

عنوان مقاله:

پیشگویی نفوذ الکله در هوا با استفاده از روابط کمی ساختار خاصیت جدید و کارا

محل انتشار:

شانزدهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسنده:

ابوذر خواجه - گروه مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی بیرجند، بیرجند، ایران

خلاصه مقاله:

در این مقاله روابط کمی ساختار - خاصیت (QSPR) بمنظور مدلسازی ضریب نفوذ الکله ها در هوا بر اساس یک بانک اطلاعاتی حاوی 185 الکله پرکاربرد ارائه شده است. بمنظور ایجاد روابط کمی بین ضریب نفوذ الکله ها در هوا و خصوصیات ساختاریشان، توصیف گرهایی با انواع مختلف استفاده شد. مدل QSPR ایجاد شده با استفاده از روش تخمین تابع ژنتیک (GFA) دارای خطای R2 برابر 0/9543 برای دسته آموزش و 0/9828 برای دسته آزمون می باشد. بمنظور بررسی رفتار غیر خطی توصیفگرهای مولکولی انتخابی با استفاده از روش GFA، مدلی غیر خطی با استفاده از روش ANFIS بر روی داده های مشابه ایجاد شد. مدل ایجاد شده با استفاده از ANFIS بر اساس مقادیر R2 برای دسته آموزش و آزمون که بترتیب برابر 0/9677 و 0/9833 هستند، دارای نتایج مناسبی است. بررسی توصیفگرهای انتخابی نشان می دهد، متوسط فاصله اتم ها در یک مولکول بیشترین تاثیر را بر ضریب نفوذ الکله ها در هوا دارد و با افزایش آن ضریب نفوذ افزایش می یابد. نتایج بدست آمده در این مقاله نشان می دهند که با استفاده از مدل های پیشنهادی می توان ضریب نفوذ الکله ها در هوا را با دقت بالایی تخمین زد.

کلمات کلیدی:

روابط کمی ساختار خاصیت، ضریب نفوذ، - الکله، هوا، ANFIS، GFA

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/860104>

