

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ СТРУКТУРОЙ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ АЛКИЛБЕНЗОЛОВ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ ГРАФОВ

Шапиро И.В., Скворцова М.И.

Московский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, каф. Высшей и прикладной математики, Россия, 119571, г. Москва, пр-т Вернадского, 86, тел. (495) 936-88-71, e-mail: skvorivan@mail.ru

Проблема моделирования связи между структурой и свойствами органических соединений – важнейшая математическая задача современной теоретической и компьютерной химии. Найденные закономерности позволяют прогнозировать свойства химических соединений непосредственно по их структуре, минуя эксперимент, и могут быть использованы для целенаправленного поиска соединений с заданными свойствами.

В работе построен и исследован ряд математических моделей связи «структура-свойство» специального вида для некоторых физико-химических свойств алкилбензолов (температуры кипения, плотности, теплоты сгорания, показателя преломления). В качестве исходных данных для построения моделей используется некоторая выборка соединений вышеуказанного класса, представленных своими структурными формулами, для которых известны численные значения u изучаемых свойств [1]. Далее структуры соединений представляются в виде графов, вершины которых соответствуют атомам углерода в молекулах, а ребра – химическим связям; атомы водорода при этом игнорируются. Затем проводится классификация вершин построенных молекулярных графов (например, по их степеням) и вершинам одного класса с номером i приписывается неопределенный вес x_i ($i=1,2,\dots$). Предполагается, что искомые модели имеют вид специальных нелинейных уравнений $y=F(x_1, x_2, \dots)$, связывающих определенным образом изучаемое свойство y и веса x_i ($i=1,2,\dots$) вершин соответствующих графов. Далее веса вершин x_i ($i=1,2,\dots$) подбираются по исходной выборке соединений так, чтобы уравнение $y=F(x_1, x_2, \dots)$ было бы как можно более точным на исходной выборке соединений. Для построенных моделей была проведена оценка точности прогноза свойств соединений на их основе как для исходной выборки, так и для некоторой тестовой выборки соединений. Полученные результаты свидетельствуют об эффективности использованного подхода для моделирования связи между структурой и физико-химическими свойствами алкилбензолов; при этом использование более детальной классификации вершин графов позволяет получить более точные результаты. Разработанные модели могут быть использованы для расчета свойств соединений, для которых отсутствуют экспериментальные данные.

Литература.

1. Оболенцев Р.Д. Физические константы углеводородов, жидких топлив и масел. - М.: Госуд. научно-техн. изд-во нефтяной и горно-топливной литературы, 1953, 287 стр.