

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ СТРУКТУРОЙ И СВОЙСТВАМИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ С ЭЛЕМЕНТАМИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ

Шулаева Н.А., Скворцова М.И., Михайлова Н.А.

МИРЭА - Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова), каф. Высшей и прикладной математики, Россия, 119571, г.Москва, пр-т Вернадского,86, тел. (495) 936-88-71, e-mail: skvorivan@mail.ru

В работе предложен общий, алгоритмический метод построения математических моделей связи «структура - свойство». Вышеуказанные модели строятся на основе статистического анализа данных по выборкам структур и свойств химических соединений некоторых классов и имеют вид корреляционных уравнений. Метод применим к любым классам органических соединений и любым свойствам, измеряемым количественно. Для представления химических структур в рамках предложенного метода использованы специальные взвешенные молекулярные графы, отражающие некоторые элементы пространственного строения соответствующих молекул. Реализация метода происходит в несколько этапов. На 1-ом этапе предполагается, что искомое уравнение связи «структура-свойство» имеет вполне определенный вид, зависящий от весов молекулярных графов, представляющих химические структуры, а также от ряда подгоночных числовых параметров и пары функций одной переменной, которые могут варьироваться. На этом этапе происходит отбор наилучшей пары функций из некоторого множества функций, а также выбор оптимальных значений для вышеуказанных параметров (т.е. отбор наилучшей модели). На 2-ом этапе происходит некоторая модификация полученной наилучшей модели с целью ее дальнейшего улучшения. Для этого первоначально проводится классификация вершин молекулярного графа по химическим символам соответствующих атомов и картинам 1-го окружения, а также ребер, в соответствии с классами вершин, которые они соединяют. На основе полученной классификации вершин и ребер вводятся числовые «поправки» к исходным весам вершин и ребер. Конечным результатом процесса построения модели служит уравнение определенного вида с конкретными числовыми значениями всех его параметров, позволяющее рассчитать значение изучаемого свойства для любого соединения заданного класса. Кроме того, в работе проведены примеры применения разработанного метода для построения моделей связи «структура-свойство» для конкретных свойств и классов соединений, показавшие его эффективность, а также проанализирована целесообразность введения второго этапа в этом методе. Модели связи «структура-свойство», построенные на основе вышеописанного метода, обладающие достаточно высоким качеством, могут быть использованы для расчета свойств соединений, для которых отсутствуют экспериментальные данные.