

Таким образом, география масличных культур в Костанайской области представлена выращиванием повсеместно подсолнечника. Подсолнечник в основном идет на зеленый корм для животноводства, а также производства масла в пищевой промышленности. Рапс выращивают в северных и северо-западных районах области. Особую популярность приобретает экспорт масличных культур органического льна, представленное в Федоровском районе.

Библиографический список

1. Режим доступа: <http://kazakh-zerno.kz/>.
2. Режим доступа: [http://www.inform.kz/ru /ploschadi-pod-maslichnye-kultury-uvelichat-v-kostanayskoj-oblasti_a3132487](http://www.inform.kz/ru/ploschadi-pod-maslichnye-kultury-uvelichat-v-kostanayskoj-oblasti_a3132487). Площади под масличные культуры увеличат в Костанайской области.
3. Режим доступа: <http://farmers.kz>. А.Б. Нугманов. Технология возделывания подсолнечника масличного в Костанайской области.
4. Режим доступа: www.stat.kz. Департамент статистики Костанайской области.
5. Режим доступа: <https://www.zakon.kz>. В Костанайской области запущен новый маслозавод. 27 июня 2012.
6. Рапса будет вдвое больше. А. Джаманкулова // Наша газета от 08.11.2007.
7. Новый сорт льна вывели Костанайские ученые // Казахстанская правда от 6 июня 2016.
8. Режим доступа: <http://24.kz/ru/news/pokupaj-kazakhstanskoe/item/123291-novyj-sort-lna>.
9. Режим доступа: <http://24.kz/ru/news/economy/item/141127-lnkst>. Наталья Строкова, Ермек Мухамедьяров. Костанайский органический лен идет нарасхват у иностранцев.

КОМПЬЮТЕРНАЯ ОЦЕНКА ЗНАЧЕНИЙ КРИТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ АЛКИЛБЕНЗОЛОВ

COMPUTER ESTIMATION OF CRITICAL PRESSURE VALUES OF ALKYL BENZENES

Важев В.В., Важева Н.В., Губенко М.А., Ергалиева Э.М.

*Костанайский социально-технический университет,
Костанайский государственный педагогический институт*

Аннотация

Исследована возможность прогнозирования значений критического давления алкилбензолов с использованием дескрипторов, генерируемых программой Dragon с применением алгоритмов «перекрестной проверки» – leave-one-out программы PROGROC. Использован набор из 126 алкилбензолов, качество прогнозирования характеризуется коэффициентом

корреляции 0,9969 экспериментальными и расчетными значениями критического давления и стандартным отклонением – 0,56 атм.

Проведён расчет значения критического давления 33 соединений, для которых отсутствует справочная информация.

Ключевые слова: критическое давление, алкилбензолы, моделирование, QSPR.

Keywords: critical pressure, alkylbenzenes, simulation, QSPR.

Многие химические производства базируются на нефтехимии и нуждаются в продуктах углубленной переработки нефтяного сырья, среди которых и продукты алкилирования ароматических углеводородов. Способы получения алкилбензолов постоянно совершенствуются. Большинство из них идет на получение поверхностно-активных веществ бытового и технического назначения, присадок к маслам и топливам, синтетических смазочных масел и т.д. Особенностью проектирования технологических процессов в химическом машиностроении, нефтяной и газовой промышленности является необходимость учитывать различные риски, в том числе возможность возникновения в ходе эксплуатации оборудования экстремальных условий, при которых вещество переходит в критическое состояние. При критическом состоянии различие между жидкой и газообразной фазами вещества исчезает. Это состояние вещества характеризуется критическими параметрами: критической температурой, давлением и объемом. Для каждого вещества существует критическая температура, выше которой оно никаким повышением давления не может быть переведено в жидкость. Критическое давление – это давление, необходимое для сжижения газа при критической температуре. Экспериментальное *определение критических параметров* требует значительных финансовых затрат и весьма продолжительно по времени.

