

МРНТИ 28.23.25

### Построение оптимальной иммунносетевой модели на основе модифицированного алгоритма роя частиц

Самигулина Г.А.\*, Масимканова Ж.А.\*\*

Казахстанско-Британский технический университет,  
Институт информационных и вычислительных технологий КН МОН РК,  
г. Алматы, Республика Казахстан,  
\*galinasamigulina@mail.ru, \*\*masimkanovazh@gmail.com

Разработка информационных технологий на основе биоинспирированных интеллектуальных методов, например подхода искусственных иммунных систем, для компьютерного молекулярного дизайна новых лекарственных препаратов и прогнозирования зависимости "структура-свойство/активность" (QSAR) химических соединений является актуальной проблемой. Статья посвящена решению задачи QSAR по построению иммунносетевой модели на основе выбора оптимального набора дескрипторов для облегчения процесса отбора новых химических соединений в кандидаты лекарственных препаратов с заданными свойствами. В соответствии с концепцией мультиалгоритмического подхода разработка оптимальной иммунносетевой модели и выделение информативных дескрипторов осуществляется на основе алгоритмов роя частиц. В данной работе описано сравнение классического алгоритма роя частиц (PSO) и модифицированного алгоритма роя частиц с весом инерции (IWPSO) для отбора информативных дескрипторов на примере лекарственных соединений сульфаниламидной группы с различной фармакологической активностью. Проанализирован выбор параметров (фитнес-функций, размер популяций, количество итераций и др.), определяющих эффективность работы предложенных алгоритмов для построения оптимального набора дескрипторов. Приведены результаты моделирования зависимости значений фитнес-функций от количества итераций в программных продуктах WEKA и Yarpiz (PSO).

**Ключевые слова:** оптимальная иммунносетевая модель, выделение информативных дескрипторов, алгоритмы роя частиц (PSO).

### Құстар үйірінің модификацияланған алгоритмі негізінде оңтайлы иммунды желілік модель құру

Самигулина Г.А.\*, Масимканова Ж.А.\*\*

Қазақстан-Британ техникалық университеті,  
ҚР БҒМ ҒК Ақпараттық және есептеуіш технологиялар институты,  
Алматы қ., Қазақстан Республикасы,  
\*galinasamigulina@mail.ru, \*\*masimkanovazh@gmail.com

Биоинспирацияланған интеллектуалды әдістер негізінде, мысалы, жаңа дәрілік препараттардың компьютерлік молекулярлық дизайны үшін және химиялық қосылыстардың "құрылым-қасиет/белсенділік" (QSAR) тәуелділігін болжамдауда жасанды иммунды жүйелердің ақпараттық технологиясын құру өзекті мәселе болып отыр. Мақала иммунды желілік модель негізінде дәрілік препаратқа кандидат ретінде берілген қасиеттері бар жаңа химиялық қосылыстарды таңдау әдерісін жеңілдету үшін оңтайлы дескрипторлар жиынын таңдау арқылы QSAR-дың тапсырмасын шешуге арналған. Мультиалгоритмдік тәсіл концепциясы негізінде оңтайлы иммунды желілік моделді құру мен ақпараттық дескрипторларды белгілеу құстар үйірінің алгоритмдері негізінде жүзеге асады. Берілген жұмыста ақпараттық дескрипторларды сұрыптау үшін мысал ретінде, әртүрлі фармакологиялық белсенділігі бар сульфаниламид тобының дәрілік қосылыстарын құстар үйірінің классикалық алгоритмі (PSO) мен инерциялық салмақты құстар үйірінің түрленген алгоритмдерін (IWPSO) салыстыруы сипатталған. Оңтайлы дескрипторлар жиынын құру үшін ұсынылған алгоритм жұмысының тиімділігін анықтауда параметрлерді таңдау (фитнес-функциялар, популяция мөлшері, итерация саны және т.б.) талданды. WEKA және Yarpiz (PSO) программалық өнімдерінде итерация санына байланысты фитнес-функция мәндерінің тәуелділігін моделдеу нәтижелері келтірілген.

