:

1. Выбрать элемент, с которого необходимо произвести трансформацию.
2. Просмотреть матрицу и выписать все элементы, с которыми имеется связь.
3. Последовательно рассмотреть каждый элемент, выписанный на шаге 2, и поочередно для каждого элемента выполнить шаг 2, проверяя, не описана ли эта связь ранее.
4. Изменить нумерацию всех элементов, начиная с первого.
5. Сформировать Z-матрицу, то есть последовательно выписать параметры для каждого элемента.
6. Подготовить специализированный файл для проверки существования такой матрицы через квантово-химический расчет в программе GAMESS.
7. Выбрать из файла оптимизированную матрицу.

Сложность проведения трансформации вручную заключается в том, что данный алгоритм нужно выполнить для каждого элемента матрицы. Это может привести к ошибкам или неправильным решениям, связанным с человеческим фактором, а также занимает очень длительное время.

По примерным расчетам, для составления одной матрицы молекулы «Метионина», состоящей из 20 элементов, вручную уходит примерно 56 мин. Так как необходимо произвести 19 трансформаций, то это занимает  $56 * 19 = 1064$  мин  $\approx 17$  часов.

Таким образом, очевидно, что использование разработанного программного продукта позволило значительно сократить время исследования, а также избежать вероятные ошибки, которые может допустить исследователь в ходе выполнения работы вручную.

### Заключение

Представлена методика трансформации молекулярной системы, основанная на представлении МС в виде молекулярного графа, отличающаяся возможностью производить трансформацию и проверять на существование сложной молекулярной

системы (т. е. имеющие большое количество элементов системы, например, таких, как аминокислоты или белки) через квантово-химические расчеты. Программный продукт, основанный на методике, позволяет производить трансформацию и сохранять оптимизированные структуры для проведения дальнейших расчетов. Проблема по трансформации сложных молекулярных систем, которую ставили в начале исследования, решена. Эксперимент, проведенный на небольших МС (20 элементов), показал, что без использования специализированного программного обеспечения трансформация происходила около 17 часов, а с применением ПО за 10 мин (с учетом автоматической проверки существования всех структур). На основе полученных результатов можно сделать вывод, что данная методика и разработанное на ее основе ПО можно использовать как один из этапов при моделировании межмолекулярных взаимодействий.

### СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Алыков Н.М., Жарких Л.И., Сиротин А.Н. Математическое моделирование процессов воздействия молекул зарина, зомана и табуна на структурные компоненты клеточной мембраны. *Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. Научно-технический журнал*. 2013;21(1):71–77.
2. Старикова А. А., Сажин М. А., Золотарева Н. В. [и др.] Изучение взаимосвязи антимикробной и гипогликемической активности новых хиназолинонов методами математического моделирования. *Прикаспийский вестник медицины и фармации*. 2023;4(1):63–70.
3. Старикова А.А., Жарких Л.И., Смирнова Ю.А. Математическое моделирование взаимодействия нового производного хиназолинона с D-аланином тейхоевых кислот клеточной мембраны бактерий. *Вестник Пермской государственной фармацевтической академии: Сборник материалов научно-практической конференции с международным участием*. 2021;1:77–81.
4. Соловьев М.Е. *Компьютерная химия*. М.: СОЛОН-Пресс; 2005. 536 с.
5. Математическое моделирование в химических науках. URL: <https://postnauka.ru/video/84371> (дата обращения: 15.09.2023).
6. Программный комплекс GAMESS. URL: <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess> (дата обращения: 15.09.2023).
7. Программный комплекс HyperChem. URL: <http://www.hypercubeusa.com/> (дата обращения: 15.09.2023).
8. Интерпретатор ChemCraft. URL: <https://www.chemcraftprog.com/download.html> (дата обращения: 15.09.2023).
9. Шницер Т., Вантомм Г. Синтез сложных молекулярных систем – предполагаемая роль химиков-органиков. 2020. URL: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/33274282> (дата обращения: 15.09.2023).
10. Игнатов С.К. Учебное Пособие. Квантово-химическое моделирование атомно-молекулярных процессов. Нижний Новгород; 2019. URL: <http://www.qchem.unn.ru/files/2020/02/IgnatovSK-QCmodeling2019.pdf> (дата обращения: 05.09.2023).
11. Смирнова Ю.А., Головацкая Л.И. Разработка алгоритма и метода трансформации записи атомно-молекулярных систем. *Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии*. 2022;58(2):61–67.
12. Макаров Л.И. Оценки положения подграфов в молекулярных графах и особенности их общих подграфов. *Журнал структурной химии*. 2005;46(4):759–763.

13. Мельников А.А., Мельников В.А., Палюлин Я.С. Генерация молекулярных графов для QSAR-исследований. *Доклады Академии наук*. 2005;402(3):348–352.

