

***ВВЕДЕНИЕ В  
ХИМИЧЕСКУЮ  
КИБЕРНЕТИКУ***

# Химическая кибернетика

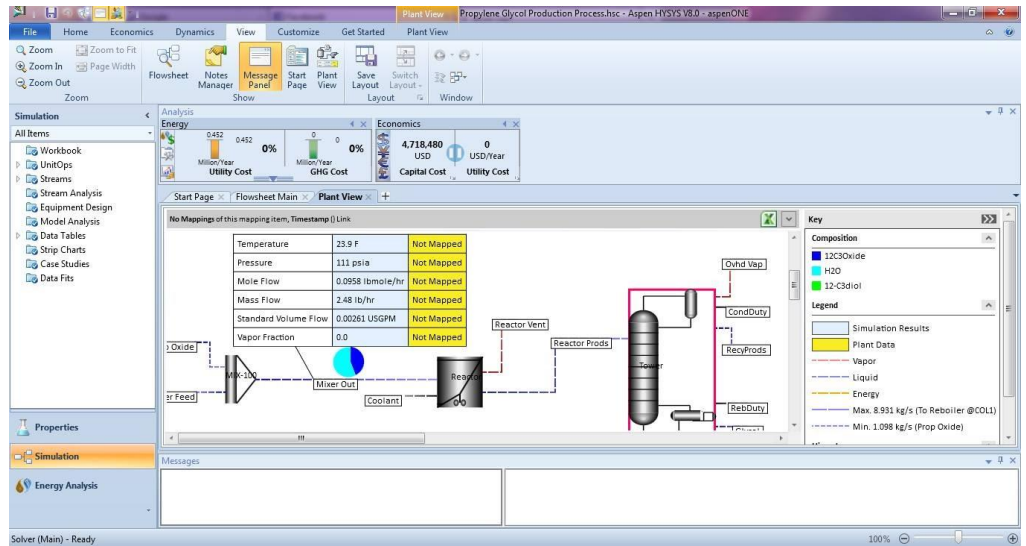
- **КИБЕРНЕТИКА** в химической технологии (от греч. *kybernetike* - искусство управления), раздел науки о связях процессов и явлений в химико-технол. системах и управлении ими. Предмет исследования - хим. объекты и их совокупности, хим. произ-ва, стратегия изучения - системный анализ, научный метод мат. моделирование, ср-ва реализации ЭВМ.
- Кибернетика позволяет получать конкретные количеств, результаты, анализировать и синтезировать (разрабатывать) химико-технологические системы (ХТС) с заданными св-вами, прогнозировать их оптим. функционирование и создавать алгоритмы управления процессами.
- ХТС включает: собственно хим. процессы, аппарат или группу аппаратов для проведения этих процессов, ср-ва контроля и управления процессами и связи между ними. Совокупность этих элементов и связи между ними образуют структуру ХТС. Функционирование ее может оцениваться совокупностью показателей (количественных, качественных, материальных, энергетических, экономических, экологических и т.д.), каждый из к-рых существенно зависит от организации данной ХТС, состава входящих в нее процессов, технол. совершенства отдельных стадий и др.

# Химико-технологическая система

- химико-технологическая система (ХТС) - совокупность аппаратов, связанных между собой потоками и функционирующих как единое целое. В каждом аппарате или элементе по терминологии теории систем, происходит преобразование потока (смешение) разделение, измельчение, нагрев, преобразование энергии, сжатие, расширение, химическое превращение, испарение и т.д.). Потоки, или связи по терминологии систем, обеспечивают передачу вещества или энергии между аппаратами (элементами системы) и могут быть материальными, тепловыми, энергетическими.

# Химико-технологические системы

Методы изучения систем включают эвристические или неформализованные методы и формализованные или строгие математические приемы, машинные алгоритмы расчета, анализа и построения схем, совокупность приемов, вырабатываемых в практической работе исследователей, инженеров.



Функционирование ХТС характеризуют состоянием ХТС т.е. показателями всех потоков и аппаратов. Показатели потоков называют параметрами состояния, которые разделяются на параметры состояния и параметры свойств. К первым относятся расход и концентрация компонентов в потоке, температура, давление и др., ко вторым – теплоемкость, вязкость, плотность.