**Түйін сөздер:** оңтайлы иммунды желілік модель, ақпараттық дескрипторларды сұрыптау, құстар үйірінің алгоритмі (PSO).

**Construction of an optimal immune network model  
based on the modified swarm algorithm**

Samigulina G.A.\*, Massimkanova Zh.A.\*\*

Kazakh-British technical university

Institute of information and computational technologies CS MES RK

Almaty, Kazakhstan,

\*galinasamigulina@mail.ru, \*\*masimkanovazh@gmail.com

The development of information technologies based on bioinspired intellectual methods, such as the approach of artificial immune systems, for the computer molecular design of new drugs and prediction the "structure-property/activity" relationship (QSAR) of chemical compounds is an actual problem. The article is devoted to the solution of the task of QSAR on the construction of immune network model based on the choice of optimal set of descriptors to facilitate the selection of new chemical compounds for candidate drugs with predefined properties. According to the concept of multialgorithmic approach development of optimal immune network model and allocation of informative descriptors is carried out on the basis of swarm intelligence algorithms. In this work comparison of standard particle swarm optimization algorithm (PSO) and modified inertia weight particle swarm optimization (IWPSO) is described for selection of informative descriptors on the example of drug compounds of the sulfanilamide group with various pharmacological activities. The choice of the parameters (fitness functions, population size, the number of iterations, etc.), which define performance of the offered algorithms for creation of optimal set of descriptors is analysed. The results of modeling of dependence of fitness function values on the number of iterations in software products WEKA and Yarpiz (PSO) are given.

**Key words:** optimal immune network model, selection of informative descriptors, particle swarm optimization (PSO).

## 1 Введение

В настоящее время актуально применение интеллектуальных методов для обработки химических данных и решения задачи прогнозирования зависимости "структура-свойство/активность" (QSAR) новых соединений. Широкое распространение получили интеллектуальные технологии с использованием нейронных сетей, эволюционных алгоритмов, искусственных иммунных систем, алгоритмов роевого интеллекта (РИ) и др. За последние годы особенно широкое применение получили алгоритмы РИ, такие как алгоритмы роя частиц (particle swarm optimization, PSO), муравьиной и пчелиной колонии, серых волков, кукушки и бактерий, которые применяются для решения оптимизационных задач. Алгоритмы РИ отличаются от эволюционных алгоритмов большей точностью и простотой программной реализации. Эффективность алгоритмов РИ зависит от ряда факторов, таких как качество и размер обрабатываемых данных, настройки параметров, выбора фитнес-функций и др. Правильный подбор значений весовых коэффициентов алгоритмов улучшает способность к глобальному и локальному поиску, решает проблему преждевременной сходимости. Одним из эффективных подходов является алгоритм роя частиц (PSO). Разработаны различные модифицированные алгоритмы роя частиц, такие как Guaranteed Convergence PSO (GCP SO) [Farsangi, 2007: 1], modified PSO (MPSO) [Khan, 2016: 1; Jena, 2015: 3263–3272], inertia weight PSO (IWPSO) [Mu, 2009: 151-155], Fully informed PSO (FIPSO) [Jukasik, 2014: 155-161], Adaptive PSO (APSO) [Zhan, 2009: 1362-1381] и др.

## 2 Обзор литературы

Работа [Thamaraichelvi, 2016: 744-760] посвящена применению метода роя частиц и алгоритма светлячка для диагностики опухоли в изображениях магнитной резонансной и компьютерной томографии. Предложенный метод роя частиц применяется для поиска оптимального количества дескрипторов и уменьшения размерности данных спектрального изображения. В статье [Liu, 2015: 147-156] совместно используются хаотический алгоритм оптимизации и алгоритм роя частиц для повышения точности прогноза при отборе данных с определенными фармакологическими свойствами препарата. Результаты эксперимента показывают, что предложенный метод имеет хорошую обучаемость и способность к обобщению. В работе [Goodarzi, 2012: 636-651] предлагается использование модифицированного алгоритма роя частиц (MPSO) и множественной линейной регрессии (MLR) для отбора информативных дескрипторов при моделировании QSAR. В статье [Guo, 2014: 2251] описываются оптимизационные алгоритмы (эволюционные алгоритмы, метод роя частиц) для прогнозирования свойств химических соединений. Исследования выполнены с использованием программного продукта AutoDock. Сравнение результатов моделирования показывает эффективность применения алгоритмов роя частиц. В работе [Bin, 2008: 698-705] рассматривается модифицированный алгоритм роя частиц, в котором с увеличением количества итераций уменьшается вес инерции. По сравнению с классическим алгоритмом роя частиц данный алгоритм улучшает поиск оптимального решения. В статье [Umapathy, 2010: 1] анализируется влияние веса инерции (постоянный вес инерции, изменяющийся во времени вес инерции и вес инерции при локально-глобальной лучшей позиции) на эффективность работы алгоритма роя частиц. В результате отмечается, что использование алгоритма роя частиц с предложенным весом инерции позволяет быстро обрабатывать большой объем данных и обеспечивает лучшее решение.

