

1、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，针对化学分子合成中生物毒性量进行预测控制，以不同化学结构的疏水性为控制量，生物毒性量为被控量，其特征在于，包括以下步骤：

S1、建立生物毒性与辛醇/水分配系数的 QSAR 模型；

S2、建立模糊神经网络化学分子毒性预测模型；

S3、建立优化 NFN 参数的遗传算法模型；

步骤 S1 所述的建立生物毒性与辛醇/水分配系数的 QSAR 模型关系，具体是指，建立用于化学分子合成过程中生物毒性与辛醇/水分配系数的模型关系，生物毒性用  $LC_{50}$  半数致死浓度表示；其步骤为：利用回归分析法推导  $\log Kow$  和毒性  $EC_{50}$  之间的数学表达式，建立方程： $y = ax + b$ ，其中  $y$  表示毒性效应浓度，即为  $\log LC_{50}$ ，单位为  $mmol/L$ ， $x$  是  $\log Kow$  值；最终得到公式：

$$\log(LC_{50}) = a\log(Kow) + b \quad (1)$$

式 (1) 中的  $a$ ， $b$  为线性回归系数，应用这些导出的线性方程后，用于计算未测试化学品的毒性值， $mmol/L$ ；

步骤 S2 所述的模糊神经网络化学分子毒性预测模型，建立了基于 Sugeno 模型，并选取了包含 5 层的 NFN 结构，包括：输入层、可信度层、归一化层、解模糊层、输出层，下面是各层的计算函数：

网络第一层为输入层，主要目的是将输入信号模糊化，得到信号隶属度；采用某种函数来实现，通常包括高斯函数，钟形函数、Sigmoid 函数，这里我们采用高斯函数来实现：

$$\mu(x_i) = e^{-((x_i - c)/a)^2} \quad (2)$$

式中， $i$  取值 1、2， $c$  为函数的中心值， $a$  为函数的中心宽度值；

网络第二层是可信度层，目的是把模糊化的信号隶属度结果相乘，实际得到的是每条模糊推理规则的可信度；

$$\omega_1 = \mu_1\mu_3, \quad \omega_2 = \mu_1\mu_4, \quad \omega_3 = \mu_2\mu_3, \quad \omega_4 = \mu_2\mu_4 \quad (3)$$

网络第三层为归一化层，目的是将可信度层的可信度进行归一化计算；

$$\bar{\omega}_1 = \omega_1 / \sum \omega_i, \quad \bar{\omega}_2 = \omega_2 / \sum \omega_i, \quad \bar{\omega}_3 = \omega_3 / \sum \omega_i, \quad \bar{\omega}_4 = \omega_4 / \sum \omega_i \quad (4)$$

网络第四层为解模糊层，目的是计算每条规则的输出，把输入信号  $x_1$ ， $x_2$  引入解模糊网络模型，通常包括一阶 Sugeno 模型或者二阶 Sugeno 模型，这里我们采用一阶 Sugeno 模型，其函数如下：

## 权 利 要 求 书

---

$$O_n = \overline{\omega_n}(P_n x_1 + Q_n x_2 + R_n) \quad (5)$$

式中, n 取值 1、2、3、4, P, Q, R 为线性回归系数;

网络第五层为输出层, 是各条规则的累加,  $y = \sum O_n$ ;

所述步骤 S3 中提到的建立优化 NFN 参数的遗传算法模型, 具体是修正了模糊神经网络参数, 使得计算值更加精确; 建立符合度函数:

$$F=1/(1+E) \quad (6)$$

$$E = \sum_{i=1}^{\infty} [(F(i) - F_p)^2] \quad (7)$$

式中,

E 为与控制目标的误差;

F(t)是模糊神经网络模型的输出;

F<sub>p</sub> 是输出的控制目标。

2、根据权利要求 1 所述的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, 其特征在于, 完成上述步骤后, 进行:

步骤 S4、利用优化后的模糊神经网络模型对新分子的生物毒性值进行计算预测, 根据所计算的生物毒性值判断该分子是否符合要求。