ВВЕДЕНИЕ В ХИМИЧЕСКУЮ КИБЕРНЕТИКУ

НГТУ- 2020

Химическая кибернетика

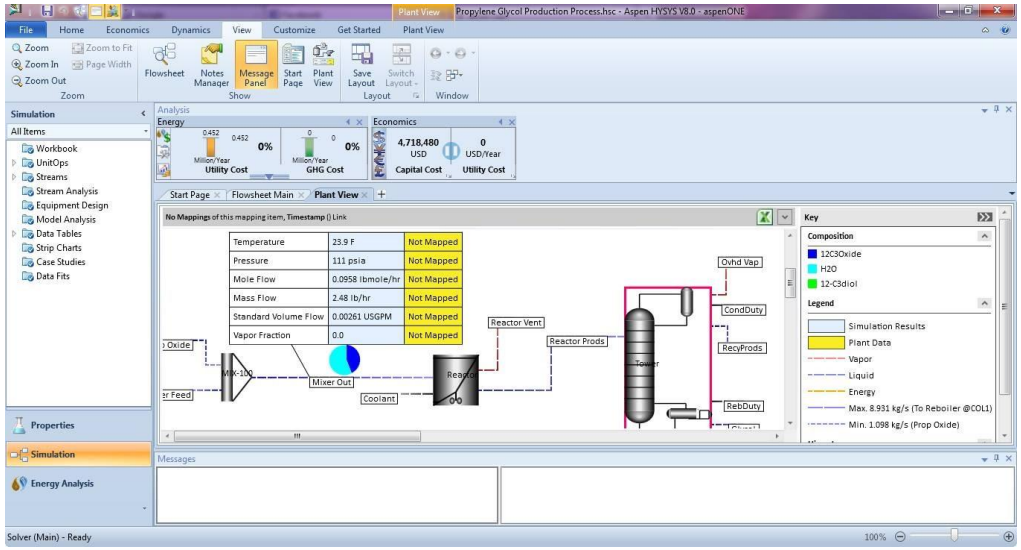
- **КИБЕРНЕТИКА** в химической технологии (от греч. kybernetike - искусство управления), раздел науки о связях процессов и явлений в химико-технол. системах и управлении ими. Предмет исследования - хим. объекты и их совокупности, хим. произ-ва, стратегия изучения - системный анализ, научный метод мат. 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 исследований , инженеров.



Функционирование ХТС характеризуют состояни ХТС т.е. показателями всех потоков и аппаратов Показатели потоков называют параметрами 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.

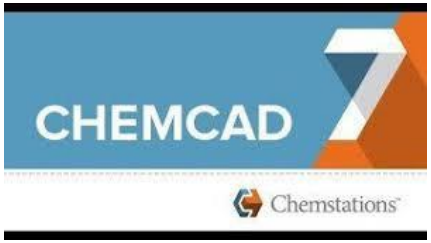
Программы для моделирования химико-технологических систем

