



КАСЬЯНОВ

Павло Олегович — член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор, директор Навчально-наукового комплексу «Інститут прикладного системного аналізу» Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» МОН України та НАН України

ІНТЕГРОВАНІ ДОСЛІДЖЕННЯ В ГАЛУЗІ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ, МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОБОРОННИХ ЗАСТОСУВАНЬ

**Стенограма доповіді на засіданні
Президії НАН України 22 жовтня 2025 року**

У доповіді наведено результати фундаментальних досліджень за новим науковим напрямом у теорії стохастичних процесів ухвалення рішень, який за координації Відділення інформатики НАН України сформовано на базі Навчально-наукового комплексу «Інститут прикладного системного аналізу» Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» МОН України та НАН України. Розглянуто також кілька стратегічних та оперативних прикладних проєктів, які виконуються на основі отриманих математичних результатів і сучасних методів штучного інтелекту у співпраці з провідними українськими та міжнародними партнерами.

Вельмишановний Анатолію Глібовичу!
Шановні колеги!

У своїй доповіді я пропоную до вашої уваги інтегрований дослідницький проєкт, який поєднує два, на перший погляд, різні напрями: молекулярне моделювання клітини з атомною роздільною здатністю та стратегічний аналіз в оборонній сфері. Однак обидва ці напрями спираються на єдиний математичний фундамент — теорію марковських процесів ухвалення рішень у складних просторах станів та застосування штучного інтелекту (ШІ) для розв'язання практичних задач в умовах невизначеності. Спочатку я розповім про фундаментальну математичну складову — ключові теореми щодо оптимальних стратегій у марковських процесах ухвалення рішень, покажу, як ці теорії втілено в конкретну ШІ-платформу GRAMMCell для молекулярного моделювання, а потім ми розглянемо багатокрокові алгоритми стратегічного аналізу для практичних оборонних застосувань.

Отже, перший наш ключовий результат стосується існування оптимальних стаціонарних стратегій. Ми довели, що

навіть для дуже загальних умов, коли множини рішень некомпактні, переходи слабко неперервні, а простори є борелівськими, існує оптимальна стратегія, яку агент може застосовувати постійно, без необхідності її змінювати. Обґрунтовано ключові концепції, а саме: K -inf-compact функції, оптимальність за середнім критерієм, умови, за яких це працює. Виявляється, що навіть коли класичні компактнісні умови не виконано, в разі наявності певних регулярних властивостей результат залишається істинним. Ці дослідження ми проводили разом із академіком НАН України Михайлом Захаровичем Згуровським та американським колегою Євгеном Файнбергом ще у 2012 р. [1].

Другий наш результат — це обґрунтування достатньої умови оптимальності для частково спостережуваних процесів із необмеженими функціями вартості. Термін «частково спостережуваний» означає, що агент не має прямого доступу до істинного стану системи і натомість отримує лише зашумлені (стохастичні) спостереження, які опосередковано відображають цей стан. Прикладом може бути задача керування запасами, коли поточна кількість товару невідома, а спостерігаємо ми лише інформацію про рівень запасів. У таких системах теорема існування оптимальної політики вимагає трьох ключових умов: K -inf-компактність вартості, слабка неперервність переходів та неперервність за варіацією ядра спостережень. Це уможливорює застосування отриманого результату до широкого класу практичних задач.

Третій результат — доведення теорем про неперервність апостеріорних розподілів. Частково спостережуваний марковський процес ухвалення рішень (POMDP) розглянуто тут більш детально. Ми показали, що апостеріорний розподіл станів залежить неперервно від апріорного розподілу та від послідовності спостережень. Це принципово важливо для фільтрації та оцінювання стану. Наприклад, якщо взяти структуру POMDP та аналог формули Баєса, то коли простір спостережень злічений, ми маємо явну форму формули Баєса, а коли він незлічений, картина стає складнішою, але ми довели, що неявна форма форму-

ли Баєса все ще забезпечує коректну еволюцію апостеріорних розподілів.

