

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ХИМИЯ

BIOMEDICAL CHEMISTRY

DOI: 10.12731/2658-6649-2021-13-3-276-287

УДК 544.165:547.792+004.942

QSAR МОДЕЛИРОВАНИЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТРИАЗОЛА

А.Л. Осипов, В.П. Трушина

***Цель.** Разработка эффективных QSAR моделей предсказания антибактериальной активности для производных 1,2,4-триазола.*

***Методы и материалы исследования.** Материалом для научных исследований послужили экспериментальные данные антибактериальной активности производных 1,2,4-триазола. Исследования проводились с помощью методов: QSAR моделирования, программирования, регрессионного многомерного анализа с помощью молекулярных дескрипторов.*

***Результаты.** В работе описываются и анализируются математические модели предсказания антибактериальной активности на основе физико-химических параметров химических веществ. Проведены вычислительные эксперименты, которые продемонстрировали эффективность предложенных моделей. Сравнительный анализ моделей позволил выявить модель с наилучшими статистическими характеристиками: MAE=0,11; MAPE=10,74; точность прогноза=89,26%; MSE=0,0186; RMSE=0,1363.*

***Заключение.** Были разработаны QSAR модели для прогнозирования антибактериальной активности двадцати восьми производных 1,2,4-триазола. В качестве факторов в моделях использовались от одного до шести молекулярных дескрипторов, порождаемых автоматически из структурных формул. Выбраны наилучшие модели на основе вычисленных статистических характеристик.*

***Ключевые слова:** антибактериальная активность; количественные соотношения структура - активность; производные 1,2,4-триазола; многомерная линейная регрессия; молекулярные дескрипторы*

Для цитирования. Осипов А.Л., Трушина В.П. QSAR моделирование антибактериальной активности производных 1,2,4-триазола // Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture. 2021. Т. 13, № 3. С. 276-287. DOI: 10.12731/2658-6649-2021-13-3-276-287

QSAR MODELING OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY WITH 1,2,4-TRIAZOLE DERIVATIVES

A.L. Osipov, V.P. Trushina

Purpose. Development of effective QSAR models for predicting antibacterial activity for 1,2,4-triazole derivatives.

Materials and methods. Experimental data on the antibacterial activity of 1,2,4-triazole derivatives served as the material for scientific research. The research was carried out using the following methods: QSAR modeling, programming, regression multivariate analysis using molecular descriptors.

Results. The paper describes and analyzes mathematical models for predicting antibacterial activity based on the physical and chemical parameters of chemicals. Computational experiments were carried out, which demonstrated the effectiveness of the proposed models. Comparative analysis of the models revealed the model with the best statistical characteristics: MAE=0.11; MAPE=10.74; forecast accuracy=89.26%; MSE=0.0186; RMSE=0.1363.

Conclusion. QSAR models were developed to predict the antibacterial activity of twenty-eight 1,2,4-triazole derivatives. From one to six molecular descriptors generated automatically from structural formulas were used as factors in the models. The best models are selected based on the calculated statistical characteristics.

Keywords: antibacterial activity; quantitative structure-activity relationship; 1,2,4-triazole derivatives; multiple linear regression; molecular descriptors

For citation. Osipov A.L., Trushina V.P. QSAR Modeling of Antibacterial Activity with 1,2,4-Triazole Derivatives. Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture, 2021, vol. 13, no. 3, pp. 276-287. DOI: 10.12731/2658-6649-2021-13-3-276-287

Введение

Методология QSAR (quantitative structure-activity relationship – поиск количественных соотношений структура-активность) – важная отрасль теоретической медицины, позволяющая прогнозировать биологическую активность новых химических соединений на основе закономерностей (касающихся структурных, физико-химических и конформационных свойств

молекул), выявленных из предыдущих опытов [1-6]. В настоящее время имеется большое количество работ российских и зарубежных исследователей, посвященных разработке эффективных QSAR моделей в химии, биологии и медицине [7-22].

В работах [5, 7] представлены эффективные QSAR модели, построенные в каждом классе опасности, для прогнозирования токсикологических параметров химических веществ на основе структурных фрагментов. В статье [8] исследовалась взаимосвязь электронных параметров молекулы с канцерогенной активностью. В работах [9, 18-21] представлены результаты прогнозирования термодинамических свойств химических веществ с помощью QSAR моделей, в основе которых лежат множественные регрессионные зависимости.

