МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний авіаційний університет

ОБЧИСЛЮВАЛЬНА МАТЕМАТИКА В ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ

ЛАБОРАТОРНИЙ ПРАКТИКУМ
для здобувачів вищої освіти
ОС «Бакалавр» спеціальності 161
«Хімічні технології та інженерія»

Київ 2021

УДК 519.6:66 (076.5)
О 269

Укладачі: *В. Л. Чумак* — д-р хім. наук, проф.;
М. Р. Максимюк — канд. хім. наук, доц.;
Т. В. Кравчук — старш. викладач

Рецензент *Г. В. Сокольський* — д-р хім. наук, доц.
(Національний авіаційний університет)

Затверджено науково-методично-редакційною радою Національного авіаційного університету (протокол № 5/21 від 11.06.2021 р.).

О 269 **Обчислювальна математика в хімічній технології** : лабораторний практикум. / уклад. : В. Л. Чумак, М. Р. Максимюк Т. В. Кравчук. — К. : НАУ, 2021. — 52 с.

У лабораторному практикумі розглянуто методи виконання практичних робіт, розглянуто основні оператори і можливості мови програмування *Visual Basic* for Applications, наведено приклади використання програми *Microsoft Office Excel* для проведення різних розрахунків у галузі хімічної технології із застосуванням методів обчислювальної математики.

Для здобувачів вищої освіти ОС «Бакалавр» спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», а також аспірантів хімічних спеціальностей.

ВСТУП

Термін «обчислювальна математика» пройшов довгий шлях становлення та розвитку. На початковому етапі становлення даної предметної області під обчислювальною математикою розуміли будь-яке застосування математичних методів до вирішення різноманітних задач. Наразі обчислювальна математика включає в себе не тільки вивчення можливостей застосування чисельних методів, але і їх реалізацію на комп'ютерах за допомогою існуючих програмних комплексів або шляхом створення алгоритмів з використанням різних мов програмування.

Сучасний рівень розвитку хімічної технології вимагає високого рівня володіння цифровими технологіями, що включає в себе наявність у студентів знань, вмінь та навичок застосування методів обчислювальної математики, наявність навичок з програмування для вирішення складних задач у відповідній галузі.

Тому метою вивчення дисципліни «Обчислювальна математика в хімічній технології» є ознайомлення з основними чисельними методами, окреслення областей їх застосування, а також вивчення мови програмування *Visual Basic for Applications* для реалізації ефективних автоматизованих розрахунків за цими методами на базі комп'ютера.

Дисципліна «Обчислювальна математика в хімічній технології» складається з одного модуля, в якому розглядаються основи роботи і проведення розрахунків у програмі *Microsoft Office Excel,* основні оператори і конструкції мови програмування *Visual Basic for Applications*, які можуть бути використані для створення процедур і проведення розрахунків із застосуванням чисельних методів.

Усі лабораторні роботи з дисципліни виконуються в комп'ютерному класі, тому потрібно дотримуватися таких правил техніки безпеки:

1. Робочий стіл слід підтримувати в чистоті.
2. Необхідно знати місцезнаходження засобів протипожежного захисту і аптечки для надання невідкладної медичної допомоги.
3. Перед виконанням лабораторної роботи необхідно оглянути робоче місце, й у випадку виявлення несправностей (оголених дротів, від'єднаних кабелів, наявності запаху гару) одразу повідомити про це викладача.
4. Під час виникнення пожежі знеструмити приміщення і негайно скористатися засобами пожежогасіння (піском, ковдрою, вогнегасником).
5. У разі необхідності евакуації зберігати спокій, не створювати тисняву і в порядку черги звільнити приміщення.

ЗМІСТ

ВСТУП 3

Лабораторна робота 1
ЗАСТОСУВАННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ТАБЛИЦЬ *MICROSOFT OFFICE EXCEL* ДЛЯ ОБРОБКИ ДАНИХ У ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ 4

Лабораторна робота 2
ЗАСТОСУВАННЯ НАДБУДОВИ «ПІДБІР ПАРАМЕТРУ» ДЛЯ НАБЛИЖЕНОГО ЗНАХОДЖЕННЯ КОРЕНІВ РІВНЯННЯ 8

Лабораторна робота 3
ЗАСТОСУВАННЯ МАКРОСІВ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦІЇ ОПЕРАЦІЙ У ПРОГРАМІ *MICROSOFT EXCEL* 13

Лабораторна робота 4
РОЗРАХУНОК ЗНАЧЕННЯ ТЕПЛОЄМНОСТІ РЕЧОВИНИ ЗАСОБАМИ РЕДАКТОРА *VISUAL BASIC* ПРОГРАМИ *MICROSOFT EXCEL* 16

Лабораторна робота 5
ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ГАУСА ДЛЯ ЗНАХОДЖЕННЯ КОРЕНІВ СИСТЕМИ ЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ ЗАСОБАМИ РЕДАКТОРА *VISUAL BASIC* 21

Лабораторна робота 6
ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ІТЕРАЦІЙ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ СТУПЕНЯ ДИСОЦІАЦІЇ СЛАБКОГО ЕЛЕКТРОЛІТУ 25

Лабораторна робота 7
ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ НЬЮТОНА ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ РІВНОВАЖНИХ КОНЦЕНТРАЦІЙ ХІМІЧНИХ СПОЛУК 32

Лабораторна робота 8
ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ЕЙЛЕРА ДЛЯ ВИВЧЕННЯ КІНЕТИКИ ПРОЦЕСУ ДИФУЗІЇ 37

Лабораторна робота 9
ВИЗНАЧЕННЯ ЗМІНИ ЕНТАЛЬПІЇ ТА ЕНТРОПІЇ РЕЧОВИНИ В РЕЗУЛЬТАТІ ЇЇ НАГРІВАННЯ 43

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ 51

Навчальне видання

ОБЧИСЛЮВАЛЬНА МАТЕМАТИКА В ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ

ЛАБОРАТОРНИЙ ПРАКТИКУМ
для здобувачів вищої освіти ОС «Бакалавр»
спеціальності 161
«Хімічні технології та інженерія»

Укладачі :
ЧУМАК Віталій Лукич
МАКСИМЮК Марія Романівна
КРАВЧУК Тетяна Володимирівна

В авторській редакції

Технічний редактор *А. І. Лаврінович*
Комп'ютерна верстка *Л. Т. Колодіної*

Підп. до друку 17.09.2021. Формат 60x84/16. Папір офс.
Офс. друк. Ум. друк. арк. 3,02. Обл.-вид. арк. 3,25.
Тираж 50 пр. Замовлення № 164-1.

Видавець і виготівник
Національний авіаційний університет
03058. Київ-58, проспект Любомира Гузара, 1
Свідоцтво про внесення до Державного реєстру ДК № 977 від 05.07.2002