



## BP神经网络预测二肽模型多极展开属性计算方法

文献类型: 专利

...

**作者** 李国辉; 李焱; 彭向达; 张鼎林

**发表日期** 2015-11-01

**专利国别** CN

**专利号** CN201310690175.5

**专利类型** 发明

**权利人** 中国科学院大连化学物理研究所

**是否PCT专利** 否

**中文摘要** 本发明涉及基于BP神经网络预测二肽模型多极展开属性计算方法, 包括以下步骤: 通过量子力学计算软件Gaussian优化不同二肽构象的结构, 并计算其物理化学参数及原子间相互距离; 选择部分二肽构象的原子的物理化学参数以及原子间相互距离训练BP神经网络, 得到BP神经网络的物理化学参数; 并通过剩余的二肽构象作为测试集验证BP神经网络的预测结果。本发明通过BP神经网络预测代替量子力学计算Gaussian软件进行的量子力学计算。在基于力场信息的分子力学模拟的基础上, 本发明可以快速的针对不同构象给出二肽的能量, 多极距等物理化学参数等信息。在可接受的误差范围内, 极大地减少了计算的时间和计算量, 大大地提高了动力学模拟过程中的精度。

**学科主题** 物理化学

**公开日期** 2015-06-17

**授权日期** 2015-11-01

**申请日期** 2013-12-12

**语种** 中文

**专利申请号** CN201310690175.5

**源URL** [<http://cas-ir.dicp.ac.cn/handle/321008/144848>]

**专题** 大连化学物理研究所\_中国科学院大连化学物理研究所

**作者单位** 中国科学院大连化学物理研究所

**推荐引用方式** 李国辉,李焱,彭向达,等. BP神经网络预测二肽模型多极展开属性计算方法, BP神经网络预测二肽模型多极展开属性计算方法, BP神经网络预测二肽模型多极展开属性计算方法, BP神经网络预测二肽模型多极展开属性计算方法. CN201310690175.5. 2015-11-01.

入库方式: OAI收割

来源: 大连化学物理研究所

浏览	下载	收藏
86	0	0

其他版本

除非特别说明, 本系统中所有内容都受版权保护, 并保留所有权利。