В статье [11] представлены результаты поиска биологически активных веществ с противовоспалительным действием в ряду производных N-арилзамещенных антралиловых кислот в зависимости от параметра липофильности. В работе [12] получены зависимости между физико-химическими свойствами лигандов и их сорбционной активностью, которые используются для прогнозирования связывания лекарственных веществ перфтораном. В статье [13] разработаны два корреляционных уравнения, связывающих противомикробную активность от энергии связывания, межмолекулярной энергии и константы ингибирования. В работах [14-15] разработаны QSAR модели на основе регрессионных уравнений, которые используются в молекулярном дизайне соединений с противовоспалительной, анальгетической и противомикробной активностью производных антралиловой кислоты.

Представленные QSAR модели показывают высокую эффективность в прогнозировании различных физико-химических, биологических и лекарственных свойств.

Разработка новых QSAR моделей для предсказания антибактериальной активности производных 1,2,4-триазола представляется весьма актуальной задачей.

Методы и материалы исследования

В данной работе исходным материалом для проведения научных исследований послужили экспериментальные данные по антибактериальной активности 28 производных 1,2,4-триазола, представленных в статье [22]. Методы исследования: QSAR моделирование, программирование, множественный регрессионный анализ.

В качестве факторов в моделях использовались шесть типов молекулярных дескрипторов [22]. Два из них *eeig11r* и *eeig12r* это Edge adjacency indices. Дескриптор *ish* это GETAWAY descriptor. Два дескриптора *mor18v* и *mor20e* это 3D-MoRSE descriptors. Фактор *belm2* является дескриптором класса Burden eigenvalues.

Результаты исследований и их обсуждение

В статье [22] представлены результаты исследований по предсказанию антибактериальной активности производных 1,2,4-триазола с помощью линейных регрессионных моделей. Представлена многомерная линейная модель вида

$$\log X = -44,664 + 3,858eeig11r - 1,415mor20e + 23,672belm2 - \\ - 1,502eeig12r - 1,21mor18v - 2,834ish.$$

Статистические характеристики этой модели следующие: $R^2 = 0,9$; $F = 28,414$; $SE = 0,097$. Целевой показатель X определяет антибактериальную активность против *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumonia*.

На основе исходных данных статьи [22] и модели, представленной в этой работе, нами были рассчитаны прогнозные значения целевого показателя по выборке экспериментальных данных и получены следующие статистические характеристики: $MAE = 0,31$; $MAPE = 29,21$; $MSE = 0,446$; $RMSE = 0,667$. Точность прогноза равна $100 - MAPE = 70,79\%$. Коэффициент детерминации посчитать не удалось по данной модели, он оказался не входящим в интервал (0, 1). С помощью средств стандартного пакета MS Excel была рассчитана многомерная линейная регрессионная модель по экспериментальным данным, представленным в статье [22]. Данная модель оказалась другой по сравнению с представленной в работе [22] и имеет следующий вид

$$\log X = -32,9777 + 1,5499 \cdot eeig11r - 1,0848 \cdot mor20e + 18,4553belm2 - \\ - 2,1175 \cdot ish + 0,0664 \cdot eeig12r + 0,0624 \cdot mor18v.$$

Дальнейшие исследования связаны с получением наилучших QSAR моделей предсказания антибактериальной активности производных 1,2,4-триазола.

Получены следующие QSAR модели по предсказанию антибактериальной активности производных 1,2,4-триазола. В таблице 1 представлены модели и их статистические характеристики, зависящие от одного молекулярного дескриптора.

Таблица 1.

