

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ СТРУКТУРОЙ И СВОЙСТВАМИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ПОДБОРА ОПТИМАЛЬНЫХ АТОМНЫХ ПАРАМЕТРОВ

Яковенко Ю.Ю., Скворцова М.И.

Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова, Кафедра высшей и прикладной математики, Россия, 119571, г. Москва, пр. Вернадского, 86, Тел.: (495) 936-88-71, E-mail: [yakovenko88.88@mail.ru](mailto:yakovenko88.88@mail.ru), [skvorivan@mail.ru](mailto:skvorivan@mail.ru)

Построение и исследование математических моделей связи между структурой и свойствами органических соединений является одной из основных задач математической химии. Найденные закономерности позволяют прогнозировать свойства химических соединений непосредственно по их структуре, минуя эксперимент, и могут быть использованы для планирования целенаправленного поиска соединений с заданными свойствами.

В работе предлагается новый общий метод построения моделей связи «структура-свойство» органических соединений и проводится его исследование. В качестве исходных данных используется некоторая выборка соединений, представленных структурными формулами, для которых известны численные значения  $y$  изучаемого свойства. Согласно предложенному методу первоначально проводится некоторая классификация атомов, входящих в структуры изучаемых соединений. Например, атомы могут быть классифицированы по химическим символам и распределениям типов связей. Атомам  $k$ -ого класса приписывается некоторый неопределённый вес. Далее предполагается, что модель связи «структура-свойство» имеет следующий вид:

$$y = \frac{\sum x^{(i)} x^{(j)}}{n} + x_0, \quad (1)$$

где  $x^{(i)}$ ,  $x^{(j)}$  – веса  $i$ -ого и  $j$ -ого атомов в молекуле (в соответствии с их классификацией); суммирование распространено на все связи  $(i, j)$ ,  $x_0$  – некоторая константа,  $n$  – число атомов в молекуле. На следующем этапе построения модели эти веса подбираются оптимальным образом так, чтобы модель (1) была бы как можно более точной на исходной выборке соединений. Следует отметить, что: а) классификацию атомов можно проводить с разной степенью детализации, что позволяет увеличить точность аппроксимации; б) в формуле (1) можно использовать другие виды выражений, зависящих от атомных весов.

На основе предложенного метода построены модели связи «структура-свойство» для различных физико-химических свойств и классов соединений; при этом рассматривались различные модификации формулы (1). Эти модели затем использованы для прогнозирования свойств других соединений рассматриваемых классов, не включённых в исходные выборки. Кроме того, проведено сравнение эффективности предложенного метода моделирования связи «структура-свойство» и ряда других методов того же назначения для одних и тех же данных.