Одним из известных интеллектуальных подходов при компьютерном молекулярном дизайне новых лекарственных препаратов являются искусственные иммунные системы (ИИС), основанные на применении принципов теоретической иммунологии [Timmis, 2000: 143-150]. Работа [Carkli, 2017: 1387-1391] посвящена прогнозированию карбона диоксида на основе алгоритмов клональной селекции CLONALG и AIRS. Использование предложенных алгоритмов позволяет более точно прогнозировать выбросы карбона диоксида по сравнению с алгоритмом многослойного перцептрона и методом ближайших соседей. В статье [Lasisi, 2017: 101-110] предлагается ИИС на основе алгоритма клональной селекции для прогнозирования вторичной структуры белка. Искусственная иммунная система прогнозирует вторичную структуру гемоглобина с высокой точностью прогнозирования 88,38 процентов. В исследованиях [Samigulina, 2017a: 88-94; Самигулина, 2017б: 92-104] решается задача построения оптимальной иммунносетевой модели на основе алгоритмов роевого интеллекта. В соответствии с концепцией мультиалгоритмического подхода [Samigulina, 2013: 21-29] рассматриваются различные модифицированные алгоритмы роевого интеллекта. Проведенные эксперименты показывают, что выделение информативных дескрипторов с использованием алгоритмов роевого интеллекта, а также построенные оптимальные иммунносетевые модели существенно повышают качество прогноза при решении задачи распознавания образов на основе ИИС [Samigulina, 2015: 172].

Постановка задачи формулируется следующим образом: необходимо построить оптимальную иммуносетевую модель на основе модифицированного алгоритма роя с весом инерции (IWPSO) частиц для прогнозирования зависимости "структура-свойства/активность"(QSAR) новых лекарственных препаратов (сульфаниламидов). Сравнить результаты моделирования классического алгоритма роя частиц и модифицированного алгоритма роя частиц с весом инерции.

### 3 Материалы и методы

В статье сравниваются классический (PSO) и модифицированный алгоритмы роя частиц (IWPSO) для построения оптимального набора дескрипторов химических соединений (на примере сульфаниламидов), а также дальнейшей разработки оптимальной иммуносетевой модели.

#### 3.1 Классический алгоритм роя частиц (PSO)

Классический алгоритм роя частиц [Kennedy, 1995: 1942-1948] разработан Дж. Кеннеди и Р. Эберхартом в 1995 году для оптимизационных задач. Пусть позиция частицы в  $D$ -мерном пространстве представляется следующим образом [Му, 2009: 151-152]:  $X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})$ , а скорость частицы:  $V_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})$ . Для выбранной фитнес-функции задается размер популяции, количество итераций и весовые коэффициенты алгоритма. При каждой итерации определяются локальное лучшее ( $p_{id}$ ) и глобальное лучшее ( $p_{gd}$ ) значения. Локальное лучшее значение рассматривается как наилучшее положение частицы в пространстве поиска. Глобальное лучшее значение является лучшим положением всех частиц в популяции.

Далее частицы меняют скорость (1) и положения (2) по формулам:

$$v_{id}^{k+1} = wv_{id}^k + c_1r_1(p_{id} - x_{id}^k) + c_2r_2(p_{gd} - x_{id}^k), \quad (1)$$

$$x_{id}^{k+1} = x_{id}^k + v_{id}^{k+1}, i = 1, 2, \dots, N; d = 1, 2, \dots, D, \quad (2)$$

где  $v_{id}$  - скорость частицы,  $k$  - количество итераций,  $w$  - вес инерции,  $c_1, c_2$  - коэффициенты ускорения,  $r_1, r_2$  - равномерно распределенные случайные числа в интервале  $[0,1]$ , которые используются для сохранения разности популяции,  $p_{id}$  - локальное лучшее значение,  $p_{gd}$  - глобальное лучшее значение,  $N$  - размер популяции.

Выбор дескрипторов выполняется с использованием алгоритма CFS (Correlation-based feature selector, CFS), предложенного в работе [Hall, 1999: 69]. Фитнес-функция представляется следующим образом:

$$M_s = \frac{kr_{sf}^-}{\sqrt{k+k(k-1)r_{ff}^-}}, \quad (3)$$

где  $s$  - подмножество, которое содержит  $k$  дескрипторов,  $r_{sf}^-$  - средняя корреляция "дескриптор-класс" ( $f \in s$ ),  $r_{ff}^-$  - средняя корреляция между "дескриптор-дескриптор".

Далее сравниваются значения фитнес-функций [Ahmad, 2015: 3-4]:

- если  $M(x_{id}^{k+1}) \leq M(p_{id})$ , то установить  $p_{id} = x_{id}^{k+1}$ ,

- если  $M(p_{id}) \leq M(p_{gd})$ , то установить  $p_{gd} = p_{id}$ .

Одной из особенностей алгоритмов роя частиц является необходимость подбора коэффициентов в зависимости от условий задачи. Если установить  $c_1 > c_2$ , то частицы стремятся к своим лучшим положениям. Если  $c_1 < c_2$ , то все частицы будут стремиться к лучшему глобальному положению, которое приводит к преждевременной сходимости [Пичужкина, 2017: 8-9].