Четвертий отриманий результат пов'язаний із розглядом загальних некомпактних метричних просторів. Ми довели існування оптимальних політик для еволюційних частково спостережуваних процесів ухвалення рішень у загальних незлічених метричних просторах за умови, що ядро спостережень є неперервним за варіацією.

І п'ятий результат — ми знайшли та обґрунтували умову рівномірної напівфеллеровості перехідних ядер. Це технічна умова, але вона є критичною для збіжності алгоритмів динамічного програмування. Нами знайдено так звану умову рівномірної напівфеллеровості, яка гарантує, що чисельні методи пошуку оптимальних політик дійсно збігаються.

Актуальність цих досліджень значною мірою визначається широкою сферою практичних застосувань. Так, у промисловості це може бути технічна підтримка промислових систем, система експертизи промислової безпеки; у науці — робототехніка, автоматизоване прогнозування, навчання з підкріпленням (reinforcement learning); у бізнесі — маркетинг, керування запасами; в ІТ-сфері — передача інформації, усунення несправностей мереж, оптимізація запитів до серверів розподілених баз даних; у сфері національної безпеки та оборони — пошук рухомих цілей, ідентифікація цілей, розподіл зброї; у сфері охорони здоров'я — методи медичної діагностики.

Тепер продемонструємо, як творче поєднання математичних методів і штучного інтелекту сприяє вирішенню актуальних проблем та протистоянню викликам. Ми розробили високопродуктивну ШІ-платформу GRAMMCell для молекулярного моделювання білків у клітинному середовищі з атомною роздільною здатністю. При цьому, якщо широковідома модель AlphaFold від компанії Google DeepMind, розробників якої минулого року було відзначено Нобелівською премією з хімії, прогнозує структуру окремого білка, то GRAMMCell розглядає взаємодію між білками (докінг) у переважаному клітинному середовищі. Тобто

AlphaFold працює з амінокислотною послідовністю окремого білка, а GRAMMCell — з 3D-структурами вже згорнутих білків і прогнозує їхню взаємодію. У таблиці наведено порівняльні характеристики моделей AlphaFold і GRAMMCell.

Що стосується алгоритмів, то в AlphaFold використано глибоке навчання та attention-механізми, а в GRAMMCell — геометричний докінг та енергетичні функції. AlphaFold демонструє високу точність у прогнозуванні структур окремих білків, тоді як підхід GRAMMCell забезпечує принципові переваги в моделюванні багатокомпонентних, щільно заповнених середовищ і добре масштабується до складних клітиноподібних систем.

Власне, саме надзвичайна складність клітинного середовища і спонукала нас до розроблення III-платформи GRAMMCell. У клітині одночасно перебувають тисячі різних молекул, що взаємодіють одна з одною. Класичний метод молекулярної динаміки в цьому випадку має дуже обмежені можливості — використовуючи його, неможливо симулювати достатньо довгі часові шкали та достатньо великі системи одночасно. Потрібна була якась інша, швидка, точна й масштабована основа.

Наш підхід ґрунтується на трьох основних компонентах. По-перше, це гібридна методологія, яка поєднує докінг (геометричний розра-

хунок позицій білків), протокол Монте-Карло ланцюгів Маркова (для вибірки конформацій) та енергетичні функції. По-друге, це паралелізація, коли за допомогою просторового розбиття ми розділяємо молекулярне середовище на локалізовані регіони і обробляємо їх паралельно. І по-третє, одночасне досягнення атомної роздільної здатності та довгих часових шкал.

Крім того, було адаптовано алгоритм Метрополіса—Гастінгса, який дозволяє у 25—100 разів зменшити час розрахунку порівняно з класичним методом молекулярної динаміки, і застосовано його до розрахунку білків Death Fold Domain, які відіграють важливу роль в імунній регуляції. Це стало першим атомним моделюванням сигнальних олігомерів вродженого імунітету. Результати моделювання узгоджуються з експериментальними біологічними значеннями EC50.