- Aspen Hysys

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

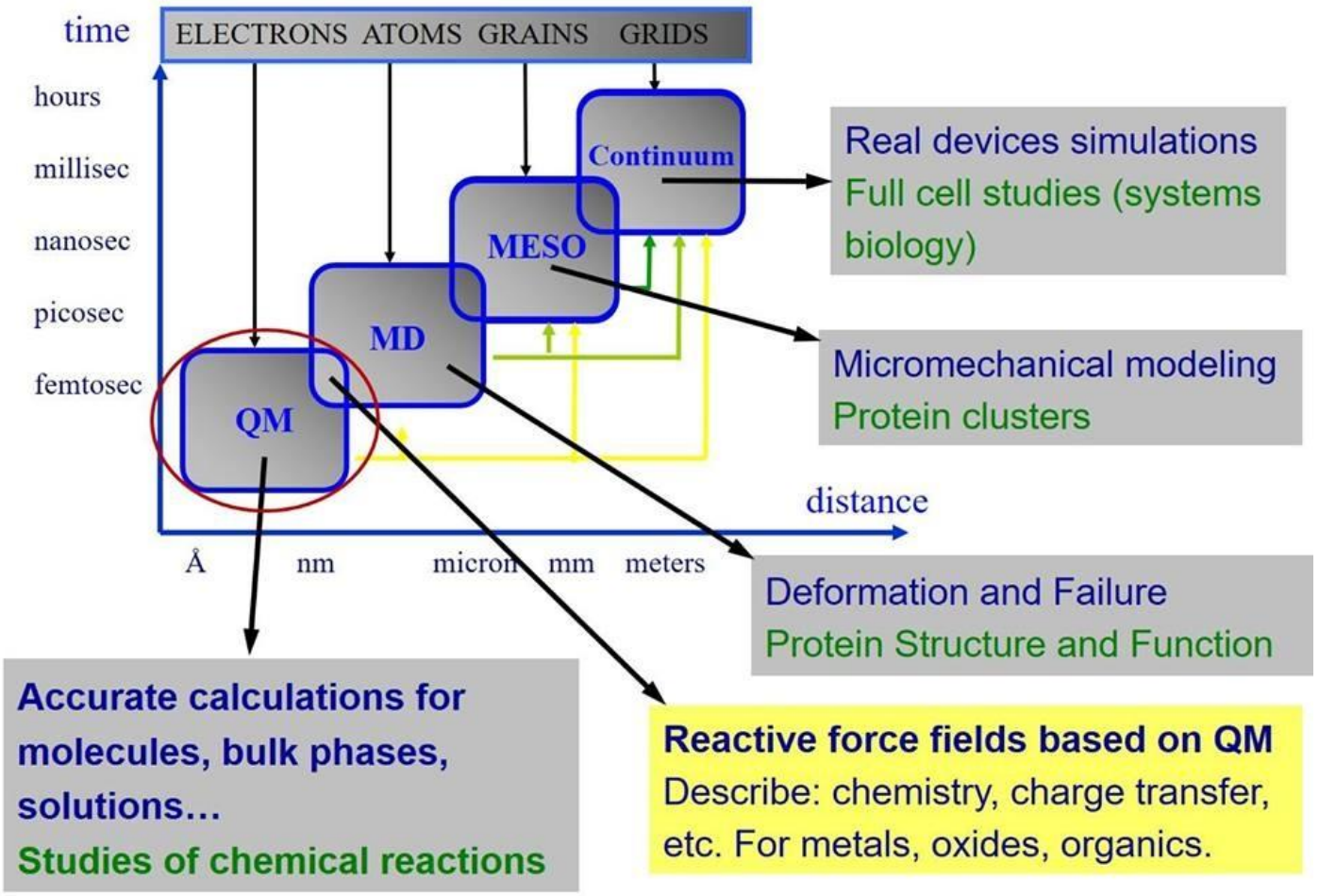
- ChemCAD

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

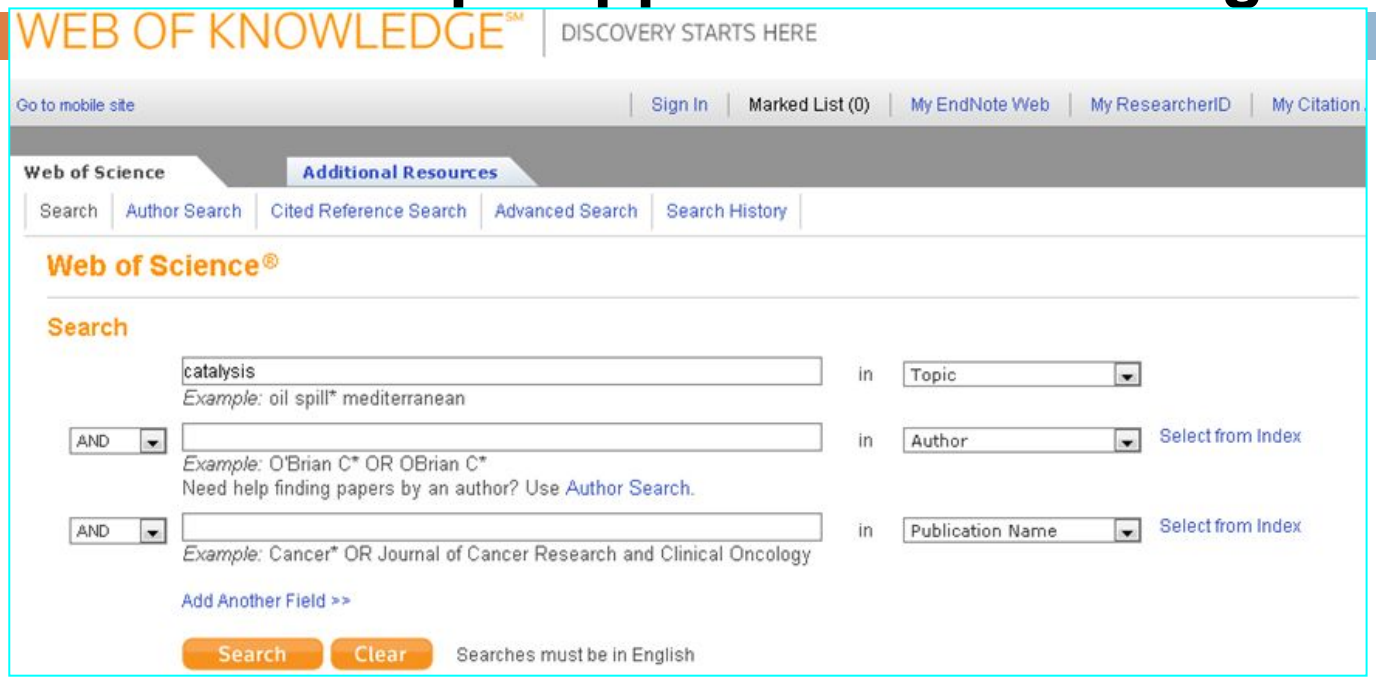
Доступ по подписке