# Программы для моделирования ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

- Aspen Hysys

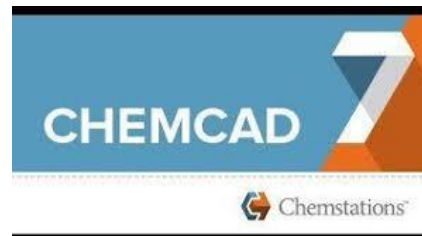
<https://www.youtube.com/watch?v=q0D2zbmPry4>

- ChemCAD

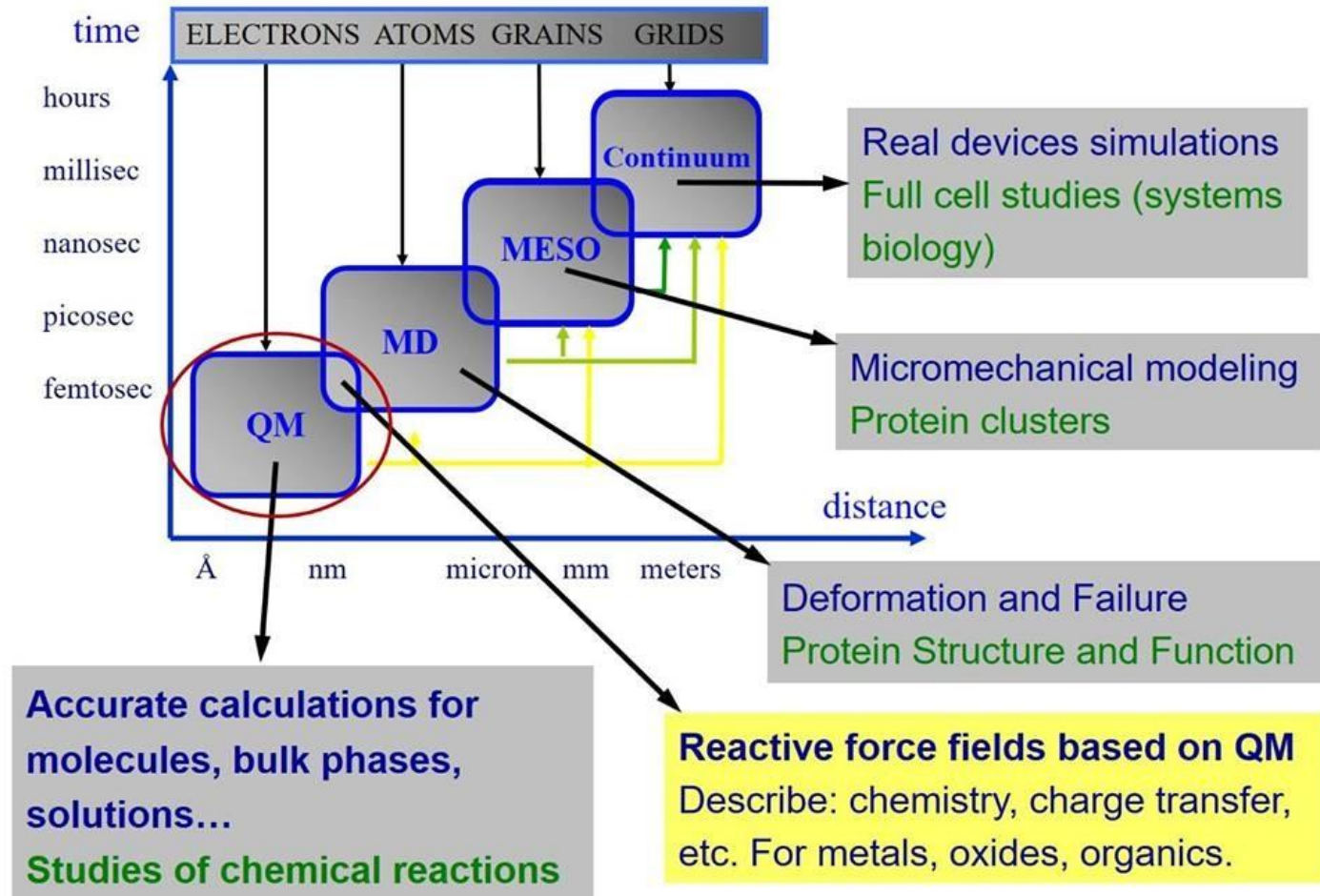
<https://www.youtube.com/watch?v=ge-2dEwqF28>



**Aspen HYSYS**



# Multiscale Hierarchy of Modeling



# Хемоинформатика

- **Хемоинформатика** это научная дисциплина, возникшая за последние 40 лет в пограничной области между химией и вычислительной математикой. Было осознано, что во многих областях химии огромный объем информации, накопленный в ходе химических исследований, может быть обработан и проанализирован только с помощью компьютеров. Более того, многие из проблем в химии настолько сложны, что для их решения требуются новые подходы, основанные на применении методов информатики. Исходя из этого, были разработаны методы для построения баз данных по химическим соединениям и реакциям, для прогнозирования физических, химических и биологических свойств соединений и материалов, для поиска новых лекарственных препаратов, анализа спектральной информации, для предсказания хода химических реакций и планирования органического синтеза.