**Статистические характеристики моделей,
включающих один молекулярный дескриптор**

Модель	R^2	F	MAE	$MAPE$	MSE	$RMSE$	Точность прогноза в %
$\log X = 0,5776 \cdot eeig11r$	0,955	571,62	0,21	20,48	0,056	0,236	79,52
$\log X = 0,5628 \cdot mor20e$	0,913	284,52	0,278	26,43	0,107	0,327	73,57
$\log X = 0,569 \cdot belm2$	0,943	448,75	0,239	23,44	0,07	0,265	76,56
$\log X = 1,233 \cdot ish$	0,94	429,53	0,245	24,16	0,073	0,27	75,84
$\log X = 1,7258 \cdot \ln(eeig11r)$	0,958	651,03	0,193	18,61	0,052	0,228	81,39
$\log X = 1,6449 \cdot \ln(mor20e)$	0,877	191,8	0,32	29,98	0,152	0,39	70,02
$\log X = 1,6869 \cdot \ln(belm2)$	0,943	449,58	0,237	23,39	0,069	0,264	76,61
$\log X = -7,3873 \cdot \ln(ish)$	0,883	203,88	0,332	32,11	0,144	0,38	67,89

По статистическим характеристикам наилучшей моделью оказалось нелинейное уравнение вида $\log X = 1,7258 \cdot \ln(eeig11r)$ с точностью прогноза 81,39%, которая вычислялась по формуле 100- $MAPE$.

В таблице 2 представлены модели и их статистические характеристики, зависящие от двух молекулярных дескрипторов.

Таблица 2.

**Статистические характеристики моделей,
включающих два молекулярных дескриптора**

Модель	R^2	F	MAE	$MAPE$	MSE	$RMSE$
$\log X = 2,2272 \cdot \ln(belm2) - 0,5588 \cdot \ln(mor20e)$	0,95	235,7	0,229	22,73	0,064	0,254
$\log X = 2,72 \cdot \ln(eeig11r) - 1,01 \cdot \ln(mor20e)$	0,97	436,7	0,15	14,67	0,036	0,189
$\log X = 1,9504 \cdot \ln(eeig11r) - 0,2226 \cdot \ln(belm2)$	0,96	297,6	0,186	17,98	0,052	0,227
$\log X = 1,1887 \cdot eeig11r - 0,6132 \cdot mor20e$	0,97	422,1	0,156	15,2	0,037	0,192
$\log X = 1,8784 \cdot belm2 - 0,3133 \cdot mor20e$	0,95	234,9	0,229	22,78	0,065	0,254
$\log X = 1,0542 \cdot eeig11r - 0,4736 \cdot belm2$	0,96	295,8	0,189	18,15	0,052	0,228
$\log X = 0,8686 \cdot eeig11r - 0,6279 \cdot ish$	0,96	287,1	0,197	19,01	0,053	0,231

По статистическим характеристикам наилучшей моделью оказалось нелинейное уравнение вида $\log X = 2,72 \cdot \ln(eeig11r) - 1,01 \cdot \ln(mor20e)$ с точностью прогноза 85,33%, которая вычислялась по формуле 100- $MAPE$.

В таблице 3 представлены модели и их статистические характеристики, зависящие от более двух молекулярных дескрипторов.

Таблица 3.

**Статистические характеристики моделей,
включающих более двух молекулярных дескрипторов**

Модель	R^2	F	MAE	$MAPE$	MSE	$RMSE$
$\log X = 2,6081 \cdot \ln(eeig11r) - 1,0239 \cdot \ln(mor20e) + 0,1236 \cdot \ln(belm2)$	0,97	280,52	0,15	14,55	0,036	0,189
$\log X = 2,5613 \cdot \ln(eeig11r) - 1,3182 \cdot \ln(mor20e) + 0,0607 \cdot \ln(belm2) - 1,8443 \cdot \ln(ish)$	0,974	221,44	0,147	14,37	0,033	0,18
$\log X = -21,452 + 3,0036 \cdot \ln(eeig11r) - 1,9997 \cdot \ln(mor20e) + 33,7721 \cdot \ln(belm2) - 2,1272 \cdot \ln(ish)$	0,736	16,01	0,11	10,74	0,0186	0,1363
$\log X = -20,6294 - 3,0404 \cdot \ln(eeig11r) - 1,6358 \cdot \ln(mor20e) + 32,5515 \cdot \ln(belm2)$	0,678	16,87	0,119	11,78	0,023	0,15
$\log X = -29,8281 + 1,6214 \cdot eeig11r - 1,0943 \cdot mor20e + 16,8506 \cdot belm2 - 2,3192 \cdot ish$	0,724	15,1	0,115	11,1	0,0194	0,139
$\log X = 1,4035 \cdot eeig11r - 0,8228 \cdot mor20e + 1,2387 \cdot belm2 - 2,7034 \cdot ish$	0,975	235,46	0,141	13,81	0,031	0,175
$\log X = -32,9777 + 1,5499 \cdot eeig11r - 0,0848 \cdot mor20e + 18,4553 \cdot belm2 - 2,1175 \cdot ish + 0,0664 \cdot eeig12r + 0,0624 \cdot mor18v$	0,735	9,68	0,11	10,5	0,019	0,137
$\log X = 1,3993 \cdot eeig11r - 0,08824 \cdot mor20e + 1,2073 \cdot belm2 - 2,6605 \cdot ish + 0,0482 \cdot eeig12r + 0,081 \cdot mor18v$	0,976	148,51	0,134	13,28	0,029	0,172

