

ІНСЕРЦІЙНА СЕМАНТИКА КВАНТОВИХ ВЗАЄМОДІЙ

У статті розглядається застосування методу інсерційного моделювання, а саме – теорії агентів та середовищ на основі алгебри поведінок, до моделювання експериментів, спрямованих на вивчення фізичних, хімічних та біологічних процесів.

Даний підхід використовує багаторівневу модель взаємодій, в основі якої лежать знання про квантові взаємодії в середовищі атомів та молекул. Усі інші види взаємодій (міжмолекулярні взаємодії, хімічні реакції, взаємодії біологічних об'єктів тощо) розглядаються та моделюються як наслідки формалізованих законів квантової взаємодії. Застосування алгебраїчного підходу дозволяє розглядати як експерименти що стосуються вивчення властивостей певного процесу та визначення його кінцевого результату в термінах середовища експерименту, так і можливість оберненого моделювання, коли задано «кінцевий результат» (властивості певної фізичної сутності – речовини або процесу) та необхідно знайти початкові параметри і відповідні дії, що приводять до нього.

У статті наведено приклади формального представлення основних агентів, що розглядаються у моделях, їхні взаємодії, а також дослідження властивостей речовини на прикладі виявлення речовини з магнітоелектричними властивостями.

Ключові слова: інсерційне моделювання, квантові взаємодії, молекулярне моделювання, алгебраїчне моделювання

Вступ

Вивчення квантових взаємодій відіграє надзвичайно важливу роль у створенні нових можливостей для науки, техніки, медицини, комунікації, безпеки та інших сфер діяльності людини.

Квантові взаємодії лежать в основі механізмів виникнення та властивостей сили взаємодії електромагнітної природи між молекулами, що дозволяє розглядати процеси утворення та декомпозиції молекул за різних значень параметрів середовища – температури, тиску, наявності каталізаторів та інших факторів на найнижчому рівні абстракції. Таким чином, вивчення квантових взаємодій розглядається як одна із основних можливостей у відкритті нових речовин із корисними властивостями (суперпровідність, суперпластичність, квантові точки, магнітоелектричність тощо), оскільки дозволяє зрозуміти структуру та властивості речовини на мікроскопічному рівні, а також процеси, які відбуваються в атомах, молекулах, кристалах, наночастинках та інших квантових системах. Сьогодні особливу увагу привертають дослідження, спрямовані на виробництво сильних магнітів [1,2], дослідження поведінки електронів та, зокрема, «квантової запутаності» [3-5], відкриття нових форм надпровідності [6], отримання чистої

енергії [7] тощо. Важливу роль для здійснення досліджень у даних напрямках відіграють методи та системи молекулярного моделювання, зокрема, системи комп'ютерного молекулярного моделювання.

Моделювання взаємодій між мікрота макромолекулами на квантовому рівні дозволяє маніпулювати електронними, магнітними, оптичними та іншими характеристиками речовини, а також розглядати можливості створення нових хімічних зв'язків, молекулярних структур, фазових переходів, квантових станів та ін. Застосування методів квантової механіки для з'ясування закономірностей поведінки мікросистеми дозволяє поширити квантовомеханічний підхід на опис фізичних властивостей макросистем, таких як, твердих тіл та рідин, які складаються з великої кількості окремих атомів чи молекул.

Застосування методів моделювання як для неперервних, так і для дискретних моделей, відбувається за допомогою різних підходів: статистичного, ймовірнісного, імітаційного, візуального. Формальні математичні специфікації для опису знань про поведінку атомів, молекул, іонів використовуються в програмних системах, існують стандарти мов формалізованих хімічних та біологічних об'єктів. Наприклад,

формат моделей SBML для обміну та зберігання біологічних моделей, що має широку системну підтримку. Моделювання відбувається як на рівні взаємодії речовин, так і на молекулярному та атомному рівнях. До категорії квантово-хімічних методів обчислень належать такі методи як метод Гартрі-Фока, методи кореляції, теорія функціоналу густини (DFT) та ін.[8,9].

Одним із найпопулярніших методів чисельних квантово-механічних обчислень в обчислювальній фізиці та квантовій хімії є теорія функціоналу густини [10-13]. Проте, не зважаючи на популярність та широке застосування, метод має певні недоліки, такі як складність представлення міжмолекулярних взаємодій. Зокрема, у врахуванні дисперсійної взаємодії, перенесенні заряду, перехідних станів, тощо [10-12]. Окрім того, хоча обчислювальне навантаження даного методу порівняно з іншими традиційними методами (метод Гартрі-Фока та його сучасні модифікації [13]) значно менше, його вартість з точки зору обчислень залишається досить високою.

