

Дубна Московской области) // Мир науки, культуры, образования. – 2013. – № 5 (42). – С. 45–47.

18. Назаренко М.А. Проблемы качества образования в области управления и стандартизации больших данных // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 11.

19. Назаренко М.А. Развитие баз данных // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 11.

20. Назаренко М.А. Роль и место менеджмента качества в современном образовании // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 11.

21. Назаренко М.А. Стратегия естественнонаучного образования в области больших данных // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 11.

22. Назаренко М.А. Технологии и методы анализа больших данных // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 11.

23. Назаренко М.А. Управление качеством в области больших данных // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 11.

24. Назаренко М.А. Философия в федеральных университетах: взгляд на индекс Хирша // Современные наукоемкие технологии. – 2014. – № 3. – С. 168–169.

25. Назаренко М.А., Адаменко А.О., Киреева Н.В. Принципы менеджмента качества и системы доработки или внесения изменений во внедренное программное обеспечение // Успехи современного естествознания. – 2013. – № 7. – С. 177–178.

26. Назаренко М.А., Фетисова М.М. Разработка методов и средств управления производственными процессами и их результатами // Научное обозрение. – 2014. – № 8–3. – С. 1155–1159.

27. Черненко С.С., Назаренко М.А. Разработка научных методов защиты компьютерных сетей // Современные проблемы науки и образования. – 2014. – № 3. – С. 34.

**«Компьютерное моделирование в науке и технике»,
ОАЭ (Дубай), 16-23 октября 2015 г.**

Химические науки

**МЕТОД МНОГОУРОВНЕВОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ В ОЦЕНКЕ
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ
ПАРАМЕТРОВ РАСТВОРИТЕЛЕЙ.
IV. ИЗОТЕРМИЧЕСКИЕ ИЗМЕНЕНИЯ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ
ОТ ИДЕАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ**

Танганов Б.Б.

*Восточно-Сибирский государственный университет
технологий и управления, Улан-Удэ,
e-mail: tanganov@rambler.ru*

В предыдущих работах [1, 2, 3] были показаны возможности и перспективы метода многоуровневого моделирования (ММУМ) [4, 5, 6] при исследовании физико-химических параметров растворителей (воды, спиртов, кетонов, амидных и др. растворителей).

Модельные расчеты позволили с высокой долей вероятности уточнить или впервые получить важные параметры жидкостей – многих дипольных апротонных растворителей. Так, ММУМ позволил (может быть, впервые) оценить энергии ионизации таких спиртов и дипольных растворителей, как пентанол, гексанол, N-метилформамид, N,N'-диметилформамид, N-метилацетамид, N,N'-диметилацетамид, гексаметилфосфортриамид, тетраметилсульфон (сульфолан), N-метилпирролидон и пропиленкарбонат [1]; теплоемкость метилбутилкетона, N-метилформамида, ацетамида, N-метилацетамида, N, N'-диметилацетамида, гексаметилфосфортриамида, диметилсуль-

фоксида, тетраметилсульфона (сульфола-на), пропиленкарбоната [2].

В данной работе представлены соответствующие расчетные формулы для термодинамических характеристик и ММУМ оценены различные изотермические отклонения термодинамических свойств характеристик (энтальпии, энтропии, энергии Гиббса, внутренней энергии, энергии Гельмгольца) растворителей: вода, спирты, кетоны, амидные, сераорганические и другие растворители дипольного характера при температуре $T_0 = T_{\text{кип}} + 125^\circ\text{C}$ и давлении $P_0 = 10$ кПа (опорное давление $P = 0,1$ кПа).

Расчетные формулы:

уравнения Лидерсена:

$$T_{\text{пр}} = T_{\text{кип}} / T_{\text{крит}};$$

$$P_{\text{пр}} = P_{\text{кип}} / P_{\text{крит}};$$

уравнение Эдмистера:

$$\omega = (3/7) \cdot [P_{\text{пр}} / (1 - P_{\text{пр}}) \lg P_{\text{крит}}] - 1;$$

уравнение Федорса:

$$Z_{\text{крит}} = P_{\text{крит}} \cdot V_{\text{крит}} / R \cdot T_{\text{крит}}$$

где $T_{\text{кип}}$ – температура кипения (К); $T_{\text{крит}}$ – критическая температура (К); $T_{\text{пр}}$ – приведенная температура (К); $P_{\text{кип}}$ – давление при температуре кипения (атм.); $P_{\text{крит}}$ – критическое давление (атм.); $P_{\text{пр}}$ – приведенное давление; ω – фактор ацентричности (сферичности) молекулы; $Z_{\text{крит}}$ – коэффициент сжимаемости для критической точки; R – универсальная газовая постоянная.

