

радикальних парах настільки сильні, що можуть викликати T–S перехід і за відсутності виродження між T та S станами РП.

Дослідження, представлене в цих тезах, було профінансовано National Science Foundation (NSF) (Grant No 0124U003833).

References

1. B. F. Minaev, N. A. Murugan, H. Ågren. Dioxyspectra and bioactivation. International Journal of Quantum Chemistry, 2013, 113 (14), 1847–1867.
2. P. J. Horie, K. Ivanov, M. R. Wasielewski. Spinchemistry. J. Chem. Phys., 2020, 152, 120401.
3. Stanitska M., Deva L., Minaev B., Minaeva V., Panchenko O., Ågren H., Volyniuk D., Keruckienė R., Khomyak S., Maksymych V., Stakhira P., Gražulevičius J. V. Hetero-donors-adorned anthraquinones with near infra-red absorption for solution-processable photodetectors. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2025, 332, 125805
4. M. Engström, B. Minaev, O. Vahtras, H. Ågren. Linear response calculations of electronic g-factors and spin-rotational coupling constants for diatomic molecules with a triplet ground state. Chemical physics, 1998, 237 (1-2), 149–158.
5. B. Minaev, M. Sukhyna, P. Stakhira, V. Minaeva, H. Ågren. Unusually high spin–orbit coupling in the methionine singlet–triplet transition and the role of magnetic perturbations in amino acids. Physical Chemistry Chemical Physics, 2025, 27 (25), 13340–13351.

МОДЕЛЮВАННЯ ЧУТЛИВОСТІ ДО ТЕРТЯ ВИСОКОАЗОТНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ANN ТА GFA-ПІДХОДІВ

Роман Заболотний, Сєрґій Бондарчук

*Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
кафедра хімії та наноматеріалознавства, Черкаси, Україна
e-mail: zabolotnii.roman2221@vu.edu.edu.ua*

Чутливість до механічних впливів, зокрема до тертя (FS), є критично важливою характеристикою енергоємних сполук, зокрема високоазотних гетероциклів, що широко досліджуються як перспективні вибухові речовини наступного покоління. Традиційні експериментальні методи визначення чутливості є дорогими, небезпечними та трудомісткими, що зумовлює активний розвиток теоретичних і обчислювальних підходів до її прогнозування. Сучасні дослідження демонструють високу ефективність методів машинного навчання, зокрема глибокого навчання, проте такі підходи вимагають значних за обсягом наборів даних, що налічують сотні і навіть тисячі значень. З іншого боку використання малих наборів даних, що становить десятки значень зазвичай вимагає інформаційно дуже важливих дескрипторів, таких, які можна отримати на основі квантово-хімічних розрахунків молекул, а подекуди і кристалів неемпіричними методами, зокрема в рамках теорії функціоналу густини (DFT) [1]. Інший підхід, який гарно зарекомендував себе для малих наборів даних, це метод апроксимації генетичної функції (GFA) [2]. І хоча в обох випадках отримані емпіричні рівняння демонструють високі коефіцієнти кореляції ($R^2 = 0,96$ та $R^2 = 0,9$), тестування отриманих моделей на незалежному зовнішньому наборі даних не проводилось, а була виконана лише внутрішня перехресна валідація. Тому в рамках цієї роботи нами було перевірено результати використання методів GFA та штучних нейронних мереж (ANN) для невеликих наборів даних із незалежним зовнішнім тестуванням отриманих моделей чутливості.

Для цього нами було досліджено 90 високоазотних гетероциклічних енергоємних сполук, для яких експериментальні значення FS було взято з джерел [3, 4]. Для розбиття набору даних на тренувальний і тестовий спочатку всі дані було відсортовано за зростанням, після чого кожне 3-тє значення відбиралось у тестовий набір. Таким чином, співвідношення тренувального до тестового набору склало 67/33, що є типовим для досліджень в рамках кількісних співвідношень «структура-властивість» (QSPR). У цій роботі використані лише «швидкі» дескриптори (структурні, топологічні, інформаційні), що не вимагають значних машинних затрат, а також квантово-хімічні дескриптори на основі напівемпіричних розрахунків молекул чи солей у газовій фазі. Як результат було розраховано масив із 74 дескрипторів, для яких одержана матриця кореляції показала сильні внутрішні взаємозв'язки (рис. 1 а).

Таким чином ми провели серію регресійних аналізів методом GFA варіюючи параметри розміру популяції та коефіцієнта мутації. Числові значення всіх налаштовуваних параметрів для найкращої моделі разом з графіком використання базисних функцій в ході еволюції наведені на рис. 1 б.

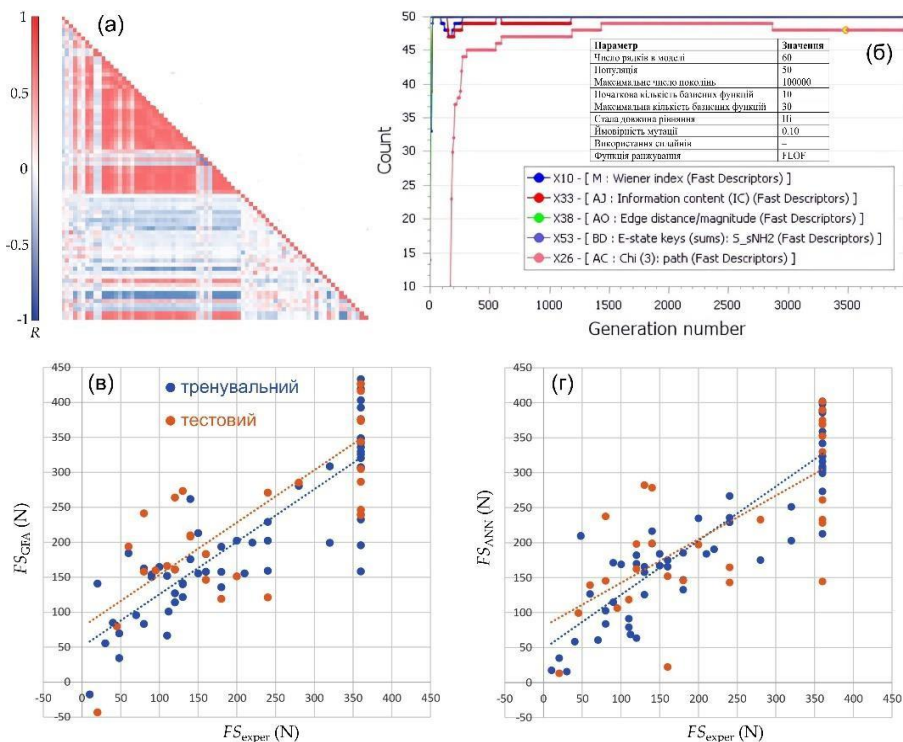


Рис. 1. Матриця взаємної кореляції дескрипторів (всього 74) (а); частота використання базисних функцій в ході еволюції та початкові параметри GFA (б); графік залежності передбачених значень чутливості до тертя розрахованих в рамках GFA (в) та ANN (г) від експериментальних