

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ АВІАЦІЙНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Факультет екологічної безпеки, інженерії та технологій**

КАФЕДРА ХІМІЇ І ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

РОЗШИРЕНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

**з дисципліни «Обчислювальна математика в хімічній технології»
за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія»**

Укладач: д.х.н., професор Чумак В.Л.
(науковий ступінь, вчене звання, П.І.Б. викладача)

Модуль №1
«Чисельні методи знаходження коренів рівнянь. Мова програмування VBA як засіб реалізації чисельних методів у хімічній технології»

ЛЕКЦІЯ № 1.1.

Тема лекції: Вступ. Поняття функції та способи представлення функції

План лекції

1. Значення обчислювальної математики в хімічній технології.
2. Загальна характеристика функції.
3. Способи представлення функції.

Зміст лекції

Обчислювання математика, її предмет. Застосування методів обчислювальної математики при вирішенні хімічних задач.

Основні поняття математики, які використовуються в обчислювальній математиці. Залежна змінна (функція). Незалежна змінна (аргумент). Способи представлення функції.

Література:

1. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.
2. Андруник В.А. Чисельні методи в комп'ютерних науках / А.В. Андруник, В.А. Висоцька, В.В. Пасічник, Л.Б. Чирун, Л.В. Чирун. – Львів: Новий світ – 2000, 2017. – 470 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.2.

Тема лекції: Апроксимація функцій у хімічній технології

План лекції

1. Інтерполяція функцій.
2. Види інтерполяції функцій.
3. Задача зворотної інтерполяції.

Зміст лекції

Наближені формули. Лінійна інтерполяція. Нелінійна інтерполяція. Інтерполяційний многочлен Ньютона. Застосування інтерполяції в хімічній технології.

Задача зворотної інтерполяції. Інтерполяційний многочлен Ерміта. Сходимість інтерполяції. Обробка даних у хімічній технології.

Література:

1. Чумак В.Л. Основи наукових досліджень / В.Л. Чумак, С.В. Іванов, М.Р. Максимюк. – К.: НАУ, 2012. – 360 с.
2. Обчислювальна математика в хімічній технології : лабораторний практикум. / уклад. : В. Л. Чумак, Т. В. Кравчук, М.Р. Максимюк. – К. : НАУ, 2021. – 56 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.3.

Тема лекції: Корені рівняння. Наближені методи знаходження коренів рівняння

План лекції

1. Нульові значення функції.
2. Методи знаходження коренів рівняння.

Зміст лекції

Знаходження нульових значень функції. Корінь рівняння.

Графічний метод знаходження коренів рівняння. Підбір параметру в електронній таблиці Excel. Метод сканування. Уточнення коренів методом половинного ділення.

Література:

1. Чумак В.Л. Основи наукових досліджень / В.Л. Чумак, С.В. Іванов, М.Р. Максимюк. – К.: НАУ, 2012. – 360 с.
2. Bernard Liengme. Liengme's Guide to Excel 2016 for Scientists and Engineers / Bernard Liengme, Keith Hekman. – London: Elsevier Academic Press, 2020. – 401 p.

ЛЕКЦІЯ № 1.4.

Тема лекції: Лінійні системи рівнянь. Метод Гауса

План лекції

1. Основні задачі лінійної алгебри.
2. Прямі та ітераційні методи вирішення лінійних систем рівнянь.
3. Метод виключення Гауса.

Зміст лекції

Задачі лінійної алгебри. Прямі методи вирішення лінійних систем. Ітераційні методи вирішення лінійних систем.

Метод виключення Гауса. Трикутна матриця. Прямий хід виключення. Зворотній хід виключення. Визначник і зворотна матриця. Метод прогонки як окремий випадок методу Гауса.

Література:

1. Прокопенко Ю.В. Обчислювальна математика / Ю.В. Прокопенко, Д.Д. Татарчук, В.А. Казміренко. – К.: Видавництво, 2013. – 224 с.
2. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.5.

Тема лекції: Основи програмування на VBA для вирішення задач хімічної технології

План лекції

1. Основи роботи з редактором Visual Basic.

2. Програмування на VBA як спосіб вирішення хімічних задач.
3. Основи мови програмування Visual Basic for Applications.

Зміст лекції

VBA додатки. Редактор Visual Basic. Цикл створення програми. Налаштування інтерфейсу. Об'єктно-орієнтоване програмування. Програмування на VBA як спосіб вирішення хімічних задач.

Основні мовні елементи Visual Basic for Applications. Коментарі. Змінні, константи, типи даних. Робота з рядками та датами. Створення масивів, динамічні масиви.

