



## Семинар “Индустриальная математика” в Лаборатории Чебышева

Вторник, 9 ноября 2021, 15:30 (Moscow time, GMT+3),  
ауд. 120, 14-я линия В.О. 29

**Zoom ID: 856 1900 9884, password: ind**

### Задача молекулярного докинга



Дмитрий Павлов, СПбГУ

В докладе будет рассказано о различных методах решения задачи нахождения оптимального расположения и конформации небольшой органической молекулы (лиганда) в белковой молекуле. Критерием оптимизации является энергия электростатического взаимодействия атомных ядер и электронов. Задача является вычислительно сложной на трёх уровнях: (i) вычисление энергии в строгом смысле требует решения уравнения Шрёдингера на волновые функции электронов, что невозможно сделать при том количестве атомов, которое встречается на практике; (ii) каждая конформация определяется набором из нескольких углов поворота, и, таким образом, задача оптимизации решается в многомерном пространстве с большим количеством локальных минимумов; (iii) в фармакологической практике задача докинга решается в массовой постановке, для десятков тысяч лигандов с одним и тем же белком. В существующем ПО для молекулярного докинга применяется широкий спектр методов локальной и глобальной оптимизации и существенно различающиеся подходы к оценке энергии взаимодействия, от физически корректных аппроксимаций решения уравнения Шрёдингера (методы Хартри-Фока и метод функционала плотности) до чисто эмпирических методов, использующих функции простого вида с коэффициентами, подогнанными под экспериментальные данные. Будут рассмотрены перспективы развития существующих методов в направлении использования современных вычислительных средств и экономии объёма вычислений с использованием специфики практической задачи.

Приглашаются все желающие!

Всю информацию о прошедших и будущих семинарах можно найти на сайте:  
<https://sites.google.com/view/industrial-math-seminar/main>