

本发明公开了一种基于模糊神经网络的化学分子生物毒性预测模型的方法，利用模糊神经网络模型预测的方法实现生物毒性的提前预测和控制。针对在化学分子合成过程中，不同分子结构的化学分子疏水性对生物毒性的影响具有不确定性、非线性等特点，难以实现针对化学分子合成过程建立精确的模型，因此设计了基于自适应模糊神经网络的生物毒性预测模型，该方法通过调整模糊神经网络参数，提高神经网络处理能力，实现了化学分子的毒性高精度前端预测。实验结果表明该方法具有较好的自适应能力，能够达到提前预测和控制化学分子合成中的生物毒性，降低了化学合成的成本、缩短了化学合成的时间、减少了对环境的污染。