### 3.2 Алгоритм роя частиц с весом инерции (IWPSO)

Алгоритм IWPSO [Shi, 1998: 73-79] был предложен Р. Эберхартом и Ю. Ши для решения проблемы преждевременной сходимости. При итерации вес инерции частицы меняется от большого значения к меньшему [Му, 2009: 153] по формуле:

$$w = w_{\max} - \frac{w_{\max} - w_{\min}}{iter_{\max}} k, \quad (4)$$

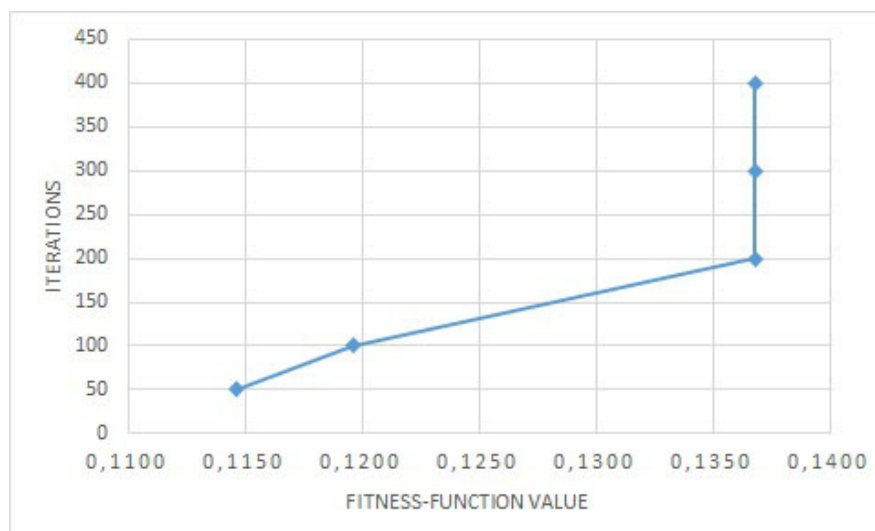
где  $w$  - вес инерции,  $w_{\max}$  - начальный вес инерции,  $w_{\min}$  - конечный вес инерции,  $iter_{\max}$  - максимальное количество итерации,  $k$  - текущая итерация. При  $w \geq 1$  скорость частицы увеличивается и позволяет частицам лучше исследовать пространство поиска. При  $w < 1$  частицы замедляются и находят локальные значения.

## 4 Результаты и обсуждение

Для исследования эффективности предложенных методов используется база данных дескрипторов сульфаниламидов на базе ресурса Mol-instincts и PubChem [molinstincts, 2018: 1]. База данных (БД) состоит из более 1000 дескрипторов разных уровней. Рассмотренные химические соединения классифицированы на сульфаниламиды короткого действия, средней длительности действия и длительного действия. Примерами дескрипторов являются количество атомов, относительное количество атомов карбона, относительное количество атомов водорода, молекулярный вес, количество связей, гравитационный индекс и др [Самигулина, 2017в: 99-107]. Необходимо построить оптимальный набор дескрипторов, который наиболее полно описывает химическое соединение.

Существуют различные программные продукты на основе алгоритмов роя частиц для решения прикладных задач. Например, WEKA (Waikato Environment for Knowledge Analysis) [Moraglio, 2007: 125-137], Yarpiz [Yarpiz, 2017: 1], SwarmNLP [SwarmNLP, 2015: 1], Co-PSO [Shen, 2011: 1], DPSO (Dissipative particle swarm optimization) [Jia, 2014: 37-47], ParadisEO [Liefoghe, 2010: 87], EPSO [tribespso, 2017: 1] и др.

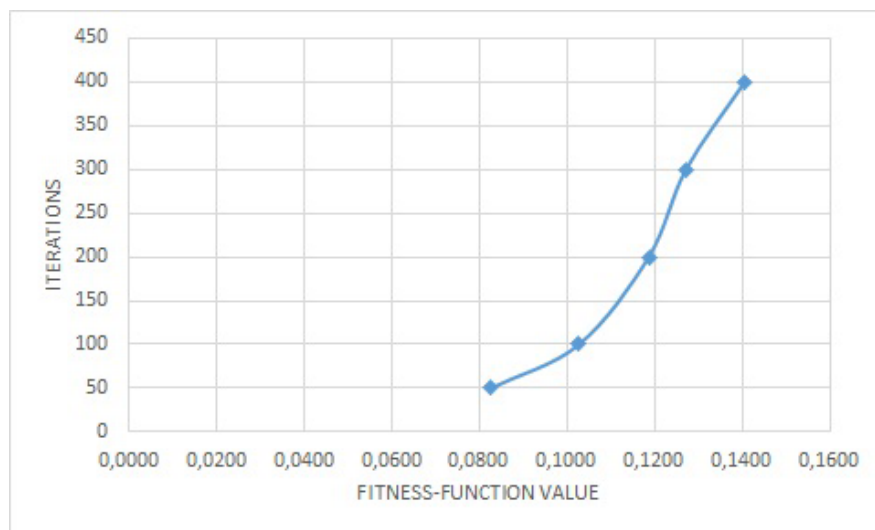
Для выделения информативного набора данных на основе классического алгоритма роя частиц используется программный пакет WEKA, реализованный на языке программирования Java. При моделировании заданы следующие параметры: количество частиц в рое  $N = 100$ , количество итераций  $k = 50$ , коэффициенты ускорения  $c_1 = 1$  и  $c_2 = 2$ , вес инерции  $w = 1$ , равномерно распределенное случайное число  $r_1 = 1$ . Время вычисления равно 3 мс. В результате моделирования из 1024 дескрипторов выбраны 49 информативных дескрипторов. На рисунке 1 приведены результаты



