

### Список литературы

1. Inaba K., Kuroda T., Shimamoto T., Kayahara T, Tsuda M., Tsuchiya T. *Lithium Toxicity and Na<sup>+</sup>(Li<sup>+</sup>)/H<sup>+</sup> Antiporter in Escherichia coli* // *Biol Pharm Bull.*, 1994. – Vol. 17. – № 3. – P. 395–398.
2. Chernova A., Pukhniarskaia D., Biryukov M., Plotnikov E. *Influence of lithium salt on Escherichia coli growth and viability* // *Industrial Biotechnology*, 2022. – Vol. 18. – № 1. – P. 32–37.
3. *ГОСТ 30726–2001. Продукты пищевые. Методы выявления и определения количества бактерий вида Escherichia coli.* – М.: Стандартинформ, 2010. – 9 с.
4. Чернова А. П., Батжаргал Х. *Метод оценки ферментативной активности хлебопекарных дрожжей* // *Пищевая промышленность*, 2019. – № 8. – С. 84–88.

## БАЙЕСОВСКИЕ МЕТОДЫ ПРЕДСКАЗАНИЯ ЛИПОФИЛЬНОСТИ МАЛЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Б. И. Пякилля

Научный руководитель – профессор, д.т.н. ОАР ИШИТР ТПУ В. И. Гончаров  
Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, д. 30, morphism@tpu.ru

Задача предсказания молекулярных свойств является важным направлением хемоинформатики – науки, которая использует методы информатики для решения химических проблем. В биохимии и особенно в проектировании лекарственных средств (drug design) некоторые молекулярные свойства играют основную роль. Одним из таких свойств является липофильность – физико-химическое свойство, определяющее способность вещества растворяться в жирах и маслах [1]. В лекарственном проектировании липофильность является ключевым параметром, так как она определяет способность вещества проникать через клеточную мембрану, состоящую из билипидного слоя фосфолипидов.

В данной статье рассматриваются преимущества применения байесовских нейронных сетей для предсказания липофильности малых органических соединений. В ходе исследования было показано, что байесовские нейронные

сети позволяют учитывать неопределенность в данных и модели, что делает их особенно полезными для задач хемоинформатики, где данные могут быть шумными и содержать пропущенные значения. Байесовские нейронные сети также позволяют получать вероятностные распределения для выходных значений, что позволяет получать более точные прогнозы и оценки неопределенности. В статье также описываются различные задачи, связанные с липофильностью малых органических соединений, которые могут быть решены с помощью байесовских нейронных сетей, такие как прогнозирование активности лекарственных препаратов или оценка токсичности химических веществ. Результаты исследования показывают, что байесовские нейронные сети являются мощным инструментом для предсказания липофильности малых органических соединений и могут быть полезны в различных областях химии и медицины.

### Список литературы

1. Кольман Я., Рем К. Г. *Наглядная биохимия.* – мир, 2000. – Т. 469. – С. 23.