В работе применены также: методы Ли и Кеслера:

$$H^0 - H = (RT_{\text{крит}} / M) \cdot [(H^0 - H)^{(0)} / RT_{\text{крит}} + \omega \cdot (H^0 + H)^{(1)} / RT_{\text{крит}}]; \quad (1)$$

$$S^0 - S = (R/M) \cdot [(S^0 - S)^{(0)} / R + \omega \cdot (S^0 - S)^{(1)} / R - \ln(P_0/P)]; \quad (2)$$

уравнение (5.3.10) [7]:

$$G^0 - G = -(H - H^0) + T_0 \cdot (S^0 - S); \quad (3)$$

уравнение Питцера:

$$Z = Z^0 + \omega \cdot Z^{(1)}; \quad (4)$$

уравнение (5.3.10) [7]:

$$A^0 - A = (G^0 - G) + RT_0 \cdot (Z - 1); \quad (5)$$

уравнение (5.3.8) [7]:

$$A^0 - A = (H^0 - H) - T_0 \cdot (S^0 - S) + RT_0 \cdot (Z - 1); \quad (6)$$

уравнение (5.3.9) [7]:

$$U^0 - U = (A^0 - A) + T_0 \cdot (S^0 - S), \quad (7)$$

где $H^0 - H$, Дж/г; $S^0 - S$, Дж/г·К; $G^0 - G$, Дж/г; $A^0 - A$, Дж/г; $U^0 - U$, Дж/г являются изотермическими отклонениями энтальпии, энтропии, энергии Гиббса, энергии Гельмгольца и внутренней энергии растворителей, разительно отличающихся химическим составом, температурами кипения (от 329,2 до 558,0 К), вязкостями (от 0,316 до 10,130 сПз), дипольными моментами (от 1,64 до 5,37 D), диэлектрическими постоянными (от 14, до 182,4) и др.

В табл. 1 представлены рассчитанные базисные параметры и функции отклонения изотермических характеристик 23 растворителей от идеального состояния.

Таблица 1

Функции отклонения от идеального состояния при температуре ($T_{\text{кип}} + 125^\circ\text{C}$) и давлении 10 кПа

№ п/п	Растворитель	ω	$Z_{\text{крит}}$	$V_{\text{крит}}^{\text{крит}}$ (см ³ /моль)	V (см ³ /моль)	$T_r = T/T_{\text{крит}}$	$P_r = P_0/P_{\text{крит}}$	$H^0 - H$, ур. (1)	$H^0 - H$, ур.(0)	$(S^0 - S)$, ур. (2)	$(S^0 - S)$, ур.(0)
1	Вода	0,348	0,230	56	26,68	0,77	0,45	1936,64	1591,64	6,17	4,86
2	MeOH	0,556	0,222	118	62,14	0,90	1,26	863,77	953,51	2,75	3,01
3	EtOH	0,635	0,248	167	95,51	0,92	1,57	631,24	690,02	1,89	2,12
4	PrOH	0,600	0,252	218,2	100,53	0,92	1,93	488,80	508,43	1,43	1,49
5	BuOH	0,596	0,259	274,6	121,29	0,91	2,26	411,05	402,11	1,14	1,12
6	AmOH	0,513	0,260	333	149,67	0,92	2,64	342,36	306,92	0,95	0,80
7	HeOH	0,560	0,300	381	142,54	0,91	2,47	324,65	240,62	0,82	0,58
8	Ацетон	0,318	0,237	211	110,16	0,89	2,10	414,06	583,29	1,34	1,95
9	МЭК	0,337	0,249	267	130,01	0,89	2,41	350,83	583,29	1,08	1,95
10	МПК	0,349	0,250	302	142,11	0,88	2,57	311,54	488,41	0,92	1,58
11	МБК	0,400	0,260	371	168,87	0,90	3,05	278,26	460,92	0,77	1,44
12	Формамид	0,516	0,183	141	103,98	0,82	1,28	933,89	914,45	1,97	2,23
13	N-МФА	0,426	0,235	245	115,88	0,83	1,78	683,47	811,43	1,66	1,98
14	ДМФА	0,418	0,257	265	115,59	0,84	1,90	473,72	375,60	1,16	0,83
15	Ацетамид	0,442	0,189	183	102,16	0,80	1,51	737,61	1030,3	1,51	2,60
16	N-ММА	0,516	0,248	247	105,30	0,83	1,64	579,82	552,24	1,24	1,14
17	ДМАА	0,379	0,226	307	155,69	0,86	2,48	382,87	304,63	0,93	0,60
18	ГМФТА	0,243	0,269	597	256,96	0,83	3,50	198,93	125,71	0,41	0,27
19	ДМСО	0,309	0,202	216	121,74	0,81	1,77	470,18	388,58	1,06	0,67
20	ТМС	0,392	0,203	285	152,83	0,80	1,99	385,32	476,70	0,72	0,95
21	N-МП	0,369	0,247	310,5	137,37	0,83	2,09	377,49	242,38	0,83	0,27
22	АН	0,319	0,184	173	114,16	0,87	2,07	629,69	492,20	1,90	1,49
23	ПК	0,447	0,210	251,5	130,41	0,82	1,85	423,69	434,46	0,85	0,85