По статистическим характеристикам наилучшая нелинейная модель по четырем факторам имеет следующий вид

$$\log X = -21,452 + 3,0036 \cdot \ln(eeig11r) - 1,9997 \cdot \ln(mor20e) + 33,7721 \cdot \ln(belm2) - 2,1272 \cdot \ln(ish)$$

с точностью прогноза 89,26%, которая вычислялась по формуле 100- $MAPE$.

С использованием шести факторов построена линейная модель с точностью прогноза 89,5% вида

$$\log X = -32,9777 + 1,5499 \cdot eeig11r - 0,0848 \cdot mor20e + 18,4553 \cdot belm2 - 2,1175 \cdot ish + 0,0664 \cdot eeig12r + 0,0624 \cdot mor18v$$

Данная модель по статистическим характеристикам мало отличается от предыдущей, но имеет большее количество факторов. Анализируя наилучшие модели, включающие один дескриптор, два дескриптора, более двух дескрипторов, можно заметить наличие в них дескриптора $eeig11r$. Поэтому данный дескриптор является наиболее важной переменной для прогнозирования антибактериальной активности производных 1,2,4-триазола с помощью QSAR моделей.

Заключение

Бактерии представляют собой серьезную угрозу для жизни многих организмов, включая и человеческое сообщество. В данной работе представлены QSAR модели прогнозирования антибактериальной активности, реализованные с помощью регрессионных зависимостей, факторы в которых выбирались из шести типов молекулярных дескрипторов. В наилучших моделях, построенных по одному, двум и более двух факторов, точность прогноза равнялась 81,39%, 85,33% и 89,26%. Выявлены дескрипторы из представленных шести типов, которые вносят наибольший вклад в антибактериальную активность производных 1,2,4-триазола. В результате проведенных изысканий предложены корреляционные уравнения для проведения дальнейших научных QSAR исследований, которые позволяют производить достоверный прогноз антибактериальной активности, выявляя соединения с высокой активностью до проведения их синтеза и биологических испытаний. Разработанные модели могут быть рекомендованы для практического применения в химико-биологических и медицинских исследованиях.

Информация о конфликте интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Информация о спонсорстве. Исследование не имело спонсорской поддержки.

Список литературы

1. Осипов А.Л., Трушина В.П. Теория принятия решений в химико-биологических исследованиях // В мире научных открытий. 2015. №4-2 (64). С. 843-849.
2. Интеллектуальные технологии анализа химико-биологических данных / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, Пятницев Д.В., Шляпкин Г.В., Павлик И.О. // В мире научных открытий. 2014. №12-2 (60). С. 749-757.
3. Осипов А.Л., Александров В.В. Методы статистической классификации химических веществ по степени токсичности // Автометрия. 2003. Т. 39, № 1. С. 114-125. <https://www.sibran.ru/upload/iblock/2c5/2c5c8914db7135d1cd352c421ef87c8b.pdf>
4. Осипов А.Л. Метод моделирования адиабатической температуры горения химических веществ на основе дескрипторов графов структурных формул // Автометрия. 2004. Т. 40, № 1. С. 74-83. <https://www.sibran.ru/upload/iblock/4/15/415d791111ccba0980dc85437fe760a3.pdf>

