

Е.Г. Мокшина, аспирантка, **В.Е. Кузьмин**, доктор хим. наук, **В.И. Недоступ**, доктор техн. наук
Физико-химический институт имени А.В. Богатского НАН Украины, Люстдорфская дорога, 86, г. Одесса,
Украина, 65080.
e-mail: mokshinaelena@ukr.net

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ И АЦЕНТРИЧЕСКОГО ФАКТОРА МНОГОАТОМНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО НЕИЗУЧЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

Ежегодно синтезируются многоатомные химические соединения. Их внедрение в различные технологические процессы сдерживается из-за отсутствия надёжных экспериментальных p , v , T — данных этих соединений. Для прогнозирования их термодинамических свойств, например, критических температур, объёмов, давлений и фактора Питцера, можно применять QSPR-модели, позволяющие находить количественные отношения в системе «структура-свойство». Исследуемые соединения описываются с помощью симплексного представления молекулярной структуры веществ (СПМС). Модели построены с использованием нелинейного метода машинного обучения «Random Forest». СПМС-подход показал себя как эффективный способ изучения и прогнозирования термодинамических свойств соединений. Достаточная точность полученных результатов, наглядная интерпретируемость симплексных дескрипторов и их влияние на проявление свойств критического типа позволяют рекомендовать симплексный метод в качестве инструмента для изучения и прогнозирования критических свойств веществ.

Ключевые слова: Термодинамические свойства. Молекулярная структура. Критические параметры. Ацентрический фактор.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

AAE — средняя абсолютная ошибка;
 k — константа Больцмана;
 p — давление;
 R^2 — коэффициент детерминации;
 S — среднее квадратичное отклонение;
 T — абсолютная температура;
 v — удельный объём;
 ϵ и σ — параметры потенциала Леннарда-Джонса;
 ω — фактор ацентричности Питцера.

Индексы:

c — параметр критической точки

1. ВВЕДЕНИЕ

Все большее количество новых совершенно неисследованных соединений находят применение в технологических процессах различного назначения. Отсутствие информации о термодинамических свойствах часто становится принципиальным препятствием широкого использования этих соединений. Единственно возможный путь связан с применением математического аппарата, основанного на концепциях термодинамического подобия. Но для этого необходимо знать, как минимум, критические параметры этих веществ и, с целью обеспечения более высокой точности, — ацентрический фактор.

К настоящему времени выполнено много иссле-

дований, посвященных определению критических параметров многоатомных молекул на основании вкладов структурных факторов, как например, в методе Джобака [1]. Однако все эти работы носят интерполяционный характер и обеспечивают достаточно высокую точность только для веществ, относящихся к одному гомологическому ряду, или для тех, чьи данные использовались при разработке методики. Общий подход, основанный на современных информационных технологиях, находится только в стадии формирования [2, 3].

В данной работе сделана попытка построения комплекса количественных соотношений «структура-свойство» веществ в виде QSPR-моделей, основанных на симплексном представлении молекулярной структуры, для больших выборок соединений различных классов. Это вызывает интерес благодаря малой трудоемкости подхода, использующего 2D-представление молекулярной структуры, его широкой применимости и наглядной интерпретируемости полученных результатов.

2. ФОРМИРОВАНИЕ БАЗЫ ДАННЫХ

Большой массив накопленных экспериментальных данных по критическим свойствам позволяет составить представительную выборку, включающую информацию о значительном числе соединений различных классов. Соединения, вошедшие в выборку, были взяты из открытой базы данных NIST WebBook [4].

На основе этого сформированы базы данных, в