Тож, зважаючи на значну складність обчислень та досліджуваних моделей, велику кількість задач в біохімії та біофізиці не може бути ефективно розв'язано за допомогою традиційних методів моделювання через нескінченну кількість можливих сценаріїв поведінки об'єктів. Хоча стохастичне (ймовірнісне) та конкретне імітаційне моделювання ілюструє процеси з точністю до емпіричних даних, повний розгляд множини нескінченних сценаріїв поведінки досліджуваних об'єктів важко здійснити. Одним із потужних інструментів, що набуває сьогодні широкого застосування в біологічних дослідженнях, є нейронні мережі [14-16]. Системи штучного інтелекту (ШІ), побудовані на базі тих чи інших нейронних мереж уже сьогодні дозволяють розв'язувати багато актуальних задач. Так, наприклад, як одна із можливостей підвищення ефективності обчислень традиційних методів моделювання енергії та сил атомних систем, зокрема, методу теорії функціоналу густини, розглядається застосування графових нейронних мереж [17].

Важливою є можливість імплементації у системи ШІ вже існуючих методів молекулярного моделювання (методів молекулярного докінгу, молекулярної механіки, гібридних квантово-механічних/молекулярно-механічних симуляцій) та глибоких моделей навчання для прогнозування структури, енергії, кінетики та термодинаміки взаємодії молекул. З іншого боку, зважаючи на ряд недоліків використуваних на сьогодні методів, ми не можемо стверджувати, що отримані нейронною мережею/системою штучного інтелекту результати не є помилковими, хоча дійсно будуть такими, що звужують пошук. Відповідно, постає необхідність у додаткових експериментах та перевірці, підтвердженні отриманих результатів.

Розвиток алгебраїчних систем – машин розв'язування, автоматичного доведення теорем поклав початок новим дослідженням за допомогою символного моделювання, що дало змогу виводити необхідні знання із множини формалізованих законів. Як бачимо, основна ідея нашого дослідження полягає у застосуванні технології алгебраїчного моделювання та квантово-хімічного апарату для моделювання та перевірки експериментів в галузі фізики, хімії, біології.

Використання алгебраїчної техніки, а саме, – теорії інсерційного моделювання (алгебраїчне моделювання взаємодії агентів та середовищ), створеної видатним академіком О. А. Летичевським (1935-2019), дає змогу здійснювати дослідження на різних рівнях абстракції та оперувати із нескінченними сутностями, що було підтверджено відповідними дослідженнями у галузі розробки надійних систем в електронній промисловості, а також в різних індустріях нашої країни та США.

У даній статті ми розглядаємо можливості та приклади застосування теорії інсерційного моделювання до моделювання квантових взаємодій. У першому розділі статті надано стислий опис застосовуваного методу та інструментів. У другому та третьому розділах наведено приклади формального представлення основних агентів, що розглядаються у моделях (елементарні частинки, атоми, молекули) та їх вза-

емодії, представлено список деяких досліджуваних властивостей.

Опис підходу

Для моделювання експериментів в царині фізики, хімії та біології з урахуванням необхідності багаторівневого моделювання, в основі якого розглядається моделювання квантових взаємодій, ми пропонуємо алгебраїчний підхід, який реалізується в рамках системи інсерційного моделювання IMS [18], розробленої на базі алгебраїчної системи програмування APS [19].

Інсерційне моделювання зосереджується на побудові моделей та вивченні взаємодії агентів та середовищ у складних багатоагентних системах [20]. Для представлення специфікацій вимог використовується мова алгебраїчних специфікацій дій агентів в алгебрі поведінок. Дія являє собою перехід стану агента з перед- та післяумовою, що представлені логічними формулами в певній теорії. Семантика дій дозволяє створювати конкретні та символічні моделі на різних рівнях абстракції. Таким чином, як математичне уточнення поняття агента ми використовуємо транзитивну систему. Вона є найбільш абстрактною математичною концепцією, моделюючою систему, яка розвивається з часом. У рамках методу інсерційного моделювання квантових взаємодій ми використовуємо специфікації алгебри поведінки для формалізації [18,20]. Як базова логічна мова використовується множина формул логіки першого порядку над поліноміальною арифметикою.

Усі основні концепції, такі як середовище, агенти, базові протоколи, алгебра поведінки тощо, розглядаються у статті на прикладі формалізації будови речовин, молекул, атомів та елементарних частинок (протони, електрони), їхньої взаємодії та зміни їхніх властивостей/характеристик під дією температури, магнітного поля тощо.

Вся семантика фізичних та хімічних взаємодій для моделювання на рівні квантово-хімічного середовища визначається будовою атомів та молекул, а саме будовою ядра, орбіталями, кількістю електронів на відповідних орбіталях та характеристиками електронів. Це забезпечує

підтримку базових можливостей, які, в свою чергу, можуть бути використані в моделюванні сутностей більш високого рівня абстракції.

Для моделювання використовуємо систему Insertion Model Creator (Рис.1.), реалізовану на базі системи інсерційного моделювання IMS. За допомогою цієї системи формалізується предметна область та створюється модель задачі, яка буде розв'язуватись у термінах формальних теорій. Далі модель передається до Алгебраїчного серверу, що поєднує в собі формалізовані математичні теорії та відповідні методи, які працюють із моделями та розв'язують задачі [24]. Зокрема, ми маємо своєрідну базу знань, що містить множину формалізованих знань та теорій з квантової фізики, хімії, біології та інших, що забезпечує багаторівність моделювання.

