

Возможности образовательного ресурса технологии MathCAD Application значительно расширились после открытия в Московском энергетическом институте (ТУ) MathCAD Application/Calculation Server (MAS/MCS) www.vpu.ru/mas.

Сервер позволяет запускать на нем MathCAD документы и обращаться к ним через Интернет.

Возможности расчетов в режиме удаленного доступа, введение пользователем формул и цифровых значений в текстовые поля [1] (режим Web Control) на MAS/MCS позволили создать и внедрить в учебный процесс компьютерные учебные курсы, охватывающие такие наиболее математизированные разделы учебной дисциплины «Физическая химия», как «химическая термодинамика» и «формальная кинетика химических реакций».

При построении компьютерных учебных курсов использовалось информационное моделирование как метод познания, который предполагает создание информационной среды, включающей в себя:

- цели изучения [2];
- учебную базу данных

<http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/1/НВThermValues.html>,

которая позволяет в режиме реального времени исследовать температурные зависимости изменения важнейших термодинамических функций и констант равновесия реакций образования веществ. Графические иллюстрации дают наглядное представление о характере их изменения. Технологии MathCAD Application (MA) создавать новое поколение справочников;

- тематическое объединение основных задач и модель процедуры их решения <http://twmmas.mpei.ac.ru/mas/Worksheets/Chem/Nar/tests.html>;
- обзор основных законов и закономерностей [2]

<http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/1/Chem/HTM1/CHIMDYM1.htm>,

<http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/1/Chem/HTM1/CHIMDYM2.htm>

<http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/1/Chem/HTM1/CHIMDYM3.htm>, с помощью которых эти задачи могут быть

решены,

- необходимый математический и расчетный аппарат (www.vpu.ru/mas), [1] (в частности, матричная форма закона Гесса [2] для расчета изменения функций состояния физико-химических процессов, расчета равновесий в сложных и реальных системах) для их решения;
- возможность планирования обучения на основе решения задачи как некоторой редакции “образца” по определенному сценарию

http://twmmas.mpei.ac.ru/mas/Worksheets/Chem/Nar/2_3_1/Task_2_3_1.mcd

http://twmmas.mpei.ac.ru/mas/Worksheets/Chem/Nar/2_3_2/Test_2_3_2.mcd;

- получение новых знаний за счет обобщений, полученных после решения комплекса определенных задач и при выполнении расчетных лабораторных работ «Исследование гетерогенного равновесия. Некалориметрический метод определения теплового эффекта реакции» <http://twm.mpei.ac.ru/MAS/Worksheets/Chem/ReseachGeterEquel/mcd>.

и расчете коэффициентов изотермы адсорбции Лангмюра по экспериментальным данным <http://twm.mpei.ac.ru/MCS/Worksheets/Chem/adsorption.xmcd>.

Интерактивная сетевая версия термодинамической базы позволяет в режиме реального времени исследовать температурные зависимости важнейших термодинамических функций веществ, влияние температуры на константы равновесия физико-химических процессов с участием этих веществ. Графические иллюстрации зависимостей дают наглядное представление о характере изменения термодинамических функций.

Такой же подход к созданию информационно-учебной среды был осуществлен при создании мультимедийного курса «Кинетика химических реакций», который содержит разделы:

- конспект лекций «Кинетика химических реакций»

http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/Chem_Kinetic/index.html,

- обучающую программу «Зависимость скорости реакции от концентрации и температуры»,

http://twm.mpei.ac.ru/ochkov/trenager/twt_fcr/,

- решебник «Расчетные задачи химической кинетики»

http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/Chem_Kinetic/index.html,

расчетные задачи химической кинетики

http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/Chem_Kinetic/tests.html,

http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/Chem_Kinetic/Naryshkin_1.mcd,

http://twm.mpei.ac.ru/ТТНВ/Chem_Kinetic/Naryshkin_2.mcd,

http://twf.mpei.ac.ru/ТТНВ/Chem_Kinetic/Naryshkin_3.mcd,

http://twf.mpei.ac.ru/ТТНВ/Chem_Kinetic/Naryshkin_4.mcd,

- расчетную лабораторную работу «Исследование кинетики каталитического разложения пероксида водорода»

<http://twf.mpei.ac.ru/MCS/Worksheets/Chem/Kinetic-H2O2-desruction.xmcd>.

Пакет кинетических расчетов позволяет:

- решить обратную задачу химической кинетики, т.е. определить по экспериментальным данным наиболее достоверные численные значения параметров кинетического уравнения исследуемой реакции;
- решить прямую задачу химической кинетики, т.е. определить по известному кинетическому уравнению скорости реакции в зависимости от концентрации реагирующих веществ, время достижения некоторой концентрации или степени превращения, концентрации реагирующих веществ или степени превращения в зависимости от времени проведения процесса

Ниже представлена структура интерактивного справочника физико-химических величин:

Chemical Engineer's Web Handbook

Проект кафедр Химии и электрохимической энергетики и Технологии воды и топлива Московского энергетического института.

Предназначен для студентов, изучающих курс «Химии» и «Физической химии», аспирантов и научных работников.

