

## PR-63

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ  
ХАРАКТЕРИСТИК ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ  
МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ:  
КАКИЕ ДЕСКРИПТОРЫ ЛУЧШЕ ВСЕГО ИСПОЛЬЗОВАТЬ?**

**А. Рахимбекова, Г. И. Минибаева, Д. Мазитов, А. Кокорин, А. Семенова,  
Р. И. Нугманов, П. Г. Полищук, Т. И. Маджидов, А. Варнек**

*Химический институт им. А. М. Бутлерова, Казанский федеральный университет, 420008,  
Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 18.  
E-mail: asima.astana@outlook.com*

Одной из актуальных проблем в области QSAR/QSPR-моделирования для химических реакций является поиск оптимального набора дескрипторов, которые смогли бы описать взаимосвязь «структура – реакционная способность» для разнообразных типов химических реакций.

В работе проведен сравнительный анализ различных способов дескрипторного представления химических реакций для прогнозирования константы скорости реакций и константы равновесия. Реакции представлены в виде (1) дескрипторов набора реагентов и продуктов либо их конкатенации или разности (2) фрагментных ISIDA дескрипторов для конденсированного графа реакции (КГР) [1] и в виде (3) SiRMS дескрипторов смеси молекул реагентов и продуктов [2]. Представление реакции в виде КГР также использовали для вычисления векторов контекстного сходства, графовых ядер сходства, а также для применения графовых нейронных сетей. Для сравнения дескрипторов использовали широко применяемые в литературе разностные молекулярные отпечатки, имплементированные из библиотеки RDKit [3–4]. Сопоставление различных подходов проведено на четырех наборах данных по реакциям: бимолекулярного замещения, бимолекулярного элиминирования, реакций Дильса – Альдера и таутомерного равновесия.

В результате проведенного анализа обнаружено, что каждый из рассмотренных способов представления реакций может быть использован для моделирования связи «структура – реакционная способность». Графовые нейронные сети на основе КГР и модели, построенные на фрагментных дескрипторах КГР, в среднем показывают более высокое качество результатов по сравнению с остальными способами описания реакций.

#### **Библиографический список**

1. Varnek, A. Substructural fragments: an universal language to encode reactions, molecular and supramolecular structures / A. Varnek, D. Fourches, F. Hoonakker, V.P. Solov'ev // Journal of Computer-Aided Molecular Design. – 2005. – Vol. 19 – P. 693–703.
2. Polishchuk, P. Structure-reactivity modeling using mixture-based representation of chemical reactions / P. Polishchuk, T. Madzhidov, T. Gimadiev, A. Bodrov, R. Nugmanov, A. Varnek // Journal of Computer-Aided Molecular Design. – 2017. – Vol. 31 – P. 829–839.
3. Schneider, N. Development of a novel fingerprint for chemical reactions and its application to large-scale reaction classification and similarity / N. Schneider, D. M. Lowe, R. A. Sayle, G. A. Landrum // Journal of Chemical Information and Modeling. – 2015. – Vol. 55 – P. 39–53.
4. Schneider, N. What's what: The (nearly) definitive guide to reaction role assignment / N. Schneider, N. Stiefl, G.A. Landrum // Journal of Chemical Information and Modeling. – 2016. – Vol. 56 – P. 2336–2346.

*Исследование поддержано Министерством образования молодежи и спорта Чешской Республики, соглашение MSMT-5727/2018-2, а также Министерством высшего образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.587.21.0049 (уникальный идентификатор проекта RFMEFI58718X0049)*