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

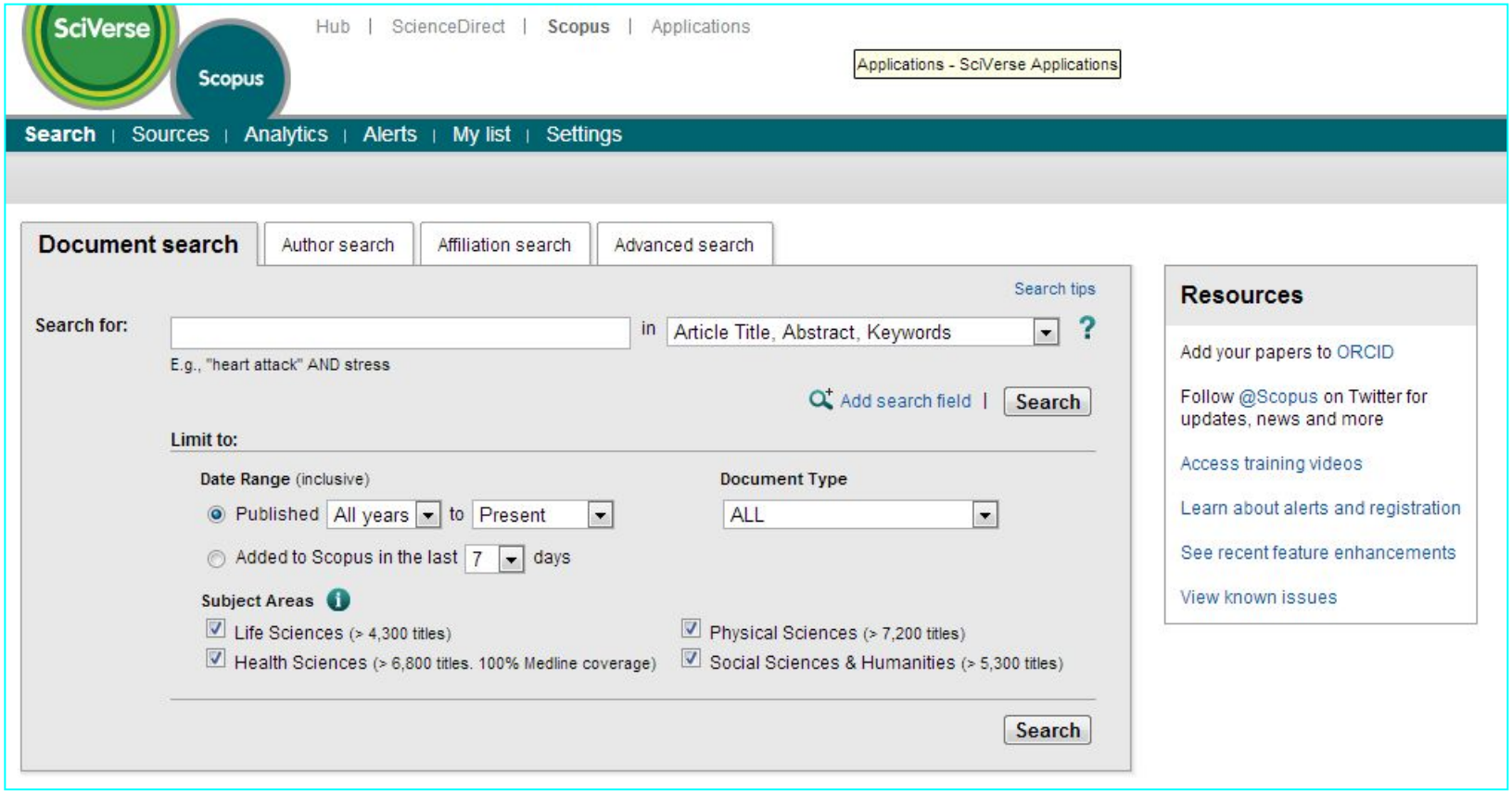
Общедоступные сервисы

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

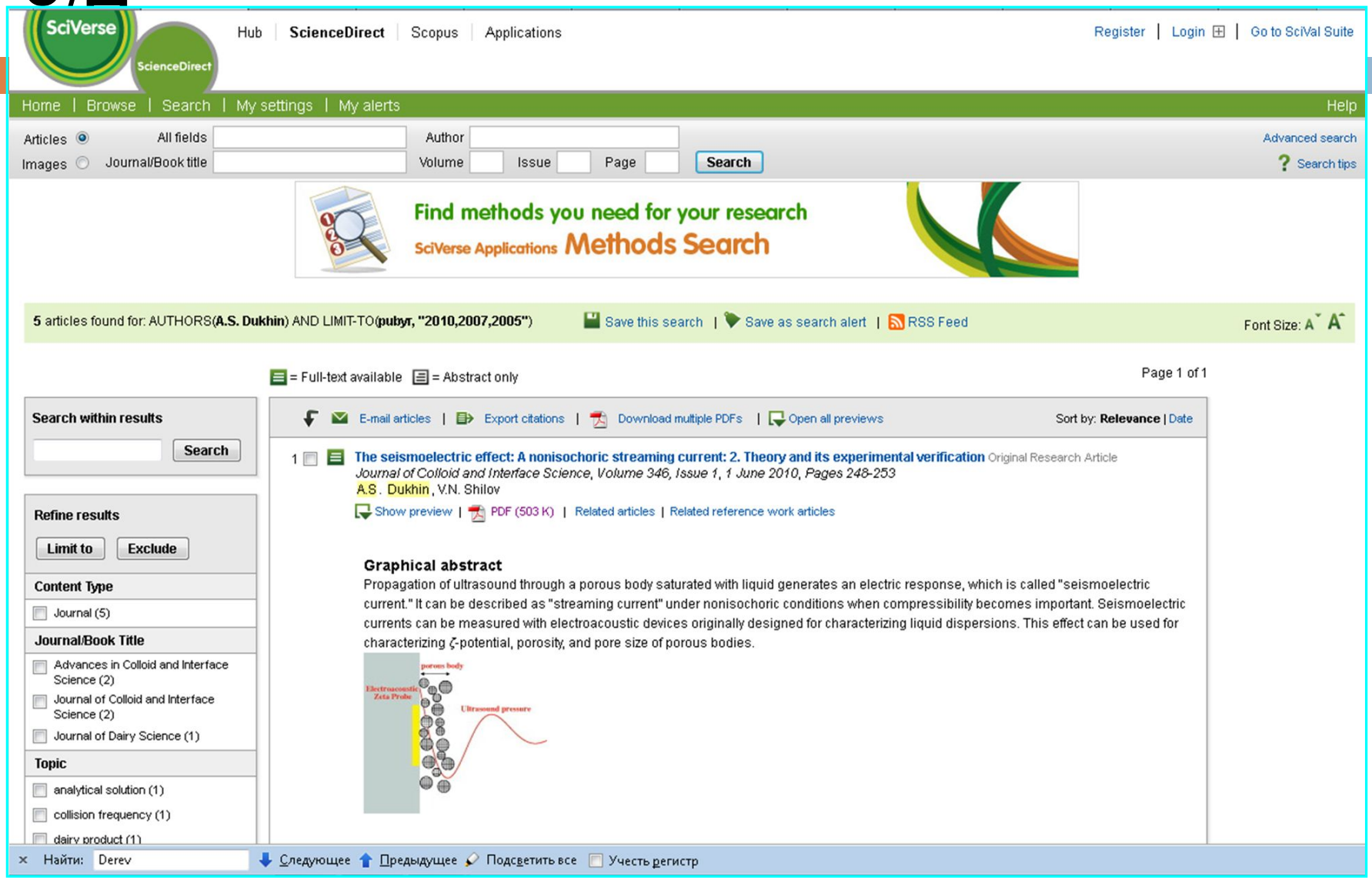
