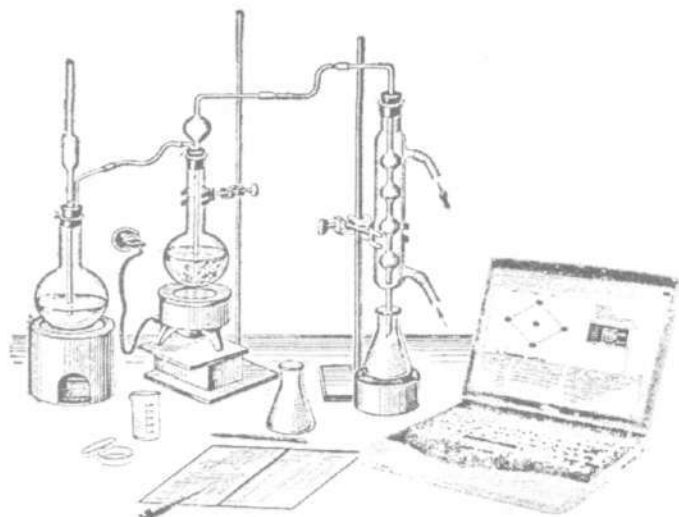


*Міністерство освіти і науки України
Донецький національний університет*



***КОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ НАВЧАЛЬНОГО
І НАУКОВОГО ПРИЗНАЧЕННЯ З ХІМІЇ***

*VIII Українська науково-методична
конференція*

6-8 жовтня 2008 року

Тези доповідей

Донецьк ДонНУ 2008

Комп'ютерні технології навчального і наукового призначення з хімії:
Тези доповідей VIII Української науково-методичної конференції
6-8 жовтня 2008 р. – Донецьк: ДонНУ, 2008.- 49 с.

Відповідальні
за випуск

Є.І.Гетьман, Т.О.Грищенко

Матеріали конференції друкуються мовою оригіналу.

Днепропетровский национальный университет им. О.Гончара
49050, Днепропетровск, пр. Гагарина, 72

Тел. (0562) 46-42-78. e-mail: korvik58@mail.ru

*Московский энергетический институт (Технический университет)

111250, Россия, Москва, Красноказарменная, 14

Тел./факс: (495) 362-71-71, e-mail: OchkovVF@mpei.ru

*Коробов В.И., *Нарышкин Д.Г., *Очков В.Ф.*

Химические расчеты на Mathcad Calculation Server

В применении пакета Mathcad для решения различных задач наметилась тенденция переноса расчетов с отдельного компьютера на удаленный сервер. Расчеты в режиме удаленного доступа на Mathcad Calculation Server (MCS) – один из путей решения проблемы использования нелицензионных программных продуктов.

На сегодняшний день контент MCS включает достаточный перечень основных расчетных документов, охватывающих основные типы физико-химических расчетов.

Термодинамические расчеты [1]:

расчеты с использованием справочных термодинамических величин (теплотность, энтальпия, энтропия и т.п.);

тепловые эффекты физико-химических процессов;

критерии направленности процессов;

химическое равновесие.

Кинетические расчеты [2]:

прямая кинетическая задача (аналитическое и численное решения для многих типов простых и сложных реакций); универсальный кинетический симулятор;

обратная кинетическая задача (различные методы реализации – от линеаризации кинетических данных до универсальных подходов);

оптимизационные задачи с использованием кинетических моделей;

иллюстрация классических кинетических моделей.

Большинство расчетных документов позволяют выбор языка для текстовых комментариев (русский, украинский, английский).

Рассмотрены особенности подготовки сетевых версий расчетных документов для последующего размещения на Mathcad Calculation Server.

Литература.

1. Нарышкин Д.Г., Очков В.Ф. Создание интерактивной сетевой версии справочника физико-химических величин. Сборник научных тезисов 15-й конференции "Математика, компьютер, образование". Дубна, 28 января - 02 февраля 2008 г. С. 380.
2. Коробов В.И., Очков В.Ф. Решение задач химической кинетики в средах Mathcad и Maple. Тезисы 14-й международной конференции "Математика, компьютер, образование". г. Пушкино, 22-27 января 2007. С. 122.