## REFERENCES

1. Alykov N.M., Zharkikh L.I., Sirotin A.N. Matematicheskoe modelirovanie protsessov vozdeistviya molekul zarina, zomana i tabuna na strukturnye komponenty kletochnoi membrany. *Prikaspiiskii zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii. Nauchno-tekhnicheskii zhurnal*. 2013;21(1):71–77. (In Russ.).
2. Starikova A.A., Samotrueva M.A., Zolotareva N.V. [et al] Izuchenie vzaimosvyazi antimikrobnoi i gipoglikemicheskoi aktivnosti novykh khinazolinonov metodami matematicheskogo modelirovaniya. *Prikaspiiskii vestnik meditsiny i farmatsii*. 2023; 4(1):63–70. (In Russ.).
3. Starikova A.A., Zharkikh L.I., Smirnova YU.A. Matematicheskoe modelirovanie vzaimodeistviya novogo proizvodnogo khinazolinona s D-alaninom teikhoevykh kislot kletochnoi membrany bakterii. *Vestnik Permskoi gosudarstvennoi farmatsevticheskoi akademii: Sbornik materialov nauchno-prakticheskoi konferentsii s mezhdunarodnym uchastiem*. 2021;1:77–81. (In Russ.).
4. Solov'ev M.E. *Komp'yuternaya khimiya*. Moscow, SOLON-Press; 2005. 536 p. (In Russ.).
5. Matematicheskoe modelirovanie v khimicheskikh naukakh. URL: <https://postnauka.ru/video/84371> (accessed on 15.09.2023). (In Russ.).
6. Programmnyi kompleks GAMESS. URL: <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess> (accessed on 15.09.2023). (In Russ.).
7. Programmnyi kompleks HyperChem. URL: <http://www.hypercubeusa.com/> (accessed on 15.09.2023). (In Russ.).
8. Interpretator ChemCraft. URL: <https://www.chemcraftprog.com/download.html> (accessed on 15.09.2023). (In Russ.).
9. Shnicer T., Vantom G. Sintez slozhnykh molekulyarnykh sistem – predpolagaemaya rol' khimikov-organikov. 2020. URL: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/33274282> (accessed on 15.09.2023). (In Russ.).
10. Ignatov S.K. *Uchebnoe Posobie. Kvantovo-khimicheskoe modelirovanie atomno-molekulyarnykh protsessov*. Nizhnii Novgorod; 2019. URL: <http://www.qchem.unn.ru/files/2020/02/IgnatovSK-QCmodeling2019.pdf> (accessed on 05.09.2023). (In Russ.).
11. Smirnova Yu.A., Golovatskaya L.I. Razrabotka algoritma i metoda transformatsii zapisi atomno-molekulyarnykh sistem. *Prikaspiiskii zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii*. 2022;58(2):61–67. (In Russ.).
12. Makarov L.I. Otsenki polozheniya podgrafov v molekulyarnykh grafakh i osobennosti ikh obshchikh podgrafov. *Zhurnal strukturnoi khimii*. 2005;46(4):759–763. (In Russ.).
13. Melnikov A.A., Melnikov V.A., Paliulin Ya.S. Generatsiya molekulyarnykh grafov dlya QSAR-issledovaniy. *Doklady Akademii nauk*. 2005;402(3):348–352. (In Russ.).

## ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ / INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Смирнова Юлия Александровна, старший преподаватель, Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева, Астрахань, Российская Федерация. Yulia A. Smirnova, Senior Lecturer, V.N. Tatishchev Astrakhan State University, Astrakhan, the Russian Federation.

e-mail: [2013qwer22@gmail.com](mailto:2013qwer22@gmail.com)

ORCID: [0000-0002-3807-5062](https://orcid.org/0000-0002-3807-5062)

**Марьенков Александр Николаевич**, кандидат  
технический наук, доцент, заведующий  
кафедрой, Астраханский государственный  
университет им. В.Н. Татищева, Астрахань,  
Российская Федерация.

*e-mail:* [marenkovan17@gmail.com](mailto:marenkovan17@gmail.com)

ORCID: [0000-0003-1378-3553](https://orcid.org/0000-0003-1378-3553)

**Aleksandr N. Marienkov**, Candidate of  
Technical Sciences, Associate Professor, Head  
of the Department, V.N. Tatishchev Astrakhan  
State University, Astrakhan, the Russian  
Federation.

*Статья поступила в редакцию 20.09.2023; одобрена после рецензирования 27.11.2023;  
принята к публикации 14.12.2023.*

*The article was submitted 20.09.2023; approved after reviewing 27.11.2023;  
accepted for publication 14.12.2023.*