

ОБРАБОТКА И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА С ПОМОЩЬЮ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ПАКЕТА *Wolfram Mathematica 8*

Осипов Р.А., Рукк Н.С., Замалютин В.В., Обухова А.Ю.

МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Россия, 119571, Москва, проспект Вернадского, д. 86,
тел. (495) 936-89-12, e-mail: r.a.osipov@gmail.com, roukkn@inbox.ru.

Основной задачей химиков-экспериментаторов является получение массива данных, описывающих свойства того или иного соединения при различных условиях. Не менее важной задачей является обработка результатов исследований, которая включает в себя как вычисление некоторых функций, так и последующую визуализацию полученных зависимостей. Эти задачи возникают как перед студентами, так и перед самостоятельными исследователями и в повседневной работе, и в процессе подготовки статей, монографий и т.п. к изданию.

Наибольшее распространение в последнее время получил пакет Origin [1], позволяющий на достаточно высоком уровне решать упомянутые выше задачи (формирование таблиц, построение 2D- и 3D графиков, отображение на графике погрешностей экспериментальных данных, вставка увеличенных фрагментов графика, экспортирование и импортирование данных и т.п.). Несмотря на все достоинства указанного пакета, в ряде случаев необходимо использовать дополнительные возможности, которые данный пакет не предоставляет. К ним относятся: проведение сложных расчетов, в том числе решение задач по линейной и нелинейной аппроксимации и оптимизации, введение динамических манипуляторов для иллюстрации поведения объекта при изменении того или иного аргумента, использование дополнительного справочного материала, и, что особенно важно, написание специальных кодов для решения конкретных вычислительных задач.

Математический пакет *Wolfram Mathematica 8* [2] позволяет создавать полностью интерактивные приложения для обработки данных пользователем, предоставляя для него интуитивно понятный русскоязычный интерфейс. Так как данные приложения написаны на языке *Mathematica*, это дает возможность пользователю изменять эти приложения под свои нужды, совершенствовать их, добавлять новую функциональность и создавать собственные приложения, а также визуализировать полученные зависимости именно так, как это необходимо пользователю, с возможностью импорта и экспорта данных в более чем 150 форматах файлов.

Литература

1. Исхакова О.П., Тарасевич Ю.Ю. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Учебно-методическое пособие.- Астрахань, изд-во ОГОУ ДПО «АИПКП», 2007.-68 с.
2. <http://www.wolfram.com/mathematica>