

**Олена СОВИН,**

аспірантка Львівського національного університету ім. І. Франка

**Олена ПАЦАЙ,**

канд. хім. наук, доцент кафедри аналітичної хімії Львівського національного університету ім. І. Франка

## **КОМП'ЮТЕРНА ГРАМОТНІСТЬ ЯК ПОВСЯКДЕННИЙ ІНСТРУМЕНТАРІЙ (НА ПРИКЛАДІ ПРОБЛЕМАТИКИ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ РІВНОВАЖНИХ СТАНІВ)**

Можливості використання комп'ютера та мережі Інтернет науковцем з природничих наук щодня зростають. Навчання, комунікація, пошук спеціалізованого програмного забезпечення, створення форм для розрахунків, розробка спеціалізованого програмного забезпечення (ПЗ) – це на сьогодні базові та перспективні напрями у сфері використання комп'ютерів у цій галузі. Ефективне створення та поширення спеціалізованого наукового ПЗ дає можливість застосовувати на практиці новітні розробки математико-теоретичного плану пересічним користувачам (у тому числі й студентам, із будь-яким рівнем підготовки). Нове спеціалізоване ПЗ – це ефективний продукт на інтернет-ринку.

*Ключові слова:* комп'ютер, спеціалізоване програмне забезпечення, аналітична хімія, Інтернет, створення ПЗ.

Хімія – це наука, яка протягом багатьох років була нерозривно пов'язана з приладобудуванням. І увияти собі сучасну хімію без таких повсякденних речей для кожного спеціаліста, як спектрометр, рН-метр, іонімір, полярограф нині просто неможливо.

Останнім часом в арсеналі корисних інструментаріїв, якими можуть щодня користуватися працівники природничих наук, з'явився ще один – комп'ютер. На сьогодні навряд чи можна знайти науковця, який не користується комп'ютером у межах мінімуму: пакет офісних програм та доступ до світової мережі (пошук інформації та комунікація). Таке використання значно спрощує комунікацію в науковому світі та обробку даних. Але чи насправді цей інструментарій використовується науковцем повною мірою таким чином? Чи за допомогою нього можна розв'язати набагато ширше коло питань, отримати принципово нові висновки з класичних експериментальних даних? Чи може стати комп'ютер надійним та щоденним помічником не тільки для досвідченого науковця, а й для студента?

Під час роботи у сфері рівноважних систем в аналітичній хімії було виявлено та частково використано такі можливості використання Інтернету в науковій сфері:

- обчислення характеристик на основі отриманих експериментальних даних;
- пошук інформації зі схожою проблематикою з метою знаходження програмного забезпечення (ПЗ), за допомогою якого вирішуються ці питання;
- навчання в Інтернеті основам створення професійного програмного забезпечення;
- створення ПЗ на основі розроблених раніше експериментальних даних;
- створення специфічного ПЗ як форми товару у сфері проєктів.

### **Короткі відомості про сферу діяльності**

Хімічно активна система перебуває у стані рівноваги, якщо швидкість прямої реакції рівна швидкості зворотної. Аналітична хімія найчастіше має справу з кислотно-основними рівновагами та рівновагами в реакціях комплексоутворення. Стан рівноваги характеризується за допомогою констант рівноваги. Також на основі таких досліджень є можливість отримати принципово нові відомості про різні форми реагентів, які беруть участь у взаємодії.

### **Розрахунок нових характеристик системи на основі отриманих або відомих із джерел даних**

#### *Суть підходу*

Використання відомих характеристик системи для отримання нових на основі різноманітніших рівнянь зв'язку. Для спрощення проведення розрахунків – використання комп'ютера та неспеціалізованого програмного забезпечення.

#### *Приклад*

Система, в якій спостерігається декілька кислотно-основних рівноваг. Кожна з цих рівноваг характеризується константою рівноваги (константою кислотності), яка може бути знайдена безпосередньо експериментатором або ж можна віднайти її значення в літературних джерелах. Саме набір констант кислотності слугує вихідним набором даних. За допомогою введення їх у розрахунки, можна знайти розподіл різних форм реагенту залежно від рН середовища. Якщо зіставити такий розподіл з оптимальним рН, за якого протікає реакція комплексоутворення з цим реагентом, можна отримати також корисну інформацію про механізм реакції. Здійснити це можна за допомогою Origin 6.1 (також це можна зробити і за допомогою Excel, але в ній розрахунки менш автоматизовані).

#### *Кроки операції:*

- одержання констант кислотності реагенту (теоретичне або експериментальне);

- створення зв'язків між полями Origin згідно з рівняннями зв'язку, що пов'язують константи з різними концентраціями кислотно-основних форм реагенту, з метою одержання розподілу форм реагенту;
- використання розробленої форми для реального реагенту;
- пошук оптимального рН для взаємодії;
- зівставлення оптимального значення комплексоутворення з одержаним розподілом форм реагентів;
- висновок про кислотно-основну форму реагенту, що вступає у взаємодію з металом.