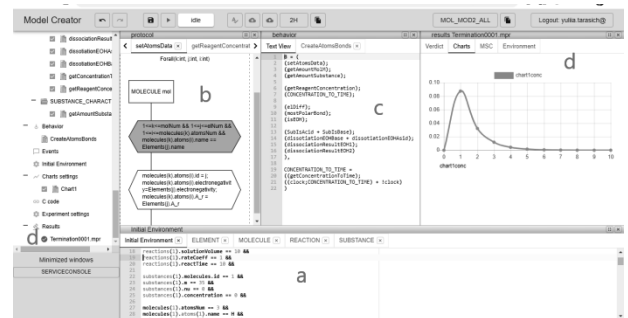


Рис.1. Система Insertion Model Creator: а) Початкова формула середовища, б) Дія, в) Рівняння поведінки, д) Результати моделювання (графіки (для конкретного моделювання), Формула середовища, MSC діаграма,Траса))

Для уникнення можливого явища комбінаторного вибуху через високу складність моделей, що розглядаються, передбачається використання методів нейронних мереж як таких що здатні вказати правильний шлях моделювання. Наприклад, можна визначити можливі варіанти зміни властивостей речовини під дією тих чи інших чинників шляхом оцінки початкового стану середовища, що моделюється. Модель класифікації так само вказує відповідний найефективніший напрямок чи дію, яку треба застосовувати, або відкине напрямки, які ведуть до небажаного результату.

Для моделювання гібридних систем метод алгебраїчного моделювання розширено із можливістю аналітичного розв'язку диференціальних рівнянь, оператори яких є виконуваними алгебраїчними специфікаціями.

Перші результати застосування алгебраїчного підходу до молекулярного моделювання були представлені в [25,26].

Інсерційна семантика міжатомних та міжмолекулярних взаємодій на квантовому рівні

Моделювання взаємодії молекул, органічних та неорганічних речовин на рівні квантово-хімічних механізмів взаємодії потребує визначення властивостей атомів, які входять до їх складу, що говорить про необхідність аналізу їхньої будови та енергетичних станів, що залежать від кількісних та якісних характеристик протонів та електронів як невід'ємних складових кожного атома. Таким чином, для більшості експериментів, протони та електрони розглядаються як складові атома – його основні атрибути. З іншого боку протони та електрони мають власні характеристики та можуть розглядатися як окремі агенти (експерименти з моделювання процесів протонної терапії, роботи прискорювачів частинок, дослідження поведінки електронів тощо). Зважаючи на вищесказане, для формалізації знань найнижчого рівня абстракції – квантових та міжатомних взаємодій, – ми визначаємо такі типи агентів як ELECTRON, PROTON та АТОМ.

Як атрибути агента типу ELECTRON розглянуто такі, значення яких відповідають фізичним властивостям електрона та використовуються для моделювання електрон-електронних, міжатомних та міжмолекулярних взаємодій, а саме: маса електрона (атрибут mass), заряд електрона (charge), магнітний момент електрона (orbitalMagneticMoment), імпульс електрона (electronMomentum), швидкість електрона (speed), спин електрона (spinQuantumNum), радіус орбіти електрона (orbitalRadius). Усі перераховані атрибути є атрибутами дійсного типу.

Розглядаючи агенти типу PROTON для більшості експериментів, ми абстрагуємося від будови протона та деяких інших атрибутів та розглядаємо лише такі характеристики як маса та заряд частинки – атрибути mass та charge дійсного типу.

Агентом типу АТОМ є частинка, що складається з позитивно зарядженого ядра (до складу якого входять протони та нейтрони) і електронів, які обертаються навколо ядра на різних енергетичних рівнях. Відповідно, використовуючи даний тип агента ми можемо розглядати у моделі як власне самі атоми, так і іони та ізотопи атомів. Основними атрибутами, які визначають даний тип агенту, є:

– атрибути цілочисельного типу: protonsNum, neutronsNum, та electronsNum, які відповідно, визначають кількість протонів, нейтронів та електронів атома/іона/ізотопа; massNumber – масове число, тобто сумарна кількість протонів і нейтронів у ядрі атома (використовується для визначення кількості нейтронів); principalQuantumNum – головне квантове число; orbitalQuantumNum – побічне/орбітальне квантове число; magneticQuantumNum – магнітне квантове число; bondingAbility – кількість зовнішніх/валентних електронів

– атрибути дійсного типу nuclearCharge – заряд ядра; charge – заряд атома/іона; mass – маса атома; ionizationEnergy – енергія іонізації; electronAffinityEnergy – енергія спорідненості до електрону (електронна афінність); electronegativity – електронегативність; radius – радіус атома/іона; effectiveQuantumNum – значення ефективного квантового числа; effectiveCharge – значення ефективного заряду; dipoleMoment – дипольний момент.

– атрибути функціонального типу: electrons(int,int,int,int) – >ELECTRON – зберігає список електронів даного атома. Набуває таких параметрів: номер рівня, номер підрівня, номер орбіталі, номер електрона на орбіталі та повертає агента типу ELECTRON;

– Orbital: (int,int,int) – >int- набуває номер рівня, номер підрівня, номер ор-

біталі і повертає кількість електронів, які знаходяться на даній орбіталі.

