

## ПРЕДСКАЗАНИЕ АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ АНТОЦИАНОВ: СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ

Зайцев В.Г.<sup>1,2</sup>, Никоненко А.В.<sup>2</sup>, Загребина З.Н.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ФНЦ агроэкологии РАН, Волгоград, Россия

<sup>2</sup>Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

<sup>3</sup>ООО «Фарм-Синтез Лаб», Москва, Россия

В последние годы показано, что положительное влияние антиоксидантов на здоровье человека лучше прослеживается при профилактическом применении. Это стимулировало усиление интереса к антиоксидантам пищи, включая антоцианы. Антоцианы хорошо растворимы в воде, что повышает биодоступность, обладают различными видами фармакологической активности и широко распространены в пищевых растениях. Известно более 500 видов антоцианов, но экспериментальные данные об антиоксидантной активности (АОА) ограничены. Для предсказания АОА антоцианов разработаны различные модели, однако их систематическое сравнение между собой не проводилось. В данном исследовании проведено сравнение результатов предсказания АОА большой выборки антоцианов с помощью моделей, разработанных как для антоцианов, так и для флавоноидов в-целом. Для SAR-моделей использовалось как качественное сравнение (АОА предсказана или не предсказана), так и условно количественное (вероятность наличия АОА). Сравнение QSAR-моделей основано на относительных рангах уровня предсказанной АОА внутри выборки антоцианов для каждой модели. Для сравнительного анализа были выбраны статистические модели с дескрипторами, модели, основанные на химическом сходстве и на молекулярном моделировании, и модели машинного обучения. Обнаруженные различия в спектре и уровнях АОА, предсказанной различными моделями, могут помочь в разработке более совершенных моделей.