### **Пошук інформації з метою пошуку ПЗ для вирішення поставленої проблеми**

Однак часто перед дослідником постає потреба вирішити проблему, здійснення обрахунків в якій не можливе або дуже ускладнене, за допомогою неспеціалізованого ПЗ. Існує два шляхи вирішення: пошук необхідного ПЗ або створення власного ПЗ (див. п. 4). Якщо вибрано перший шлях вирішення, то оптимальними, на наш погляд, є такі кроки операції:

- постановка проблематики;
- пошук публікацій з вирішенням схожої проблематики;
- визначення можливого ПЗ, яке може бути застосоване;
- пошук ПЗ, яке доступне безкоштовно або в пробному варіанті (тріалверсія), купівля платного ПЗ.

Факт використання ПЗ в інших роботах, які були опубліковані в авторитетних виданнях, дає більшу достовірність того, що ПЗ дає адекватну інформацію.

#### *Приклад*

При дослідженні системи, в якій спостерігається кілька кислотно-основних рівноваг при різних значеннях рН, було отримано масив експериментальних даних (масив спектрів поглинання у видимій ділянці при різних рН). Поставлена мета – розрахунок констант кислотності та спектрів окремих форм реагенту. Після аналізу доступних літературних даних було з'ясовано, що для прикладу [1] було використано для вирішення цієї проблематики програму DATAN 3.0, яка доступна в тріалверсії. При використанні цієї програми для експериментальних даних поставлена мета була досягнута. Супроводжувальна інформація до ПЗ надає коротку інформацію про принципи її роботи [2].

### **Навчання в Інтернеті основам створення професійного програмного забезпечення**

Якщо пошук доступного ПЗ не дав позитивних результатів (платне ПЗ, тріалверсія з обмеженими можливостями, незручний інтерфейс для щоденного використання програми), більш раціональним є створення власного ПЗ, яке б задовольняло вимоги, поставлені дослідником. Однак не завжди науковець володіє достатнім рівнем знань з основ створення ПЗ. Оптимальним для створення ПЗ у наукових цілях, яке

б поєднувало у собі простий і водночас багатфункціональний інтерфейс та відмінний математичний апарат, є ПЗ, створене за допомогою однієї з основних мов об'єктно-орієнтованого програмування (ООП) (C#, Delphi). Ще одна значна перевага ООП над іншими, що створена новачком програма за допомогою цих мов зовнішньо майже не відрізняється від програми, створеної професіоналом.

Отже, для вирішення питання вивчення мов ООП є декілька варіантів:

- вивчення базових знань за допомогою класичних методів (книги, електронні видання), а також за допомогою відеокурсів, онлайн курсів. Останні більш ефективні, оскільки дають змогу не тільки сприймати візуальну інформацію, а й слухову;

- програмування за допомогою мов ООП за принципом «питання-відповідь» через пошук в мережі Інтернет. При цьому створення бажаного ПЗ розбивається на кілька простих етапів (кількість яких залежить від рівня знань та навиків у програмуванні науковця, який створює ПЗ). Після цього здійснюється пошук інформації зі створення (програмний код з коментарями) кожної окремої частини.

Другий спосіб є менш трудомістким та надає можливість створювати ПЗ без значної витрати часу, який необхідно виділити для вивчення основ мови ООП. Однак не завжди користуючись другим способом можна в майбутньому правильно відкоригувати чи налаштувати ПЗ.

Хочемо особливо наголосити, що Інтернет пропонує такі можливості, які досі не були доступні. Адже він надає фактично величезні можливості для самоосвіти та саморозвитку. До того ж існує різноманітність у способах навчання, що дає можливість кожному бажуючому ентузіасту вивчити саме потрібне йому і у такий спосіб, як він цього прагне.

### **Створення ПЗ на основі нових або створених раніше модельних розробок**

Якщо науковець володіє достатнім рівнем знань з основ програмування, то він може перевести створену ним модель для системи в ПЗ, що полегшить користування цією моделлю для пересічного користувача. Також важливим і корисним є переведення в ПЗ раніше отриманих теоретичних розробок, що можуть з успіхом використовуватися для вирішення практичних проблем.

*Кроки:*

- розробити математичну модель для вирішення поставленого завдання віднайти в літературних даних адекватну модель, що дає змогу описувати експериментальні дані;

- створити логічну структуру майбутнього ПЗ;

- написання основної частини ПЗ;

- оптимізація інтерфейсу ПЗ;

- апробація ПЗ.

На сьогодні в українських реаліях є дуже важливим створення нового професійно-адекватного спеціалізованого ПЗ, яке використовується в класичних науках. Оскільки, за попередніми дослідженнями, сучасному українському науковцю доступно надзвичайно мало ПЗ відповідної якості, оскільки більшість із них платні. Також практично повністю відсутнє на ринку ПЗ з україномовним інтерфейсом. У складніших програмах навіть російськомовний інтерфейс є рідкістю.