# Л 1. Поиск информации

- Освоение основ поиска научной информации
- Выработка навыков обращения с программами анализа научной численной информации



# Поисковые системы и базы данных

- ▣ **Информационно-поисковая система:** компьютерная система, выполняющая функции хранения больших объемов информации; быстрого поиска требуемой информации; изменения хранимой информации; вывода информации в удобном виде.
  
- ▣ **База данных:** организованная в соответствии с определенными правилами и поддерживаемая в памяти компьютера совокупность данных, относящихся к некоторой предметной области и используемая для удовлетворения информационных потребностей пользователей.

# Базы данных:

- Библиографические базы - содержат извлеченную из публикаций (статей, патентов и др.) информацию об их заглавиях, авторах, источниках, а также рефераты
- Полнотекстовые базы - содержат полные тексты публикаций, (статьи и патенты)
- Базы данных, содержащие химические структуры и химические реакции (поиск интересующих веществ по структурной формуле )
- Фактографические базы - содержат числовую информацию; по свойствам веществ (термодинамическим, спектральным и т. д.), данные о поставщиках и ценах на реактивы (поиск веществ по молекулярным формулам, тривиальным, торговым и химическим названиям)

# Доступные поисково-информационные системы и базы данных

## Доступ по подписке

- Sci Finder (ресурс CAS)  
<https://scifinder.cas.org>
- Scopus  
<http://scopus.com>
- Web of knowledge  
<http://apps.webofknowledge.com>

## Общедоступные сервисы

- Chemspider (структурная б/д)  
<http://chemspider.com>
- поисковая система Scirus  
<http://scirus.com>
- поисковая система Google Академия  
<http://sholar.google.ru>

# ISI Web of knowledge - общенаучная ИПС для поиска рефератов и библиографии: <http://apps.webofknowledge.com>

**WEB OF KNOWLEDGE<sup>SM</sup>** | DISCOVERY STARTS HERE

Go to mobile site | Sign In | Marked List (0) | My EndNote Web | My ResearcherID | My Citation

**Web of Science** | **Additional Resources**

Search | Author Search | Cited Reference Search | Advanced Search | Search History

### Web of Science®

#### Search

in

in  [Select from Index](#)  
*Example: O'Brian C\* OR OBrian C\**  
Need help finding papers by an author? Use [Author Search](#).

in  [Select from Index](#)  
*Example: Cancer\* OR Journal of Cancer Research and Clinical Oncology*

[Add Another Field >>](#)

Searches must be in English

**Web of Science** | **Additional Resources**

Search | Author Search | Cited Reference Search | Advanced Search | Search History

### Web of Science®

**Results** Topic=(catalysis)  
Timespan=All Years. Databases=SCI-EXPANDED, SSCI, CPCI-S, CPCI-SSH.

[Create Alert / RSS](#)

Results: **119,943** | Page 1 of 10,000 |  | Sort by:

[Save to: ENDNOTE® WEB](#) | [ENDNOTE®](#) | [I Wrote These Publications](#) | [more options](#) | [Analyze Results](#)  
Citation Report feature not available. [?]

#### Refine Results

Search within results for

**Web of Science Categories**

CHEMISTRY MULTIDISCIPLINARY (29,069)

- Title: **Catalytic oxidation of thioanisole using oxovanadium(IV)-functionalized electrospun polybenzimidazole nanofibers**  
Author(s): Walmsley, Ryan S.; Hlangothi, Percy; Litwinski, Christian, et al.  
Source: JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE Volume: 127 Issue: 6 Pages: 4719-4725 DOI: 10.1002/app.38067 Published: MAR 15 2013  
Times Cited: 0 (from Web of Science)  
[View abstract](#)

# Scopus- общенаучная ИПС для поиска рефератов и библиографии: <http://scopus.com>

The screenshot displays the Scopus search interface. At the top, there are logos for SciVerse and Scopus, along with navigation links for Hub, ScienceDirect, Scopus, and Applications. A search bar is present with the text "Applications - SciVerse Applications". Below this is a dark teal navigation bar with links for Search, Sources, Analytics, Alerts, My list, and Settings.

The main search area is titled "Document search" and includes tabs for "Author search", "Affiliation search", and "Advanced search". The search input field is empty, with a dropdown menu set to "Article Title, Abstract, Keywords" and a "Search tips" link. Below the input field, there is an example: "E.g., 'heart attack' AND stress". A "Search" button is located to the right of the input field.

Under the "Limit to:" section, there are two main filter categories: "Date Range (inclusive)" and "Document Type".

- Date Range (inclusive):**
  - Published: All years to Present
  - Added to Scopus in the last 7 days
- Document Type:** ALL

The "Subject Areas" section is expanded, showing a list of checked categories:


- Life Sciences (> 4,300 titles)
- Health Sciences (> 6,800 titles. 100% Medline coverage)
- Physical Sciences (> 7,200 titles)
- Social Sciences & Humanities (> 5,300 titles)

A "Search" button is located at the bottom right of the search area.

