

## **ПРЕДСКАЗАНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФЛУОРОФОРОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

**Зарудских М.А.<sup>1</sup>**

**Научный руководитель – доктор физ.-мат. наук, профессор Безносюк С.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Алтайский государственный университет  
zarudskikh@yandex.ru

### **Введение**

За последнее десятилетие в мире наблюдается рост числа онкологических заболеваний – группы заболеваний, характеризующихся непредсказуемым ростом и распространением аномальных клеток, являющихся одной из самых распространённых причин смертности не только в РФ, но и во всём мире. Исследователи отмечают следующие причины роста числа этой группы заболеваний: негативные изменения экологической обстановки (загрязнение воздуха, влияние ультрафиолетового излучения, загрязнение почвы и воды), образа жизни человека (вредные привычки, ожирение, гормональные сдвиги), а также увеличение продолжительности жизни в развитых странах (так как риск возникновения рака после 35-летнего возраста с каждым возрастным годом увеличивается на 10% процентов) [1, 2, 3]. В связи с этим становится актуальным поиск новых методов диагностики и терапии онкологических заболеваний.

Среди таких методов наиболее широкое распространение в биомедицинских исследованиях живых тканей при контроле и эффективности терапии получают оптические методы объединённые под общим названием «оптическая биопсия» - область визуализации патологических очагов основанная на выявлении различий в флуоресцентном контрасте между патологическими очагами и окружающими их нормальными тканями, который возникает за счёт экзогенных флуорофоров [4, 5]. Поиск новых флуорофоров с заданными свойствами становится одним из важных направлений в современной онкологии.

### **Основная часть**

Основной целью исследования является разработка и валидация модели машинного обучения для прогнозирования квантово-химических свойств флуорофоров на основании их структуры представленной в формате нотации SMILES.

Предполагается сформировать базу данных из репрезентативных флуорофоров (поликонденсированные ароматические соединения, кумариновые производные, BODIPY-производные, и др.). Для этого необходимо произвести квантово-химические расчёты методом теории функционала плотности (DFT) с использованием гибридного функционала B3LYP и базисного набора def2-TZVP, и расчёт TD-DFT в четырёх окружениях (газовая фаза, вода, этанол, гексан) с использованием PCM-модели в среде программного пакета «ORCA 6.1.0» [6]. Структуры кодируются каноническими SMILES-нотациями и дополняются электронными и спектральными дескрипторами. Обучение будет осуществляться методом многозадачной регрессии с использованием алгоритмов машинного обучения. Окончательный выбор модели будет сделан после сравнительного тестирования. Объективная оценка результатов обучения методом разделения по каркасам (scaffold split) [7]

### **Выводы**

Ожидается, что наиболее точная модель обеспечит прогноз характеристик с точностью, сравнимой с TD-DFT, и может быть использована для предсказания квантово-химических свойств флуорофоров, что обеспечит ресурсозатраты на синтез новых соединений.

## Литература

1. Мерабишвили В. М. Возрастные риски возникновения рака (аналитические показатели учета и ранней диагностики) // Успехи геронтологии. 2017. № 6. С. 818-825.
2. Макимбетов Э.К., Салихар Р.И., Туманбаев А.М. Эпидемиология рака в мире // Современные проблемы науки и образования. 2020. № 2. С. 168.
3. Сертакова О. В., Решетов Д.Н., Дудин М.Н., Голубева М.Ю. Распространенность онкологических заболеваний у различных групп населения в России и мире // Вестник Всероссийского общества специалистов по медико-социальной экспертизе, реабилитации и реабилитационной индустрии. 2019. № 1. С. 33-46.
4. Лычковская Е.В., Вайс Е.Ф., Салмина А.Б, Салмин В.В. Оптическая биопсия с использованием экзогенных флуорофоров // Сибирское медицинское обозрение. 2015. №2. С. 5-14.
5. Лощенов В.Б., Стратонников А.А. Физические основы флуоресцентной диагностики и фотодинамической терапии // Сборник трудов МИФИ. 2000. Т. 4. С. 53-54.
6. Neese, F. The ORCA program system. Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci., 2012, Vol. 2, №1, P. 73–78
7. Guo Q., Hernandez-Hernandez S., Ballester P. J. Scaffold splits overestimate virtual screening performance // International Conference on Artificial Neural Networks. Cham: Springer Nature Switzerland, 2024. P. 58-72.