Для визначення початкових значень атрибутів агентів типу АТОМ, заданих іменем відповідного елемента періодичної таблиці, подальшого визначення атомної будови молекул/речовин та можливості забезпечення багаторівневості моделювання, визначено атрибут `name` та введено перелічувальний тип `Periodic_Elements {H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg,...}`, який містить усі назви елементів періодичної таблиці.

Для збереження списку атомів, які розглядаються у моделях, використовується функціональний атрибут `atoms: (int) ->АТОМ`. Даний атрибут може бути як атрибутом середовища, в якому взаємодіють агенти, так і атрибутом агента більш високого рівня, зокрема, молекули. Для визначення кількості атомів, які розглядаються у моделі, використовується цілочислений атрибут `atomsNum`.

Початкові значення усіх атрибутів середовища (температура, тиск, магнітне поле) та атрибутів агентів задаються початковою формулою середовища та можуть бути задані як конкретно, так і символічно. Наприклад, ми виконуємо конкретне моделювання. Тоді атрибути агентів та середовища матимуть конкретні значення. Для агента типу АТОМ, який відповідає хімічному елементу Водень фрагмент початкової формули матиме наступний вигляд:

```
atoms(1).name == H &&
atoms(1).principalQuantumNum == 1 &&
atoms(1).massNumber == 1 &&
atoms(1).electronegativity == 2.2 &&
atoms(1).Orbital(1,0,1) == 1 &&
atoms(1).electronspinQuantumNum(1,0,1,1)
== 0.5 &&
atoms(1).protonsNum == 1 &&
atoms(1).neutronNum ==
atoms(1).massNumber -
atoms(1).protonsNum &&
atoms(1).electronsNum == 1 &&
atoms(1).nuclearCharge ==
atoms(1).protonsNum * proton.charge && ...
```

Досяжність властивості ми також аналізуємо, використовуючи конкретні значення. Виконуючи конкретне моделювання, ми можемо будувати та аналізувати

графіки (наприклад, зміна концентрації речовини у процесі реакції залежно від зміни температури тощо), але даний експеримент буде проходити в межах єдиного сценарію.

Будуючи символічну алгебраїчну модель, ми можемо задавати атрибутам агенту довільні початкові значення, наприклад: `atoms(1).name == H &&`
`atoms(1).principalQuantumNum == 1 &&`
`1 <= atoms(1).massNumber <= 2 &&`
`atoms(1).electronegativity == 2.2 &&`
`atoms(1).Orbital(1,0,1) == 1 &&`
`atoms(1).electronspinQuantumNum(1,0,1,1)`
`== 0.5 &&`
`atoms(1).protonsNum == 1 &&`
`atoms(1).neutronNum ==`
`atoms(1).massNumber -`
`atoms(1).protonsNum &&`
`0 <= atoms(1).electronsNum <= 1 &&`
`atoms(1).nuclearCharge ==`
`atoms(1).protonsNum * proton.charge && ...`

У даному випадку формула початкового стану експерименту визначає множину можливих сценаріїв, і заданий агент буде розглядатися як атом Водню, або ізотоп Водню, або іон Водню. Такі початкові формули, або алгебраїчні констрейнти можуть бути як завгодно складні. Тоді на кожному кроці алгебраїчного моделювання ми будемо отримувати вже не конкретні числові значення атрибутів, а формулу, що покриває множину сценаріїв. І кінцевим результатом буде не один сценарій, що досягає шуканої властивості, а саме всі сценарії із початкової формули, в яких ця властивість досяжна.

Взаємодії агентів формалізовані за допомогою формальних дій та розглядаються як поведінкові рівняння. Знайти сценарій у вигляді послідовності дій, що веде до шуканої властивості можливо саме через розв'язання поведінкового рівняння, а розв'язок знаходиться за допомогою алгебраїчного моделювання.

Алгебраїчне моделювання є пошуком послідовностей дій в рамках алгебри поведінок. Кожна дія представляє множину переходів, що можливі на кожному кроці моделювання для агента. Результатом буде множина можливих станів, що приводять до певної цілі моделювання.

Як приклад, фрагмент формалізації поведінки моделі, що розглядає утворення міжатомних зв'язків, має наступний вигляд:

```
CREATE_BOND =
(getAtomsBondEnergy; (createIonicBond .
RECALCULATION_ATOMS_DATA +
CreateNonPolarMol .
RECALCULATION_ATOMS_DATA +
CreatePolarMol .
RECALCULATION_ATOMS_DATA +
CreateMetalMol .
RECALCULATION_ATOMS_DATA +
repulsion);
(changeTime.CREATE_BOND +
!changeTime.Delta)),

RECALCULATION_ATOMS_DATA =
(RewriteAtom1Orbitals;
RewriteAtom2Orbitals;
changeAtomsCoordinates; getdistance;
DEFINE_ATOM_CHARACTERISTICS),

DEFINE_ATOM_CHARACTERISTICS = (
getLastLevelElNum;
GET_EFFECTIVE_QUANTUM_NUM;
getAtomMass;
getAtomCharge;
GET_BONDING_ABILITY;
GET_SHIELDING_CONSTANT;
getEffectiveCharge;
getAtomRadius; getTotalElEnergy;
GET_ATOMS_CATIONS_DATA;
GET_ATOMS_ANION_DATA;
getIonizationEnergy;
getElectronAffinityEnergy;
getMallikenElectronegativity)
```

