



ХЕМОИНФОРМАТИКА

Авторы: Е. В. Радченко, В. А. Палюлин

ХЕМОИНФОРМАТИКА (от *хемо...* и *информатика*), область химии, охватывающая применение методов информатики для решения широкого круга химич. задач, связанных с изучением веществ, их структуры, свойств и превращений. Х. оформилась как комплексная междисциплинарная область науки на рубеже 20–21 вв. в результате развития таких направлений исследований, как хранение и обработка химич. информации, математич. химия, анализ связи структуры соединений с их свойствами и биологич. активностью, молекулярное моделирование, анализ эксперим. данных, конструирование соединений с заданными свойствами и оптимизация условий реакций. Это связано со значит. общностью и взаимосвязью решаемых задач и применяемых методов, а также необходимостью работы с огромными объёмами разнородной информации. Наряду с методами химии и информатики в Х. активно применяются достижения мн. разделов математики, физики, биологии, медицины.

Базовую роль в Х. играют методы представления и обработки химич. информации: эффективное кодирование структурных формул и пространственных структур соединений, химич. реакций (трансформаций структур), а также связанных с ними данных разл. типов (логические, числовые, текстовые, спектральные и др.); работа с содержащими такую информацию базами данных (включая её хранение, поиск по структурам, структурным фрагментам и др. полям, передачу и модификацию); анализ и обработка химич. текстов, в т. ч. названий соединений; численное описание структуры соединений с помощью молекулярных дескрипторов; анализ и визуализация химич. пространства как совокупности возможных молекул, включая генерацию структур, оценку их сходства и разнообразия.

К числу задач молекулярного моделирования принадлежат визуализация пространственной и электронной структуры низкомолекулярных соединений и

макромолекул, в т. ч. биологических (молекулярная графика), а также моделирование их структуры и межмолекулярных взаимодействий с применением методов квантовой химии и молекулярной механики, молекулярной динамики и разл. полуэмпирич. и эвристич. подходов (молекулярный докинг, фармакофорные модели и др.).

X. также изучает задачи анализа эксперим. химич. данных с целью выявления в них закономерностей и построения предсказательных моделей с применением методов статистич. машинного обучения. Важное место в X. занимают методы моделирования связи структуры соединений с их свойствами и прогнозирования для новых соединений таких свойств, как физико-химич. характеристики и спектральные свойства, реакционная способность, биологич. активность, поведение в организме и др. X. разрабатывает методы поиска оптимальных решений как в химич. пространстве (молекулярный дизайн соединений с заданными свойствами и/или биологич. активностью, дизайн библиотек структур, определение структуры соединений на основе данных физико-химич. методов анализа, планирование синтеза – см. [Компьютерный синтез](#)), так и в пространстве разл. неструктурных параметров химич. процессов (планирование экспериментов, оптимизация условий реакций, управление технологич. процессами).

Литература

Лит.: Chemoinformatics: A textbook / Ed. J. Gasteiger, T. Engel. Weinheim, 2003; Handbook of chemoinformatics / Ed. J. Gasteiger. Weinheim, 2003. Vol. 1–4; Chemoinformatics and computational chemical biology / Ed. J. Bajorath. N. Y., 2011.