Продолжение табл. 1

№ п/п	Растворитель	$(G^0 - G)$, ур. (3)	$(G^0 - G)$, ур. (0)	Z	$A^0 - A$, ур.(5,6)	$A^0 - A$, ур. (0)	$U^0 - U$, ур.(7)	$U^0 - U$, ур.(0)
1	Вода	-1138,73	-843,70	0,0644	-5013,85	-4577,73	-1938,47	-2142,36
2	MeOH	-410,818	-502,46	0,1615	-3636,93	-3661,43	-2362,34	-2205,45
3	EtOH	-272,674	-341,24	0,2412	-3277,32	-3395,59	-2373,41	-2364,34
4	PrOH	-222,505	-230,89	0,2441	-3335,69	-3266,20	-2624,38	-2526,89
5	BuOH	-179,707	-169,95	0,2829	-3254,88	-3224,08	-2664,12	-2652,03
6	AmOH	-170,716	-118,93	0,3359	-3129,92	-3219,47	-2616,84	-2793,63
7	HeOH	-130,885	-85,66	0,3087	-3323,55	-3210,59	-2868,01	-2884,33
8	Ацетон	-194,524	-314,27	0,2914	-2873,01	-2926,11	-2264,43	-2028,53
9	МЭК	-164,914	-314,27	0,3275	-2835,22	-2926,11	-2319,47	-2162,52
10	МПК	-148,219	-253,82	0,3420	-2882,92	-2904,77	-2423,15	-2254,59
11	МБК	-118,201	-240,20	0,3948	-2707,48	-2955,72	-2311,01	-2463,05

Окончание табл. 1

№ п/п	Растворитель	$(G^0 - G),$ ур. (3)	$(G^0 - G),$ ур. (4)	Z	$A^0 - A,$ ур.(5,6)	$A^0 - A,$ ур. (6)	$U^0 - U,$ ур.(7)	$U^0 - U,$ ур.(8)
12	Формаид	-232,868	-343,53	0,2116	-4106,36	-4437,72	-2939,6	-3179,73
13	N-МФА	-279,536	-312,88	0,2399	-3950,90	-4057,35	-2987,89	-2933,01
14	ДМФА	-163,302	-96,04	0,2526	-3583,95	-3389,68	-2946,93	-2918,02
15	Ацетамид	-200,751	-419,02	0,1984	-4326,90	-4695,18	-3388,54	-3245,77
16	N-МФА	-167,361	-162,65	0,2097	-4135,72	-3999,33	-3388,53	-3284,42
17	ДМАА	-140,896	-64,51	0,3324	-3268,56	-3306,26	-2744,79	-2937,10
18	ГМФТА	-64,2095	-66,48	0,4884	-2756,71	-2846,35	-2493,57	-2654,11
19	ДМСО	-152,402	-63,15	0,2494	-3816,68	-3581,85	-3194,09	-3130,10
20	ТМС	-105,880	-138,69	0,2691	-4257,32	-4292,49	-3766,12	-3677,08
21	N-МП	-119,005	-4,01	0,2754	-3733,33	-3424,72	-3236,84	-3178,30
22	АН	-281,552	-202,34	0,2862	-3128,75	-3273,66	-2217,5	-2579,11
23	ПК	-124,457	-111,21	0,2452	-4138,46	-4011,87	-3590,32	-3466,18

Примечания: 1 – вода; 2 – метанол; 3- этанол; 4 – н-пропанол; 5 – н-бутанол; 6 – н-пентанол; 7 – н-гексанол; 8 – ацетон; 9 – ме-тилэтилкетон; 10 – метилпропилкетон; 11 – метилбутилкетон; 12 – формаид; 13 – N-метилформаид; 14 – N,N-диметилформаид; 15 – ацетамид; 16 – N-метилацетамид; 17 – N,N-диметилацетамид; 18 – гексаметилфосфортриамид; 19 – диметилсульфоксид; 20 – тетраметилен сульфон (сульфонал); 21 – N-метилпирролидон; 22 – ацетонитрил; 23 – пропиленкарбонат.

