

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Компьютерные химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/15-44-12-170 Подраздел: Хемоинформатика.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.412. Поступила в редакцию 30 ноября 2015 г.

Консенсусный подход к созданию атом-атомного отображения в химических реакциях

© Маджидов^{1*+} Тимур Исмаилович, Нугманов¹ Рамиль Ирекович,
Гимадиев^{1,2} Тимур Рустемович, Лин¹ Аркадий Игоревич,
Антипин^{1*} Игорь Сергеевич и Варнек^{1,2*} Александр

¹ Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 233-74-63. E-mail: timur.madzhidov@kpfu.ru

² Laboratory of Chemoinformatics. University of Strasbourg. 1 rue Blaise Pascal, 35000 Strasbourg, France.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: атом-атомное отображение, химические реакции, принцип наименьшей химической дистанции, базы данных, хемоинформатика.

Аннотация

В работе была предложена методология для автоматического установлению атом-атомного отображения (ААО) в химических реакциях с использованием консенсуса нескольких алгоритмов. Центральным элементом предложенной методологии является принцип наименьшей химической дистанции. Оригинальная формулировка принципа была расширена на случай стехиометрически не-уравновешенных реакций с помощью использования концепции Конденсированных графов реакции. В рамках использованной методологии было предложено два подхода к уточнению ААО: последовательный, который может использоваться для наборов реакций известного типа, и параллельный, пригодный для наборов реакций с неизвестным механизмом. Показано, что каждый из подходов позволяет уточнить ААО. Параллельный подход использовался для установления ААО для реакций из базы данных ChemSpider Reactions и проанализировано качество полученного отображения.