**Рисунок 1** – Моделирование классического алгоритма роя частиц (PSO)

моделирования зависимости значений фитнес-функций от количества итераций в программном продукте WEKA.

Значение фитнес-функции характеризует информативность отобранного набора дескрипторов и меняется от 0 до 1. При увеличении итерации увеличивается значение фитнес-функции. Если количество итераций больше 100, то возникает проблема преждевременной сходимости.



**Рисунок 2** – Моделирование модифицированного алгоритма роя частиц (IWPSO)

Выделение информативных дескрипторов на основе алгоритма IWPSO выполняется в программном продукте Yarpiz, разработанного на языке программирования Python. При моделировании заданы следующие параметры: количество частиц в рое  $N = 100$ , количество итераций  $k = 50$ , коэффициенты ускорения  $c_1 = 1$  и  $c_2 = 2$ , вес инерции  $w_{\max} = 0,9$  и  $w_{\min} = 0,4$ , равномерно распределенное случайное число  $r_1=1$ .

Время вычисления равно 3 мс. В результате моделирования из 1024 дескрипторов выбраны 44 информативных дескрипторов. На рисунке 2 приведены результаты моделирования зависимости значений фитнес-функций от количества итераций в программном продукте Yagriz.

Для оценки эффективности предложенных алгоритмов в таблице 1 сравниваются результаты моделирования оптимальных наборов дескрипторов сульфаниламидов при разном количестве итераций.

**Таблица 1** - Сравнение результатов моделирования оптимального набора дескрипторов на основе алгоритмов PSO и IWPSO.

Алгоритмы роя частиц	Количество итераций	Значение фитнес-функций	Набор информативных дескрипторов
Алгоритм PSO	50	0.1146	49
	100	0.1196	49
	200	0.1368	48
	300	0.1368	48
	400	0.1368	48
Алгоритм IWPSO	50	0.0826	44
	100	0.1028	43
	200	0.1187	40
	300	0.1272	38
	400	0.1406	38

При сравнении результатов моделирования на основе алгоритмов PSO и IWPSO следует отметить:

- в алгоритме PSO решение достигается при итерации равной 100 и выбирается 49 дескрипторов. При дальнейших итерациях в качестве исходных данных используется случайная выборка данных из пространства поиска, что приводит к преждевременной сходимости;

- в алгоритме IWPSO с увеличением количества итераций улучшается значение фитнес-функции. При итерации 400 достигается лучшее значение фитнес-функции и выбирается 38 информативных дескрипторов.

Таким образом, большое количество итераций дает более точное решение, но приводит к дополнительным вычислениям.

## 5 Заключение

Одной из важнейших задач при молекулярном дизайне новых лекарственных препаратов и прогнозировании зависимости "структура-свойство/активность" на основе подходов искусственного интеллекта является построение оптимального набора дескрипторов, наиболее полно характеризующих рассматриваемые химические соединения. Результаты моделирования показали эффективность предварительной обработки данных с использованием модифицированного алгоритма роя частиц с

весом инерции IWPSO для выделения информативных дескрипторов и построения оптимальной иммуносетевой модели, а также дальнейшего решения задачи распознавания образов на основе подхода искусственных иммунных систем и прогнозирования свойств новых антисептических препаратов сульфаниламидной группы.

## 6 Благодарности

Работа выполнена по гранту КН МОН РК на тему: "Разработка и анализ баз данных для информационной системы прогнозирования зависимости "структура-свойство" лекарственных соединений на основе алгоритмов искусственного интеллекта" (2018-2020 г.г.)