#### *Приклад*

При вивченні складу комплексу, один з методів, що найчастіше використовується, – це метод ізомольярних серій. Він дає змогу встановити як порівнюються між собою компоненти вихідного розчину в утвореній сполуці. Однак за допомогою цього класичного методу ізомольярних серій не можна відрізнити за експериментальними даними комплекс зі складом 1:1 та 2:2, що може призвести до хибних трактувань деяких чутливих до механізму реакції дослідів. Для вирішення цієї проблеми вченими було розроблено математичний апарат, який дає можливість відрізнити ці два комплекси [3]. Однак цей апарат є доволі складним для його щоденного використання науковцем або пересічним дослідником (наприклад студентом). Тому на основі цього знайденого алгоритму було розроблено ПЗ, яке має зручний інтерфейс та автоматично здійснює ряд необхідних обрахунків. Таким чином, користувачу надаються результати, які дають змогу обґрунтовано відповісти, комплекс якого складу утворюється. Варто зауважити, що для виконання цих обчислень не потрібні інші додаткові експериментальні дані, поза даними, одержаними під час класичного методу ізомольярних серій.

Таке ПЗ може бути як предметом продажу (див. п. 5), так і бути розміщеним на сервері з представленням на веб-сторінці для вільного доступу. Частина розробленого нами ПЗ розміщена в електронній бібліотеці ПЗ ([www.vias.org/simulation/simu\\_chem.html](http://www.vias.org/simulation/simu_chem.html)). Планується створення авторської сторінки з розміщенням на ній інформації про ПЗ та з можливістю його закачати.

#### **Створення спеціального ПЗ як форми товару у сфері інтернет-маркетингу**

У сфері ринку праці дедалі частіше доходять висновку, що попит на працю більше прямує до проектного напрямку. Тобто роботодавець винаймає робітника тільки на виконання певної частини роботи – проекту. При цьому серед ряду професій така робота завдяки поширенню Інтернету стає можливою в онлайн режимі. Тобто роботодавець та виконавець географічно перебувають у різних частинах світу, а вся комунікація здійснюється за допомогою мережевих ресурсів (ICQ, Skype, e-mail). Розрахунок за виконану роботу може здійснюватись як на банківській основі, так і за допомогою електронних форм розрахунку (WebMoney, Яндекс-гроші, PayPal та ін.).

Існують спеціальні сервери, на яких роботодавець може представити свій проект, а працівник погодиться на виконання проекту

(www.freelance.ru, www.weblancer.net – російські сервери, міжнародні сервери – hwww.freelancer.com). Переважна більшість проектів, які представлені на таких серверах, – це проекти у сфері інтернет-реклами, складного програмування, створення веб-сайтів, дизайн веб-сайтів тощо.

Фактично здається, що представники точних наук не мають можливості ані стати роботодавцями, ані працівниками в такій формі. Однак створення спеціалізованого ПЗ, яке потребує глибоких знань як у сфері точних наук, так і базових знань в ООП, може з часом зайняти і свою нішу на цьому ринку. На даний час наші іноземні колеги займаються продажем створеного ними ПЗ на своїх приватних сайтах. Однак таке ПЗ здебільшого створюється без ґрунтовного вивчення ринку, а тому не завжди знаходить свого покупця. Якщо ПЗ створюється під проект, воно гарантовано буде оплачено та використано.

Наведений перелік можливостей ні в якому разі не претендує на вичерпність та повноту. Мета його створення – наголошення на важливості в сучасній науковій діяльності міжгалузевих вмій, до яких останнім часом з упевненістю можна віднести базові навички програмування та навички ведення бізнесу. Поза сумнівом дедалі важливішими також стають вміння вчитися (тобто вибирати, структурувати, шукати необхідну інформацію). Завдяки швидкому розвитку пошукових систем, одним з найкращих інструментів для цього стає Інтернет.

Що ж до створення ПЗ, то вміння перевести складний математичний апарат сучасних досліджень у форму ПЗ, що має зручний інтерфейс, відкриває можливості для його використання пересічними користувачами, у тому числі й студентами. Таким чином, вони отримують можливість проводити більш ґрунтовні дослідження, не використовуючи при цьому додаткових експериментальних даних, додаткового обладнання. Оскільки спеціальне ПЗ вимагає знання предмету роботи та ООП, то для його створення найкраще працювати науковцю, який має базові знання з програмування.

#### Список використаної літератури

1. *Ghasemi J.* A new algorithm for the determination of protolytic constants from spectrophotometric data in multiwavelength mode: Calculations of acidity constants of 4-(2-pyridylazo) resorcinol (PAR) in mixed nonaqueous-water solvents / *J. Ghasemi, Sh. Nayebi, M. Kubista, B. Sjogreen* // *Talanta*. – 2006. – Feb. 15 ; 68 (4) : 1201-14.

2. Product Release Note: DATAN 3.0 // *Journal of Fluorescence*. – Vol. 13. – № 6.– P. 543–544 ; *Booksh S. Karl, Comments on the DATa ANalysis (DATAN) algorithm and rank annihilation factor analysis for the analysis of correlated spectral data / Karl S. Booksh, Bruce R. Kowalski* // *Journal of Chemometrics*. – Vol. 8. – Issue 4. – P. 287–292.

3. *Sayago A.* Continuous variation data: 1:1 or 2:2 weak complexes? / *A. Sayago, M. Boccio, G. Asuero* // *International Journal of Pharmaceutics* 295. – 2005. – P. 29–34.