**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ**

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

**Кафедра математической кибернетики**

ОСТАШЕНКО

Анастасия Алексеевна

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛЕТУЧЕСТИ**

**β-ДИКЕТОНАТОВ ДВУХВАЛЕНТНЫХ МЕТАЛЛОВ**

Дипломная работа

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук,

доцент Ю.М.Метельский

Допущена к защите

«\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2022 г.

Зав. кафедрой математической кибернетики

доктор физико-математических наук, профессор А.Л.Гладков

Минск, 2022

# **РЕФЕРАТ**

**Дипломная работа:** пояснительная записка на 32 страницах, 18 иллюстраций, 9 источников, 2 приложения.

**Ключевые слова:** хемоинформатика, графовая модель, химическое пространство, β-дикетонат, летучесть, С#.

**Объект исследования:** летучесть β-дикетонатов двухвалентных металлов.

**Цель исследования:** предложить метод построения графовой модели химического пространства летучести β-дикетонатов двухвалентных металлов, а также разработать и реализовать на одном из языков программирования алгоритм, генерирующий эту модель.

**Методы исследования:** анализ летучести β-дикетонатов двухвалентных металлов, комбинаторно-графовые методы, выбор инструментов, которые будут использоваться при разработке алгоритма.

В процессе работы был предложен метод для построения графовой модели химического пространства, узлы которой будут охватывать все возможные летучие соединения двухвалентных металлов, был разработан алгоритм для реализации данного метода для хелатобразующих соединений. Для каждого нового соединения произведён расчёт летучести. Конечной точкой стала визуализация данного графа с использованием языка программирования С#, а также расширяемого языка разметки XAML и его библиотеки GraphX.

**Область применения:** синтез летучих соединений, расширение пространства изученных элементов

# **РЭФЕРАТ**

**Дыпломная праца:** тлумачальная запіска на 32 старонках, 18 ілюстрацый, 9 крыніц, 2 прыкладання.

**Ключавыя словы**: хемоинфарматыка, графавая мадэль, хімічны прастор, β-дыкетанат, лятучасць, С#.

**Аб'ект даследавання:** лятучасць β-дыкетанатаў двухвалентных металаў.

**Мэта даследавання**: прапанаваць метад пабудовы графавай мадэлі хімічнай прасторы лятучасці β-дыкетанатаў двухвалентных металаў і рэалізаваць на адным з моў праграмавання дадзены алгарытм.

**Метады даследавання:** аналіз лятучасці β-дыкетанатаў двухвалентных металаў, камбінаторна-графавыя метады, выбар інструментаў, якія будуць выкарыстоўвацца пры распрацоўцы.

У працэсе працы быў прапанаваны метад для пабудовы графовой мадэлі хімічнай прасторы, вузлы якой будуць ахопліваць усе магчымыя лятучыя злучэнні двухвалентных металаў, быў прыдуманы алгарытм для рэалізацыі дадзенага метаду для хелатаабразуючых злучэнняў. Для кожнага новага злучэння выраблены разлік лятучасці. Канчатковай кропкай стала візуалізацыя дадзенага графа з выкарыстаннем мовы праграмавання С#, а таксама пашыраннай мовы разметкі XAML і яго бібліятэкі GraphX.

**Вобласць ужывання**: сінтэз лятучых злучэнняў, пашырэнне прасторы невывучаных элементаў

# **ABSTRACT**

**Degree paper:** 32 pages, 18 illustrations, 9 sources, 2 appendices.

**Keywords:** chemoinformatics, graph model, chemical space, β-diketonate, volatility, C#.

**Object of research:** volatility of β-diketonates of divalent metals.

**The purpose of the stud**y: to propose a method for constructing a graph model of the chemical space of the volatility of β-diketonates of divalent metals and to implement this algorithm in one of the programming languages.

**Research methods:** analysis of the volatility of β-diketonates of divalent metals, combinatorial graph methods, selection of tools to be used in the development. In the process of work, a method was proposed for constructing a graph model of the chemical space, the nodes of which will cover all possible volatile compounds of divalent metals, an algorithm was invented to implement this method for chelating compounds. The volatility was calculated for each new compound. The end point was the visualization of this graph using the C# programming language, as well as the extensible XAML markup language and its GraphX library.

**Area of possible practice application:** synthesis of volatile compounds, expansion of the space of unexplored elements