Многообещающие результаты дает применение вычислительных методов направления QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship), использование которого основано на установлении корреляционных соотношений между структурой вещества и его свойствами. Структура вещества представляется в виде числовых описателей – дескрипторов, определяются уравнения связи между дескрипторами и свойствами веществ, на основании чего строятся модели, отражающие зависимость свойств от структуры. Метод позволяет прогнозировать значения свойств, а также предсказывать структуры с необходимыми свойствами.

В ряде работ описаны модели QSPR для критического давления довольно широкого круга органических соединений с использованием раз-

нообразных дескрипторов. Качество моделирования обычно характеризуется коэффициентом корреляции R (R^2) между прогнозируемыми и экспериментальными значениями исследуемых параметров и стандартным отклонением s .

Тенер, Костелло и Джурс [1] представили несколько моделей QSPR для критического давления в пределах от 12–55 атм. для 165 разных органических веществ с использованием дескрипторов, вычисленных программой ADAPT. Так, модель множественной линейной регрессии с восемью дескрипторами имела $R^2 = 0,929$ и стандартное отклонение $s = 2,0$ атм. для тренировочного набора из 147 веществ и стандартное отклонение 2,8 атм. для 18 веществ контрольной выборки. Авторы нашли, что большая часть ошибок в модели связана с прогнозированием веществ с высоким критическим давлением. Представленная ими 8–5–1 модель нейронной сети показала стандартные отклонения 1,51, 1,35 и 2,39 атм. для 132 соединений тренировочного набора, 15 соединений перекрестной проверки, и 18 соединений набора предсказания, соответственно.

Адаптивные нейросети применили Эспиноза и др. [2] и получили QSPR модель для оценки критического давления 463 различных соединений в пределах от 8,95 до 1,02 МПа. Модели с восемью описателями (сумма атомных номеров, дипольный момент и др.) на входе показали высокие прогнозирующие возможности, абсолютные средние ошибки 0,02 МПа.

Авторы [3] получили модель QSPR для критического давления набора из 121 вещества с помощью CODESSA. Заключительная модель QSPR с восемью описателями, несмотря на разнообразный состав базы данных, показала достаточно высокую точность ($R^2 = 0,9209$), подтверждая надежность метода QSPR. Методология CODESSA была применена Годаварти и др. [4] для вычисления молекулярных дескрипторов и моделирования критического давления большого набора данных 1230 разнообразных органических соединений со средним абсолютным отклонением 1,5%. Различные линейные и нелинейные модели имели удовлетворительные статистические показатели: для линейных $R^2 = 0,951$, средняя абсолютная ошибка 1,24; для нелинейных – $R^2 = 0,992$, средняя абсолютная ошибка 0,49.

В статье [5] описано применение метода искусственной нейронной сети для расчета критического давления, температуры и объема индивидуальных соединений. Было исследовано около 1700 химических соединений из различных классов. Построена модель, имеющая следующие аб-

солютные средние отклонения расчетных и экспериментальных свойств: 1,1% для критического давления; 0,9% для критической температуры; 1,4% для критического объема.

Собати и Абуали [6] предложены новые количественные соотношения структура – свойства для оценки критических параметров чистых хладагентов. Для разработки моделей использованы экспериментальные данные критических параметров 197 соединений. Использован большой набор молекулярных дескрипторов и усовершенствованный метод выбора для подмножества переменных. Предложенные модели представляют собой простые многомерные линейные уравнения с шестью переменными, рассчитанными из молекулярной структуры хладагентов. Среднее абсолютное относительное отклонение из предложенных моделей 4,65% для оценки критических параметров.

