

## **Методы хемоинформатики в термодинамике равновесий. Диссоциация уксусной кислоты.**

© Бондарев Сергей Николаевич,<sup>1</sup> Зайцева Инна Сергеевна<sup>2</sup>  
и Бондарев Николай Васильевич<sup>1\*+</sup>

<sup>1</sup> Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина. пл. Свободы, 4.  
г. Харьков, 61077. Украина. E-mail: n\_bondarev@ukr.net

<sup>2</sup> Харьковская национальная академия городского хозяйства. Ул. Маршала Бажанова, 17.  
г. Харьков, 61002. Украина. E-mail: inna.zaitseva123@yandex.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** хемоинформатика, искусственная нейронная сеть, множественная регрессия, массив данных, константа диссоциации, энергия Гиббса, сольватация.

### **Аннотация**

Методы химической информатики (хемоинформатики) – множественная линейная регрессия и нейросетевое моделирование применены для анализа зависимости энергии Гиббса (констант) диссоциации уксусной кислоты от свойств водно-органических растворителей. Выявлены значимые факторы, влияющие на равновесие диссоциации кислоты. Построена нейросетевая модель (трех-слойный персептрон) и показана перспективность применения нейронных сетей для прогнозирования констант диссоциации (силы) уксусной кислоты в водно-органических растворителях.