On the right side, there is a "Resources" sidebar with the following links:


- Add your papers to ORCID
- Follow @Scopus on Twitter for updates, news and more
- Access training videos
- Learn about alerts and registration
- See recent feature enhancements
- View known issues

# Science Direct - ИПС с полнотекстовыми б/д

Hub | **ScienceDirect** | Scopus | ApplicationsRegister | Login | Go to SciVal Suite

Home | Browse | Search | My settings | My alertsHelp

Articles  All fields  Author Images  Journal/Book title  Volume  Issue  Page  **Search**Advanced search? Search tips



**Find methods you need for your research**  
SciVerse Applications **Methods Search**

5 articles found for: AUTHORS(A.S. Dukhin) AND LIMIT-TO(pubyr, "2010,2007,2005")

[Save this search](#) | [Save as search alert](#) | [RSS Feed](#)

Font Size: A<sup>+</sup> A<sup>-</sup>

= Full-text available  = Abstract only

Page 1 of 1

**Search within results**

**Search**

**Refine results**

**Limit to**  **Exclude**

**Content Type**

Journal (5)

**Journal/Book Title**

Advances in Colloid and Interface Science (2)

Journal of Colloid and Interface Science (2)

Journal of Dairy Science (1)

**Topic**

analytical solution (1)

collision frequency (1)

dairy product (1)

[E-mail articles](#) | [Export citations](#) | [Download multiple PDFs](#) | [Open all previews](#)

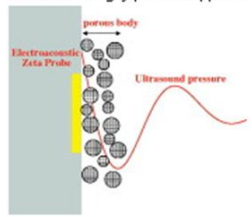
Sort by: **Relevance** | Date

1  **The seismoelectric effect: A nonisochoric streaming current: 2. Theory and its experimental verification** Original Research Article  
*Journal of Colloid and Interface Science*, Volume 346, Issue 1, 1 June 2010, Pages 248-253  
A.S. Dukhin, V.N. Shilov

[Show preview](#) | [PDF \(503 K\)](#) | [Related articles](#) | [Related reference work articles](#)

**Graphical abstract**

Propagation of ultrasound through a porous body saturated with liquid generates an electric response, which is called "seismoelectric current." It can be described as "streaming current" under nonisochoric conditions when compressibility becomes important. Seismoelectric currents can be measured with electroacoustic devices originally designed for characterizing liquid dispersions. This effect can be used for characterizing  $\zeta$ -potential, porosity, and pore size of porous bodies.



× Найти: Deryev

[Следующее](#) [Предыдущее](#) [Подсветить все](#)  Учеть регистр

# ИПС для ХИМИКОВ: SciFinder

SciFinder®

Explore References   Explore Substances   Explore Reactions

Welcome Lykyanova Olga | Sign Out

Add KMP Alert   Research Topic "catalysis"

## Explore References ?

Research Topic   Research Topic ?   catalysis   Search

Author Name

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

Examples:  
*The effect of antibiotic residues on dairy products*  
*Photocyanation of aromatic compounds*

<https://scifinder.cas.org>

Welcome Lykyanova Olga | Sign Out

Add KMP Alert   Research Topic "catalysis"

## Research Topic Candidates ?

2 Topics   0 Selected

Select All   Deselect All

Research Topic Candidates	References
<input type="checkbox"/> 325987 references were found containing "catalysis" as entered.	325987
<input type="checkbox"/> 2279521 references were found containing the concept "catalysis".	2279521

Get References

# Пример поиска информации в программе ChemSpider



## Поиск по химическому составу

Search

Simple Structure **Advanced** More searches...

Search by Structure

Search by Identifier

Systematic Name, Trivial Name or Synonym, Registry Number, SMILES, InChI or InChIKey:

Synonym  
 InChI  
 InChIkey  
 Substring  
 Approximate

Search by Elements

The elements below, if chosen,  may  must be present in compounds being found

C H N O P S F Cl Br I Li Na K Ca Zn Fe Cu Co Ni Ga Ge As Se Br Kr B C N O F Ne Al Si P S Cl Ar He

H  D  T

The elements below, if chosen, **must not** be present in compounds being found

## Поиск по номенклатуре или тривиальному названию

Simple search Structure search Advanced search

analgin

Systematic names: 1,2-dihydroxybenzene  
Synonyms: AIBN  
Trade names: Aspirin  
Registry numbers: 7732-18-5  
SMILES: O=C(O)OC  
InChI: InChI=1/CH4/h1/H4

Search

## Поиск по структурной формуле

Search

Simple Structure **Advanced** More searches...