Позволяет рассчитать:

- температурные зависимости теплоемкости
- температурные зависимости изменение энтальпии
- температурные зависимости изменение энтропии
- температурные зависимости теплоты образования
- температурные зависимости энтропий образования
- температурные зависимости энергии Гиббса образования
- температурные зависимости констант равновесия образования веществ

Средние ионные коэффициенты активности сильных электролитов в водных растворах в зависимости от молярной концентрации при 298 К

молярная электрическая проводимость разбавленных водных растворов при 298К

Ионное произведение и pH воды в диапазоне 0-100°C вар 1 вар 2 вар 3

Растворимость соединений в воде >>>>

Температурная зависимость произведения растворимости и растворимость трудно растворимых соединений >>>>

Сайт по химической кинетике >>>>>>>>

Представлены термодинамические свойства (Thermodynamic property):

простых веществ (simple substance >>>>):

неорганических соединений (inorganic compounds):

углеводородов (hydrocarbons >>>>):

кислородсодержащих органических соединений (organic compounds with oxygen >>>>):

температурные зависимости констант равновесия важнейших газовых реакций >>>>:

Средние ионные коэффициенты активности сильных электролитов в водных растворах в зависимости от молярной концентрации при 298 К >>>>

Молярная электрическая проводимость разбавленных водных растворов при 298К >>>>

Ионное произведение и pH воды в диапазоне 0-100°C >>>> (Формуляция IAPWS >>>>)

Истинные атомные и молекулярные теплоемкости в интервале температур 10 – 298К >>>>

Температурная зависимость произведения растворимости и растворимость трудно растворимых соединений >>>>

Предельная молярная электрическая проводимость ионов в воде в зависимости от температуры и молярная электрическая проводимость ионов в воде в зависимости от концентрации >>>>

Расчет парциальных молярных величин >>>>

Конспект лекций по химической кинетике >>>>

Кинетические расчеты >>>>

Расчет концентрации и степени превращения в необратимых реакциях >>>>

Приложение:

Пересчет концентраций

Растворимость соединений в воде

Параметры раствора серной кислоты

Параметры раствора соляной кислоты

Параметры раствора азотной кислоты

Параметры раствора КОН

Параметры раствора NaOH

Параметры раствора аммиака
Параметры раствора ортофосфорной кислоты
Параметры раствора Na_3PO_4
Плотность и концентрация раствора NaCl
Удельная электропроводность чистой воды
Проблема единиц концентрации и ее решение в среде MathCAD
Создано в MathCAD Application/Calculation Server

Развиваемый подход к созданию информационно-учебной среды способствует развитию познавательной активности обучающегося, предоставляя ему возможность получения не только учебных, но и научных знаний, ставя перед студентом исследовательские задачи.

Литература

1. Очков В.Ф. *MathCAD 12* для студентов и инженеров. СПб.: БХВ-Петербург, 2005. <http://tw.t.mpei.ac.ru/ochkov/Mathcad12>
2. Нарышкин Д.Г. Расчетные задачи химической термодинамики. М.: Изд-во МЭИ, 2005.

Гейн А.Г., Некрасов В.П. О ПРОГРАММНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОСТРАНСТВА ЗНАНИЙ

nauka@uisi.ru

ГОУ ВПО «УрГУ им. Горького»

УрТИСИ ГОУ ВПО «СибГУТИ»

г. Екатеринбург

В [1] предложено рассматривать систему знаний, представленных в курсе «Дискретная математика», как пространство, снабженное подходящей метрикой, в основе которого лежат древовидные структуры. Там же отмечено, что пространство знаний может выделяться по дисциплине в целом, в рамках конкретной специальности, в рамках специальности с учетом специализации обучения и т. п. Это позволяет конструировать и объективно оценивать различные методические установки чтения курса.

Основу такого пространства составляют деревья знаний, тезаурус и методические установки по преподаванию курса. Удаленность того или иного элемента данного пространства от корневой вершины естественно определять уровнем детализации понятий и терминов, их описывающих.

Введем метрику в пространство знаний. Интерпретируя дерево знаний отдельного раздела курса в виде графа, разобьем его по уровням. Названию раздела сопоставляется нулевой уровень, смежным с ним понятиям — первый уровень и т. д. Такое разбиение дерева знаний назовем логическим. Оно соответствует традиционному подходу к чтению курса. При таком разбиении номер уровня отдельного понятия в дереве знаний равен числу ребер, соединяющих его с понятием нулевого уровня, т. е. длине пути до базового понятия данного раздела.

Рассмотрим, к примеру, фрагменты деревьев знаний Основы теории множеств и Основы алгебры логики:

Множество

- Теоретико-множественные операции
 - виды операций
 - объединение
 - пересечение
 - разность
 - симметрическая разность
 - дополнение
- Булева функция
 - Равносильности
 - доказательство равносильностей
 - таблицы истинности
 - эквивалентные преобразования

Поскольку при таком разбиении понятия «объединение, пересечение, разность, симметрическая разность, дополнение» дерева знаний Основы теории множеств и понятие «эквивалентные преобразования» дерева знаний Основы алгебры логики находятся на третьем уровне, то логическая длина между ними равна шести.

Однако между понятиями, расположенными в логическом дереве на значительном расстоянии, нередко наблюдается понятийная близость. Продолжая рассмотрение того же примера, сопоставим логической операции «отрицание» теоретико-множественную операцию «дополнение до универсума», логической операции «конъюнкция» — теоретико-множественную операцию «пересечение», логической операции «дизъюнкция» — теоретико-множественную операцию «объединение», логической константе «0» — пустое множество « \emptyset », а логической константе «1» — универсальное множество «U». Получим свойства теоретико-множественных операций. Таким образом, понятийная длина между этими понятиями равна единице.