|  |  |
| --- | --- |
| Gerb-BMSTU_01 | **Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  **высшего образования**  **«Московский государственный технический университет**  **имени Н.Э. Баумана**  **(национальный исследовательский университет)»**  **(МГТУ им. Н.Э. Баумана)** |

|  |  |
| --- | --- |
| ФАКУЛЬТЕТ | «Фундаментальные науки» |
| КАФЕДРА | «Вычислительная математика и математическая физика» |

**ОТЧЁТ**

***К ЛАБОРТАТОРНОЙ РАБОТЕ***

***НА ТЕМУ:***



|  |  |
| --- | --- |
| ***Комбинаторика*** | |
|  | |
|  | |
|  | |
| Дисциплина: | «Программные технологии разработки систем инженерного анализа» |
|  | |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Студент ФН11-11М |  | А.А. Пономарёв |
|  | (Подпись, дата) | (И.О.Фамилия) |
| Преподаватель |  | С.Б. Каримов |
|  | (Подпись, дата) | (И.О.Фамилия) |

*2020 г.*

# ­­­­­­Постановка задачи

Из заданного набора атомов хим. элементов синтезировать соединения, доставляющие минимум и максимум заданной функции. Ограничиться соединениями с линейным ядром: если исключить из соединения водород, то должны оставаться последовательно соединенные элементы. Например, C2H5OH имеет линейное "ядро" C-C-O. В качестве целевой функции взять температуру вспышки, рассчитанную по одной из методик, указанных в ссылке.

# Реализация

Программа была реализована с помощью языка программирования Python версии 3.8 в скрипте chemical.py.

Была взята функция температуры вспышки индивидуальных веществ в закрытом тигле. Температура рассчитывается по следующей формуле:

Diagram

Description automatically generated with low confidence

где – температура кипения жидкости при 101 кПа, ; – число структурных групп -го вида в молекуле; – эмпирические коэффициенты.

Для [органических соединений](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9E%D1%80%D0%B3%D0%B0%D0%BD%D0%B8%D1%87%D0%B5%D1%81%D0%BA%D0%B8%D0%B5_%D0%B2%D0%B5%D1%89%D0%B5%D1%81%D1%82%D0%B2%D0%B0" \o "Органические вещества), молекулы которых состоят из [атомов](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D1%82%D0%BE%D0%BC" \o "Атом) [С](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A3%D0%B3%D0%BB%D0%B5%D1%80%D0%BE%D0%B4" \o "Углерод), [Н](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%92%D0%BE%D0%B4%D0%BE%D1%80%D0%BE%D0%B4" \o "Водород), [О](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9A%D0%B8%D1%81%D0%BB%D0%BE%D1%80%D0%BE%D0%B4" \o "Кислород) и [N](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%B7%D0%BE%D1%82" \o "Азот), а также для галоидорганических и [элементоорганических соединений](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%AD%D0%BB%D0%B5%D0%BC%D0%B5%D0%BD%D1%82%D0%BE%D0%BE%D1%80%D0%B3%D0%B0%D0%BD%D0%B8%D1%87%D0%B5%D1%81%D0%BA%D0%B8%D0%B5_%D1%81%D0%BE%D0%B5%D0%B4%D0%B8%D0%BD%D0%B5%D0%BD%D0%B8%D1%8F" \o "Элементоорганические соединения), содержащих атомы [S](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D0%B5%D1%80%D0%B0" \o "Сера), [Si](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9A%D1%80%D0%B5%D0%BC%D0%BD%D0%B8%D0%B9" \o "Кремний), [P](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A4%D0%BE%D1%81%D1%84%D0%BE%D1%80" \o "Фосфор) и [Cl](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A5%D0%BB%D0%BE%D1%80" \o "Хлор), температура вспышки может быть рассчитана по формуле:

Diagram

Description automatically generated with low confidence

где – константы; – стандартная теплота сгорания вещества, кДж/моль.

# Результаты

Была реализована программа, синтезирующая из заданного набора атомов химических элементов, доставляющие максимум и минимум заданной функции. В качестве целевой функции была взята функция температуры вспышки индивидуальных веществ в закрытом тигле.