5. Осипов А.Л., Бобров Л.К. Прогнозирование свойств химических соединений на основе структурно-неаддитивных моделей с учетом парциальных вкладов структурных // Научно-техническая информация. Серия 2. Информационные процессы и системы. 2013. № 9. С. 35-39.
6. Осипов А.Л., Трушина В.П., Чентаева Е.А. Предсказание радиопротекторных свойств методами распознавания образов // В мире научных открытий. 2014. №4 (52). С. 123-127.
7. Осипов А.Л., Семенов Р.Д. Модели прогнозирования токсикологических свойств химических веществ // Автметрия. 1995. № 6. С. 101-106.
8. Осипов А.Л., Трушина В.П. Взаимосвязь электронных параметров молекулы с канцерогенной активностью // Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture. 2019. Т. 11, № 3-2. С. 54-57.
9. Осипов А.Л., Трушина В.П., Осипов Ф.Л. QSPR моделирование теплоемкости альдегидов // Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture. 2020. Т. 12, № 1. С. 92-97. <https://doi.org/10.12731/2658-6649-2020-12-1-92-97>
10. Осипов А.Л., Трушина В.П. Прогнозирование липофильных свойств производных адамантана // Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture. 2020. Т. 12. № 5. С. 11-15. <https://doi.org/10.12731/2658-6649-2020-12-5-11-15>
11. Андрюков К.В., Коркодинова Л.М. Константы липофильности в поиске биологически активных веществ с противовоспалительным действием в ряду производных N-арилзамещенных антралиловых кислот // Фундаментальные исследования. 2014. № 3. С. 533-538. <https://fundamental-research.ru/ru/article/view?id=33709>
12. Пшенкина Н.П., Софронов Г.А. Анализ и прогнозирование сорбции лекарственных веществ перфтораном на основе физико-химических свойств лигандов // Общая реаниматология. 2011. Том VII, № 3. С. 14-18. <https://doi.org/10.15360/1813-9779-2011-3-14>
13. Андрюков К.В., Коркодинова Л.М. Исследование связи “структура-противомикробная активность” с использованием молекулярного докинга в ряду замещенных амидов и гидразидов N-ароил-5-бром (5-хлор) антралиловых кислот // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Медицина. Фармация. 2018. Т. 41, № 3. С. 495-501. <https://doi.org/10.18413/2075-4728-2018-41-3-495-501>
14. Андрюков К.В., Коркодинова Л.М. Математическое моделирование с использованием регрессионных моделей в молекулярном дизайне соединений с противовоспалительной, анальгетической и противомикробной активностью производных антралиловой кислоты // Современные наукоемкие технологии. 2019. № 9. С. 31-35. <https://top-technologies.ru/ru/article/view?id=37661>

15. Андрюков К.В., Коркодинова Л.М. Поиск соединений с анальгетической активностью с использованием молекулярного докинга в исследованиях «структура-активность» по ферментам циклооксигеназа 1 и 2 в ряду Т-замещенных антралиловых кислот // International Journal of Applied and Fundamental Research. 2019. № 12. С. 60-64. <https://applied-research.ru/ru/article/view?id=12954>
16. Osipov A.L., Bobrov L.K. The use of statistical models of recognition in the virtual screening of chemical compounds // Automatic Documentation and Mathematical Linguistics. 2012. Т. 46, № 4. P. 153-158. <https://doi.org/10.3103/S0005105512040024>
17. Tarko L. A Selection Method for Molecular Descriptors and QSPR Equations // MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 2017. Vol. 77. P. 245-272. https://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match77/n2/match77n2_245-272.pdf
18. Mohammadinasab E. Determination of Critical Properties of Alkanes Derivatives using Multiple Linear Regression // Iranian Journal of Mathematical Chemistry. 2017. Vol. 8. № 2. P. 199-220. https://ijmc.kashanu.ac.ir/article_44911_fb51b07421247e66c784b0b7270c8254.pdf
19. Havare O. QSPR Analysis with Curvilinear Regression Modeling and Topological Indices // Iranian Journal of Mathematical Chemistry. 2019. Vol. 10. № 4. P. 331-341. <https://doi.org/10.22052/IJMC.2019.191865.1448>
20. Shafifi F. Relationship between Topological Indices and Thermodynamic Properties and of the Monocarboxylic Acids Applications in QSPR // Iranian Journal of Mathematical Chemistry. 2015. Vol. 6. No 1. P. 15-28. <https://dx.doi.org/10.22052/ijmc.2015.8944>
21. Forush M., Shafifi F., Dialamehpour F. QSPR Study on Benzene Derivatives to some Physico-Chemical Properties by using Topological Indices // Iranian Journal of Mathematical Chemistry. 2016. Vol. 7. No 1. P. 93-110. <https://dx.doi.org/10.22052/ijmc.2016.12410>
22. Rostami Z., Manesh A., Samie L. QSPR Modeling of Antimicrobial Activity with Some Novel 1,2,4-Triazole Derivatives, Comparison with Experimental Study // Iranian Journal of Mathematical Chemistry. 2013. Vol. 4. No 1. P. 91-109. <https://dx.doi.org/10.22052/ijmc.2013.5284>