Зазначена поведінка складається з таких дій як `getAtomsBondEnergy` – визначення енергії, необхідної для утворення зв'язку; `createIonicBond` – утворення іонного типу зв'язку, `CreateNonPolarMol` – утворення ковалентного неполярного зв'язку; `CreatePolarMol` – утворення ковалентного полярного зв'язку; `CreateMetalMol` – утворення металічного типу зв'язку; `repulsion` – відштовхування між атомами; `changeTime` – зміна часу (дозволяє моделювання перебігу експерименту в часі), а також поведінок `RECALCULATION_ATOMS_DATA` та `DEFINE_ATOM_AGENT_CHARACTERIS`

`TICS`, які складаються з наборів інших дій та поведінок, що дозволяють моделювати зміну значень атрибутів агентів (кількість електронів, які залишилися на зовнішньому рівні, маса, радіус, ефективний заряд та ефективне квантове число, енергія іонізації, електронегативність тощо) залежно від типів утворених між ними зв'язків або можливих результатів взаємодії після відштовхування.

Дії визначаються в мові алгебри поведінки, що представляє собою алгебраїчні специфікації. Кожна дія має передумову її спрацювання та зміну стану агента/агентів.

Як приклад розглянемо дію `CreateIonicMol`, яка визначає утворення іонного зв'язку між атомами:

```
CreateIonicMol = Forall(i:int, j:int, k:int)
((1<=i<=atomsNum && 1<=j<=atomsNum
&& i != j &&
(atoms(i).IonizationEnergy(k) –
atoms(j).ElectronAffinityEnergy(k) +
bondEnergy(i,j)) < 0 &&
atoms(i).electronegativity <
atoms(j).electronegativity &&
atoms(i).bondingAbility !=0 &&
atoms(j).bondingAbility !=0) &&
IFTHE(atoms(i).bondingAbility>=atoms(j).bo
ndingAbility,k==atoms(j).bondingAbility,k==
atoms(i).bondingAbility) &&
(atoms(i).metal==1 && atoms(j).metal==0) )
->
"ATOM#A1: action 'IonicBond';"
(molecules(moleculasNum+1).atoms(molecul
es(moleculasNum+1).atomsNum-1) = i;
molecules(moleculasNum+1).atoms(molecul
es(moleculasNum+1).atomsNum) = j;
molecules(moleculasNum+1).bondEnergy(i,j)
= bondEnergy(i,j);
molecules(moleculasNum+1).bondType(i,j) =
ionic;
molecules(moleculasNum+1).bondV(i,j) = k;
molecules(moleculasNum+1).relativeMolecul
arMass = atoms(i).atomicMass +
atoms(j).atomicMass;
atoms(i).bondingAbility =
atoms(i).bondingAbility – k;
atoms(j).bondingAbility =
atoms(j).bondingAbility – k;
atoms(i).electronsNum =
atoms(i).electronsNum +k ;
atoms(j).electronsNum =
```

atoms(j).electronsNum-k;
moleculesNum=moleculesNum+1),

У передумові ми визначаємо дію для усіх агентів типу АТОМ (визначається умовою $1 \leq i \leq \text{atomsNum}$ та функціоналами atoms(i), atoms(j)), але обираємо два з них, характеристики (значення атрибутів) яких відповідатимуть сукупності наступних умов утворення іонного зв'язку:

– 1) atoms(i).IonizationEnergy(k) – atoms(j).ElectronAffinityEnergy(k) + bondEnergy(i,j) < 0 – дана умова відповідає визначенню енергетичної вигідності утворення іонної молекули. Тобто даний зв'язок буде утворено за умови, що реакція утворення молекули $A^+ + B^-$ є екзотермічною ($\Delta H = I_A - \epsilon_B + U_0 < 0$, де I_A – енергія іонізації атома А, ϵ_B – енергія спорідненості до електрона атома В, U_0 – кулонівська енергія взаємодії).

– 2) atoms(i).bondingAbility != 0 && atoms(j).bondingAbility != 0 – тут ми перевіряємо які атоми мають вільні електрони, а, отже, – можуть брати участь в утворенні зв'язку (атрибут bondingAbility агента типу атом визначає наявну кількість зовнішніх електронів (валентність)).

3) умова atoms(i).electronegativity < atoms(j).electronegativity визначає, що атоми (i) та (j) мають різну електронегативність, та відповідно дозволяє визначити атом, який забере електрони в результаті утворення зв'язку (i), та атом, який віддасть свої електрони (j).

4) $\text{IFTHE}(\text{atoms}(i).\text{bondingAbility} \geq \text{atoms}(j).\text{bondingAbility}, k == \text{atoms}(j).\text{bondingAbility}, k == \text{atoms}(i).\text{bondingAbility})$ визначає кількість електронів (k), які «братимуть участь» в утворенні зв'язку. Тобто, якщо атом, який забирає електрони, потребує більшої кількості електронів (atoms(i).bondingAbility), ніж та, яку може віддати інший атом (atoms(j).bondingAbility), то $k = \text{atoms}(j).\text{bondingAbility}$, а в іншому випадку $k = \text{atoms}(i).\text{bondingAbility}$.