ISI Web of knowledge - общенаучная ИПС для поиска рефератов и библиографии: http://apps.webofknowledge.com



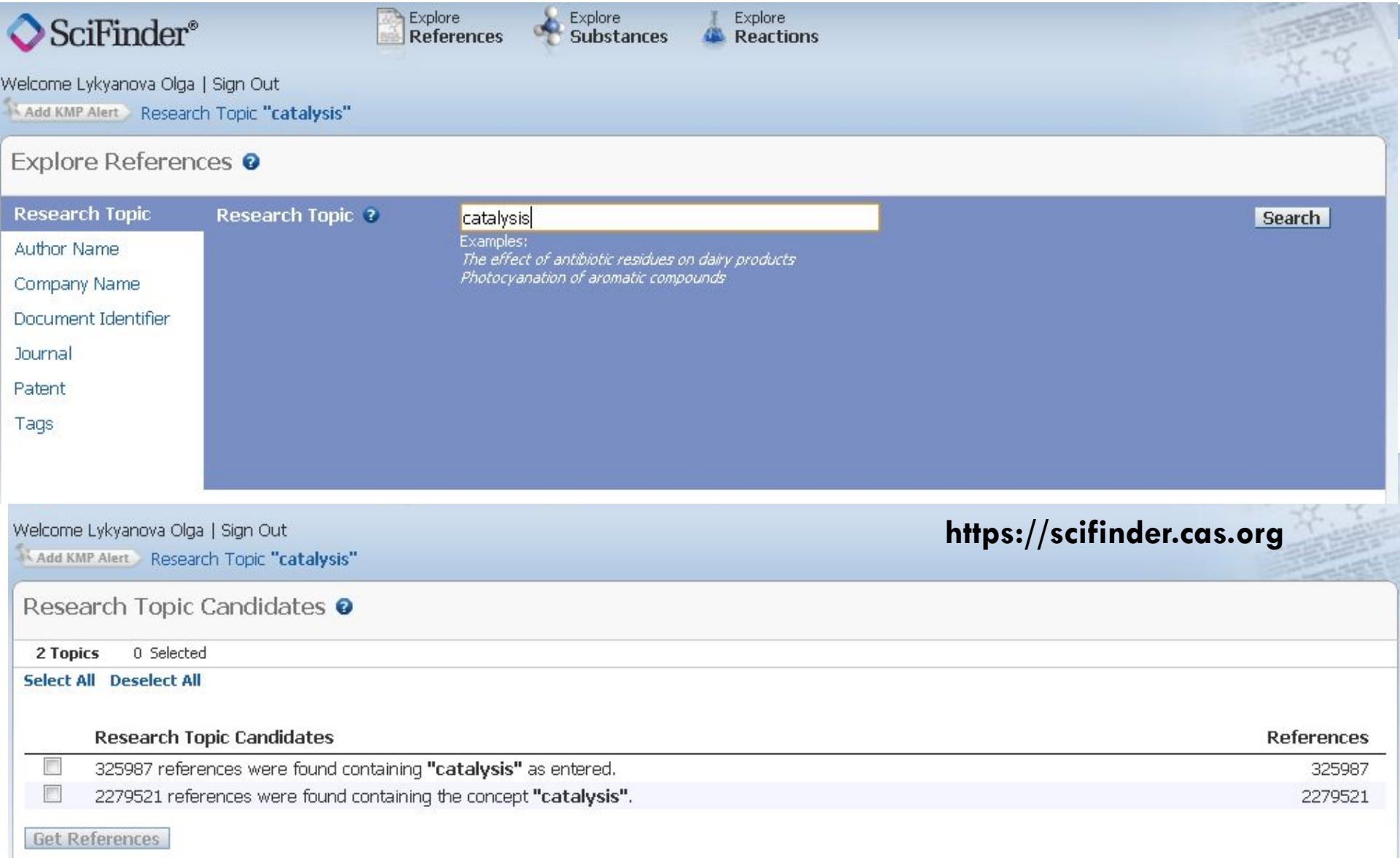
Scopus- общенаучная ИПС для поиска рефератов и библиографии: http://scopus.com