References

1. Osipov A.L., Trushina V.P. Teoriya prinyatiya resheniy v khimiko-biologicheskikh issledovaniyakh [Decision making theory in chemical and biological research]. *V mire nauchnykh otkrytiy* [Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture], 2015, no. 4-2 (64), pp. 843-849.

2. Osipov A.L., Trushina V.P., Pyatnitsev D.V., Shlyapkin G.V., Pavlik I.O. Intellektual'nye tekhnologii analiza khimiko-biologicheskikh dannyykh [Intelligent technologies for the analysis of chemical and biological data]. *V mire nauchnykh otkrytiy* [Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture], 2014, no. 12-2 (60), pp. 749-757.
3. Osipov A.L., Aleksandrov V.V. *Avtometriya*, 2003, vol. 39, no. 1, pp. 114-125. <https://www.sibran.ru/upload/iblock/2c5/2c5c8914db7135d1cd352c421ef-87c8b.pdf>
4. Osipov A.L. *Avtometriya*, 2004, vol. 40, no. 1, pp. 74-83. <https://www.sibran.ru/upload/iblock/415/415d791111ccba0980dc85437fe760a3.pdf>
5. Osipov A.L., Bobrov L.K. Prognozirovaniye svoystv khimicheskikh soedineniy na osnove strukturno-neadditivnykh modeley s uchetom partial'nykh vkladov strukturnykh [Prediction of the properties of chemical compounds on the basis of structurally non-additive models taking into account the partial contributions of structural ones]. *Nauchno-tekhnicheskaya informatsiya. Seriya 2. Informatzionnye protsessy i sistemy*, 2013, no. 9, pp. 35-39.
6. Osipov A.L., Trushina V.P., Chentaeva E.A. Predskazaniye radioprotekturnykh svoystv metodami raspoznavaniya obrazov [Prediction of radioprotective properties by pattern recognition methods]. *V mire nauchnykh otkrytiy* [Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture], 2014, no. 4 (52), pp. 123-127.
7. Osipov A.L., Semenov R.D. Modeli prognozirovaniya toksikologicheskikh svoystv khimicheskikh veshchestv [Models for predicting the toxicological properties of chemicals]. *Avtometriya*, 1995, no. 6, pp. 101-106.
8. Osipov A.L., Trushina V.P. Vzaimosvyaz' elektronnykh parametrov molekuly s kantserogennoy aktivnost'yu [Interrelation of electronic parameters of a molecule with carcinogenic activity]. *Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture*, 2019, vol. 11, no. 3-2, pp. 54-57.
9. Osipov A.L., Trushina V.P., Osipov F.L. QSPR modelirovaniye teploemkosti al'degidov [QSPR modeling of heat capacity of aldehydes]. *Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture*, 2020, vol. 12, no. 1, pp. 92-97. <https://doi.org/10.12731/2658-6649-2020-12-1-92-97>
10. Osipov A.L., Trushina V.P. Prognozirovaniye lipofil'nykh svoystv proizvodnykh adamantana [Prediction of lipophilic properties of adamantane derivatives]. *Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture*, 2020, vol. 12, no. 5, pp. 11-15. <https://doi.org/10.12731/2658-6649-2020-12-5-11-15>
11. Andryukov K.V., Korkodinova L.M. *Fundamental'nye issledovaniya*, 2014, no. 3, pp. 533-538. <https://fundamental-research.ru/ru/article/view?id=33709>
12. Pshenkina N.P., Sofronov G.A. *Obshchaya reanimatologiya*, 2011, vol. VII, no. 3, pp. 14-18. <https://doi.org/10.15360/1813-9779-2011-3-14>