Це наша спільна з дослідниками Університету Канзасу (США) розробка, виконана за грантом IMPRESS-U (договір з УНТЦ 7131 «Modeling protein interactions for predicting phenotypic effects of genetic mutations», науковий керівник — чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. П.О. Касьянов, номер держреєстрації 279/221) [2, 3]. Згодом ми створили вебплатформу GRAMMCell Web Server*, яка працює як публічна служба і дозволяє дослідникам з усього світу завантажувати свої завдання на моделювання і безплатно отримувати результати.

Надалі планується розширити можливості платформи GRAMMCell за такими напрямками:

1) посилення її конформаційної гнучкості завдяки додаванню можливості моделювати рух доменів білків, а не лише їх докінг;

2) оптимізація часу виконання завдань з використанням для цього алгоритмів навчання з підкріпленням;

3) впровадження навчання нейронних мереж для прогнозування та генерації молекулярної еволюції, що дозволить не лише симулювати систему, а й передбачати її еволюцію.

* GRAMMCell. Docking-based Cell Modeling.

<https://grammcell.compbio.ku.edu/>

Порівняння характеристик III-моделей AlphaFold і GRAMMCell

Параметр	AlphaFold	GRAMMCell
Тип завдання	Фолдинг (власна структура білка)	Докінг (взаємодія між білками)
Вхідні дані	Амінокислотна послідовність	3D-структури білків (або моделей)
Вихідні дані	3D-структура окремого білка	Орієнтація зв'язування та комплекс
Алгоритм	Глибоке навчання, attention, EvoFormer	Геометричний FFT-докінг, енергетичні функції
Точність	Дуже висока для окремих білків	Залежить від якості вхідних структур

Крім того, ми пропонуємо уніфікувати платформу завдяки інтеграції просторового розбиття з передовими нейронними мережами. Плануємо задіяти синергію трьох ключових компонентів, а саме: просторове розбиття розділяє молекулярне середовище на регіони; предиктивне моделювання використовує нейронні мережі для оцінки фізичних характеристик; генеративне моделювання прогнозує еволюцію системи. Це дасть змогу прискорити процес моделювання і отримати нові біологічні інсайти. Така уніфікована платформа матиме стратегічне значення для дослідження імунних сигналів та взаємодій, поглибить наше розуміння функціонування імунної системи, пришвидшить пошук нових лікарських засобів, активізує розвиток синтетичної біології та сприятиме зміцненню позицій України у світовій обчислювальній біології.

Далі розглянемо застосування отриманих нами теоретичних результатів для потреб національної безпеки та оборони. На сьогодні актуальним завданням є формалізація побудови автономних ШІ-систем, які можуть ухвалювати рішення в реальному часі без взаємодії з людиною. Це важливо для розвитку таких напрямів:

- безпілотні автомобілі, літаки та інші рухомі об'єкти, які можуть рухатися під керуванням автопілота і самостійно ухвалювати рішення про траєкторію і програму руху;
- автономні повітряні і надводні дрони, які можуть виконувати різноманітні завдання, зокрема доставляти певні вантажі в певні точки простору або дистанційно сканувати ті чи інші території, здійснювати моніторинг їхнього стану;
- інтернет речей (IoT), тобто інтернет-системи, що охоплюють різноманітні датчики та «розумні» пристрої, які можуть збирати дані про навколишнє середовище, здійснювати різні дії відповідно до покладених на них завдань;
- системи самообслуговування, які дають можливість клієнтам купувати товари або отримувати інші послуги без взаємодії зі співробітниками центрів надання таких послуг;
- автоматизовані медичні системи, які можуть діагностувати й давати поради щодо лікування тих чи інших хвороб без участі лікарів;

- роботизовані фінансові системи, які можуть автоматично розподіляти активи та управляти ризиками на фінансових ринках;

- автоматизовані виробничі системи, що складаються з різноманітних автоматів та роботів, які можуть автоматично виконувати ті чи інші завдання виробничого процесу.

Ефективність цих систем залежить від їхньої спроможності забезпечити надійну, своєчасну, інтелектуальну підтримку ухвалення рішень у швидкозмінних операційних умовах з неповнотою інформації стосовно стратегії і програми дій супротивників.