Література:

1. Обчислювальна математика в хімічній технології : лабораторний практикум. / уклад. : В. Л. Чумак, Т. В. Кравчук, М.Р. Максимюк. – К. : НАУ, 2021. – 56 с.
2. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.
3. Julitta Korol. Excel 2019. Programming by Example with VBA, XML and ASP. / Julitta Korol. – Dulles: Mercury Learning and Information, 2019. – 1073 p.
4. Нелюбов В.О., Куруца О.С. Основи інформатики. Microsoft Excel 2016: навчальний посібник. Ужгород: ДВНЗ «УжНУ», 2018. – 58 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.6.

Тема лекції: Макроси. Створення та робота з VBA процедурами

План лекції

1. Основи роботи з макросами.
2. Модулі в редакторі Visual Basic.
3. Робота з командою Debug.

Зміст лекції

Безпека при роботі з макросами. Планування макросів. Запис макросів. Запуск макросу. Редагування коду макросу. Контроль роботи програми.

Модуль і модуль класу в редакторі Visual Basic. Процедури Sub і Function. Структура процедури.

Структура If-Then. Оператори циклу For-Next, Do-While, Do-Until.

Техніка налаштування програмного коду. Виключення помилок.

Література:

1. Обчислювальна математика в хімічній технології : лабораторний практикум. / уклад. : В. Л. Чумак, Т. В. Кравчук, М.Р. Максимюк. – К. : НАУ, 2021. – 56 с.
2. Julitta Korol. Excel 2019. Programming by Example with VBA, XML and ASP. / Julitta Korol. – Dulles: Mercury Learning and Information, 2019. – 1073 p.
3. Нелюбов В.О., Куруца О.С. Основи інформатики. Microsoft Excel

2016: навчальний посібник. Ужгород: ДВНЗ «УжНУ», 2018. – 58 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.7.

Тема лекції: Метод простої ітерації

План лекції

1. Сутність методу ітерацій.
2. Похибка методу ітерацій.
3. Чутливість методу ітерацій.

Зміст лекції

Приведення рівняння до виду, зручного для ітерацій. Еквівалентне перетворення рівняння. Геометрична суть методу. Сходимость методу. Оцінка похибки методу ітерацій. Критерій закінчення пошуку коренів.

Обумовленість методу. Властивість самовиправлення. Чутливість методу простих ітерацій до похибки розрахунків.

Література:

1. Чумак В.Л. Основи наукових досліджень / В.Л. Чумак, С.В. Іванов, М.Р. Максимюк. – К.: НАУ, 2012. – 360 с..
2. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.8.

Тема лекції: Застосування методу ітерацій у хімічній технології

План лекції

1. Дисоціація електролітів та константа дисоціації.
2. Розрахунок ступеня дисоціації слабкої кислоти методом ітерацій.

Зміст лекції

Дисоціація слабких кислот. рН розчину. Ступінь дисоціації. Константа дисоціації. Розрахунок ступеня дисоціації слабкої кислоти методом ітерацій.

Особливості реалізації методу ітерацій у середовищі Visual Basic при розрахунку ступеня дисоціації.

Література:

1. Обчислювальна математика в хімічній технології : лабораторний практикум. / уклад. : В. Л. Чумак, Т. В. Кравчук, М.Р. Максимюк. – К. : НАУ, 2021. – 56 с.
2. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.
3. Bernard Liengme. Liengme's Guide to Excel 2016 for Scientists and Engineers / Bernard Liengme, Keith Hekman. – London: Elsevier Academic Press, 2020. – 401 p.

Модуль №2
«Використання методів обчислювальної математики для
вирішення задач хімічної технології»

ЛЕКЦІЯ № 2.1.

Тема лекції: Сумування рядів Фур'є. Застосування методу найменших квадратів у хімії

План лекції

1. Сумування рядів.
2. Метод найменших квадратів.
3. Визначення похибки методом найменших квадратів.

Зміст лекції

Найкраще приближення. Сумування рядів. Регуляризація сумування за числом членів. Регуляризація сумування за форм-фактором. Сходимість рядів Фур'є.

Метод найменших квадратів. Середньоквадратичне наближення. Лінійна апроксимація. Обробка експериментальних кривих.

Визначення похибки методом найменших квадратів. Середньоквадратична апроксимація. Поліноміальна апроксимація. Тригонометрична апроксимація періодичного сигналу. Згладжування експериментальних таблиць.

