

Модель QSPR для прогноза динамической вязкости аренов по топологическим характеристикам молекул

© Доломатов^{1,2*} Михаил Юрьевич, Аубекеров¹ Тимур Мендбайулы,
Коледин¹⁺ Олег Сергеевич, Ковалева³ Элла Александровна,
Ахтямова¹ Камила Ришатовна и Вагапова¹ Элина Венеровна

¹ Кафедра технологии нефти и газа; ³ Кафедра математики. Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.
Тел.: (987) 606-47-91. E-mail: o.s.koledin@yandex.ru

² Кафедра физической электроники и нанофизики. Башкирский государственный университет.
ул. Заки-Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия.
Тел.: (917) 429-44-63. E-mail: mdolomatov@bk.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: арены; динамическая вязкость; топологические индексы; собственные значения топологической матрицы; модель QSPR.

Аннотация

Прогнозирование динамической вязкости насыщенных паров углеводородов является важным этапом при расчете различных процессов и аппаратов в химической технологии.

Для того, чтобы оперативно определить динамическую вязкость, не прибегая к использованию дорогостоящего оборудования, в настоящее время применяются методы математического моделирования. Для прогноза динамической вязкости насыщенных паров аренов предложена нелинейная многомерная регрессионная модель QSPR.

Модель связывает с динамической вязкостью набор дескрипторов – топологические характеристики молекулярных графов: индекс Рандича, индекс Винера, а также функции собственных значений топологической матрицы молекулы, отражающие основные структурно-химические факторы, такие как разветвленность, протяженность углеродного скелета и энергетические параметры молекул, например, возмущение хюккелевского спектра молекул, влияющие на динамическую вязкость.

В качестве объектов исследования использовались арены. Исследуемая выборка включала в себя 40 углеводородов. Предложенная модель, адекватно описывает динамическую вязкость насыщенных паров аренов: коэффициент детерминации модели равен 0.986, средние абсолютная и относительная ошибки для тестовой выборки составляют $-2.46 \cdot 10^{-7}$ сП и 1.83% соответственно.

Модель применима для инженерных и научных прогнозов динамической вязкости насыщенных паров при различных температурах.