

МОДЕЛИ СВЯЗИ «СТРУКТУРА – СВОЙСТВО» ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ВЗВЕШЕННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ С ПОДБИРАЕМЫМИ ВЕСАМИ

Ю.Ю. Яковенко, М.И. Скворцова

МИТХТ им. М. В. Ломоносова

Проблема построения моделей, связывающих структуру и свойства органических соединений – одна из важнейших математических задач современной теоретической химии и химической информатики. Найденные закономерности позволяют, минуя эксперимент, прогнозировать свойства новых химических соединений непосредственно по их структуре и могут быть использованы для целенаправленного поиска соединений с заданными свойствами.

В настоящей работе предлагается новый метод построения моделей связи «структура-свойство» органических соединений, основанный на оптимальном выборе весов вершин молекулярных графов, представляющих химические структуры. В качестве исходных данных для реализации этого подхода используется некоторая выборка соединений с известными численными значениями рассматриваемого свойства. Первоначально проводится некоторая классификация атомов, входящих в структуры изучаемых соединений, и атомам каждого класса приписывается некоторый неопределённый «вес», зависящий от класса. Далее предполагается, что рассматриваемое свойство определенным образом зависит от «весов» атомов, входящих в молекулу; при этом в соответствующей математической формуле учитывается также и топология соответствующего молекулярного графа. Затем подбираются конкретные значения этих весов таким образом, чтобы построенная модель была бы как можно более точной на исходной выборке соединений.

Проведено тестирование предложенного метода. Для ряда физико-химических свойств и классов соединений были построены модели описанного выше типа, которые затем использовались для прогнозирования свойств других соединений тех же классов, не включённых в исходные выборки. Полученные результаты показали эффективность предложенного подхода.