Click to edit structure

Click to edit structure

Search Options

- Exact Match
- All Tautomers
- Same Skeleton (Including H)
- Same Skeleton (Excluding H)
- All Isomers

Options

Search Clear form

## Результаты поиска

Grid Tile Table Names/Structures Names

ID	Structure	Molecular Formula	Molecular Weight	# of Data Sources	# of References	# of PubMed	# of RSC
<a href="#">6000</a> W		C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> NaO <sub>4</sub> S	333.3386	31	569	1063	17389



# PubChem

- **PubChem** — база данных химических соединений и смесей, являющаяся общественным достоянием. Обслуживается Национальным центром биотехнологической информации США (NCBI), подразделением Национальной медицинской библиотеки США, которая в свою очередь является подразделением Национальных Институтов Здоровья США (NIH). Более 80 различных баз данных вносят свой вклад в рост базы данных PubChem[1]. База данных PubChem существует с 2004 года.[2]
- Ссылка для выполнения задания <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/#draw=true>

- **Mendeley** — бесплатная программа для управления библиографической информацией, позволяющая хранить и просматривать исследовательские работы в формате PDF, а также имеющая подключение к международной социальной сети учёных. Для получения доступа к использованию программы, требуется учётная запись на сайте социальной сети. Базовый пакет Mendeley распространяется как freeware, однако существуют платные версии с увеличенными квотами на хранение материалов и создание групп.

- **Sci-Hub** — интернет-ресурс, предоставляющий доступ к более чем 76,46 миллиона научных статей и других трудов [2][3]. Первый известный веб-сайт, предоставляющий автоматический и бесплатный доступ к полным текстам научных работ для всех желающих

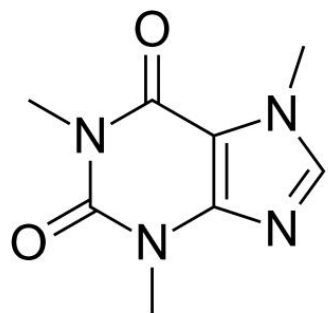


<https://sci-hub.do/>

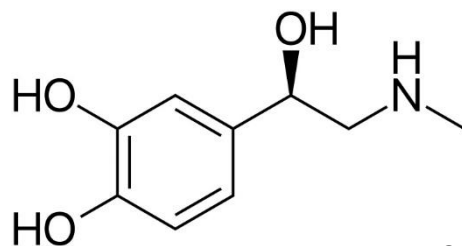
# Требования к отчету

- $\geq 2$  стр. А4 (1.5 интервал, 12 TNR)
- 3-4 ссылок на найденные в ИПС статьи в списке литературы
- Титульный лист, оформление по ГОСТ
  
- Возникающие вопросы и готовые задания высылать

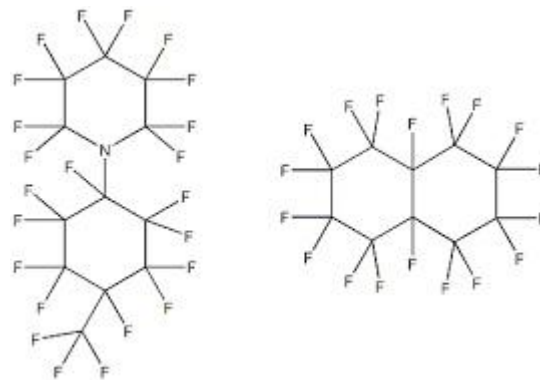
по адресу: [derevshchikov@mail.ru](mailto:derevshchikov@mail.ru)



