

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005777

Державний реєстраційний номер: 0121U100646

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Аналіз і узагальнення результатів дослідження зв'язку між структурою та критеріями подоби вивчених сполук. Виявлення структурних факторів, що впливають на прояв специфічних властивостей. Побудова експертної системи прогнозу критеріїв подоби. Відновлення кривих пружності для розробки робочих тіл теплових машин.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

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, 01601, 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.): 849.599
--

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 основі інтерпретації моделей QSPR виявлено структурні фактори, що впливають на прояв досліджуваних властивостей. Найбільш важливими серед них є стеричні властивості атомів та електростатичні (їх заряди, електронегативності та донорно-акцепторні властивості). На основі побудованих QSPR моделей розроблено комп'ютерну програму «Експертна система «SimCrit Expert» для прогнозування основних критеріїв подоби реальних газів органічних сполук».

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. The structural factors affecting the manifestation of the studied properties were identified based on the interpretation of QSPR models. The most important among them are the steric and electrostatic properties of atoms (their charges, electronegativities, and donor-acceptor properties). The computer program "SimCrit Expert" expert system for predicting the main criteria of similarity of real gases of organic compounds was developed based on the constructed 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: Кузьмін Віктор Євгенович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання:професор, чл-кор.НАН України

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерна програма "Експертна система «SimCrit Expert» для прогнозування основних критеріїв подоби реальних газів органічних сполук".

Назва НТП англійською: Computer program "Expert system «SimCrit Expert» for predicting the main criteria of similarity of real gases of organic 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 інтерпретації моделей QSPR виявлено структурні фактори, що впливають на прояв досліджуваних властивостей. Так, для критичного фактору стисливості найбільший вклад вносять топологічні індекси, та симплексні 1D дескриптори, що враховують характеристики вандерваальсового притягнення атомів, а також 2D дескриптори, що враховують донорно-акцепторні властивості атомів. Для фактору ацентричності Пітцера отримано дві моделі. В першій найбільший вклад вносить сумарна електронегативність атомів, та 1,5D симплексні дескриптори, що враховують заряди на атомах та природу атому. В другій – топологічні індекси, кількість гідроксильних груп, та 2D симплексні дескриптори, що враховують природу атому та його електронегативність. Для критерію Ріделя також достатньо великий вклад вносить сумарна електронегативність, та різні 1,5D симплексні дескриптори, найбільший вклад з яких вносить кількість комбінацій кисню та водню в молекулі. На основі побудованих QSPR моделей розроблено комп'ютерну програму "Експертна система «SimCrit Expert» для прогнозування основних критеріїв подоби реальних газів органічних сполук".

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення автоматизації виробничих процесів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Навчально-науковий інститут холоду, кріотехнологій та екоенергетики ім. проф. В.С.Мартинівського Одеського національного технологічного університету МОН України.

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

- Заявка про реєстрацію авторського права на службовий твір (комп'ютерна програма). Кузьмін В.Є., Артеменко А.Г., Огніченко Л.М. Комп'ютерна програма «Експертна система «SimCrit Expert» для прогнозування основних критеріїв подоби реальних газів органічних сполук». Рег. номер заявки № с202308031, 27.11.2023.

- 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.

- Мокшина О.Г. Фактор Пітцера та його зв'язок з структурою органічних сполук: дослідницький SPR аналіз // О.Г. Мокшина, В.І. Недоступ, В.Є. Кузьмін // "Хімічні Каразінські Читання": VII Всеукраїнська наукова конференція студентів і аспірантів: Тези доповідей. – Харків, 2015 – С. 225.

- Mokshyna E. Influence of Molecular Shape and Size on Acentric Factor: Causal Analysis / E. Mokshyna // XVIII Scientific Youth Conference "Problems and Achievements of Modern Chemistry". – Odessa, 2016. – P. 13.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович
д. х. н., 02.00.01

Перелік осіб-виконавців

Іллюшко Наталія Олександрівна
Артеменко Анатолій Григорович
(к. х. н., 02.00.03)

Кузьмін Віктор Євгенович
(д. х. н.)

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