Ключове питання полягає в тому, як формалізувати проблему. Фахівці DeepMind запропонували гіпотезу, що «інтелект і пов'язані з ним здібності можна розуміти як забезпечення максимізації винагороди агентом, що діє в певному середовищі» [4]. Тобто, якщо ми знаємо винагороди для кожної пари («стан», «дія»), теоретично завжди можна формалізувати проблему побудови автономної ШІ-системи за допомогою частково спостережуваних марковських процесів ухвалення рішень, де відомими є простори станів, простори допустимих керувань і, можливо, винагороди.

Отже, формалізація складається з трьох етапів:

- 1) формалізація простору станів — встановлення параметрів, що визначають поточний стан системи;
- 2) формалізація допустимих дій — з'ясування того, які дії система може робити;
- 3) формалізація винагород — визначення того, які переваги ми отримуємо від того чи іншого результату.

Далі ця задача перетворюється на задачу навчання з підкріпленням у контексті марковських процесів ухвалення рішень, де ми використовуємо теорему Йонеску—Тулчі, методи динамічного програмування, рівняння фільтрації та інші математичні інструменти, які гарантують знаходження ϵ -оптимальних стратегій (рис. 1).

Розглянемо конкретні приклади.

Перший — задача з розрахунку сценарію вторгнення в мережу. Агент має початковий



Рис. 1. Етапи формалізації побудови автономних систем штучного інтелекту

доступ до одного вузла мережі (home node) і повинен вирішити, чи збирати інформацію на цьому вузлі, чи спробувати інфільтрувати сусідні комп'ютери, тобто агенту потрібно збалансувати режими зчитування та інфільтрації так, щоб зібрати максимум інформації з мережі комп'ютерів (рис. 2). У найпростішому випадку лінійної мережі є повна інформація, і цю задачу можна розв'язати математично. Якщо ж топологія мережі змінюється в часі (скажімо, коли в мережі є роутери), інформація неповна, і для розв'язання задачі необхідно застосовувати методи ШІ (навчання з підкріпленням), формалізувавши її як задачу «багаторукого бандита». У першому варіанті теорема стверджує: якщо горизонт $T = 3$, то існує оптимальна порогова політика (threshold policy), а наша гіпотеза розширює це твердження: для будь-якого горизонту T існує оптимальна порогова політика. У другому варіанті агент не знає точної топології мережі, але має роутери, які можуть допомогти вибрати найбільш перспективні сусідні вузли. Ми показали, що в разі правильного використання алгоритму Upper Confidence Bound (UCB) можна досягти логарифмічної різниці між оптимальною сукупною винагородою та сукупною винагородою алгоритму.

Другий приклад — задача маршрутизації ресурсів зображень. Скажімо, оператор зібрав якусь кількість розвідувальних знімків, але вони мають різну роздільну здатність та різне поле зору. Потрібно вирішити, що краще: використовувати режим LoRes-HiFOV (низька роздільна здатність, широке поле) або режим HiRes-LoFOV (висока роздільна здатність,

вузьке поле). Застосувавши модель «багаторукого бандита», коли один оператор має k рук (виборів) і кожний вибір дає деяку винагороду, ми розробили алгоритм, який дозволяє швидко та ефективно (принаймні порівняно з UCB-алгоритмом) збалансувати обидва режими і вийти на необхідну точність.

Третя задача — ланцюжки постачання для морських експедиційних підрозділів. Скажімо, морський експедиційний підрозділ розгортається на 15 місяців і має обмежене місце для зберігання запасів. Всі необхідні матеріальні ресурси можна отримати лише на початку розгортання, а потім, під час виконання місії, поповнити їх неможливо. Фахівці мають вирішити, скільки припасів кожного типу потрібно взяти. У цій задачі ми розглядаємо попит як випадкову величину (розподіл Пуассона), і нам потрібно знайти баланс між «надто мало — дефіцит» і «надто багато — марно витрачене місце». Для її розв'язання ми створили нелінійну модель оптимізації з функціями утримання, замовлення та втрати.

