

Задачи классификации в оценке связи структура-запах для органических веществ

© Белик Александр Васильевич

Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский государственный университет. Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.

Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru

Ключевые слова: задачи классификации органических веществ, связь «структура-запах», модель «DENSON», структурно-чувствительный «частотный дескриптор» v_{cp} , геометрический структурный дескриптор S_d , расчетная относительная плотность d_4^{20} .

Аннотация

Рассмотрена задача классификации веществ по типу их запаха с помощью методов теории распознавания образов.

Показана принципиальная возможность с хорошим качеством классификации органических веществ на два класса запахов с применением простых алгоритмов классификации в дескрипторном пространстве v_{cp} , d_4^{20} и S_d .