5) atoms(i).metal == 1 && atoms(j).metal == 0 – перевіряємо, чи один із агентів належить до металів, що визначає, що саме іонний тип зв'язку буде утворено.

Зміна стану визначається постумовою дією та відповідає змінам значень атрибутів агентів, але буде виконана лише у разі, якщо передумова дії виконувана. Для дії CreateIonicMol зміна стану середовища визначає зміну значень атрибутів агентів типу АТОМ, які беруть участь в утворенні зв'язку (bondingAbility, electronsNum) та відповідно утворення нового агента типу MOLECULE (визначається функціоналом molecules(moleculesNum+1)) та визначенням значень деяких її атрибутів (енергія зв'язку – bondEnergy, тип зв'язку – bondType, порядок зв'язку – bondV).

Алгебраїчне моделювання експерименту

Завданням більшості фізичних, хімічних, біологічних експериментів є визначення корисних/необхідних властивостей речовин, або пошук речовини, яка відповідатиме заданим властивостям. За приклад розглянемо експеримент, спрямований на пошук молекулярного магніта або магнітоелектрика, який існуватиме за умови заданої температури.

Для моделювання даного експерименту ми використовуємо знання про електронну будову молекули, формалізовані правила міжатомних та міжмолекулярних взаємодій для визначення характеристики молекули, визначаємо можливість досягнення сценарію за якого суміш молекул/речовин під дією чинників середовища (зміна температури, тиску, тощо) утворить молекулу/речовину із шуканими властивостями.

Усі молекули розглядаються як агенти типу MOLECULE, який з одного боку може розглядатися як агент, що може взаємодіяти з наявними у середовищі атомами та зарядженими частинками, так і виступає агентом вищого рівня, середовищем взаємодії для тих атомів та частинок, з яких складається. Атрибути агента типу MOLECULE представлені числовими значеннями наступних величин: функціонал, що відображає набір атомів, з яких дана молекула складається (atoms), електронна конфігурація молекули (MolOrbital), довжина зв'язку (d_bond),

енергія зв'язку (BondEnergy), дипольний момент (DipoleMoment), молярна маса (M_r), порядок зв'язку (bondMO – за методом молекулярних орбіталей, bondV – за методом валентних зв'язків), тип зв'язку (bondType) тощо.

Оскільки, магнітоелектрик – це матеріал, який за певної температури одночасно є сегнетоелектриком (речовини, які мають спонтанний дипольний електричний момент в одній із кристалічних фаз, що існує в певному діапазоні температур) і парамагнетиком (речовини з невеликою позитивною магнітною сприйнятливістю, які у зовнішньому магнітному полі намагнічуються вздовж поля і дещо підсилюють його). Одночасно йому притаманна магнітострикція (деформація кристалічної структури під дією магнітного поля). Визначення відповідності утворюваного матеріалу вказаним властивостям визначається представленою нижче формулою властивості:

*19 <= Temperature <= 26 && /*маємо кімнатну температуру*/*

*molecule(i). isFerroelectrician == true && /*речовина за заданої температури є сегнетоелектриком*/*

*molecule(i). isParamagnet == true && /*речовина за заданої температури є парамагнетиком*/*

*molecule(i). isCrystalStructureChanged == true /*речовина змінила свою структуру під дією магнітного поля (змінено конфігурацію електричних диполів і, отже, поляризацію)*/*

Алгебраїчне моделювання експерименту відбувається відповідно до поведінкових рівнянь пошуком послідовності дій, що приводять до шуканої властивості. Водночас генерується множина символічних сценаріїв поведінки агентів із використанням довільних значень атрибутів середовища, які можуть бути задані констрейнтами. Досяжність даної формули говорить про досяжність вказаної властивості за певних початкових параметрів середовища (характеристики речовин, з яких буде утворено сплав, початкові значення та коефіцієнти зміни температури, магнітного поля тощо), а саме набуття отриманою ре-

човиною магнітоелектричних властивостей за заданої температури.

Обернене алгебраїчне моделювання дає змогу визначити конкретні початкові дані, за яких досяжність досліджуваної властивості можлива. Обернене моделювання відбувається як моделювання від заданих властивостей до можливої множини початкових атрибутів згідно поведінкового рівняння, що визначають усі можливі взаємодії на даному рівні абстракції. Наприклад, визначення оптимальних показників температури та часу нагрівання/охолодження сплаву, що мають привести до утворення речовини із необхідною електронною будовою тощо.

Представлення сутностей на вищому рівні, що спирається на типи агентів нижчих рівнів, організовується аналогічно. Для речовин, що представлені певним складом молекул, ми розглядаємо допоміжні атрибути. Наприклад, кількість речовини, концентрація. Відповідно до завдання експерименту ми визначаємо атрибути середовища такі, як температура, тиск, наявність та характеристики магнітного поля тощо. Таким чином ми вибудовуємо багаторівневу систему знань, націлену на розв'язання відкритих задач в галузях фізики, хімії, біології та на їх перетині. Дана система знань представляє повний формальний опис моделей, що розглядаються, алгебраїчною мовою та дозволяє виконувати моделювання експериментів на різних рівнях абстракції – від квантових взаємодій до взаємодій між біологічними об'єктами.