Science Direct - ИПС с полнотекстовыми б/д



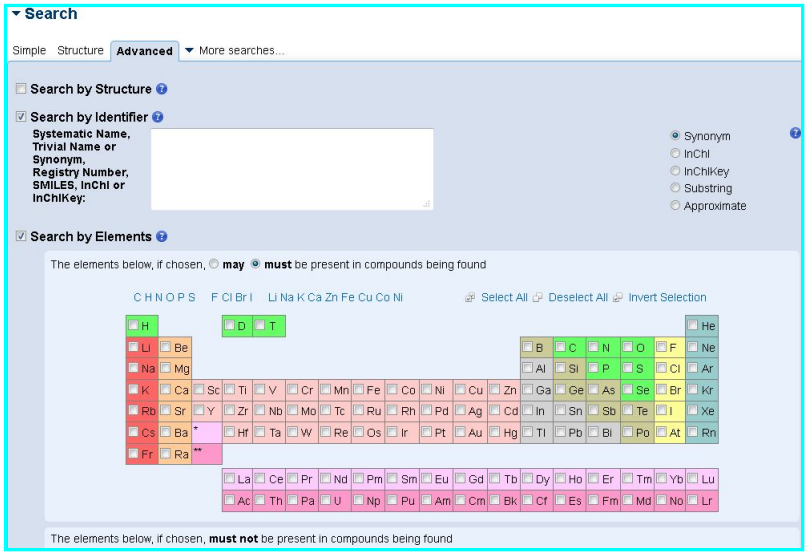
ИПС для химиков: SciFinder



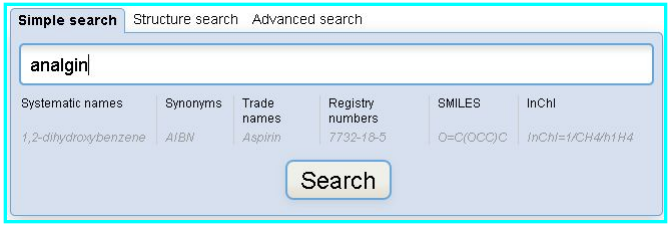
Пример поиска информации в программе ChemSpider

ChemSpider
The free chemical database

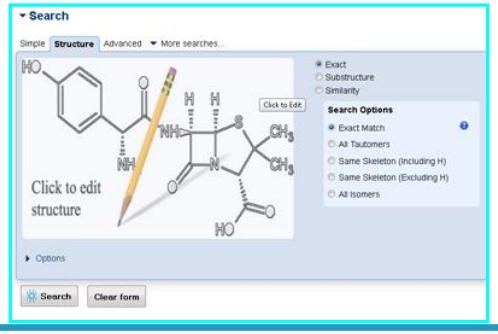
Поиск по химическому составу



Поиск по номенклатуре или тривиальному названию

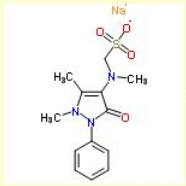


Поиск по структурной формуле



Результаты поиска

Grid Tile Table Names/Structures Names

ID	Structure	Molecular Formula	Molecular Weight	# of Data Sources	# of References	# of PubMed	# of RSC
6000		$C_{13}H_{16}N_3NaO_4S$	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

