

СПОСОБЫ ОДНОЗНАЧНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ВЕЩЕСТВ, ДОПУСКАЮЩИХ ИЗОМЕРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ, ПРИ ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Е.А. Клокова, студент группы АСМ-14,
научный руководитель: Томилов И.Н.*

Новосибирский государственный технический университет
630073, г. Новосибирск, пр-т К.Маркса, 20

*Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского
Томского политехнического университета
652055, Кемеровская обл., г. Юрга, ул. Ленинградская, 26

В работе решается проблема неоднозначности при описании химических реакций с участием веществ, допускающих изомерные соединения.

Прямая задача химической кинетики. Расчет кинетических кривых для заданных начальных концентраций компонентов с использованием известных констант скоростей называется прямой задачей химической кинетики (ПЗХК). Предметом изучения являются временные зависимости концентраций участников реакции от времени, которые являются решением задачи Коши для системы ОДУ химической кинетики [1].

Дифференциальные уравнения составляют основу математического аппарата химической кинетики. Они строятся по определенному алгоритму на основе схемы химической реакции [2]. В случае достаточно большого количества участников химической реакции и/или стадий реакции написание соответствующей системы ОДУ предметным специалистом весьма затруднительно, что является основанием для создания математического и программного обеспечения для решения прямых задач химической кинетики методом компьютерного моделирования. Еще одной проблемой является однозначность представления участников реакции, имеющих одинаковые химические формулы – изомеры.

Понятие изомерии. Изомерия – явление, заключающееся в существовании химических соединений – изомеров, – одинаковых по атомарному составу и молекулярной массе, но различающихся по строению или расположению атомов в пространстве и, вследствие этого, по свойствам. Изомерия является одной из причин того, что органические соединения так многочисленны и разнообразны.

В зависимости от характера отличий в строении изомеров различают структурную и пространственную изомерию (стереоизомерию).

Структурные изомеры – соединения одинакового качественного и количественного состава, отличающиеся порядком связывания атомов, то есть химическим строением. К этому типу относят изомерию углеродной цепи (рисунок 1), валентную изомерию, изомерию функциональной группы, изомерию положения и метамерию.



Рис. 1. Изомерия углеродной цепи: а) 2-аминобутановая кислота; б) 2-амино-2-метилпропановая кислота

Пространственная изомерия возникает в результате различий в пространственной конфигурации молекул, имеющих одинаковое химическое строение. Этот тип изомерии подразделяют на энантиомерию (оптическую изомерию) и диастереомерию (рисунок 2).

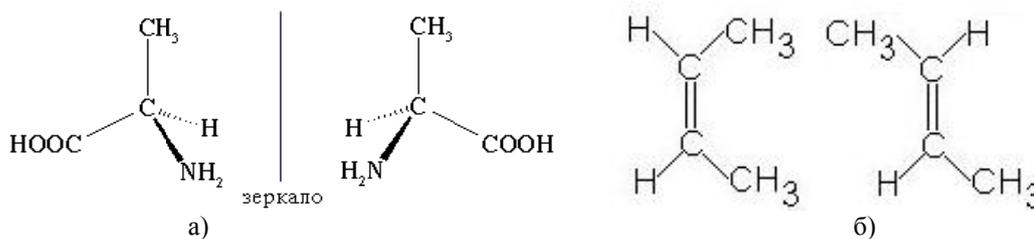


Рис. 2. Пространственная изомерия: а) энантиомерия б) диастереомерия

Способы однозначного представления изомеров. Существует два типа способов внутреннего представления структурных формул: линейные нотации и молекулярные графы [3].

Молекулярный граф – это связный неориентированный граф, находящийся во взаимно-однозначном соответствии со структурной формулой химического соединения таким образом, что вершинам графа соответствуют атомы молекулы, а рёбрам графа — химические связи между этими атомами. В этом случае описание структуры заключается в составлении матрицы смежности молекулярного графа.

Однако простейшим способом внутреннего представления являются линейные нотации, когда структурная формула описывается как линейная последовательность символов. По сравнению с матрицами смежности линейные нотации чрезвычайно компактны, что является преимуществом при хранении информации о соединениях. Линейные нотации позволяют свободно обмениваться информацией о химических соединениях без необходимости использования специального программного обеспечения, интерпретация поддерживается поисковыми системами. Рассмотрим такие линейные нотации, как нотацию Висвессера (WLN), InChI, SMILES и SLN [3].

WLN (Wiswesser Line Notation) была создана для удобства ввода информации в ЭВМ с перфокарт. Чтобы выполнить ограничение в 80 символов на карте, в нотации использовались только прописные буквы, цифры от 0 до 9 и несколько знаков типа «&». Кроме того, она была создана таким образом, чтобы её с легкостью распознавали и химики, и цифровые процессоры. Буквенные обозначения присвоены всем химическим элементам (с учетом валентности их атомов и ближайшего окружения), а также основным типам связей, циклов и функциональных групп. Длина углеродной цепи кодируется числом, символ «&» разделяет коды цепей в точке их разветвления.