Таблица 2

Базисные характеристики растворителей ($X_1 - X_7$) для оценки функций отклонения от идеального состояния растворителей ММУМ [1, 2, 3]

№ п/п	Растворитель*	M X_1	$T_{кип}$ X_2	ρ X_3	p, D X_4	n_D X_5	$\eta, \text{сПз}$ X_6	ϵ X_7
1	H ₂ O	18,0	373,2	0,9971	1,84	1,3333	1,005	78,3
2	MeOH	32,0	338,0	0,7914	1,70	1,3288	0,541	32,6
3	EtOH	46,0	351,3	0,7895	1,69	1,3611	1,052	24,3
4	PrOH	60,1	370,2	0,7995	1,68	1,3854	1,968	20,33
5	BuOH	74,1	390,2	0,8058	1,66	1,3993	2,616	17,49
6	PeOH	88,1	411,0	0,8090	1,65	1,4070	3,718	14,4
7	HeOH	102,2	430,5	0,8155	1,64	1,4158	4,314	12,5
8	ММК	58,0	329,2	0,7920	2,88	1,3588	0,316	20,7
9	МЭК	72,1	352,6	0,8054	2,79	1,3789	0,428	18,4
10	МПК	86,2	375,5	0,8089	2,48	1,3902	0,500	15,45
11	МБК	100,1	400,5	0,8304	2,16	1,4360	0,542	14,60
12	ФА	45,0	466,0	1,1290	3,25	1,4453	3,310	109,5
13	N-МФА	59,0	456,0	1,0110	3,82	1,4319	1,650	182,4
14	ДМФА	73,1	425,5	0,9445	3,82	1,4269	0,796	36,7
15	АА	59,1	494,2	1,1590	3,60	1,4278	1,320	59,0
16	N-МФА	73,1	479,0	0,9420	3,71	1,4277	3,385	179,0
17	ДМАА	87,1	438,5	0,9366	3,79	1,4351	0,919	37,8
18	ГМФТА	179,2	508,0	1,0253	5,37	1,4582	3,340	29,6
19	ДМСО	78,0	462,0	1,1014	4,30	1,4783	2,000	48,9
20	ТМС	120,0	558,0	1,2618	4,69	1,4742	10,130	42,0
21	N-МП	99,1	475,0	1,0327	4,09	1,4706	1,830	31,5
22	АН	41,0	353,1	0,7856	3,80	1,3441	0,345	37,5
23	ПК	102,0	514,7	1,0257	4,94	1,4212	2,510	64,9

Примечания: *) M – молярная масса растворителя (X_1), г/моль; $T_{кип}$ – температура кипения (X_2), K; ρ – плотность растворителя (X_3), г/см³; p – дипольный момент растворителя (X_4), D; n_D – показатель преломления растворителя (X_5); η – вязкость растворителя (X_6), сПз; ϵ – диэлектрическая постоянная растворителя (X_7).

В табл. 2 представлены базисные параметры для применения ММУМ к объектам исследования.

В процессе многоуровневого моделирования по авторской компьютерной программе [8] получены следующие уравнения:

$$H^0 - H = 1,7767 \cdot X_1 - 1,1611 \cdot X_2 + 3249,4549 \cdot X_3 - 168,3490 \cdot X_4 - 7024,1026 \cdot X_5 - 42,1591 \cdot X_6 + 2,4113 \cdot X_7 + 8281,5159; \quad (8)$$

$$S^0 - S = 0,01154 \cdot X_1 - 0,008166 \cdot X_2 + 10,7006 \cdot X_3 - 0,5340 \cdot X_4 - 24,9963 \cdot X_5 - 0,1207 \cdot X_6 + 0,007435 \cdot X_7 + 30,8831; \quad (9)$$

$$G^0 - G = -3,1448 \cdot X_1 + 1,6812 \cdot X_2 - 2058,4313 \cdot X_3 + 109,2763 \cdot X_4 + 4813,5642 \cdot X_5 + 23,6190 \cdot X_6 - 1,5087 \cdot X_7 - 5886,6784; \quad (10)$$

$$A^0 - A = 9,1867 \cdot X_1 - 9,2961 \cdot X_2 - 2312,0144 \cdot X_3 + 155,2468 \cdot X_4 + 7468,2263 \cdot X_5 + 15,9504 \cdot X_6 - 1,0420 \cdot X_7 - 9145,9615; \quad (11)$$

$$U^0 - U = 14,1087 \cdot X_1 - 12,1388 \cdot X_2 + 2996,0251 \cdot X_3 - 122,3693 \cdot X_4 - 4369,5876 \cdot X_5 - 49,8303 \cdot X_6 + 2,8782 \cdot X_7 + 5022,3870. \quad (12)$$