Четвертий приклад — задачі пошуку. Припустимо, що на деякій місцевості є невідома числова величина (сигнал), що змінюється в просторі, наприклад акустична інтенсивність або температура. Нам потрібно оцінити значення цієї величини в кожній локації, для чого необхідна відповідна стратегія розміщення датчиків. Для побудови математичної моделі розглянемо n локацій, при цьому датчики ми можемо розмістити на $k \ll n$ локаціях. Для кожної підмножини A локацій визначимо корисність $u(A)$ як міру інформативності цих

локацій. Завдання полягає в тому, щоб максимізувати $u(A)$. Це і є задача оптимального експериментального дизайну.

Усі наведені вище приклади практичних задач ми реалізовували у співпраці з Університетом Стоуні-Брук (США) та Післядипломною школою ВМС США (Naval Postgraduate School) (роботи частково підтримані грантом N00014-24-1-2646 Міністерства військово-морських сил США «New Foundations and Algorithms for Risk-Aware Sequential Decision Processes with Defense Applications», наук. кер. — чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. П.О. Касьянов, номер держреєстрації 238/1573).

На основі розроблених нами методів було створено дві ШІ-платформи: платформу Disruption для динамічної підтримки та утримання інфраструктурних мереж і ситуаційно-аналітичну платформу моделювання сценаріїв вторгнення в аеропорти та морські лінії, яка дає змогу дослідникам вивчати, як вибір мети впливає на можливість переміщення вантажів. Обидві платформи застосовують у сценаріях стратегічного планування. Результати цих досліджень оприлюднено в низці наукових публікацій у провідних рецензованих журналах [5—10].

Отже, творче поєднання математичних методів та інструментів ШІ відкриває нові можливості для розв'язання актуальних наукових і прикладних проблем. Зазначені вище підходи формують нову наукову парадигму, в межах якої методи та інструменти, розроблені в одній прикладній галузі, можна ефективно переносити і використовувати для розв'язання задач в інших сферах. Представлений у доповіді інтегрований дослідницький проєкт охоплює фундаментальну математику, прикладне молекулярне моделювання та оборонні застосування. Кожен його компонент є концептуально узгодженим з іншими, а їх взаємодія забезпечує внутрішню цілісність і наукову послідовність проєкту. Фундаментальні теоретичні ре-

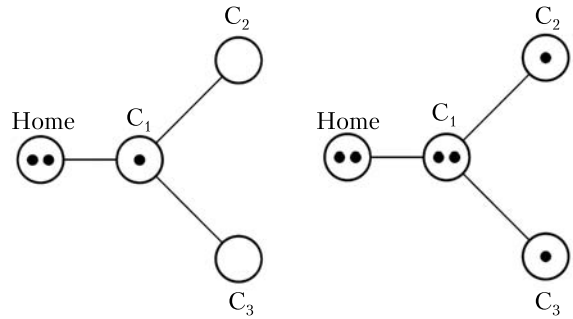


Рис. 2. Задача з розрахунку сценарію вторгнення в мережу: дві точки — інфільтрований комп'ютер (можна збирати інформацію); одна точка — доступний комп'ютер (можна інфільтрувати); кружечок без точок — недоступний комп'ютер

зультати гарантують збіжність розроблюваних нами алгоритмів до оптимальних розв'язків. Платформа GRAMMCell наочно демонструє можливість практичного застосування цих теоретичних положень до складних задач обчислювальної біології. Оборонні застосування, зі свого боку, ілюструють, як зазначені математичні принципи забезпечують функціонування систем підтримки ухвалення оптимальних рішень у середовищах з невизначеністю та ризиком.

Координований розвиток зазначених напрямів відкриває нові можливості для зміцнення позицій України у світовому науковому просторі в галузях фундаментальних досліджень і технологій штучного інтелекту. Представлені результати досліджень демонструють спроможність вітчизняних наукових колективів конкурувати на найвищому міжнародному рівні завдяки залученню фінансування від провідних наукових агенцій США та розвитку сталих партнерств із провідними університетами світу.