InChI (IUPAC International Chemical Identifier) – международный текстовый идентификатор химического объекта; это компьютеризованный вариант систематического названия, то есть запись в формате InChI является цифровым эквивалентом названию соединения по номенклатуре IUPAC. InChI содержит пять уровней информации: связанность, таутомеризм, изотопы, стереохимия, заряд. Каждый слой в InChI содержит свой тип информации о химическом соединении. При разработке формата первоочередной задачей ставилась компактность, а не легкость интерпретации, тем не менее, сохраняется возможность интерпретируемости пользователем. Запись InChI для сложных молекул может оказаться довольно длинной. Поэтому её не эффективно использовать для поиска в базе данных, но из неё генерируется хеш-ключ, который состоит из 27 символов для любой формулы – InChIKey.

Наиболее распространенной линейной нотацией является спецификация SMILES [3].

SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification) — система правил однозначного описания состава и структуры молекулы химического вещества с использованием строки символов ASCII. Линейное обозначение, составленное по правилам SMILES, может быть преобразовано многими молекулярными редакторами в двумерную или трёхмерную структурную формулу молекулы.

SMILES имеет ряд достоинств, которые делают этот язык намного более понятным и удобным в обращении, чем предшествующие ему линейные нотации и матричные формы [4]. Он представляет собой лингвистическую конструкцию, поэтому лучше воспринимается пользователем. Имеет простой и понятный словарь, основанный на обозначениях атомов и типов связей, привычных для химиков. Использует простую грамматику, состоящую из небольшого числа достаточно простых правил.

В основе грамматики SMILES лежит всего шесть основных правил:

1. Атомы изображаются общепринятыми в химии символами.
2. Водородные атомы по умолчанию насыщают свободные валентности и не отображаются.
3. Соседствующие атомы записываются один за другим согласно порядку их следования в молекулярной цепи.
4. Двойная и тройная связи изображаются знаками «=» и «#» соответственно.
5. Коды боковых цепей заключаются в круглые скобки.
6. Циклы описываются путем присвоения цифровых индексов двум замыкающим цикл атомам.

SMILES является наиболее популярной системой описания молекул. Большинство систем цифровой обработки химических данных поддерживает этот формат.

Путем модификации SMILES фирма «Tripos» разработала линейную нотацию SLN (Sybyl Line Notation) – универсальный язык представления химической структуры, позволяющий кодировать «стандартные» органические соединения, полимеры и биомолекулы [4]. Основное отличие SLN от SMILES – полная спецификация водородных атомов для всех «неводородных» атомов в

структуре. SLN используется в QSAR исследованиях, для структурного и подструктурного поиска, в комбинаторных библиотеках.

Литература.

1. Денисов Е.Т. Химическая кинетика: Учебник для вузов / Е.Т. Денисов, О.М. Саркисов, Г.И. Лихтенштейн. – М.: Химия, 2000. – 568 с.
2. Томилов И.Н. Математическое и программное обеспечение для решения прямых задач химической кинетики / И.Н. Томилов // Системы управления и информационные технологии, 2009. – №3.2(37). – С. 286-290.
3. Gasteiger Ed. J., Engel T. Chemoinformatics: A Textbook, Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, 2003, 649 p.
4. Васильев П.М. Языки фрагментарного кодирования структуры соединений для компьютерного прогноза биологической активности / П.М. Васильев, А.А Спасов // Российский химический журнал – 2006.

РАЗРАБОТКА ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ УЧЕТА И АНАЛИЗА УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ АВТОШКОЛЫ «МАГИСТРАЛЬ АВТО»

Ю.В. Корольков, студент группы 3-17890,

научный руководитель: Маслов А.В., к.т.н., доцент

Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского

Томского политехнического университета

652055, Кемеровская обл., г. Юрга, ул. Ленинградская, 26, тел. 89235081425.

E-mail: 89234812783@mail.ru

Автошкола «Магистраль Авто» – это автономная некоммерческая организация (АНО), которая создана для обучения клиентов правилам дорожного движения, вождению разных категорий транспортных средств. Целью деятельности автошколы является предоставление клиентам образовательных услуг для подготовки обучающихся к экзаменам в ГИБДД. Имеется большое количество информации о клиентах автошколы, программах обучения, автомобильного парка, бухгалтерских отчетах, мониторинге этапов прохождения обучения. Необходима информационная система (ИС), которая будет автоматизировать деятельность автошколы, упрощать работу сотрудников, преподавателей автошколы и предоставление клиентам информации о программе обучения, закрепленных за ним инструкторах и автомобилях. Информационная система будет объединять информацию о автошколе, выдавать необходимые отчеты.

Целью автоматизации является создание программного продукта на платформе 1С: Предприятие 8.3.

В 1С: Предприятие 8.3 имеется целый набор функций, с помощью которых можно:

- создавать, обрабатывать и изменять данные различных форматов;
- создавать собственные решения.

Современный дизайн интерфейса обеспечивает легкость освоения для начинающих и высокую скорость работы для опытных пользователей:

- значительное ускорение массового ввода информации благодаря функции «ввод по строке» и эффективному использованию клавиатуры;
- удобные средства работы с большими динамическими списками, управление видимостью и порядком колонок, настройка отбора и сортировки;
- разнообразные сервисные возможности;
- универсальные инструменты для создания отчетов любой сложности.

Таким образом, 1С: Предприятие 8.3 является средой, максимально подходящей для создания данной информационной системы.

Ход работы с готовым прототипом ИС будет следующий: менеджер автошколы составляет договор по оказанию услуг на обучение, затем за клиентом закрепляются инструктора и автомобили, далее с программой работают преподаватели. Они отмечают прохождение программы обучения клиентом. Создаются отчеты о принятых внутренних экзаменах и успешной сдаче экзаменов в ГИБДД.