## Список литературы

- [1] *Ahmad I.* Feature Selection Using Particle Swarm Optimization in Intrusion Detection // International Journal of Distributed Sensor Networks. - 2015. - Vol. 11. - URL: <https://doi.org/10.1155/2015/806954> (дата обращения: 28.03.2018)
- [2] *Bin J., Zhigang L., Xingsheng G.* A dynamic inertia weight particle swarm optimization algorithm // Chaos, Solitons and Fractals. - 2008. - Vol. 37. - P. 698-705.
- [3] *Carkli Y.B., Sertkaya C., Yurtay N.* Prediction of secondary structures of hemoglobin using clonal selection algorithm // 7th International Workshop on Computer Science and Engineering. - 2017. - P. 1387-1391.
- [4] *Farsangi M.M., Nezamabadi-pour H., Lee K.Y.* Implementation of GCPSO for Multi-objective VAR Planning with SVC and Its Comparison with GA and PSO // Intelligent Systems Applications to Power Systems. - IEEE, 2007. - DOI: 10.1109/ISAP.2007.4441632 (дата обращения: 15.03.2018)
- [5] *Goodarzi M., Dejaegher B.* Feature selection methods in QSAR studies // Journal AOAC Int. - 2012. - Vol. 95(3). - P. 636-651.
- [6] *Guo L., Yan Z., Zheng X., Hu L., Yang Y., Wang J.* A comparison of various optimization algorithms of protein-ligand docking programs by fitness accuracy // Journal Molecular modeling. - 2014. - Vol. 20(7). - P. 2251 p.
- [7] *Hall M.A.* Correlation-based Feature Selection for Machine Learning // Thesis of Doctoral dissertation. - The University of Waikato, 1999. - 198 p.
- [8] *Jena P.K., Parhi D.R.* A Modified Particle Swarm Optimization Technique for Crack Detection in Cantilever Beams // Arabian Journal for Science and Engineering. - Springer, 2015. - Vol. 40. - P. 3263-3272.
- [9] *Jia Y., Chen W., Zhang J., Li J.* Generating Software Test Data by Particle Swarm Optimization // Materials of Asia-Pacific Conference on Simulated Evolution and Learning. - 2014. - P. 37-47.
- [10] *Jukasik S., Kowalski P.* Fully Informed Swarm Optimization Algorithms: Basic Concepts, Variants and Experimental Evaluation // Proceedings of the 2014 Federated Conference on Computer Science and Information Systems. - IEEE, 2014. - Vol.2. - P.155-161.
- [11] *Kennedy J., Eberhart, R.C.* Particle swarm optimization // IEEE International Conference on Neural Network. - 1995. - P. 1942-1948.
- [12] *Khan S.U., Yang S., Wang L., Liu L.* A Modified Particle Swarm Optimization Algorithm for Global Optimizations of Inverse Problems // IEEE Transactions on Magnetics. - IEEE, 2016. - Vol.52. - DOI:10.1109/TMAG.2015.2487678 (дата обращения: 17.03.2018)
- [13] *Lasisi A., Ghazali R., Chiroma H.* Utilizing clonal selection theory inspired algorithms and K-means clustering for predicting OPEC carbon dioxide emissions from petroleum consumption // Advances in Intelligent Systems and Computing. - 2017. - Vol.549. - P. 101-110.
- [14] *Liefooghe A, Jourdan L., Legrand T., Humeau J., Talbi E.* ParadisEO-MOEO: A Software Framework for Evolutionary Multi-objective Optimization // Studies in Computational Intelligence. - Springer, 2010. - Vol. 272. - P. 87-117.