Література:

1. Чумак В.Л. Основи наукових досліджень / В.Л. Чумак, С.В. Іванов, М.Р. Максимюк. – К.: НАУ, 2012. – 360 с.
2. Прокопенко Ю.В. Обчислювальна математика / Ю.В. Прокопенко, Д.Д. Татарчук, В.А. Казміренко. – К.: Видавництво, 2013. – 224 с.
3. Андруник В.А. Чисельні методи в комп'ютерних науках / А.В. Андруник, В.А. Висоцька, В.В. Пасічник, Л.Б. Чирун, Л.В. Чирун. – Львів: Новий світ – 2000, 2017. – 470 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.2.

Тема лекції: Задача одновимірної мінімізації. Методи прямого пошуку.

План лекції

1. Задача одновимірної мінімізації.
2. Точки мінімумів.
3. Методи оптимального пасивного пошуку.

Зміст лекції

Цільова функція. Задача одновимірної мінімізації. Точка глобального мінімуму. Точка локального мінімуму. Точка строгого локального мінімуму. Відрізок локалізації. Унімодальні функції. Обумовленість задачі мінімізації.

Оптимальний пасивний пошук. Метод ділення відрізка навпіл. Метод Фібоначчі і золотого перерізу.

Література:

1. Чумак В.Л. Основи наукових досліджень / В.Л. Чумак, С.В. Іванов, М.Р. Максимюк. – К.: НАУ, 2012. – 360 с.

2. Прокопенко Ю.В. Обчислювальна математика / Ю.В. Прокопенко, Д.Д. Татарчук, В.А. Казміренко. – К.: Видавництво, 2013. – 224 с.

3. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.3.

Тема лекції: Похідна функції. Чисельне розв'язання рівнянь методом Ньютона.

План лекції

1. Поняття похідної функції.
2. Метод лінеаризації.
3. Основна теорема сходимості методу Ньютона.

Зміст лекції

Похідна функції. Фізичний зміст похідної. Геометричний зміст похідної. Метод дотичних. Метод лінеаризації. Послідовність лінійних рівнянь.

Ряд Тейлора. Основна теорема сходимості методу Ньютона. σ -околиця кореня рівняння. Критерій закінчення пошуку кореня. Зв'язок з методом простої ітерації.

Література:

1. Чумак В.Л. Основи наукових досліджень / В.Л. Чумак, С.В. Іванов, М.Р. Максимюк. – К.: НАУ, 2012. – 360 с.

2. Прокопенко Ю.В. Обчислювальна математика / Ю.В. Прокопенко, Д.Д. Татарчук, В.А. Казміренко. – К.: Видавництво, 2013. – 224 с.

3. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.4.

Тема лекції: Застосування методу Ньютона в хімічній технології.

План лекції

1. Вплив похибки розрахунків на точність методу Ньютона.
2. Послідовність ітераційного процесу в методі Ньютона.
3. Реалізація методу Ньютона у програмі Microsoft Office Excel.

Зміст лекції

Складність використання методу Ньютона. Розрахунок похідної. Локальна сходимість. Вплив похибки розрахунків. Модифікації методу Ньютона.

Послідовність процесу ітерацій з використанням методу Ньютона.

Застосування методу Ньютона для знаходження коренів систем двох нелінійних рівнянь. Рівноважна концентрація. Двох- і трьохосновна кислота. Реалізація методу Ньютона у програмі Microsoft Office Excel.

Література:

1. Обчислювальна математика в хімічній технології : лабораторний практикум. / уклад. : В. Л. Чумак, Т. В. Кравчук, М.Р. Максимюк. – К. : НАУ, 2021. – 56 с.
2. Андруник В.А. Чисельні методи в комп'ютерних науках / А.В. Андруник, В.А. Висоцька, В.В. Пасічник, Л.Б. Чирун, Л.В. Чирун. – Львів: Новий світ – 2000, 2017. – 470 с.
3. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.5.

Тема лекції: Чисельне диференціювання.

План лекції

1. Розрахунок першої похідної.
2. Розрахунок другої похідної.
3. Виведення формул чисельного диференціювання.

Зміст лекції

Найпростіші формули чисельного диференціювання. Розрахунок першої похідної. Похибка апроксимації. Права та ліва різниці похідні. Геометрична інтерпретація формул чисельного диференціювання. Центральна різниця похідна.

Розрахунок другої похідної. Друга різниця похідна. Порядок точності. Виведення формул чисельного диференціювання. Односторонні формули чисельного диференціювання. Таблиці зі сталим кроком.

