

ПРЕДИСЛОВИЕ

Химическая кинетика – один из наиболее математизированных разделов физической химии, и освоение ее основ, а также успешное применение полученных знаний на практике требует умения математической формализации конкретных кинетических задач и проведения зачастую сложных расчетов. При этом значительную часть таких расчетов весьма затруднительно, а подчас и невозможно реализовать без применения компьютера. Несмотря на большое число литературы по химической кинетике, в ней практически не излагаются вопросы конкретной практической реализации компьютерных кинетических расчетов. По этой причине авторы посчитали целесообразным изложить основные положения формальной кинетики химических реакций, а также основные подходы к решению двух основных кинетических задач – прямой и обратной – «на языке» современных математических пакетов Maple и Mathcad.

В связи с этим уместно упомянуть об истории использования компьютеров для научных и инженерно-технических расчетов. Здесь условно можно выделить 3 этапа:

- работа с машинными кодами;
- программирование на языках высокого уровня;
- использование математических пакетов типа Mathcad, Maple, Matlab, Mathematica, MuPAD, Derive, Statistica и др.

Четкие границы между перечисленными этапами (*информационными технологиями*) отсутствуют. Работая, например, в среде Mathcad, можно при необходимости вставить в расчет таблицу Excel¹ или собственные функции, написанные на языке C, в код которых вкраплены фрагменты ассемблера. Машинные коды, кстати, остались в программируемых калькуляторах, которые по-прежнему широко используются в научно-технических расчетах. Здесь скорее следует говорить не об изолированных этапах развития средств решения задач, а о расширении спектра инструментальных средств, о некоей тенденции, которая, в частности, приводит к резкому сокращению времени создания и реализации на компьютере расчетных методик и математических моделей, к исключению программиста как дополнительного звена между исследователем и компьютером, к повышению открытости самих расчетов, когда можно видеть не только конечный результат, но и все формулы, а также промежуточные данные.

¹ В список пакетов не попали электронные таблицы Excel, которые по-прежнему остаются самым популярным средством ведения расчетов на компьютере. Пакет Excel (как, впрочем, и пакет Matlab) занимает промежуточную позицию между языками программирования и математическими программами.

Именно открытость, наглядность расчетов, проводимых в среде Mathcad, делает его не только привлекательным вычислительным, но и эффективным *образовательным* инструментом, позволяющим эффективно применять его в учебном процессе как средство визуализации основных понятий химической кинетики. С другой стороны, пакеты Mathcad и Maple вслед за электронными таблицами создавались как программные средства, *альтернативные* традиционным языкам программирования. Иногда химическая задача не может быть решена студентом и даже специалистом из-за того, что на каком-то этапе решения она как бы переходит из плоскости химии в плоскость информатики, требуя от решающего глубоких знаний языков программирования. Но химик, как правило, не имеет (и не обязан иметь) таких знаний. Пакеты же Mathcad и Maple позволяют решать широкий круг научных, инженерно-технических и учебных задач без обращения к традиционному программированию.

У читателя, ознакомившегося с материалом книги, может сложиться мнение, что авторы сделали явный «перекос» в изложении, отдавая главное предпочтение пакету Mathcad и его «серверному развитию» в лице Mathcad Application/Calculation Server. Дело в том, что Mathcad изначально создавался как инструмент для проведения *численных* расчетов. Численные расчеты в книге, действительно, занимают центральное место. Вместе с тем химическая кинетика требует и *аналитических*, символьных расчетов. В том случае, когда символьных средств Mathcad становится недостаточно для решения той или иной задачи, мы решили прибегнуть к услугам Maple – признанному лидеру среди систем компьютерной математики, предназначенных для проведения аналитических вычислений.

У Mathcad и Maple есть ряд свойств, позволяющих им не только быть популярными среди «непрограммистов», но и завоевывать новых поклонников даже среди асов программирования. Дело в том, что работа с пакетами в несколько раз (на порядок) ускоряет процесс постановки и решения задачи. Нечто подобное наблюдалось в свое время при переходе от работы в машинных кодах к работе с языками программирования высокого уровня (Fortran, Pascal, Basic и т. д.).