- **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

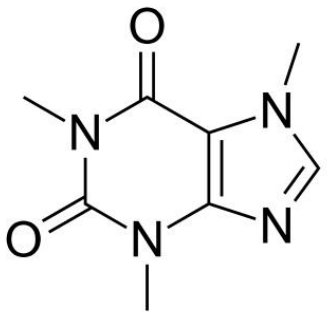
https://sci-hub.do/

Требования к отчету

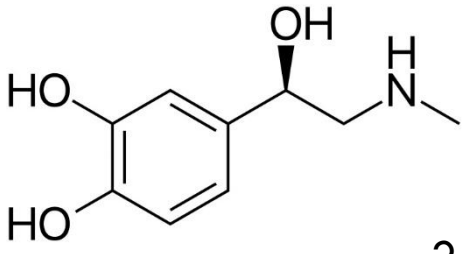
- ≥ 2 стр. А4 (1.5 интервал, 12 TNR)
- 3-4 ссылок на найденные в ИПС статьи в списке литературы
- Титульные лист, оформление по ГОСТ

- Возникающие вопросы и готовые задания высылать

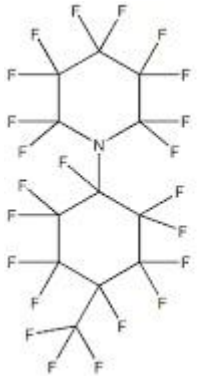
по адресу: derevshchikov@mail.ru

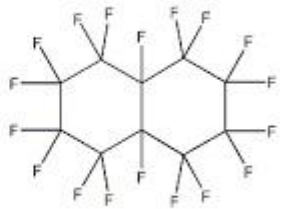


1

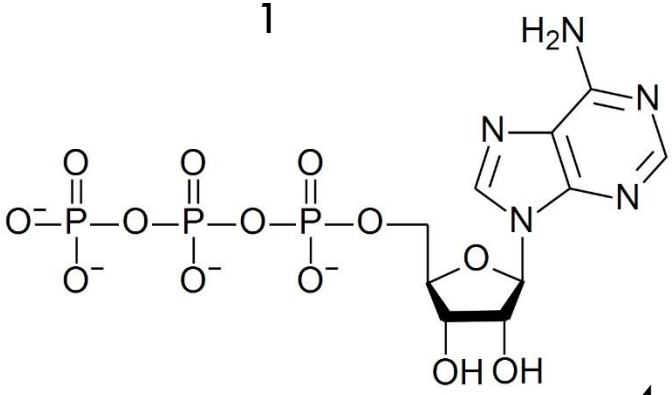


2

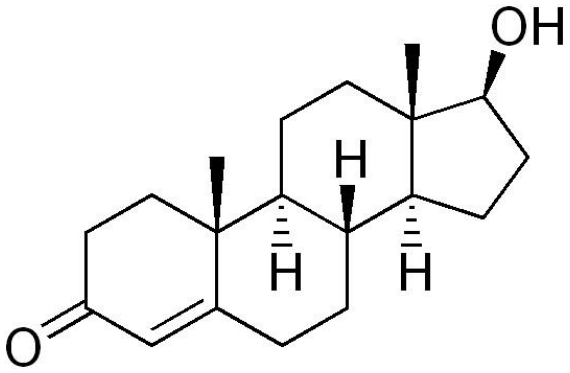




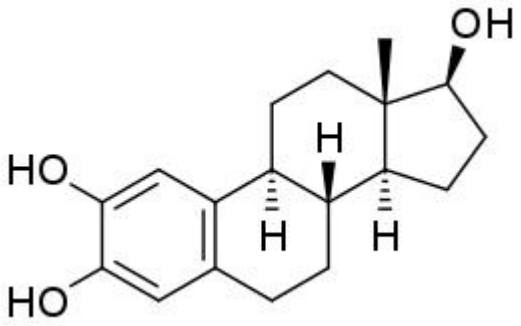
3