О востребованности прогнозирования критических параметров свидетельствуют продолжающиеся исследования последних лет. Авторами [7] представлены результаты прогнозирования критической температуры и критического давления многокомпонентных смесей, абсолютное среднее относительное отклонение значений предсказания составило 6,39% для критического давления. Модели прогнозирования критического давления органических соединений, для создания которых использовались многолинейная регрессия и нейронные сети, предложены группой авторов [8]. Охват веществ составил в общей сложности 802 углеводорода и 1 144 органических соединения, содержащих атомы O, S и N. Как отмечают авторы, модели прогнозирования достигли достаточно высоких характеристик с $R^2 > 0,96$.

В настоящей работе представлены результаты прогнозирования значений критического давления алкилбензолов с использованием дескрипторов, генерируемых программой Dragon, экспериментальные значения свойства взяты из справочника [9]. Всего было использовано 579 дескрипторов, в том числе индексы топологические, связности, информационные, геометрические дескрипторы.

Вычисления были проведены с использованием разработанной нами компьютерной программы PROGROC (**PROG**ram**RO** bustness **Calculation**), [10; 11]. Программа основана на алгоритмах, позволяющих использовать число дескрипторов, превышающее количество веществ без предварительного отбора. Преимуществом метода является возможность получения достоверных оценок свойств без лабораторных испытаний.

Было получено несколько моделей при различных делениях набора на контрольную и тренировочную выборки, статистические параметры двух моделей приведены в таблице 1.

Таблица 1

Показатели корреляции между экспериментальными и вычисленными значениями критического давления при различных соотношениях числа веществ в тренировочной и контрольной выборках

Число веществ трени./контр.	R, трен.	s, трен.	R, контр.	s, контр.
66/60	0,9996	0,19	0,9990	0,31
76/50	0,9999	0,13	0,9990	0,30

Результаты прогнозирования по качеству превышают данные других авторов для сопоставимых объектов и свидетельствуют об удачном выборе дескрипторов и алгоритма вычислений.

Жесткая проверка адекватности корреляционных моделей и дескрипторов в QSPR-исследованиях осуществляется путем «перекрестной проверки» – leave-one-out (удаление одного из) или, иначе, скользящего контроля. Из исследуемого набора поочередно извлекается каждое вещество, модель строится по оставшимся веществам, затем выполняется оценка свойства удаленного вещества. Таким образом, максимально выявляются возможности метода для оценки неизвестных значений новых веществ.

Остальные варианты прогнозирования, такие как выделение проверочных подмножеств набора веществ, являются промежуточными.

Нами выполнено моделирование критического давления с проверкой путем скользящего контроля для всего набора из 126 алкилбензолов, результаты которого приведены на рисунке 1.

Коэффициент корреляции в этом случае равен 0,9969, стандартное отклонение – 0,56 атм. Наибольшие расчетные отклонения от экспериментальных значений имеют первые члены гомологического ряда алкилбензолов: бензол – 1,67 и толуол – 1,08, средняя абсолютная ошибка равна 0,44. Это обычная ситуация для свойств начальных членов гомологических рядов органических соединений, которая объясняется особенностями их строения. Такая точность во многих случаях не уступает точности экспериментального определения и позволяет оценить значения критического давления неисследованных веществ.

