

Д.И. Осолодкин: Для всех исследованных вами классов соединений модели построены на очень маленьких выборках -- порядка 30 соединений. Насколько эти выборки соответствуют общему объёму доступных данных?

А.А. Буглак: По поводу маленьких выборок: поскольку экспериментальные данные должны измеряться в одинаковых условиях и одинаковых растворителях, выборки действительно небольшие.

В случае птеридинов это 29 соединений из 6 статей. Птеридинами я занимался длительное время, и уверен, что это исчерпывающая выборка. Правда со времени публикации статьи (2016 год) могли выйти новые данные.

Выборка по фурукумаринам - это 26 соединений и 2 статьи. Насколько я помню, измерения проводились в бензоле. Больше экспериментальных данных для этого растворителя я не нашел. Наконец, квантовые выходы порфиринов измерялись в толуоле. Все сделано на основе экспериментальных данных из одной статьи, но с точки зрения data consistency это даже хорошо.

Д.И. Осолодкин: Вы приводите информацию о предсказательной способности моделей на основании некоторого "внешнего контроля", однако никакой информации о соединениях тестовых выборок нет. Не могли бы вы уточнить, на каких соединениях проводился внешний контроль и давалась оценка предсказательной способности моделей?

А.А. Буглак: Тестовые выборки были получены методом случайной генерации из всей выборки.

Для птеридинов в тестовую выборку вошли:

sepiapterin, rhamnopterin, pterin, 6-hydroxymethyl-pterin, 6-methyl-alloxazine, folic acid.

Подробности - в статье: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/PP/C6PP00084C>

Для фурукумаринов в тестовую выборку вошли: 3-Acetoisopseudopsoralen

3-acetoisopseudopsoralen, 3-carbethoxypsoralen, 4,4'-dimethylangelicin, psoralen, 4,7,4'-trimethylallopsoralen. Все подробности - в статье:

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/NJ/C8NJ03002B>

Наконец, что касается порфиринов, в тестовую выборку вошли:

(p-Br)4-tetraphenylporphyrin, 5,10-NO₂-etioporphyrin I, deuteroporphyrin-IX-DME, N-CH₃-octaethylporphyrin, porphine, Zn-octaethylporphyrin. Статья - в процессе публикации.