مدل QSPR برای پیشگویی ثابت قانون هنری ترکیبات آلی در آب با استفاده از شبکه عصب مصنوعی

حسن مدرسی، حمید مدرس

دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

H_modarresi@yahoo.com

چکیده

مدل‌های QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) راهکاری برای پیشگویی خواص ترکیبات آلی بر مبنای ساختار مولکولی می‌باشند. مزیت چنین مدلهایی در بی‌نیازی به داده‌های تجربی دیگر جهت پیشگویی خواص مورد نظر و کاربرد آنها برای حتی ترکیباتی است که ممکن است هنوز سنتز نشده باشند. در مقاله حاضر مدلی جهت پیشگویی ثابت قانون هنری ترکیبات آلی در آب که کاربرد گسترده‌ای در مهندسی محیط‌زیست دارند، ارائه شده‌است. از توصیفگرهای مولکولی صرفاً محاسباتی بعنوان ورودی‌های مدل و از ابزار قدرتمند شبکه‌های عصب مصنوعی (پرسپترونهای چند لایه‌ای) جهت توسعه مدل غیرخطی استفاده شده است. مدل اخیر بر مبنای داده‌های تجربی ثابت هنری ۱۳۷ ترکیب آلی متعدد بدست آمده است. مجذور میانگین مربعات خطاهای(RMS) برابر ۰/۱۱ ، ۰/۴۳ و ۰/۱۸ برای بترتیب داده‌های آموزشی، ارزیابی و کلی با معماری شبکه عصب مصنوعی ۱-۶-۱۱-۱۵ بدست آمد. نتایج محاسبات و مقایسه آنها با چهار مدل پیشین نیز آورده شده‌است.

واژه‌های کلیدی: شبکه‌های عصب مصنوعی؛ ثابت قانون هنری؛ مکانیک کوانتومی؛QSPR

مقدمه

زمانیکه یک ماده شیمیایی به یک سیستم دوفازی وارد می‌شود، اصول ترمودینامیکی ایجاب می‌کنند که جسم حل شونده بین دو فاز توزیع گردد تا تعادل برقرار شود. مفهوم چنین تعادلی برای انحلال گاز در مایع، اولین بار توسط ویلیام هنری (William Henry) در قرن نوزدهم میلادی مطرح شد. بر طبق این قانون فشار جزئی جزء گازی حل‌شونده (P_i) در مایع متناسب با جزء مولی آن در فاز مایع (x_i) می‌باشد:

$$P_i = H_i x_i \qquad (۱)$$

در رابطه (۱) ثابت تناسب (H_i) به ثابت قانون هنری معروف است. بر اساس این رابطه، هرچقدر که ثابت قانون هنری بزرگتر باشد فراریت آن از فاز مایع بیشتر و به تبع آن انتقال آن از فاز مایع به فاز گاز راحتر خواهد بود.[۱]

تعریف ثابت قانون هنری برای ترکیباتی همانند مایعات و جامدات که دمای بحرانی آنها بیشتر از دمای مورد مطالعه باشند، متفاوت خواهد بود. در این حالت فوگاسیته جزء i در محلول مایع بوسیله رابطه زیر به جزء مولی آن در محلول مرتبط می‌شود:

$$\hat{f}_i^{l} = \gamma_i x_i f_i^{\circ} \qquad (۲)$$