Но даже если работающий на компьютере достаточно хорошо знаком с языками программирования, часто оказывается полезным использовать Mathcad на стадии становления и отладки математической модели. Один из авторов данной книги руководит коллективом программистов и технологов, который создал и довольно успешно продвигает на рынке пакет программ WaterSteamPro™ (www.wsp.ru), предназначенный для расчета теплофизических свойств теплоносителей для электростанций. Окончательный вариант пакета был написан и откомпилирован на языке Visual C++, но без предварительного анализа формул и алгоритмов в среде Mathcad с его удобными средствами визуализации чисел и формул этот проект вряд ли был реализован.

Следует отметить также, что в среде Mathcad в отличие от электронных таблиц Excel создаются расчеты, открытые для изучения и дальнейшей модернизации.

«Нет роз без шипов». Главный недостаток многих математических пакетов состоял в том, что они, как правило, не могли генерировать так называемые исполняемые файлы (exe-файлы), которые можно запускать без программы-прародительницы. Это, в частности, существенно мешало такому прогрессивному явлению, как разделение сидящих за компьютером на *пользователей* и *разработчиков*. Специалисты, работающие с математическими пакетами – с тем же Mathcad, как правило, вели «натуральное хозяйство»: разрабатывали расчетные методики сугубо для личного употребления либо для узкого круга коллег, умеющих работать с Mathcad. Передать свои наработки на коммерческой основе можно было только тому, у кого на компьютере установлен Mathcad. А этот человек, возможно, не будет покупать готовый файл, а постарается воссоздать нужный расчет сам. Речь идет, конечно, о небольших расчетных программах, где продолжительность их создания и отладки сопоставима с продолжительностью поиска их готового варианта, установки на компьютер и освоения новой программы. Но и объемные расчеты с трудом пробивают себе путь на рынке, так как собственный расчет всегда можно расширить и модернизировать, чего не скажешь о чужих программах. Здесь можно провести аналогию с другой, уже «внутриматкадovской» проблемой. Иногда бывает проще самому создать пользовательскую функцию, чем искать ее готовый вариант в дебрях встроенных функций Mathcad.

Передать (продать) файл тому, кто не знаком с пакетом Mathcad и не имеет его на компьютере, можно было только с большой нагрузкой – с условием установки на компьютере самого пакета Mathcad нужной версии и изучения хотя бы азов этой программы. Часто это влекло за собой необходимость обновления не только операционной системы, но и аппаратного обеспечения или даже покупки нового компьютера. Да и учиться обращаться с Mathcad тоже необходимо.

Фирма Mathsoft Engineering & Education, Inc., которая в 2006 г. была приобретена фирмой РТС – новым владельцем пакета Mathcad, ранее предпринимала ряд действий для исправления этого положения. Во-первых, была попытка запуска с очередным (восьмым, если быть точным) релизом пакета Mathcad – его бесплатной и укороченной версии (Mathcad Explorer), которая позволяла открывать Mathcad-файлы и считать по ним, но не редактировать и не сохранять документы на дисках. Саму же программу Mathcad Explorer можно было свободно скачивать из Сети. Во-вторых, интенсивно развивались средства публикации Mathcad-документов в локальных сетях и в Интернете для изучения, но не для счета по ним. Один из основных потребителей математических программ – это

сфера образования, где важен не сам результат расчета, а *путь* к результату, изучение расчетных методик, заложенных в расчет. На это была нацелена, в частности, версия Mathcad 2001i, где буква i означала «интерактивный» (interactive).

Но все эти решения не имели далекой перспективы. Довольно объемную программу Mathcad Explorer, как уже было отмечено, нужно было скачивать из Сети и устанавливать на свой компьютер. В этом случае для серьезных задач лучше поставить сам пакет Mathcad, который также в последнее время стало возможным скачивать из Сети, предварительно оплатив данную покупку, а не укороченную версию пакета. С другой стороны, Mathcad-документы, вернее их html- или MathML-копии (слепки), открытые в Сети, желательно не только разглядывать, но и преобразовывать – изменять исходные данные и видеть (распечатывать, сохранять на диске) новый ответ. Решение этой проблемы, но уже не частичное, а почти полное, опять оказалось возможным с помощью Интернет.