Висновки

На сьогодні розроблено досить велику кількість підходів, алгоритмів та засобів побудови моделей, що розглядають міжмoleкулярні та міжмолекулярні взаємодії, біофізичні, біохімічні процеси та біологічні системи, однак наявність цілої низки відкритих проблем у галузях органічної та неорганічної хімії, фізики, біології говорить про необхідність удосконалення старих та пошуку нових підходів, інструментів та методів проведення досліджень оригінальних властивостей органічних та неорганічних

речовин. Зокрема, – досліджень із вивчення фізіологічних, біохімічних, фізико-хімічних, молекулярних та квантово-хімічних механізмів їх взаємодії. Окрім необхідності удосконалення та комбінації відомих обчислювальних інструментів, постає необхідність у розробці нових алгоритмів використання квантово-хімічного апарату для аналізу насамперед міжмолекулярних взаємодій, які є базисом для моделювання складних молекул та матеріалів.

Одним із методів, здатним вирішити більшість відкритих питань, є алгебраїчне моделювання, застосування якого, на відміну від інших методів, дає змогу здійснювати дослідження на різних рівнях абстракції та оперувати із нескінченними сутностями. Перевага даного підходу полягає у тому, що знання представляються у алгебраїчному вигляді, зокрема, поведінкових рівнянь. Тож, на відміну від традиційного імітаційного, ймовірнісного моделювання, як, наприклад, у методах докінгу, де передбачається пошук положень молекул для визначення максимальної енергії зв'язності, необхідне розв'язання відповідних рівнянь, що в багатьох випадках дозволяє уникати проблеми експоненційного вибуху. Зважаючи на складність моделей, які розглядаються, додатковим інструментом, що дозволяє уникнути можливого явища комбінаторного вибуху, є застосування методів ШІ та методів обробки Big Data, як таких, що здатні вказати правильний шлях моделювання. Окрім того, застосування алгебраїчного підходу дає можливість виводити наслідки із існуючих законів, а, отже, – може дати нові факти та теорії, що дозволять розв'язати складні завдання. Іншими словами, застосування алгебраїчного підходу у поєднанні з методами нейронних мереж дозволяє визначити та формально довести певні властивості об'єктів (у даному випадку – заряджених частинок, атомів, органічних та неорганічних речовин, клітин, вірусів тощо) процесів, пошук об'єктів чи необхідних значень їхніх параметрів, які відповідають заданим властивостям.

На даному етапі досліджень нами розроблено методологію формалізації складних органічних та неорганічних речовин,

хімічних процесів та реакцій, в основі якої лежить формалізація взаємодії атомів та молекул на рівні квантових взаємодій. Моделювання речовин та їх взаємодії на рівні їхньої атомної будови дає механістичне розуміння їхньої поведінки, а використання формальних алгебраїчних методів дозволяє доводити властивості та знаходити релевантні сценарії для ефективного аналізу поведінки різних об'єктів у реальному часі, розглядаючи не окремі сценарії, а множини можливих поведінок.

В основі подальших досліджень – продовження роботи над формалізацією знань квантової фізики та хімії, органічної хімії, біохімії для розширення бази знань системи моделювання. На основі отриманих результатів передбачається продовження розробок формального опису та моделювання процесів міжклітинної та внутрішньоклітинної взаємодії, протонної терапії, досліджень властивостей органічних та неорганічних речовин на базі квантових взаємодій.

Література

1. Метал із космосу може зробити революцію в електроніці – від iPhone до винищувачів (2023) ФОКУС. Available at: <https://focus.ua/uk/digital/587710-metal-iz-kosmosu-mozhe-zrobiti-revoluciyu-v-elektronici-vid-iphone-do-vinishuvachiv> (Accessed: 21 November 2023).
2. Direct formation of hard-magnetic tetrataenite ... – Wiley Online Library. Available at: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/adv.202204315> (Accessed: 21 November 2023).
3. Di Sante, D. et al. (2022) 'Deep learning the functional renormalization group', *Physical Review Letters*, 129(13). doi:10.1103/physrevlett.129.136402.
4. Krenn, M. et al. (2016) 'Automated search for new quantum experiments', *Physical Review Letters*, 116(9). doi:10.1103/physrevlett.116.090405.
5. Husain, A.A. et al. (2023) 'Pines' demon observed as a 3D acoustic plasmon in SR2RUO4', *Nature*, 621(7977), pp. 66–70. doi:10.1038/s41586-023-06318-8.
6. Castro, P. et al. (2023) 'Emergence of the Chern supermetal and pair-density wave through higher-order Van Hove singularities in the Haldane-Hubbard model', *Physical Re-*