Коэффициенты уравнений ММУМ для уравнений (8)–(12) соответственно равны: 0,9278; 0,9084; 0,9103; 0,9506 и 0,9449.

Коэффициенты уравнений многоуровневого моделирования $R_{\text{ММУМ}}$ больше 0,9000. Это свидетельствует о достаточной надежности метода и высокой вероятности того, что уравнения (8, 9, 10, 11 и 12) отражают многоуровневую корреляцию искомых величин и базисных параметров.

Вывод

Метод многоуровневого моделирования позволяет решать широкий круг задач уточнения ненадежных, сомнительных и восполнения отсутствующих параметров в различных системах, взаимосвязи и взаимообусловленности функций и параметров и может найти применение в разных отраслях науки, народного хозяйства и даже в социологических исследованиях.

Список литературы

1. Танганов Б.Б. Метод многоуровневого моделирования в оценке физико-химических параметров растворителей. I. Энергия ионизации // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2012. – № 4. – С. 49–51.
2. Танганов Б.Б. Метод многоуровневого моделирования в оценке физико-химических параметров растворителей. II.

Теплоемкость // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – № 8. – 2012. – С. 136–138.

3. Танганов Б.Б., Крупенникова В.Е., Алексеева И.А., Раднаева В.Д. Метод многоуровневого моделирования в оценке физико-химических параметров растворителей. III. Критические свойства // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2014. – № 10. – С. 212–215.

4. Танганов Б.Б. Оценка констант автопротолиза неводных растворителей посредством множественной регрессии // Журнал физической химии. – 1986. – Т. 60. – С. 1435–1437; Russian J. Phys. Chem. – 1986. – V. 60(6). – P. 856–857.

5. Танганов Б.Б., Балданов М.М., Мохосоев М.В. Множественные регрессии физико-химических характеристик неводных растворителей на расширенном базисе параметров // Журнал физической химии. – 1992. – Т. 66. – № 6. – С. 1476–1480; Russian J. Phys. Chem. – 1992. – V. 66(6). – P. 786–789.

6. Танганов Б.Б., Балданов М.М., Могнонов Д.М., Николаев С.М., Анцупова Т.П. Разработка и применение разновидности системного анализа для оценки и прогнозирования параметров химических и медико-биологических систем // Вестник ВСГУТУ. – 2006. – Вып. 3. – С. 12–21.

7. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд. Свойства газов и жидкостей: Справочное пособие / пер. с англ. под ред. Б.И. Соколова. – 3-е изд., перераб. и доп. – Л.: Химия, 1982. – 592 с., ил. – Нью-Йорк, 1977.

8. Танганов Б.Б., Крупенникова В.Е., Раднаева В.Д. Программа расчета математической модели по восьми параметрам методом многоуровневого моделирования / Свидетельство ФИСИПТЗ о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010615116, зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 9 августа 2010 г.

«Фундаментальные и прикладные проблемы медицины и биологии», ОАЭ (Дубай), 16–23 октября 2015 г.

Медицинские науки

ОЦЕНКА ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ТКАНИ ПОЧЕК МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМОВ С ПОЗИЦИИ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ

¹Исаева Н.М., ²Савин Е.И., ²Субботина Т.И.,
²Яшин А.А.

¹Тульский государственный педагогический
университет им. Л.Н. Толстого, Тула;

²Тульский государственный университет, Тула

В ряде работ, посвящённых воздействию крайних низкочастотных вращающихся магнитных полей (ВМП) и импульсных бегущих маг-

нитных полей (ИБМП) на ткани млекопитающих успешно использовался информационный анализ. В частности, было осуществлено сравнение информационных характеристик морфометрических признаков почечных клубочков и канальцев [2–4]. Также был проведен корреляционный и регрессионный анализы между значениями относительной информационной энтропии h , полученной для морфометрических признаков почечных клубочков, и морфометрическими признаками почечных клубочков, такими как площадь цитоплазмы капсулы, площадь ядер капсулы, площадь цитоплазмы