Дякую за увагу!

*За матеріалами засідання
підготувала О.О. Мележик*

REFERENCES

1. Feinberg E.A., Kasyanov P.O., Zadoianchuk N.V. Average cost Markov decision processes with weakly continuous transition probabilities. *Mathematics of Operations Research*. 2012. **37**(4): 591—607. <https://doi.org/10.1287/moor.1120.0555>
2. Singh A., Tytarenko A.M., Ambati V.K., Copeland M.M., Kundrotas P.J., Kasyanov P.O., Feinberg E.A., Vakser I.A. GRAMMCell: Docking-based cell modeling resource. *J. Mol. Biol.* 2025. **437**(15): 169085. <https://doi.org/10.1016/j.jmb.2025.169085>
3. Tytarenko A.M., Singh A., Ambati V.K., Copeland M.M., Kundrotas P.J., Halfmann R., Kasyanov P.O., Feinberg E.A., Vakser I.A. Highly optimized simulation of atomic resolution cell-like protein environment. *J. Phys. Chem. B*. 2025. **129**(12): 3183—3190. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c07769>
4. Silver D., Singh S., Precup D., Sutton R.S. Reward is enough. *Artificial Intelligence*. 2021. **299**: 103535. <https://doi.org/10.1016/j.artint.2021.103535>
5. Feinberg E.A., Kasyanov P.O., Royset J.O. Epi-convergence of expectation functions under varying measures and integrands. *Journal of Convex Analysis*. 2023. **30**(3): 917—936. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2208.03805>
6. Feinberg E.A., Kasyanov P.O., Zgurovsky M.Z. Solutions for zero-sum two-player games with noncompact decision sets. *Naval Research Logistics*. 2023. **70**(5): 493—506. <https://doi.org/10.1002/nav.22111>
7. Feinberg E.A., Kasyanov P.O. Equivalent conditions for weak continuity of nonlinear filters. *Systems & Control Letters*. 2023. **173**: 105458. <https://doi.org/10.1016/j.sysconle.2023.105458>
8. Feinberg E.A., Kasyanov P.O., Zgurovsky M.Z. Markov decision processes with incomplete information and semiuniform Feller transition probabilities. *SIAM Journal on Control and Optimization*. 2022. **60**(4): 2488—2513. <https://doi.org/10.1137/21M1442152>
9. Feinberg E.A., Kasyanov P.O., Zgurovsky M.Z. Semi-uniform Feller stochastic kernels. *Journal of Theoretical Probability*. 2023. **36**: 2262—2283. <https://doi.org/10.1007/s10959-022-01230-9>
10. Zgurovsky M.Z., Kasyanov P.O., Levenchuk L.B. Formalization of methods for the development of autonomous artificial intelligence systems. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2023. **59**(5): 763—771. <https://doi.org/10.1007/s10559-023-00612-z>

Pavlo O. Kasyanov

Institute for Applied System Analysis at the Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6662-0160>

INTEGRATED RESEARCH IN ARTIFICIAL INTELLIGENCE, MATHEMATICAL MODELING, AND DEFENSE APPLICATIONS

Transcript of scientific report at the meeting of the Presidium of NAS of Ukraine, October 22, 2025

The report presents the results of fundamental research in a new scientific area in the theory of stochastic decision-making processes, which, under the coordination by the Department of Informatics of the NAS of Ukraine, was formed at the Institute for Applied Systems Analysis at the Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute. Several strategic and operational applied projects are also considered, which are implemented on the basis of the obtained mathematical results and modern artificial intelligence methods in cooperation with leading Ukrainian and international partners.

Cite this article: Kasyanov P.O. Integrated research in artificial intelligence, mathematical modeling, and defense applications (transcript of scientific report at the meeting of the Presidium of NAS of Ukraine, October 22, 2025). *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2025. (12): 56—62. <https://doi.org/10.15407/visn2025.12.056>