

Современные методы предсказания химических свойств новых соединений

Юськина Е.А.¹, Симонова В.М.²

¹ Кафедра аналитической химии

² Кафедра общей и неорганической химии

Прогнозирование молекулярных свойств является фундаментальной задачей в областях химии, медицины и экологии [1-3]. Современные вычислительные методы позволяют решать эту задачу быстро, эффективно и с достаточной точностью. В настоящее время основными инструментами для предсказания свойств химических соединений являются методы машинного обучения, такие как нейронные сети различной архитектуры, деревья решений, метод опорных векторов, метод k-ближайших соседей.

В отличие от физических моделей, применяемых в квантовой химии и молекулярной динамике, подходы машинного обучения используют алгоритмы, основанные на математических взаимосвязях между структурой молекулы и ее свойствами. Данный подход позволяет описывать не только уже существующие вещества, но и прогнозировать химические, биологические и физические свойства новых соединений [4]. Кроме того, преимуществом методов машинного обучения является возможность обработки больших объемов данных без привлечения значительных вычислительных ресурсов.

В докладе будут рассмотрены применение и эффективность современных методов машинного обучения в приложении к прогнозированию химических свойств существующих соединений и гипотетических веществ. В частности, в работе будут представлены результаты использования нейронной сети для решения актуальной проблемы загрязнения окружающей среды углекислым газом [3].

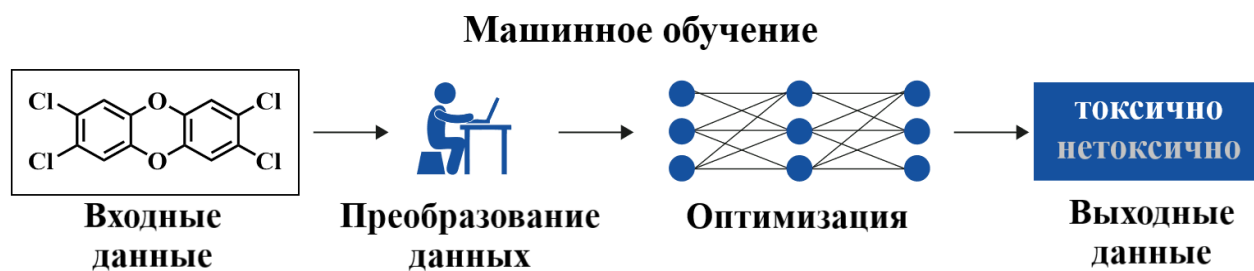


Рисунок 1. Схема процесса машинного обучения

1. S. Zhong, J. Hu, X. Fan, X. Yu & H. Zhang, J. Hazard. Mater. 383 (2020) 121141; IF 10.588
2. T. Shi, et al. Chemom. Intell. Lab. Syst. 194 (2019) 103853; IF 3.491
3. K. Choudhary, et al. Comput. Mater. Sci. 210 (2022) 111388; IF 3.300
4. Y.-C. Lo, S. E. Rensi, W. Torng & R.B. Altman, Drug Discov. Today 23 (2018) 1538–1546; IF = 7.851