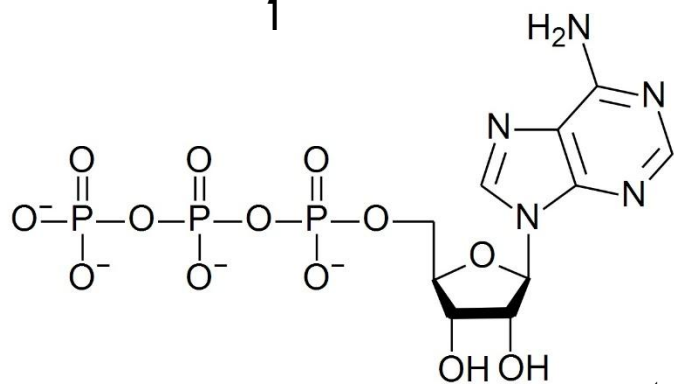
1



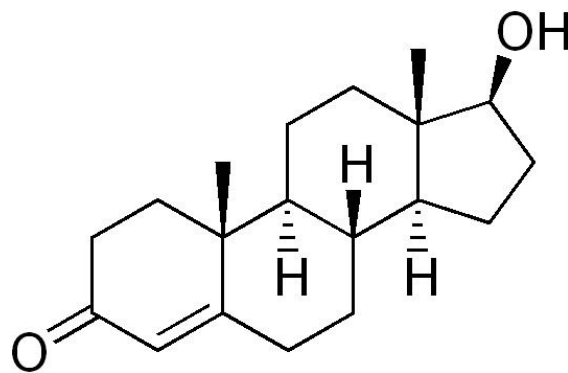
2



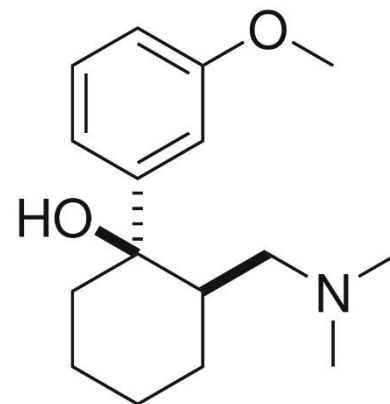
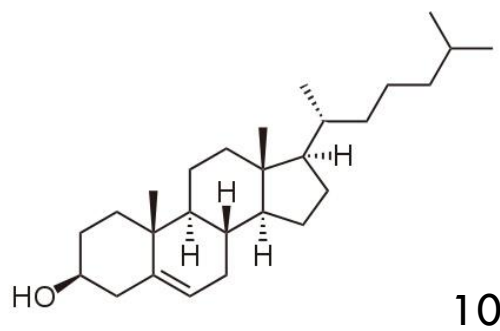
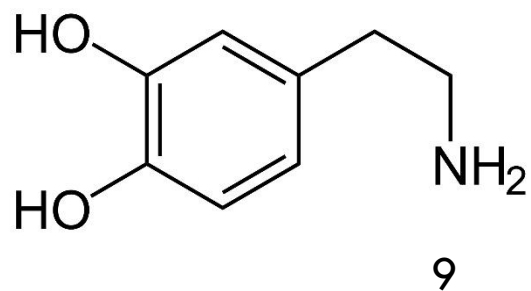
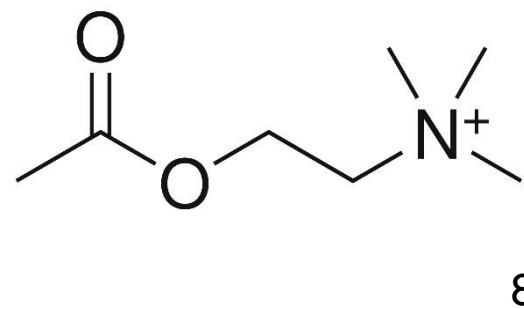
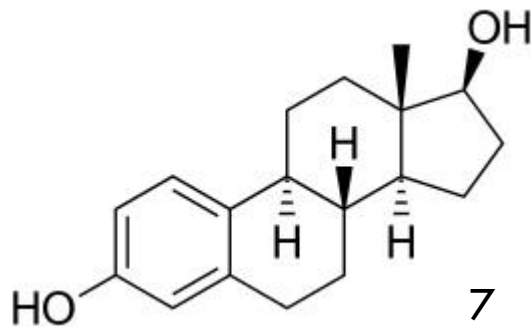
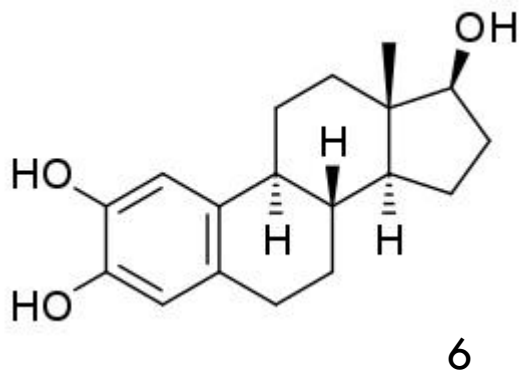
3