- view Letters, 131(2). doi:10.1103/physrevlett.131.026601.
7. Вчені розробляють нову нелінійну схему для отримання чистої енергії (2023) Український телекомунікаційний портал. Available at: <https://portaltele.com.ua/news/nauka/vcheni-rozroblyayut-novu-nelinijnu-shemu-dlya-otrymannya-chystoyi-energiyi.html> (Accessed: 21 November 2023).
 8. Atkins, P. and Friedman, R. (2010) 'The foundations of Quantum Mechanics', Molecular Quantum Mechanics [Preprint]. doi:10.1093/hesc/9780199541423.003.0001.
 9. Barbosa, N.S., Lima, E.R. and Tavares, F.W. (2017) 'Molecular modeling in Chemical Engineering', Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering [Preprint]. doi:10.1016/b978-0-12-409547-2.13915-0.
 10. Assadi, M.Hussein. and Hanaor, D.A. (2013) 'Theoretical study on Copper's energetics and magnetism in tio2 polymorphs', Journal of Applied Physics, 113(23). doi:10.1063/1.4811539.
 11. van Mourik, T. and Gdanitz, R.J. (2002) 'A critical note on density functional theory studies on rare-gas dimers', The Journal of Chemical Physics, 116(22), pp. 9620–9623. doi:10.1063/1.1476010.
 12. Vondrasek, J. et al. (2005) 'Unexpectedly strong energy stabilization inside the hydrophobic core of small protein rubredoxin mediated by aromatic residues: correlated ab initio quantum chemical calculations [J. amer. chem. soc. 2005, 127, 2615–2617].', Journal of the American Chemical Society, 127(22), pp. 8232–8232. doi:10.1021/ja0599081.
 13. Johnston, R.L. (2003) 'Book review: Essentials of computational chemistry: Theories and models. by Christopher J. Cramer', Chem-PhysChem, 4(4), pp. 402–402. doi:10.1002/cphc.200390072.
 14. Sharma, M. and Deswal, S. (2022) 'drugs–protein affinity-score prediction using Deep Convolutional Neural Network', Expert Systems, 39(10). doi:10.1111/exsy.13154.
 15. Kuenzi, B.M. et al. (2020) 'Predicting drug response and synergy using a deep learning model of human cancer cells', Cancer Cell, 38(5). doi:10.1016/j.ccell.2020.09.014.
 16. Gentile, F. et al. (2022) 'Artificial Intelligence-enabled virtual screening of ultra-large chemical libraries with deep docking', Nature Protocols, 17(3), pp. 672–697. doi:10.1038/s41596-021-00659-2.
 17. Zitnick, L., et al. (2022). 'Spherical channels for modeling atomic interactions' Advances in Neural Information Processing Systems, 35, pp. 8054-8067.
 18. Letichevsky, A., Letychevskiy, O. and Peschanenko, V. (2016) 'Insertion Modeling and Its Applications', Computer Science Journal of Moldova, 24 (3), Pp. 357-370.
 19. APS and IMS are best for rewriting and modelling (2023). Available at: <http://www.apsystem.org.ua> (Accessed: 21 November 2023).
 20. Letichevsky, A. and Gilbert, D. A. (1999) 'Model for Interaction of Agents and Environments', Recent Trends in Algebraic Development Techniques, 1827, pp.311-328.
 21. Baranov, S. et al. (2003) 'Leveraging UML to deliver correct telecom applications', UML for Real, pp. 323–342. doi:10.1007/0-306-48738-1_15.
 22. Letichevsky, A.A. et al. (2005) 'System Specification by Basic Protocols', Cybernetics and System Analyses, 41, pp. 479–493.
 23. Letichevsky, A. et al. (2005) 'Basic protocols, message sequence charts, and the verification of requirements specifications', Computer Networks, 49(5), pp. 661-675.
 24. Letychevskiy, O., Peschanenko, V. and Volkov, V. (2022) 'Algebraic virtual machine and its applications', Information and Communication Technologies in Education, Research, and Industrial Applications, pp. 23–41. doi:10.1007/978-3-031-20834-8_2.
 25. Letychevskiy, O. et al. (2022) 'Algebraic modeling of molecular interactions', Communications in Computer and Information Science, pp. 379–387. doi:10.1007/978-3-031-14841-5_25.
 26. Letychevskiy, O. et al. (2023) 'Algebraic Modeling System for Supporting Research in Medicine and Pharmacology', Proceedings of the The12th IEEE International Conference on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications, 2, pp. 1093-1098

Одержано: 23.09.2023

Про авторів:

Тарасіч Юлія Геннадіївна,
докторантка.
Кількість публікацій в українських
виданнях – 16.
Кількість зарубіжних публікацій – 21.
Індекс Хірша – 3 (Scopus).
<https://orcid.org/0000-0002-6201-4569>.

Солошенко Ганна Олександрівна,
вчителька математики та фізики,
аспірантка
Кількість публікацій в українських
виданнях – 5.
Кількість зарубіжних публікацій – 2.
<https://orcid.org/0000-0001-9622-310X>

Місце роботи авторів:

Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова
НАН України,
03187, м. Київ,
проспект Академіка Глушкова, 40.
Тел.: (098) 002 8534.
E-mail: yutarasich@gmail.com,

Херсонський науковий ліцей Херсонської
обласної ради
73000, м. Херсон,
вулиця Полтавська, 89.
Тел.: +380951038682
E-mail: hannasoloshenko@gmail.com