

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100348

Державний реєстраційний номер: 0119U002033

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: QSPR аналіз транспортних властивостей (коефіцієнтів в'язкості та теплопровідності) органічних сполук та їх сумішей в газовій фазі. Реалізація та впровадження експертної системи.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Остаточний 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, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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.): 439.579
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Прогнозування транспортних властивостей (коефіцієнтів в'язкості та теплопровідності) органічних сполук та їх сумішей в газовій фазі на основі QSPR аналізу.

Назва роботи англійською:

Prediction of transport properties (coefficients of viscosity and thermal conductivity) of organic compounds and their mixtures in the gas phase on the basis of QSPR analysis.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - система структурного опису органічних сполук та їх бінарних сумішей для прогнозування транспортних властивостей (коефіцієнтів в'язкості та теплопровідності) органічних сполук та їх сумішей в газовій фазі, структурні і фізико-хімічні фактори, що впливають на досліджувані властивості. Мета роботи - розробка QSPR моделей транспортних властивостей (коефіцієнтів в'язкості та теплопровідності) органічних сполук та їх сумішей в газовій фазі.. Сформовано бази даних транспортних властивостей індивідуальних речовин та бінарних сумішей. Розроблено нові QSPR моделі, які прогнозують транспортні параметри індивідуальних органічних речовин та їх бінарних сумішей. На основі побудованих QSPR моделей сформована експертна система для позаекспериментального скринінгу транспортних параметрів органічних речовин різних класів.

Реферат англійською:

The object of the research is a system of structural description of organic compounds and their binary mixtures for predicting of transport properties (viscosity and thermal conductivity) of organic compounds and their mixtures in the gas phase, structural and physicochemical factors affecting the studied properties. The purpose of the work is to develop QSPR models of transport properties (viscosity and thermal conductivity coefficients) of organic compounds and their mixtures in the gas phase. Databases of transport properties of individual substances and binary mixtures has been developed. QSPR models have been developed for prediction of the transport parameters of individual organic substances and their binary mixtures. An expert system for non-experimental screening of transport parameters of organic substances of different classes based on the constructed QSPR models has been developed.

Індекс УДК: 519.72;621.391, 004.42: 541.66

Коди тематичних рубрик: 28.21

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. т. н.

Вчене звання: професор, г.н.с

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерна експертна система для прогнозу в'язкості та теплопровідності органічних речовин в газовій фазі.

Назва НТП англійською: The computer expert system for prediction of the viscosity and thermal conductivity of organic substances in the gas phase.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Програмні продукти

Галузь застосування: Хімічне виробництво

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Сформовано бази даних транспортних властивостей індивідуальних речовин та бінарних сумішей. Розроблено нові QSPR моделі, які прогнозують транспортні параметри індивідуальних органічних речовин та їх бінарних сумішей. На основі побудованих QSPR моделей сформована експертна система для позаекспериментального скринінгу транспортних параметрів органічних речовин різних класів.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: Інститут Холоду, кріотехнологій і екоенергетики ім. проф. В.С.Мартинівського Одеської національної академії харчових технологій.

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Андронаті Сергій Андрійович

Д. Х. Н.

Перелік осіб-виконавців

Артеменко Анатолій Григорович

(к. х. н., 02.00.03)

Кузьмін Віктор Євгенович

(д. х. н.)

Кулінський Максим Олександрович

Михайлова Тетяна Вікторівна

Недоступ Вадим Іоаннович

(д. т. н.)

Огніченко Людмила Миколаївна

(к. х. н.)

Хромов Олександр Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Ільюшко Н. О.

Телефон

+38 (048) 793-70-78

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