- [15] *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.
- [16] *Moraglio A., Di Chio C., Poli R.* Geometric Particle Swarm Optimisation // *EuroGP, LNCS 445*. - 2007. - P. 125-135.
- [17] *Mu A., Cao D., Wang X.* A Modified Particle Swarm Optimization Algorithm // *Natural Science*. - 2009. - Vol.1, No.2. - P. 151-155.
- [18] *Пичуржкина А.В.* Метод роя частиц в задачах оптимальной ориентации спутников // *Магистерская работа*. - МФТИГУ, 2017. - 35 с.
- [19] *Samigulina G.A.* Immune network modeling technology for complex objects intellectual control and forecasting system: monograph. - USA: Science Book Publishing House, 2015. - 172 p.
- [20] *Samigulina G.A., Massimkanova Zh.A.* Computer modeling of new drugs based on the methods of swarm intelligence and immune network modeling // *Вісник Національного технічного університету "ХПІ"*. - 2017. - Vol. 50(1271). - С. 88-94.
- [21] *Самигулина Г.А., Масимканова Ж.А.* Онтологические модели алгоритмов роевого интеллекта для иммуносетевого моделирования лекарственных препаратов // *Вестник КазНУ им. аль-Фараби: серия математика, механика, информатика*. - Алматы, 2017. - № 1 (93). - С. 92-104.
- [22] *Samigulina G.A., Samigulina Z.I.* The construction of an optimal immune network model for forecasting the properties of unknown drug compounds on the basis of multialgorithmic approach // *Problems of informatics*. - 2013. - Vol. 2. - P. 21-29.
- [23] *Самигулина Г.А., Самигулина З.И.* Применение современных методов Data Mining для прогнозирования зависимости "структура/свойство" химических соединений сульфаниламидов // *Проблемы эволюции открытых систем*. - Алматы-Красноярск, 2017. - Вып.19, Т.№2. - С. 99-107.
- [24] *Shen H., Zhao Y.* An improved cooperative PSO algorithm // *Mechatronic Science, Electric Engineering and Computer*. - IEEE, 2011. - DOI: 10.1109/MECS.2011.6025643 (дата обращения: 19.11.2017)
- [25] *Shi Y., Eberhart R.C.* A modified particle swarm optimizer // *Proceedings of Congress on Evolutionary Computation*. - 1998. - P. 73-79.
- [26] *Thamaraichelvi B., Yamuna G.* Hybrid firefly swarm intelligence based feature selection for medical data classification and segmentation in SVD - NSCT domain // *International Journal of Advanced Research*. - 2016. - Vol. 4(9). - P. 744-760.
- [27] *Timmis J., Neal M., Hunt J.* An artificial immune system for data analysis // *BioSystems*. - 2000. - № 55 (1). - P. 143-150.
- [28] *Umapathy P., Venkateshaiah C., Arumugam M.S.* Particle Swarm Optimization with Various Inertia Weight Variants for Optimal Power Flow Solution // *Discrete Dynamics in Nature and Society*. - 2010. - URL: <http://dx.doi.org/10.1155/2010/462145> (дата обращения: 15.05.2018)
- [29] *Zhan Z., Zhang J., Li Y., Chung H.S.* Adaptive Particle Swarm Optimization // *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*. - 2009. - Vol. 39. - P.1362-1381.
- [30] Molecular descriptors [Электрон.ресурс]. - 2017. - URL: <https://www.molinstincts.com/features/features03.html> (дата обращения: 15.03.2018)
- [31] Python implementation of Particle Swarm Optimization [Электрон.ресурс]. - 2017. - URL: <http://yarpiz.com/463/ypea127-python-implementation-particle-swarm-optimization-psy> (дата обращения: 15.03.2018)
- [32] Particle swarm optimization for non-linear programming [Электрон.ресурс]. - 2011. - URL: <http://github.com/swax/SwarmNLP> (дата обращения: 29.11.2017)
- [33] Tribes particle swarm optimization technique [Электрон.ресурс]. - 2013. - URL: <http://tribespsy.codeplex.com> (дата обращения: 14.03.2017)

