

## В Томске разрабатывают алгоритм машинного обучения для предсказания свойств химических соединений

Молодой ученый ТПУ Борис Пякилля разрабатывает алгоритм, который сможет строить модели, предсказывающие молекулярные свойства малых органических соединений. Алгоритм основан на объединении методов искусственного интеллекта и байесовского подхода из теории вероятностей. В дальнейшем его будут применять для разработки лекарственных средств и сельскохозяйственных пестицидов.

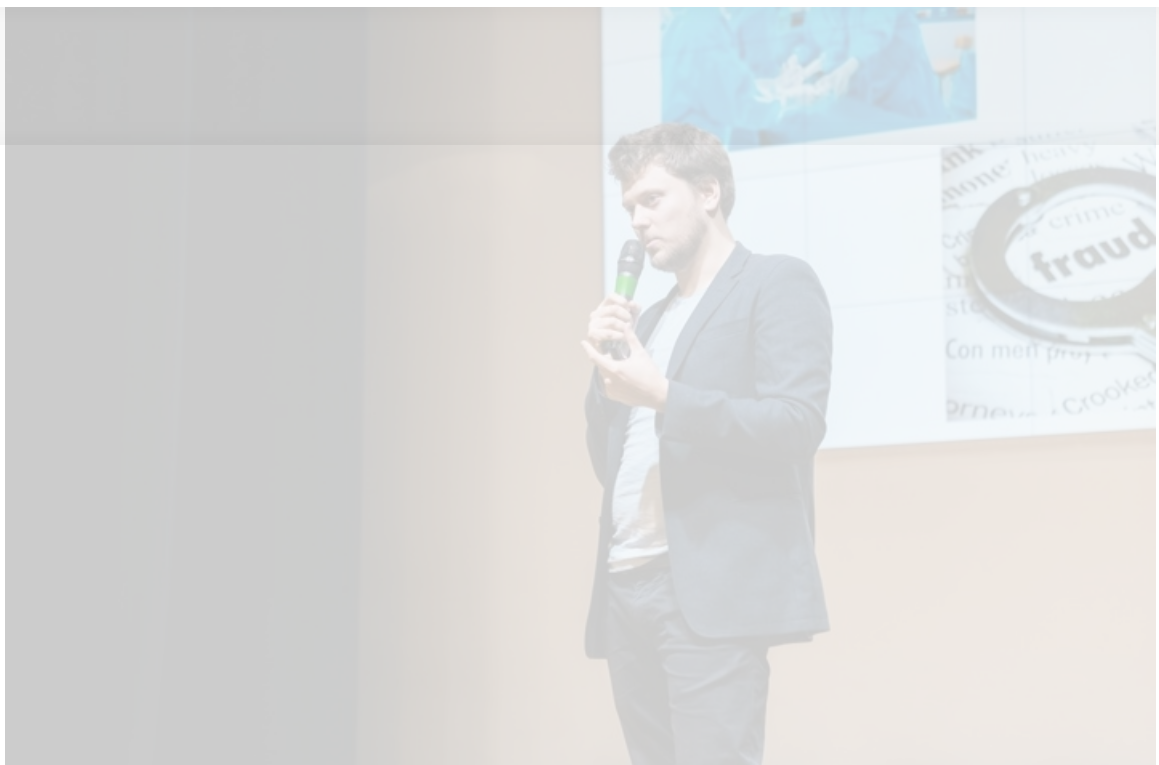


Фото: пресс-служба  
ТПУ

Результатом алгоритма станет модель, предсказывающая липофильность – свойство вещества, характеризующее его химическое сродство к органическим веществам. Она будет способна учитывать возможную неопределенность предсказаний, вызванную нехваткой обучающих данных.

«Работа актуальна за счет появления большого количества проектов, связанных с оценкой молекулярных свойств, а также ростом данных о химических экспериментах. Информация о неопределенности предсказаний, мере их возможного разброса крайне важна для пользователей из химических и биологических лабораторий и научных институтов», – поясняет молодой ученый.

Борис  
Пякилля.  
Фото: ТГУ



Разработанный алгоритм основывается на байесовском машинном обучении. Этот раздел программирования напрямую работает с неопределенностями и позволяет не только точно оценивать параметры полученной модели, но и их распределение.

Как отмечает Борис Пакилля, аналогичная работа ведется во многих институтах и фармкомпаниях. Однако алгоритм, разработанный в ТПУ, отличает качество вычислительных аспектов.

«Уникальность нашего алгоритма — в вычислительных аспектах: скорости построения предсказательной модели, высоком качестве предсказания липофильности, возможности учитывать неопределенность предсказаний из-за нехватки обучающих данных или их низкого качества», — добавляет Борис Пякилля.

В будущем алгоритм может быть использован в разработке лекарственных средств или сельскохозяйственных препаратов, например, пестицидов.

Фото: пресс-служба ТПУ.

Автор: Пепел © Babr24.com НАУКА И ТЕХНОЛОГИИ, ИНТЕРНЕТ И ИТ, ТОМСК 👁 10811 29.11.2021, 13:58  
👍 719

URL: <https://babr24.com/?ADE=221749> Bytes: 2164 / 1907 Версия для печати

👍 [Порекомендовать текст](#)

Поделиться в соцсетях:

Также читайте эксклюзивную информацию в соцсетях:

- [Телеграм](#)
- [Джем](#)
- [ВКонтакте](#)
- [Одноклассники](#)

Связаться с редакцией Бабра в Томской области:  
[tomsk.babr@gmail.com](mailto:tomsk.babr@gmail.com)

## НАПИСАТЬ ГЛАВРЕДУ:

Телеграм: @babr24\_link\_bot  
Эл.почта: newsbabr@gmail.com

## ЗАКАЗАТЬ РАССЛЕДОВАНИЕ:

эл.почта: bratska.net.net@gmail.com

## КОНТАКТЫ

Бурятия и Монголия: Станислав Цырь  
Телеграм: @bur24\_link\_bot  
эл.почта: bur.babr@gmail.com

Иркутск: Анастасия Суворова  
Телеграм: @irk24\_link\_bot  
эл.почта: irkbabr24@gmail.com

Красноярск: Ирина Манская  
Телеграм: @kras24\_link\_bot  
эл.почта: krasyar.babr@gmail.com

Новосибирск: Алина Обская  
Телеграм: @nsk24\_link\_bot  
эл.почта: nsk.babr@gmail.com

Томск: Николай Ушайкин  
Телеграм: @tomsk24\_link\_bot  
эл.почта: tomsk.babr@gmail.com

[Прислать свою новость](#)

## ЗАКАЗАТЬ РАЗМЕЩЕНИЕ:

Рекламная группа "Экватор"  
Телеграм: @babrobot\_bot  
эл.почта: equatoria@gmail.com

## СТРАТЕГИЧЕСКОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО:

эл.почта: babrmarket@gmail.com

[Подробнее о размещении](#)

[Отказ от ответственности](#)

[Правила перепечаток](#)

[Соглашение о франчайзинге](#)

[Что такое Бабр24](#)

[Вакансии](#)

[Статистика сайта](#)

[Архив](#)

[Календарь](#)

[Зеркала сайта](#)

