

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U107229

Державний реєстраційний номер: 0121U100646

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Формування і верифікація баз даних по основним критеріям подоби реальних газів.
Генерація початкових навчальних і тестових наборів.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім.
О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 974.612
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Моделі QSPR для прогнозування основних критеріїв подоби реальних газів і відновлення кривих пружності органічних сполук, які експериментально не вивчені

Назва роботи англійською:

QSPR models for predicting the main criteria of similarity of real gases and recovery of elasticity curves of organic compounds which have not been studied experimentally

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – система структурного опису органічних сполук для прогнозування основних критеріїв подоби реальних газів (критичного фактору стисливості (Z_c), фактору ацентричності Пітцера (ρ) та критерію Ріделя (ρ_c)), структурні і фізико-хімічні фактори, що впливають на досліджувані властивості. Мета роботи – розробка моделей QSPR для прогнозування основних критеріїв подоби реальних газів і відновлення кривих пружності органічних сполук різної структури для розробки хіміко-технологічних процесів. Методи дослідження – QSPR моделювання (Quantitative Structure-Property Relationships – кількісні співвідношення «структура-властивість») на основі методу симплексного представлення молекулярної структури; статистичні методи лінійного регресійний аналізу, метод часткових найменших квадратів (PLS), метод тренд-вектору, метод випадкового лісу, метод опорних векторів. Об'єкт розробки – QSPR моделі для прогнозування основних критеріїв подоби реальних газів. На першому етапі роботи на основі аналізу літературних даних сформовано бази даних по основним критеріям подоби реальних газів. Масив накопичених експериментальних даних по цим властивостями дозволив скласти представницьку вибірку: для критичного фактору стисливості та для фактору Пітцера – 330, для критерія – Ріделя 52. У навчальних вибірках представлені карбон-, галоген-, кисень-, азот- і сірковмісні органічні сполуки. Розглянуті класи включають в себе насичені і ненасичені вуглеводні, ароматичні вуглеводні, гетероциклічні сполуки, спирти, прості і складні ефіри та їх похідні. Різноманітність вибірок дасть можливість побудувати досить універсальні QSPR-моделі.

Реферат англійською:

The object of research is a system of structural description of organic compounds for prediction of the main criteria of similarity of real gases (critical compressibility factor (Z_c), Pitzer's acentricity factor (ρ) and Riedel's criterion (ρ_c)), structural and physicochemical factors influencing on the studied properties. The aim of the work is to develop QSPR models for prediction of the main criteria of similarity of real gases and recovery of elasticity curves of organic compounds of different structure for the development of chemical-technological processes. Research methods – QSPR modeling (Quantitative Structure-Property Relationships – quantitative relations "structure-property") based on the method of simplex representation of molecular structure; statistical methods of linear regression analysis, partial least squares method (PLS), trend vector method, random forest method, support vector machine. Object of development – QSPR models for predicting the main criteria of similarity of real gases. At the first stage of work on the basis of the analysis of literature data databases on the basic criteria of similarity of real gases are formed. The array of accumulated experimental data on these properties allowed to make a representative sample: for the critical compressibility factor and for the Pitzer factor – 330, for the criterion – Riedel 52. The training samples presented carbon-, halogen-, oxygen-, nitrogen- and sulfur-containing organic compounds. The classes considered include saturated and unsaturated hydrocarbons, aromatic hydrocarbons, heterocyclic compounds, alcohols, ethers and esters and their derivatives. The variety of samples will allow you to build a fairly universal QSPR-models.

Індекс УДК: 54:51Ф7; 54:007 , 004.42: 541.66

Коди тематичних рубрик:31.01.77

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Недоступ Вадим Іоаннович

Науковий ступінь: д. т. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Бази даних по основним критеріям подоби реальних газів: критичному фактору стисливості (330 сполук), фактору ацентричності Пітцера (330 сполук) та критерію Ріделя (52 сполуки).

Назва НТП англійською: Databases on the main similarity criteria of real gases: critical compressibility factor (330 compounds), Pitzer's acentricity factor (330 compounds) and Riedel's criterion (52 compounds).

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Хімічне виробництво

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі аналізу літературних даних сформовано бази даних по основним критеріям подоби реальних газів (критичний фактор стисливості (Z_c), фактор ацентричності Пітцера (p) та критерій Ріделя (pc). Масив накопичених експериментальних даних по цим властивостям дозволив скласти представницьку вибірку: для критичного фактору стисливості та для фактору Пітцера – 330, для критерія – Ріделя 52. У навчальних вибірках представлені карбон-, галоген-, кисень-, азот- і сірковмісні органічні сполуки. Розглянуті класи включають в себе насичені і ненасичені вуглеводні, ароматичні вуглеводні, гетероциклічні сполуки, спирти, прості і складні ефіри та їх похідні. Різноманітність вибірок дасть можливість побудувати досить універсальні QSPR-моделі.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів, Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Споживачі продукції: Споживачі: науково-дослідні інститути хімічного, біологічного та фармацевтичного напрямку та служби і установи, що займаються аналізом екологічної безпеки сполук.

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Мокшина Е.Г. Метод определения критических параметров и ацентрического фактора многоатомных экспериментально неизученных веществ/ Е.Г. Мокшина, В.Е. Кузьмин, В.И. Недоступ//Технические газы. – 2014. – № 1. – С. 52-58. – ISSN 1682-0355

X. Заклучні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович
д. х. н., 02.00.01

Перелік осіб-виконавців

Артеменко Анатолій Григорович
(к. х. н., 02.00.03)

Кузьмін Віктор Євгенович
(д. х. н.)

Михайлова Тетяна Вікторівна
(к. х. н.)

Муратов Вячеслав Наїлевич
Недоступ Вадим Іоаннович
(д. т. н.)

Огніченко Людмила Миколаївна
(к. х. н.)

Хромов Олександр Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Іллюшко Н. О.

Телефон

+38 (067) 724-39-55

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності