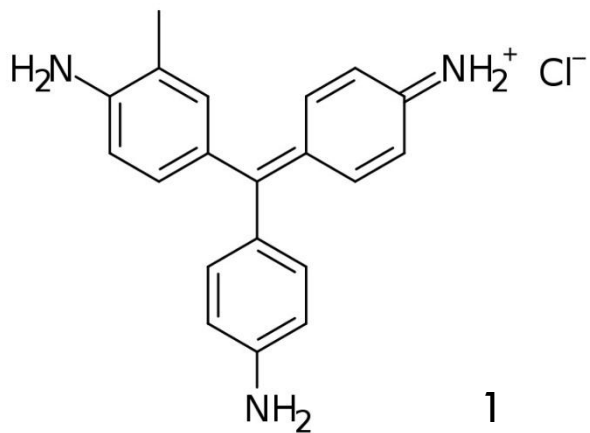


4

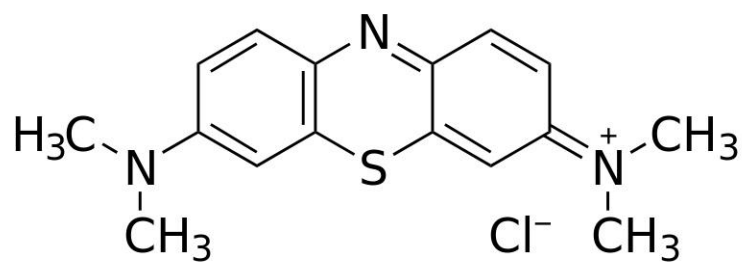


5

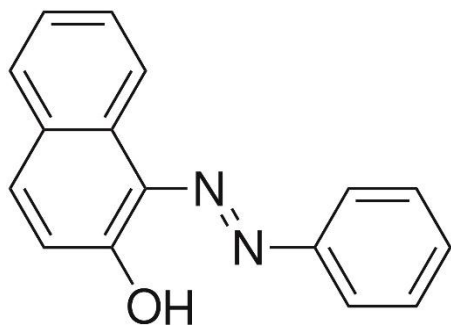




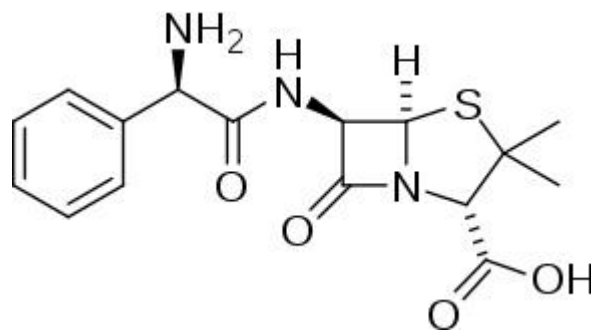
1  
2



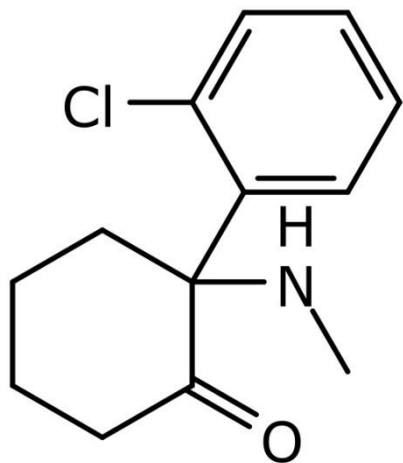
1  
3



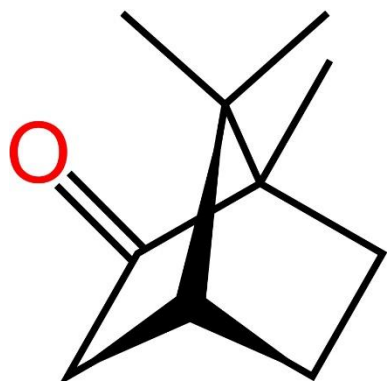
1  
4



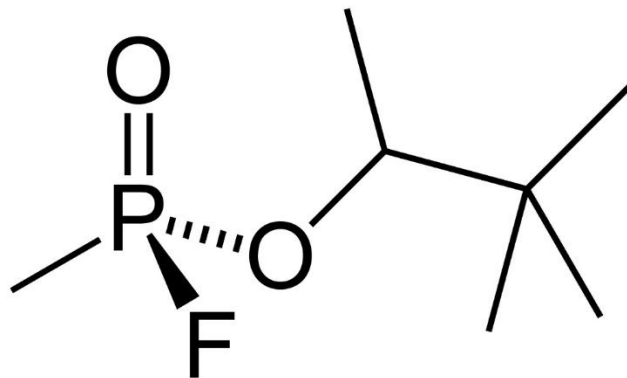
1  
5



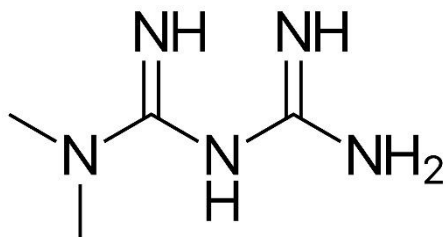
1  
6



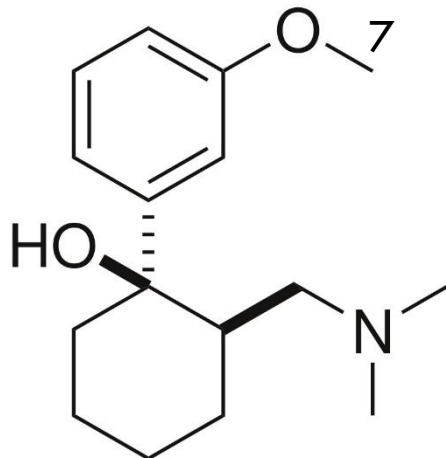
1  
7



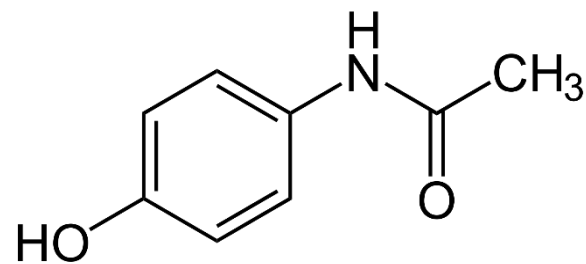
1  
8



1  
9

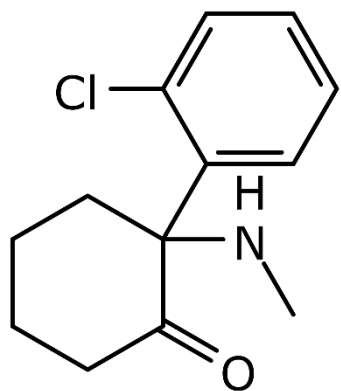


2  
0

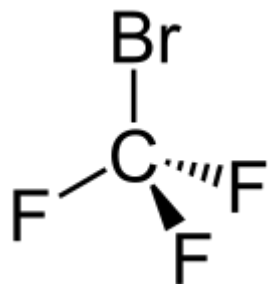


2  
1

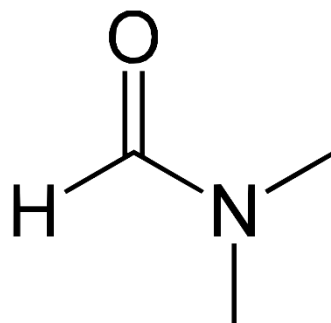




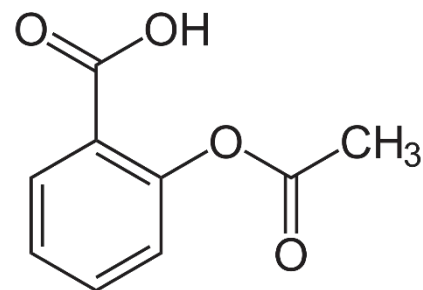
2  
2



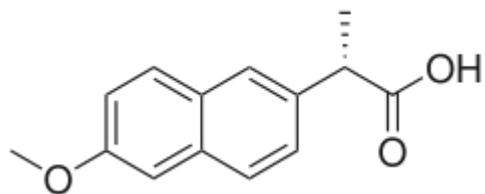
2  
3



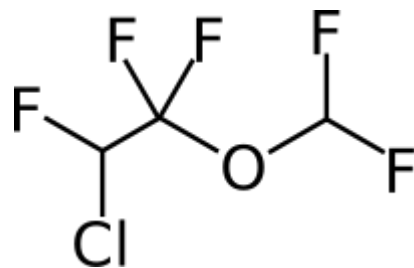
2  
4



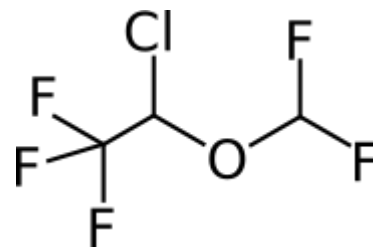
2  
5



2  
6



2  
7



2  
8

# Рекомендации по поиску информации

- При составлении поискового запроса ознакомиться с содержанием нескольких статей по выбранной тематике, выбрать характерные термины, и использовать их в запросе.
- Запрос должен содержать как можно меньше терминов, широких по смыслу. Такие термины увеличивают список результатов поиска и существенно затрудняют сортировку по релевантности.
- Лучше использовать ступенчатый алгоритм поиска: сначала провести поиск в поле названий статей (Title). Если нужная информация не найдена – в поле анализируемых полей добавить рефераты (Title, Abstract). Если же и в этом случае результаты запросов не удовлетворяют пользователя, стоит провести поиск в полных текстах статей (Full-text).
- Получив излишне длинный список результатов поиска, не надо сразу менять запрос; стоит бегло посмотреть результаты в начале списка – может быть, там имеется нужная информация,

# Используйте при подготовке:

- <http://mathcad.gorodok.net/> (примеры и рекомендации по решению задач, справочные данные)
- [http://fen.nsu.ru/posob/phys\\_ch/computer-for-chem.pdf](http://fen.nsu.ru/posob/phys_ch/computer-for-chem.pdf) (методическое пособие «Компьютер для химика»)
- <http://exponenta.ru/soft/Mathcad/Mathcad.asp> (образовательные математический сайт с примерами MathCad)