

**Программа вступительного экзамена в аспирантуру ИФАВ РАН
по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ (химические науки)**

1. Понятие модели. Имитационное моделирование. Вычислительный эксперимент.
2. Модель, алгоритм, программа.
3. Понятие QSAR (Quantity Structure Activity Relationship)
4. Характеристики биологической активности соединений, используемые в QSAR.
5. Классификация дескрипторов.
6. Понятие молекулярных графов.
7. Дескрипторы структурной формулы. Понятие топологических индексов, индексы Рандича, Кира-Холла, Винера и др.
8. Кодирование структурных формул с помощью линейных номенклатур.
9. Дескрипторы электронной структуры молекул (заряды на атомах, электроотрицательность, квантово-химические дескриптора НОМО, LUMO)/
10. Дескрипторы молекулярной формы. Индексы Кира.
11. Константа Гаммета, константы Тафта.
12. Липофильность. Коэффициент распределения в системе октанол-воды как характеристика липофильности, $\log P$.
13. Описание стерических эффектов. STERIMOL.
14. Описание электростатических взаимодействий.
15. Описание способности соединений к образованию водородных связей.
16. Индикаторные дескрипторы.
17. Метод Ганча.
18. Метод Фри-Вильсона.
19. 3D QSAR. Метод сравнительного анализа молекулярного поля (CoMFA).
20. Статистические методы, применяемые в QSAR. Коэффициент корреляции, стандартное отклонение, критерий Фишера. Множественная линейная регрессия. Пошаговая регрессия.
21. Искусственные нейронные сети. Использование искусственных нейронных сетей в QSAR.

Литература.

1. П.Е.Кузнецов, Л.А.Грибов. Введение в молекулярное моделирование. (Учебное пособие). Изд-во Саратовского ун-та. Саратов, 2003. – есть в библиотеке ИФАВ
2. Э.Стьюпер, У.Брюггер, П.Джурс. Машинный анализ связи химической структуры и биологической активности. Мир, Москва, 1982