

## Методы хемоинформатики в термодинамике равновесий. Монокоронаты калия (18C6K<sup>+</sup>).

© 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 комплексообразования, 18-краун-6, энергия Гиббса, сольватация.

### Аннотация

Множественная линейная регрессия и нейросетевое моделирование применены для анализа и прогнозирования энергии Гиббса (констант) устойчивости комплексов эфира 18-краун-6 с катионами калия в водно-органических растворителях. Проведено сопоставление результатов сольватационно-термодинамического и регрессионного анализа. Выявлены значимые факторы, влияющие на устойчивость короната калия. Построена нейросетевая модель (трехслойный персептрон) и показана перспективность применения нейронных сетей для прогнозирования констант устойчивости монокоронатов калия в водно-органических растворителях.