Література:

1. Прокопенко Ю.В. Обчислювальна математика / Ю.В. Прокопенко, Д.Д. Татарчук, В.А. Казміренко. – К.: Видавництво, 2013. – 224 с.
2. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.6.

Тема лекції: Чисельні методи вирішення задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь.

План лекції

1. Задача Коші для диференціального рівняння першого порядку.
2. Розв'язання задачі Коші.

Зміст лекції

Диференціальні рівняння високого порядку. Задача Коші для диференціального рівняння першого порядку. Інтегральна крива. Поле напрямків. Початкове значення.

Розв'язання задачі Коші. Стійкість розв'язку на кінцевому відрізку. Формула кінцевих приростів Лагранжа. Модельне рівняння. Дискретна задача Коші. Явні та неявні методи.

Література:

1. Прокопенко Ю.В. Обчислювальна математика / Ю.В. Прокопенко, Д.Д. Татарчук, В.А. Казміренко. – К.: Видавництво, 2013. – 224 с.
2. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.7.

Тема лекції: Метод Ейлера та його застосування в хімічній технології.

План лекції

1. Сутність та характеристика методу Ейлера.
2. Оцінка похибки методу Ейлера.
3. Застосування методу Ейлера для опису кінетики процесу розчинення.

Зміст лекції

Геометрична інтерпретація методу Ейлера. Ламана Ейлера. Стійкість методу. Оцінка похибки методу. Перший порядок точності. Вплив похибки розрахунку. Модифікація методу Ейлера другого порядку точності.

Кінетика процесу розчинення. Дифузійна область. Константа швидкості процесу розчинення. Метод Ейлера для системи диференціальних рівнянь.

Література:

1. Обчислювальна математика в хімічній технології : лабораторний практикум. / уклад. : В. Л. Чумак, Т. В. Кравчук, М.Р. Максимюк. – К. : НАУ, 2021. – 56 с.
2. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології: лабораторний практикум / уклад.: В.Л. Чумак, Т.В. Нешта. – К.: НАУ, 2015. – 60 с.
3. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.
4. Julitta Korol. Excel 2019. Programming by Example with VBA, XML and ASP. / Julitta Korol. – Dulles: Mercury Learning and Information, 2019. – 1073 p.

ЛЕКЦІЯ № 2.8.

Тема лекції: Чисельне інтегрування.

План лекції

1. Формула Ньютона-Лейбніца для точного знаходження визначеного інтегралу.
2. Наближені методи обчислення визначеного інтегралу.

Зміст лекції

Найпростіші квадратурні формули. Визначений інтеграл. Формула Ньютона-Лейбніца. Точне значення інтегралу.

Наближене обчислення визначеного інтегралу. Метод лівих прямокутників. Метод правих прямокутників. Метод трапецій. Оцінка похибки. Квадратурні формули інтерполяційного типу.

Література:

1. Чумак В.Л. Основи наукових досліджень / В.Л. Чумак, С.В. Іванов, М.Р. Максимюк. – К.: НАУ, 2012. – 360 с.

2. Прокопенко Ю.В. Обчислювальна математика / Ю.В. Прокопенко, Д.Д. Татарчук, В.А. Казміренко. – К.: Видавництво, 2013. – 224 с.

3. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.9.

Тема лекції: Застосування методу Сімпсона в хімічній технології.

План лекції

1. Метод Сімпсона.
2. Оцінка похибки формули Сімпсона.
3. Визначення зміни ентальпії речовини при її нагріванні методом Сімпсона.

Зміст лекції

Метод Сімпсона. Інтерполяційний многочлен другого степеня. Елементарна квадратурна формула Сімпсона (формула парабол). Оцінка похибки формули Сімпсона. Випадок змінного кроку.

Визначення зміни ентальпії методом Сімпсона. Визначення зміни ентропії методом Сімпсона. ΔH_{max} та ΔS_{max} . Рівняння лінії тренду.

Література:

1. Прокопенко Ю.В. Обчислювальна математика / Ю.В. Прокопенко, Д.Д. Татарчук, В.А. Казміренко. – К.: Видавництво, 2013. – 224 с.

2. Брановицька С.В. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С.В. Брановицька, Р.Б. Медведєв, Ю.Я. Фіалков. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

3. Обчислювальна математика в хімічній технології : лабораторний практикум. / уклад. : В. Л. Чумак, Т. В. Кравчук, М.Р. Максимюк. – К. : НАУ, 2021. – 56 с.

4. Bernard Liengme. Liengme's Guide to Excel 2016 for Scientists and Engineers / Bernard Liengme, Keith Hekman. – London: Elsevier Academic Press, 2020. – 401 p.