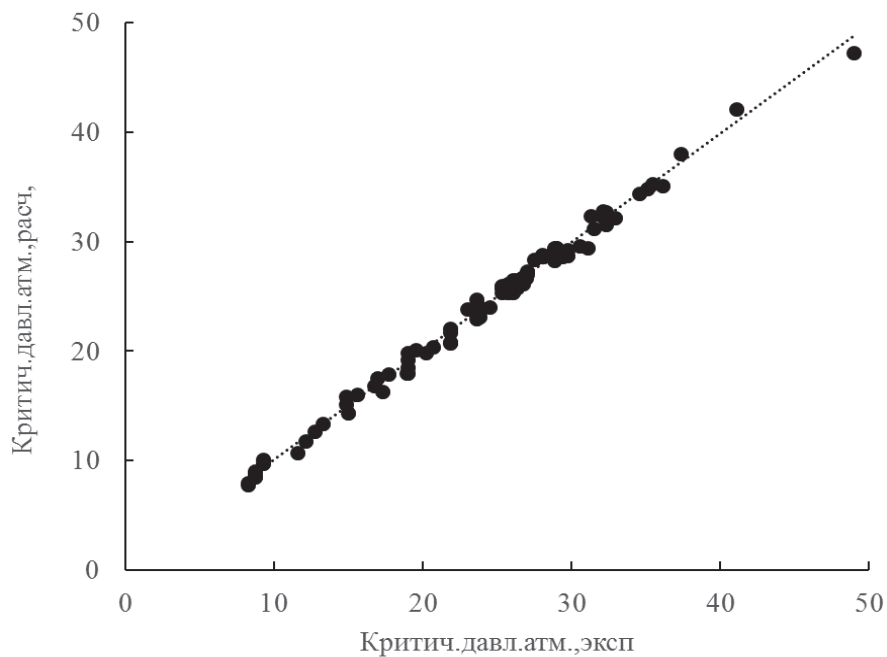


Рис. 1. Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями критического давления, скользящий контроль

В таблице 2 приведены расчетные значения критического давления соединений, для которых отсутствует справочная информация.

Таблица 2

Оценка значений критического давления $P_{кр}$ для алкилбензолов

№	Соединение	$P_{кр}$, атм
1	2	3
1	1-sec-Butyl-2-methylbenzene	26,28
2	1,2-Dimethyl-3-propylbenzene	25,83
3	1,3-Dimethyl-4-propylbenzene	25,58
4	(3,3-Dimethyl-2-butanyl)benzene	24,81
5	(3,3-Dimethylbutyl)benzene	24,73
6	2,3-Dimethyl-2-phenylbutane	24,62
7	(4-Methyl-2-pentanyl)benzene	24,13
8	1-Butyl-2,3-dimethylbenzene	23,63
9	1-Butyl-3,5-dimethylbenzene	23,55
10	1-Butyl-2,4-dimethylbenzene	23,46
11	1,3,5-Trimethyl-2-propylbenzene	23,30
12	1,2,3-Trimethyl-4-propylbenzene	22,98
13	1-Hexyl-3-methylbenzene	21,94
14	1-Hexyl-2-methylbenzene	21,86
15	2-Heptylbenzene	21,76
16	3-Octanylbenzene	20,42
17	1,4-Dibutylbenzene	19,87
18	3-Nonanylbenzene	18,43

Окончание табл. 2

1	2	3
19	1-Ethyl-2-heptylbenzene	18,28
20	4-Decanylbenzene	17,44
21	5-Undecanylbenzene	16,66
22	2-Undecanylbenzene	16,39
23	3-Undecanylbenzene	16,30
24	5-Dodecanylbenzene	15,59
25	4-Dodecanylbenzene	15,35
26	1,3,5-Tributylbenzene	15,12
27	5-Tridecanylbenzene	14,64
28	3-Tridecanylbenzene	14,53
29	2-Tridecanylbenzene	14,52
30	2-Hexadecanylbenzene	12,06
31	9-Octadecanylbenzene	10,46
32	2-Octadecanylbenzene	10,42
33	7-Icosanylbenzene	8,86

Выполненные нами исследования принципиально отличаются от других работ по изучению аналогичных объектов, поскольку демонстрируют не только высокое качество моделирования, но и позволяют уверенно оценивать значения свойств новых соединений.

