

## **ГРАФОВЫЕ И ГИПЕРГРАФОВЫЕ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛ УГЛЕВОДОРОДОВ: СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ**

**Фасхутдинова И.И., Скворцова М.И., Михайлова Н.А.**

Московский государственный университет тонких химических технологий  
им. М.В. Ломоносова, каф. Высшей и прикладной математики,  
Россия, 119571, г. Москва, пр-т Вернадского, 86, тел.(495)936-88-71,  
E-mail: skvorivan@mail.ru

Компьютерная химия – это область науки, возникшая на стыке химии, математики и информатики. К основным задачам компьютерной химии относят, в частности, задачи компьютерной генерации всех возможных реакций между заданными реагентами, построения моделей связи «структура-свойство» и прогнозирования свойств соединений при помощи этих моделей, компьютерного конструирования химических структур с заданными свойствами и т.д. Однако для решения вышеуказанных задач химические соединения должны быть, прежде всего, представлены в виде некоторых математических объектов. В связи с этим в компьютерной химии выделяют также и ряд узкоспециальных задач, связанных с построением математических моделей химических соединений, исследованием свойств этих моделей, разработкой различных алгоритмов (комбинаторных, оптимизационных и др.), оперирующих с выбранными математическими объектами.

Наиболее распространенный подход к описанию структуры молекулы основан на представлении ее в виде графа, вершины которого соответствуют атомам молекулы, а ребра - химическим связям. Для описания молекулярных структур использовались также и гиперграфы, но при этом рассматривались лишь соединения неклассического строения. Для описания структур классического строения гиперграфы не использовались. Следует отметить, что число работ, посвященных применению гиперграфов в химии, очень невелико (по сравнению с числом работ, связанных с применением графов в химии).

В настоящей работе предложен способ описания структур органических соединений классического строения, представляющих собой насыщенные углеводороды, в терминах гиперграфов специальной конструкции. Кроме того, проведено сравнение традиционной графовой модели и предложенной гиперграфовой модели таких соединений. Для этой цели введен ряд количественных критериев, характеризующих эффективность применения той или иной модели при решении определенных задач компьютерной химии. Для исследований использовано несколько разных наборов молекул углеводородов, представленных своими структурными формулами. Показано, что во всех случаях и по всем рассмотренным критериям гиперграфовая модель превосходит графовую. Кроме того, на основе инвариантов предложенных гиперграфов для соединений заданных выборок построен ряд корреляций «структура-свойство».