В 2003 г. был запущен в эксплуатацию так называемый *Mathcad Application Server (MAS)*, в 2006 г. он был переименован в *Mathcad Calculation Server – MA/CS* – сервер, позволяющий запускать на нем Mathcad-документы и обращаться к ним *дистанционно* через Интернет.

Технология MA/CS позволяет решить следующие проблемы.

- Нет необходимости ставить на компьютер пользователя саму программу Mathcad нужной версии или его укороченную версию Mathcad Explorer (см. выше), где-то искать, проверять на отсутствие вирусов и запускать прикладные mcd-файлы. Достаточно подключить компьютер к Интернету и обратиться к MA/CS через браузер Internet Explorer (версия 5.5 и выше) или через браузеры, которыми оборудованы карманные компьютеры или сотовые телефоны-коммуникаторы. При этом сохраняется полная иллюзия, что на компьютере открыт Mathcad-документ, в котором можно изменить исходные данные и считать (распечатать, сохранить на диске) ответ. Сама же расчетная методика (набор формул в традиционной математической нотации, а не в виде компьютерных программ – особенность, за которую так любят Mathcad), а также промежуточные данные могут быть либо открыты, либо закрыты полностью или частично.
- Новые расчетные методики становятся моментально доступны всем членам интернет-сообщества или работникам отдельной корпорации, если речь идет о локальных сетях. Достаточно только сообщить будущим пользователям соответствующие интернет-адреса. Кроме того, сведения о данных расчетах будут появляться в списках, выдаваемых различными поисковыми системами интернет (yandex – см., например, рис. 1.64, google и др.). Чтобы эти расчеты стали *товаром*, можно администрировать доступ к сайту, сделать его платным (уме-

ренно платным, частично платным), окружить ссылки на них баннерами и т. д.

- Любые ошибки, опечатки, недоработки и необоснованные допущения в расчете, замеченные как самим автором (разработчиком), так и пользователями, могут быть быстро исправлены. Несложно также модернизировать и расширять расчеты.
- Технология MA/CS не исключает традиционной возможности скачивания с сервера самих Mathcad-документов для их расширения и модернизации. Для этого достаточно в расчете сделать соответствующие ссылки. С mcd-файлами, размещенными для скачивания из Сети, можно поступить следующим образом. Можно передавать их только для счета на рабочей станции с установленным пакетом Mathcad, закрыв с помощью пароля сами расчеты. А можно отдавать их безвозмездно или на коммерческой основе для работы без ограничений.
- Технология MA/CS позволяет экономить денежные средства на приобретение математического обеспечения для компьютеров корпорации или университета. Нет необходимости ставить всем сотрудникам программу Mathcad для ведения рутинных расчетов, оборудовать соответствующим образом компьютерные классы. Достаточно поставить ее только тем, кто создает методики расчетов. Остальные могут вести расчеты через корпоративный (университетский или общедоступный) MA/CS.

Технология MA/CS помогает оптимально решить проблему *лицензирования* работы с программой: пользователю нет необходимости покупать дорогостоящую программу Mathcad или, нарушая законодательство, ставить на компьютер ее нелегальную копию – достаточно только обратиться к MA/CS. Покупать дорогостоящие программы должен будет только разработчик – создатель расчетных методик, размещаемых на MA/CS.

Именно на основе технологии MA/CS авторами был реализован образовательный проект по химической кинетике:

<http://twf.mpei.ru/ТТНВ/1/ChemKin.html>.

По указанной ссылке можно получить доступ к коллекции документов Mathcad и проводить основные типы кинетических расчетов в режиме удаленного доступа. При этом пользователю совершенно необязательно иметь установленный Mathcad на своем компьютере.