## References

- [1] Ahmad I., «Feature Selection Using Particle Swarm Optimization in Intrusion Detection», *International Journal of Distributed Sensor Networks* 11 (2015), accessed on March 28, 2018, <https://doi.org/10.1155/2015/806954>
- [2] Bin J., Zhigang L. and Xingsheng G., «A dynamic inertia weight particle swarm optimization algorithm», *Chaos, Solitons and Fractals* 37 (2008): 698-705.
- [3] Carkli Y.B., Sertkaya C. and Yurtay N., «Prediction of secondary structures of hemoglobin using clonal selection algorithm», *Proc. 7th International Workshop on Computer Science and Engineering*(2017): 1387-1391.
- [4] Farsangi M.M., Nezamabadi-pour H. and Lee K.Y., «Implementation of GCPSO for Multi-objective VAr Planning with SVC and Its Comparison with GA and PSO», *Intelligent Systems Applications to Power Systems* (2007), accessed March 15, 2018, DOI:10.1109/ISAP.2007.4441632
- [5] Goodarzi M. and Dejaegher B., «Feature selection methods in QSAR studies», *Journal AOAC Int* 95(3) (2012): 636-651.
- [6] Guo L. et al., «A comparison of various optimization algorithms of protein-ligand docking programs by fitness accuracy», *Journal Molecular modeling* 20(7) (2014): 2251.
- [7] Hall M.A., «Correlation-based Feature Selection for Machine Learning». PhD diss., The University of Waikato, 1999.
- [8] Jena P.K. and Parhi D.R., «A Modified Particle Swarm Optimization Technique for Crack Detection in Cantilever Beams», *Arabian Journal for Science and Engineering* 40 (2015): 3263–3272.
- [9] Jia Y. et al., «Generating Software Test Data by Particle Swarm Optimization», *Materials of Asia-Pacific Conference on Simulated Evolution and Learning* (2014): 37-47.
- [10] Jukasik S. and Kowalski P., «Fully Informed Swarm Optimization Algorithms: Basic Concepts, Variants and Experimental Evaluation», *Proceedings of the 2014 Federated Conference on Computer Science and Information Systems 2* (2014):155–161.
- [11] Kennedy J. and Eberhart R.C., «Particle swarm optimization», *IEEE International Conference on Neural Network* (1995): 1942-1948.
- [12] Khan S.U. et al., «A Modified Particle Swarm Optimization Algorithm for Global Optimizations of Inverse Problems», *IEEE Transactions on Magnetics* 52 (2016), accessed March 17, 2018, DOI:10.1109/TMAG.2015.2487678.
- [13] Lasisi A., Ghazali R. and Chiroma H., «Utilizing clonal selection theory inspired algorithms and K-means clustering for predicting OPEC carbon dioxide emissions from petroleum consumption», *Advances in Intelligent Systems and Computing* 549 (2017): 101-110.
- [14] Liefvooghe A. et al., «ParadisEO-MOEO: A Software Framework for Evolutionary Multi-objective Optimization», *Studies in Computational Intelligence* 272 (2010): 87-117.
- [15] Liu F. and 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): 147-156.
- [16] Moraglio A., Di Chio C. and Poli R., «Geometric Particle Swarm Optimization», *EuroGP, LNCS* 445 (2007): 125-135.
- [17] Mu A., Cao D. and Wang X., «A Modified Particle Swarm Optimization Algorithm», *Natural Science* 1 (2009):151-155.
- [18] Pichuzhkina A.V., «Metod roya chastic v zadachah optimalnoi orientacii sputnikov». [Particle swarm optimization in problems of optimal orientation of satellites] Master diss., Moscow Institute of Physics and Technology, 2017.
- [19] Samigulina G.A., *Immune network modeling technology for complex objects intellectual control and forecasting system*. USA: Science Book Publishing House, 2015, 172.
- [20] Samigulina G.A. and Massimkanova Zh.A., «Computer modeling og new drugs based on the methods of swarm intelligence and immune network modeling», *Bulletin of national technical university "KHPI"* 50(1271) (2017): 88-94.
- [21] Samigulina G.A. and Massimkanova Zh.A., «Ontologicheskie modeli algoritmov roevogo intellekta dlya immunnosetevogo modelirovaniya lekarstvennyh preparatov». [The ontological models of swarm intelligence algorithm for immune network modeling of medical drugs] *Bulletin of Al-Farabi Kazakh national university: Mathematics, Mechanics and Computer Science Series* 1(93)(2017): 92-104.
- [22] Samigulina G.A., Samigulina Z.I., «The construction of an optimal immune network model for forecasting the properties of unknown drug compounds on the basis of multialgorithmic approach», *Problems of informatics* 2 (2013): 21-29.

- [23] Samigulina G.A., Samigulina Z.I., «Primenenie sovremennykh metodov Data Mining dlya prognozirovaniya zavisimosti "structura-svoistvo"khimicheskikh soedineniyi sulfanilamodov», [Application of modern methods of Data Mining for prediction "structure/property"relationship of chemical compounds of sulfonamides] *Problems of evolution of open systems* 19 (2017): 99-107.
- [24] Shen H., Zhao Y., «An improved cooperative PSO algorithm», *Mechatronic Science, Electric Engineering and Computer* (2011), accessed November 19, 2017, DOI: 10.1109/MEC.2011.6025643
- [25] Shi Y. and Eberhart R.C., «A modified particle swarm optimizer», *Proceedings of Congress on Evolutionary Computation* (1998): 79-73.
- [26] Thamaraichelvi B. and Yamuna G., «Hybrid firefly swarm intelligence based feature selection for medical data classification and segmentation in SVD - NSCT domain», *International Journal of Advanced Research* 4(9) (2016): 744-760.
- [27] Timmis J., Neal M. and Hunt J., «An artificial immune system for data analysis», *BioSystems* 55 (1) (2000): 43-150.
- [28] Umopathy P., Venkateshaiah C. and Arumugam M.S., «Particle Swarm Optimization with Various Inertia Weight Variants for Optimal Power Flow Solution», *Discrete Dynamics in Nature and Society* (2010), accessed May 15, 2018, <http://dx.doi.org/10.1155/2010/462145>.
- [29] Zhan Z. et al., «Adaptive Particle Swarm Optimization», *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* 39 (2009): 1362-1381.
- [30] «Molecular descriptors», accessed March 15, 2018, <https://www.molinstincts.com/features/features03.html>
- [31] «Python implementation of Particle Swarm Optimization», accessed March 15, 2018, <http://yarpiz.com/463/ypea127-python-implementation-particle-swarm-optimization-pso>
- [32] «Particle swarm optimization for non-linear programming», accessed November 19, 2017, <http://github.com/swax/SwarmNLP>
- [33] «Tribes particle swarm optimization technique», accessed March 14, 2017, <http://tribespsocodeplex.com>