

Присвячується 110-ій річниці НТУУ «КПІ»

Міністерство освіти і науки України

*Національний технічний університет України «КПІ»
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»*

Черкаський державний технологічний університет

*Черкаське регіональне відділення
Української технологічної академії*

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ ТА ТЕХНОЛОГІЯХ

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

**Першої науково-практичної конференції
з міжнародною участю**

Черкаси, 12-16 травня 2008 року

Наукове видання

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ ТА ТЕХНОЛОГІЯХ

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Першої науково-практичної конференції
з міжнародною участю

Черкаси, 12-16 травня 2008 року

Під загальною редакцією
проф. Статюхи Г.О. і проф. Унрода В.І.

Матеріали конференції видано в авторській редакції

Укладач:	Безносик Ю.О.
Комп'ютерна верстка:	Джигирей І.М.
Обкладинка:	Алексенко Н.М.
Відповідальна за випуск	Солодовнік Т.В.

Підп. до друку 10.04.2008 р. Формат 60x84 1/8.
Папір офсетний. Гарнітура Times New Roman. Друк оперативний.
Умов.-друк. арк. 16,51. Облік.-вид. арк. 21,1. Наклад 200 прим.

Надруковано в типографії Черкаського ЦНТЕІ
18000, Україна, м. Черкаси, бул. Шевченка, 205.
Тел.: (0472) 45-28-13

КОМПЛЕКС РАСЧЕТНЫХ ДОКУМЕНТОВ ПО ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ НА MATHCAD CALCULATION SERVER

Коробов В.И., Очков В.Ф.*, Хрень Е.П.

Днепропетровский национальный университет, korvik58@mail.ru

*Московский энергетический институт (ТУ) OchkovVF@mpei.ru

Технология сетевых расчетов на Mathcad Calculation Server (MCS), впервые разработанная в Московском энергетическом институте [1], доказала свою эффективность за более чем трехлетний период эксплуатации. Кроме того, что MCS является мощной вычислительной средой, он еще и в значительной степени решает проблему использования лицензионных программ: для проведения вычислений пользователю нет необходимости устанавливать на свой компьютер дорогостоящий программный продукт (например, систему fathcad 11-14), достаточно лишь иметь доступ в Интернет. По адресу www.vpu.ru/mas можно осуществлять различные инженерные расчеты в режиме удаленного доступа.

На сегодняшний день коллекция документов по химической кинетике на MCS (<http://tw.t.mpei.ac.ru/ГТНВ/1/ChimKin.html>) включает более 40 сетевых версий расчетных документов, охватывающих все основные типы кинетических расчетов. Хотя основная часть документов имеет выраженную образовательную направленность, иллюстрируя основные закономерности кинетики простых и сложных реакций, они вполне могут быть применимы и для полноценных расчетов, включая прогнозирование эволюции химической системы во времени, а также определение основных кинетических параметров реакций на основании экспериментальной информации. Основные подходы к решению прямой и обратной задач химической кинетики в среде Mathcad 11.2 изложены нами в [2].

Отличительной особенностью сетевых версий расчетных документов является также многоязычность: по желанию пользователя можно выбрать один из языков комментариев (английский, русский, украинский).

На базе MCS разработан универсальный кинетический симулятор (Mathcad 14), позволяющий решать прямую кинетическую задачу для произвольной кинетической схемы, заданной пользователем в текстовом окне. При работе симулятора автоматически формируются стехиометрическая матрица, вектор скоростей элементарных стадий и вектор членов системы дифференциальных уравнений, описывающий изменение концентрации всех участников реакции во времени. Далее по задаваемым пользователем значениям констант скоростей элементарных реакций и начальных концентраций реагентов строятся их кинетические кривые. При этом имеется возможность выбора из предлагаемого списка конкретной встроенной функции для численного интегрирования задачи (Adams, AdamsBDF, BDF, Radau, rkfixed, Rkadapt). Предусмотрены средства контроля расчетов при неправильных действиях пользователя.

Разработанные документы используются в учебном процессе кафедр физической химии ДНУ и Технологии воды и топлива МЭИ.

Авторы выражают благодарность Стюарту Браффу (Великобритания) за любезно предоставленные некоторые подпрограммы-утилиты.

1) Mathcad Calculation/Application Server: опыт трехлетней эксплуатации в России. Труды межвузовской конф. "Практика применения научного программного обеспечения в образовании и исследованиях". – СПб., 2007. – С. 9-18.

2) Коробов В.И., Очков В.Ф. Решение задач химической кинетики в средах Mathcad и Maple. Тез. 13-й межд. конф. "Математика, компьютер, образование". г. Пущино, 2007. – С. 122.