

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U005458

Державний реєстраційний номер: 0121U100646

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-12-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Побудова QSPR моделей зв'язку між структурою органічних сполук та основними критеріями подоби. Верифікація моделей, визначення областей компетентності, вибір моделей з найкращою прогнозуючою здатністю.

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного 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, 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.): 972.997
--

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 другому етапі роботи на основі сформованих на попередньому етапі навчальних вибірок для основних критеріїв подоби реальних газів було побудовано адекватні 1D-2D QSPR-моделі. Для побудови статистичних моделей було використано дескриптори симплексні та Dragon (топологічні індекси, фрагментарні дескриптори, характеристики будови молекул) в сукупності з статистичним методом випадкового лісу. Цей метод фактично являє собою ансамбль дерев рішень і дозволяє будувати досить якісні консенсусні моделі. На етапі моделювання варіювались різні типи дескрипторів, проводився відсів тих, що взаємно-корелюють, також проводився відбір найбільш важливих дескрипторів за допомогою процедури тренд-вектору. Відбирались моделі, що мають високу якість апроксимації та високу якість прогнозу в рамках процедури out-of-back. Для всіх моделей були визначені області компетентності, похибка прогнозу порівнянна з експериментальною.

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 second stage of the work adequate 1D-2D QSPR-models has been developed on the base of training samples formed at the previous stage for the main criteria of similarity to real gases. Simplex and Dragon descriptors (topological indices, fragmentary descriptors, molecular structure characteristics) in combination with the random forest statistical method were used to build statistical models. This method actually represents an ensemble of decision trees and allows building fairly high-quality consensus models. At the modeling stage various types of descriptors were varied those that were mutually correlated were screened out, and the most important descriptors were selected using the trend-vector procedure. Models with high quality of approximation and high

quality of prediction within the out-of-back procedure were selected. Domain applicability were determined for all models; the error of prediction is comparable to the experimental one.

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: Кількісні моделі зв'язку структура - критерії подоби різноманітних органічних речовин в газовій фазі.

Назва НТП англійською: Quantitative models of relationship between structure and similarity criteria of various organic compounds on the gas phase.

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 сформованих на попередньому етапі навчальних вибірок для основних критеріїв подоби реальних газів (критичного фактору стисливості (Z_c), фактору ацентричності Пітцера (p) та критерію Ріделя (p_s)) було побудовано адекватні 1D-2D QSPR-моделі. Для побудови статистичних моделей було використано дескриптори симплексні та Dragon (топологічні індекси, фрагментарні дескриптори, характеристики будови молекул) в сукупності з статистичним методом випадкового лісу. Цей метод фактично являє собою ансамбль дерев рішень і дозволяє будувати досить якісні консенсусні моделі. На етапі моделювання варіювались різні типи дескрипторів, проводився відсів тих, що взаємно-корелюють, також проводився відбір найбільш важливих дескрипторів за допомогою процедури тренд-вектору. Відбирались моделі, що мають високу якість апроксимації та високу якість прогнозу в рамках процедури out-of-back. Для всіх моделей були визначені області компетентності, похибка прогнозу порівняння з експериментальною. В майбутньому аналіз отриманих моделей дасть можливість виявити структурні фактори, що впливають на прояв цих властивостей.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення автоматизації виробничих процесів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Фахівці в галузі створення обладнання хіміко-технологічних процесів.

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:

ІХ. 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

Х. Заклучні 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., 05.14.06)

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

