

Тезисы докладов

Пятой Международной конференции, посвящённой 95-летию со дня рождения члена-корреспондента РАН, академика Европейской академии наук Л. Д. Кудрявцева

- **ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ
ПРОСТРАНСТВА**
- **ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ
ОПЕРАТОРЫ**
- **ПРОБЛЕМЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО
ОБРАЗОВАНИЯ**

Klibanov M. V. Globally convergent convexification method for coefficient inverse problems	235
Lavrentiev M. M., Marchuk A. N. G., Kuzakov D. Fast numerical reconstruction of tsunami source parameters	236
Novikov N. S., Kabanikhin S. I., Shishlenin M. A. Direct method for solving coefficient inverse problems of seismics and acoustics	238
Shestopalov Y. How to overcome non-uniqueness of permittivity reconstruction in inverse waveguide problems	239
Shurup A. S. Numeric modeling of two-dimensional multichannel approach to three-dimensional ocean acoustic tomography problem	241
Vabishchevich P. N. Computational identification of the lowest space-wise dependent coefficient of a parabolic equation	243
Voronina T. A. Recovery of 2015 Illapel Tsunami source and estimation of observational system efficiency by the R-solution method	245
Yagola A. G. A posteriori error estimation for solutions of ill-posed problems	246
Yurko V. A. Inverse problems for the first order integro-differential operators	248
Булатов М. В. Интегро-алгебраические уравнения	250
Васин В. В., Скорик Г. Г. Итерационные фейеровские процессы: теория и приложения	251
Гласко Ю. В., Мегеря В. М. Несколько задач интерпретации и web-ориентированная информационная система относительно месторождений углеводородов	253
Голубков А. А. Обратная задача для уравнения Штурма–Лиувилля по стандартной матрице монодромии изолированной особой точки потенциала	255
Гражданцева Е. Ю. Существование решения задачи Коши о продольных колебаниях упругого стержня с учётом инерции и при внешней нагрузке	257
Григорьев И. В. Численное исследование процессов полимеризации на различных каталитических системах	258
Зотов Л. Фильтрация Пантелеева как регуляризирующий алгоритм для восстановления Чандлеровского возбуждения	260
Камынин В. Л. Некоторые обратные задачи для сильно вырождающихся параболических уравнений на плоскости	261
Каспирович И. Е. Методы самоопределения коэффициентов стабилизации связей	262
Козлов В. Н., Ефремов А. А. Квазианалитические проекционные операторы в задачах синтеза оптимальных систем	263
Кокурин М. Ю. Кластеризация стационарных точек функционала невязки в условно корректных обратных задачах	267
Костин А. Б. Коэффициентная обратная задача с условием нелокального наблюдения	269
Курамшина Г. М. Новые подходы к расчётам силовых полей биологических молекул	272
Лагутин Ю. С. Уменьшение числа параметров в задаче проектирования оптических покрытий	274
Лагутина А. А. Визуализация наноразмерных пор в атомистической структуре тонких плёнок	275
Ланев Е. Б., Бааж О. Об устойчивом решении одной смешанной задачи для уравнения Лапласа	276
Леонов А. С. Эффективный алгоритм апостериорной оценки точности приближенных решений линейных некорректных задач	278
Махлин Д. В., Щеглов А. Ю. О численном восстановлении граничного условия на внутренней сфере по переопределению на внешней в модели функционирования головного мозга	280
Мифтахов Э. Н., Жаворонков Д. А., Мустафина С. А. О решении обратной кинетической задачи процесса полимеризации изопрена в присутствии различных каталитических систем	282
Михайлова Т. А., Мустафина С. И., Михайлов В. А. Использование распределения по времени пребывания в задаче моделирования непрерывного производства синтетического каучука	284

Новые подходы к расчётам силовых полей биологических молекул

Г. М. Курамшина

Москва, Россия

Email: gmkur@yahoo.com

Задачи определения структуры молекул и характера внутримолекулярных взаимодействий из данных молекулярной спектроскопии являются классическим примером обратных задач, в которых по известным из эксперимента величинам необходимо найти косвенно связанные с ними параметры, характеризующие молекулу. В частности, при моделировании физико-химических свойств биологических молекул используются данные о молекулярных силовых полях фрагментов, входящих в биологическую систему. Значительные размеры биологических молекул и не очень большое число известных для них экспериментальных данных приводят к тому, что практически все задачи интерпретации спектрального эксперимента становятся недоопределёнными и, как следствие, относятся к классу некорректно поставленных обратных задач. По этой причине в различных исследованиях вводятся те или иные ограничения на получаемые решения, основанные на различных допущениях, и, в итоге, результаты решения обратных задач могут оказаться несравнимыми. Для преодоления подобных трудностей в наших работах были предложены устойчивые методы решения ряда обратных задач структурной химии, в частности, задач определения молекулярного силового поля и геометрических параметров молекул в рамках теории регуляризации нелинейных некорректных задач [1].

Появившийся в последние два десятилетия новый источник информации о структуре и свойствах молекул — квантовомеханические расчёты — позволяет ввести новые принципы отбора из множества решений обратной задачи, в частности, путём включения различных ограничений на структуру матрицы силовых постоянных, определяющей силовое поле молекулы, на основе анализа результатов расчётов и непосредственно использовать представления о т.н. переносимости молекулярных силовых полей в рядах родственных соединений (т.н. «data-base approach»). Созданные оригинальные новые алгоритмы расчёта силовых полей многоатомных молекул в декартовых координатах позволяют решить проблемы, связанные с неоднозначностью выбора систем обобщённых координат при анализе силовых полей сложных молекулярных систем.

Созданные алгоритмы использованы для решения обратных задач нахождения регуляризованных квантовохимических силовых полей в декартовых координатах для мелатонина, витамина B6, их метаболитов и производных.

Работа поддержана грантом №18-03-00412 РФФИ.