Библиографический список

1. Turner B.E., Costello C.L. and Jurs P.C. Prediction of Critical Temperatures and Pressures of Industrially Important Organic Compounds from Molecular Structure // J. Chem. Inf. Comput. Sci. – 1998. – Vol. 38 (4). – P. 639–645.
2. Espinosa G., Yaffe D., Arenas A., Cohen Y., Giralt F. A Fuzzy ARTMAP–Based Quantitative Structure–Property Relationship (QSPR) for Predicting Physical Properties of Organic Compounds // Ind. Eng. Chem. Res. – 2001. – Vol. 40 (12). – P. 2757–2766.
3. Sola D., Ferri A., Banchemo M., Manna L., Sicardi S. QSPR prediction of N–boiling point and critical properties of organic compounds and comparison with a group–contribution method // Fluid Phase Equilibria. – 2008. – Vol. 263. – №1. – P. 33–42.
4. Godavarthy S.S., Robinson R.L., Gasem K.A.M. Improved structure–property relationship models for prediction of critical properties // Fluid Phase Equilibria. – 2008. – Vol. 264. – № 1–2. – P. 122–136.
5. Gharagheizi F., Eslamimanesh A., Mohammadi A.H., and Richon D. Determination of Critical Properties and Acentric Factors of Pure Compounds Using the Artificial Neural Network Group Contribution Algorithm // J. Chem. Eng. Data. – 2011. – Vol. 56 (5). – P. 2460–2476.
6. Sobati M.A., Aboali D. Molecular based models for estimation of critical properties of pure refrigerants: Quantitative structure property relationship (QSPR) approach // Thermochemica Acta. – 2015. – Vol. 602. – P. 53–62.
7. He M., Liu Y., Liu X. Prediction of critical temperature and critical pressure of multi–component mixtures // Fluid Phase Equilibria. – 2017. – V. 441. – P. 2–8.

8. Oh J.Y., Park K., Kim Y., Park T.-Y., Yang D.R. A Quantitative Structure-Property Relationship Model for Predicting the Critical Pressures of Organic Compounds Containing Oxygen, Sulfur, and Nitrogen // J. of Chem. Engineering of Japan. – 2017. – V. 50. – Is. 6. – P. 397–407.

9. Yaws C.L. Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds // Ed. Carl L. Yaws New York: Norwich. – 2003. – 779 p.

10. Важев В.В. Использование ИК- и масс-спектров в QSAR/QSPR-исследованиях. – Костанай: Изд-во КГУ, 2003. – 114 с.

11. Vazhev V.V., Aldabergenov M.K., Vazheva N.V. Estimation of Flash Points and Molecular Masses of Alkanes from Their IR Spectra // Petroleum Chemistry. – 2006. – Vol. 46. – № 2. – P. 136–139.

РАЗРАБОТКА ИНТЕГРИРУЕМОГО С ПЕРСОНАЛЬНЫМ КОМПЬЮТЕРОМ

УНИВЕРСАЛЬНОГО RLC-СЕНСОРА

DEVELOPMENT OF A UNIVERSAL RLC-SENSOR INTEGRATED WITH A PERSONAL COMPUTER

Кобец Т.С.

*Костанайский государственный педагогический институт,
Костанай, Казахстан*

Аннотация

В статье рассмотрена возможность компьютеризации электрохимических методов анализа, в частности кондуктометрических. Предлагается схема создания универсального датчика измерения сопротивления, ёмкости и индуктивности. Также рассмотрен алгоритм работы программы MultiMeter 0,03, которая служит для интеграции данного сенсора с персональным компьютером. Показаны предварительные результаты измерений, рассчитаны погрешности измерений. Выведены формулы для расчёта прогноза погрешности.

Ключевые слова: датчик, компьютеризация, Multi Meter 0.03, сопротивление, ёмкость, индуктивность

Keywords: sensor, computerization, Multi Meter 0.03, resistance, capacitance, inductance

Modern school pays much attention to the work on improving the content of theoretical knowledge in chemistry on the basis of alternative training plans, which cannot be said about knowledge associated with the organization and setting up of a chemical experiment, especially performed by students themselves [1, p. 27]. In connection with the informatization of education, there has been an increased interest in the problem of the use of computer technologies in subject teaching, including in the teaching of chemistry. In the light of the increasing role of information and communication technologies,