

# СОЗДАНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ИЗМЕНЕНИЯ СВОЙСТВ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Осипов Р.А.<sup>1</sup>, Рукк Н.С.<sup>2</sup>, Скрябина А.Ю.<sup>2</sup>, Гирина А.О.<sup>2</sup>

Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М. В. Ломоносова (МИТХТ), <sup>1</sup>каф. высшей и прикладной математики, <sup>2</sup>каф. неорганической химии, Россия, 119571, г. Москва, пр-т Вернадского 86, (495)9368206. E-mail: r.a.osipov@gmail.com, roukkn@inbox.ru, aliona\_skr@mail.ru

Цель научно-исследовательской работы в любой области науки, в том числе и в химии, заключается в выявлении закономерностей в изменении свойств, как простых веществ, так и химических соединений в зависимости, например, от порядкового номера элемента. Последнее особенно важно для химии лантаноидов, обладающих подобными свойствами. Как правило, проводят однофакторный анализ [1], что в ряде случаев бывает недостаточно. Для одновременной визуализации изменения ряда параметров была разработана соответствующая математическая модель, реализованная

$T_{\text{кип}}, \text{ } ^\circ\text{C}$   $t_{\text{kip\_text}} :=$

Рис. 1. Элемент блока задания

Рука правая длины  $l(M^{3+0})$

$$\text{Ruka}_p := \begin{pmatrix} \text{Tulovine}\left(\frac{\pi \cdot \Psi_{r,p}}{2}\right)_{0,0} \\ \text{Tulovine}\left(\frac{\pi \cdot \Psi_{r,p}}{2}\right)_{0,0} + e_{M3,0} \cos(\psi_{r,p}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{Tulovine}\left(\frac{\pi \cdot \Psi_{r,p}}{2}\right)_{1,0} \\ \text{Tulovine}\left(\frac{\pi \cdot \Psi_{r,p}}{2}\right)_{1,0} - e_{M3,0} \sin(\psi_{r,p}) \end{pmatrix}$$

Рис. 2. Элемент блока обработки данных

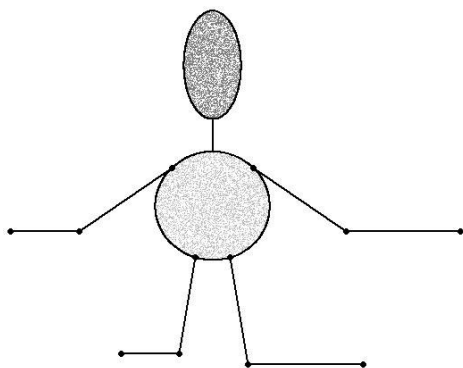


Рис. 3. Элемент блока изображение

при помощи пакета Mathcad 13 [2]. Ее программное представление состоит из трех основных блоков:

1. **задание переменных** — вводятся значения физических величин, отобранных для визуализации, а также параметры, отвечающие за внешний вид модели (рис. 1);

2. **обработка данных** — алгоритм, который ставит в соответствие величинам, введенным в 1. их функциональное представление, для последующего построения изображения в блоке 3. (рис. 2);

3. **изображение** — на основе данных, введенных в 1. при помощи блока 2. строится изображение, которое служит визуализацией рассматриваемых физических величин (рис. 3).

Построенная модель (рис. 3) позволяет отражать до 17 численных параметров и 13 цветовых. С помощью моделей такого типа существенно упрощается выявление, сопоставление и запоминание закономерностей в изменении свойств, что особенно важно с методической точки зрения.

## Литература

1. Г. А. Бандуркин, Б. Ф. Джуринский, И. В. Тананаев. Особенности кристаллохимии соединений редкоземельных элементов. – М.: Наука, 1984. 232 с.
2. Дьяконов В. П. Энциклопедия Mathcad 2001i и Mathcad 11. – М.: СОЛОН-Пресс, 2004. – 832 с.