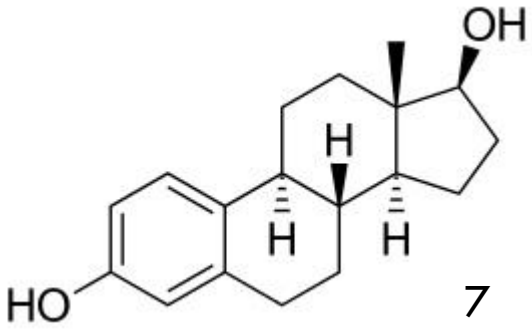
4



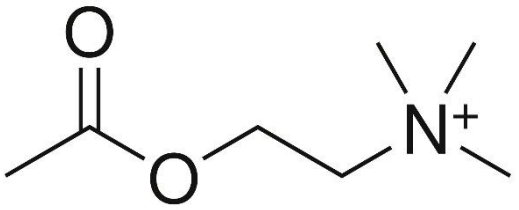
5



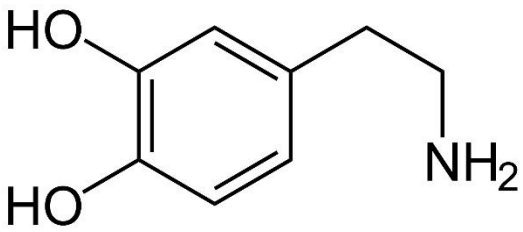
6



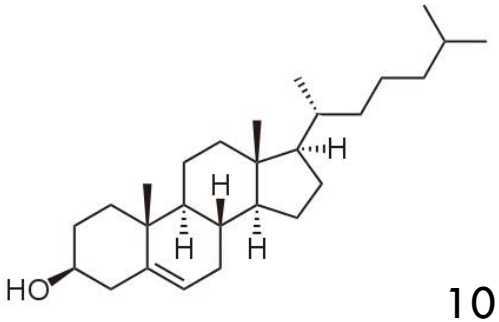
7



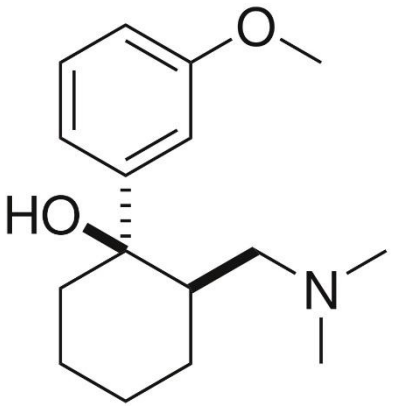
8



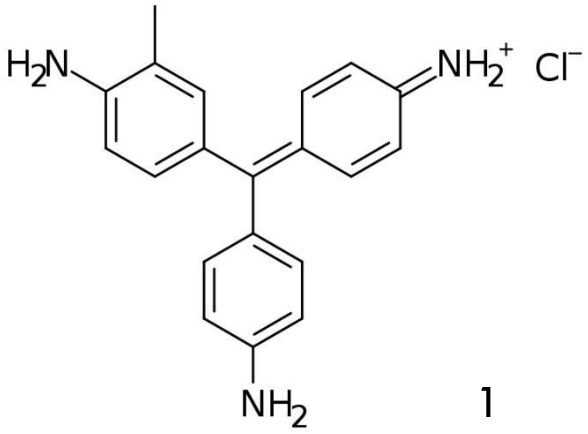
9



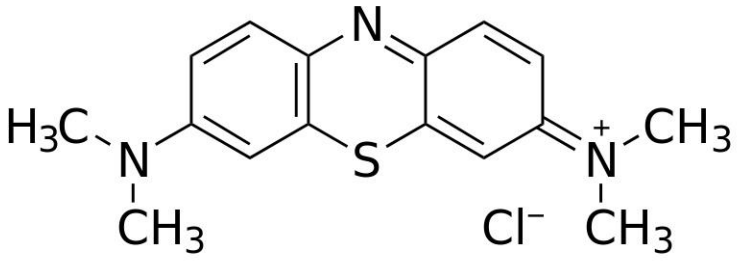
10



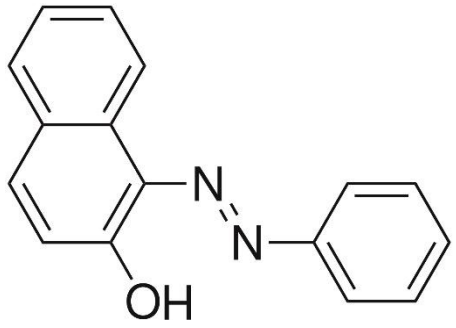
11



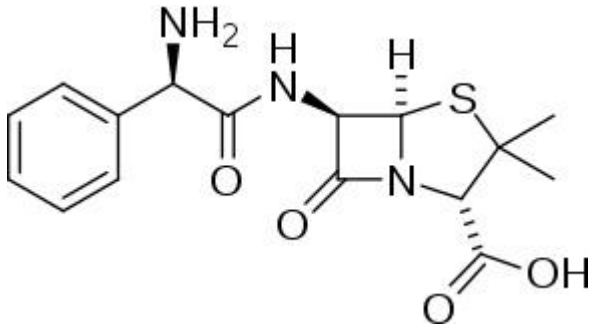
12



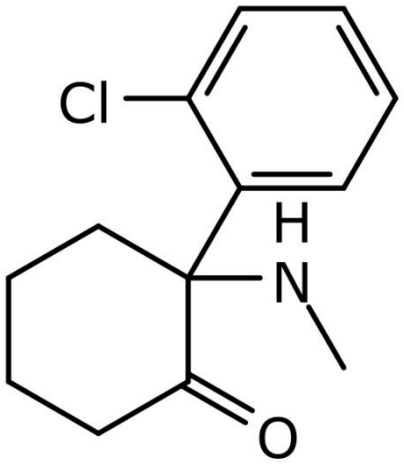
13



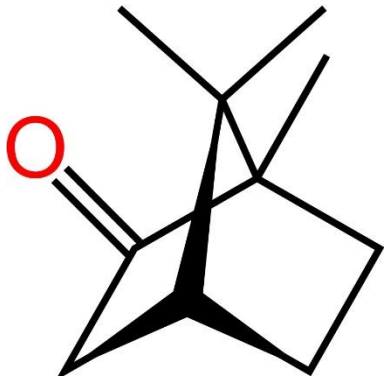
14



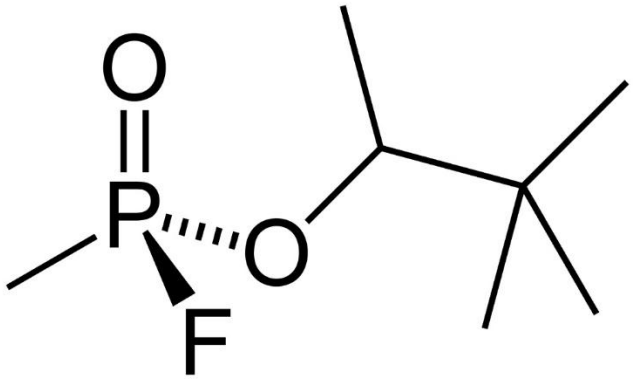
15



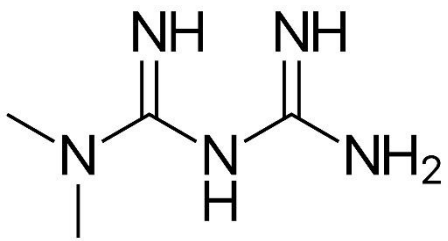
16