13. Andryukov K.V., Korkodinova L.M. *Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Meditsina. Farmatsiya*, 2018, vol. 41, no. 3, pp. 495-501. <https://doi.org/10.18413/2075-4728-2018-41-3-495-501>
14. Andryukov K.V., Korkodinova L.M. *Sovremennye naukoemkie tekhnologii*, 2019, no. 9, pp. 31-35. <https://top-technologies.ru/ru/article/view?id=37661>
15. Andryukov K.V., Korkodinova L.M. *International Journal of Applied and Fundamental Research*, 2019, no. 12, pp. 60-64. <https://applied-research.ru/ru/article/view?id=12954>
16. Osipov A.L., Bobrov L.K. The use of statistical models of recognition in the virtual screening of chemical compounds. *Automatic Documentation and Mathematical Linguistics*, 2012, vol. 46, no. 4, pp. 153-158. <https://doi.org/10.3103/S0005105512040024>
17. Tarko L. A Selection Method for Molecular Descriptors and QSPR Equations. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 2017, vol. 77, pp. 245-272. https://match.pmf.kg.ac.rs/electronic_versions/Match77/n2/match77n2_245-272.pdf
18. Mohammadinasab E. Determination of Critical Properties of Alkanes Derivatives using Multiple Linear Regression. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 2017, vol. 8, pp. 2, pp. 199-220. https://ijmc.kashanu.ac.ir/article_44911_fb51b07421247e66c784b0b7270c8254.pdf
19. Havare O. QSPR Analysis with Curvilinear Regression Modeling and Topological Indices. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 2019, vol. 10, no. 4, pp. 331-341. <https://doi.org/10.22052/IJMC.2019.191865.1448>
20. Shafifi F. Relationship between Topological Indices and Thermodynamic Properties and of the Monocarboxylic Acids Applications in QSPR. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 2015, vol. 6, no. 1, pp. 15-28. <https://dx.doi.org/10.22052/ijmc.2015.8944>
21. Forush M., Shafifi F., Dialamehpour F. QSPR Study on Benzene Derivatives to some Physico-Chemical Properties by using Topological Indices. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 2016, vol. 7, no. 1, pp. 93-110. <https://dx.doi.org/10.22052/ijmc.2016.12410>
22. Rostami Z., Manesh A., Samie L. QSPR Modeling of Antimicrobial Activity with Some Novel 1,2,4-Triazole Derivatives, Comparison with Experimental Study. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 2013, vol. 4, no. 1, pp. 91-109. <https://dx.doi.org/10.22052/ijmc.2013.5284>

ДАнные ОБ АВТОРАХ

Осипов Александр Леонидович, доцент, кандидат технических наук
ФГБОУ Новосибирский государственный университет экономики и управления

*ул. Каменская, 56, г. Новосибирск, Новосибирская область, 630099,
Российская Федерация
alosip@mail.ru*

Трушина Вероника Павловна, старший преподаватель

*ФГБОУ Новосибирский государственный университет экономики
и управления*

*ул. Каменская, 56, г. Новосибирск, Новосибирская область, 630099,
Российская Федерация
veronika07-92@mail.ru*

DATA ABOUT THE AUTHORS

Alexander L. Osipov, Associate Professor, Candidate of Engineering Science

*Novosibirsk State University of Economics and Management
56, Kamenskaya Str., Novosibirsk, 630099, Russian Federation
alosip@mail.ru*

ORCID: 0000-0002-1809-9147

SPIN-code: 5697-8004

Scopus Author ID: 7202978114

Veronika P. Trushina, Senior Lecturer

*Novosibirsk State University of Economics and Management
56, Kamenskaya Str., Novosibirsk, 630099, Russian Federation
veronika07-92@mail.ru*

ORCID: 0000-0003-1496-9069

SPIN-code: 6552-9660