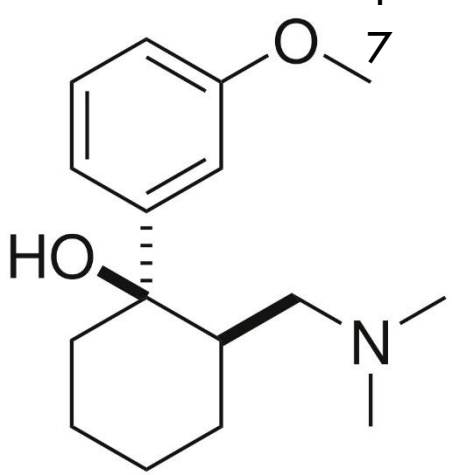
17



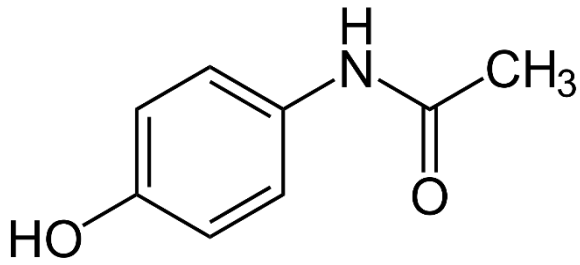
18



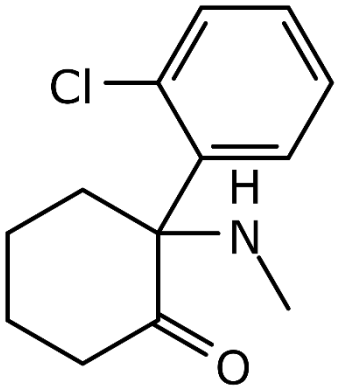
19



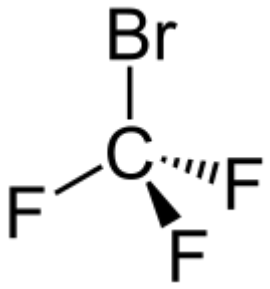
20



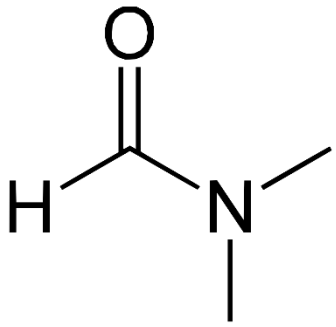
21



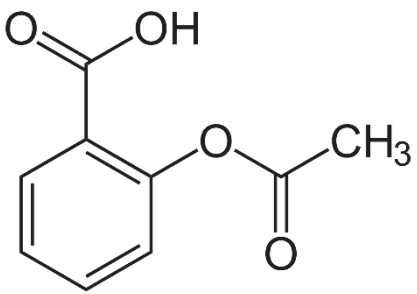
22



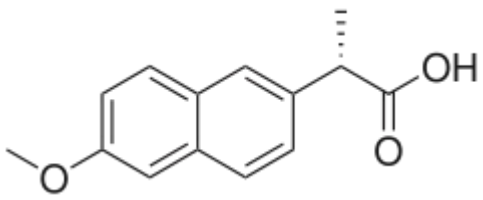
23



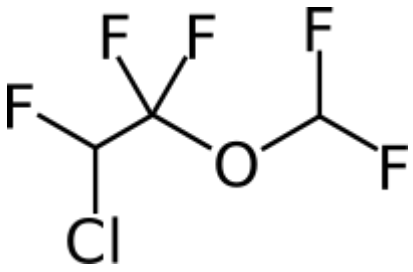
24



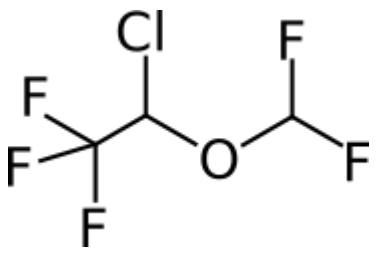
25



26



27



28

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 (методическое пособие «Компьютер для химика)
- http://exponenta.ru/soft/Mathcad/Mathcad.asp (образовательные математический сайт с примерами MathCad)