

Методичні вказівки організації самостійної роботи з дисципліни «Комп'ютерні розрахунки в хімії та хімічних технологіях»

Дисципліна вдосконалює знання та вміння студентів використовувати комп'ютерну техніку для розв'язання різноманітних задач. В наш час вирішення великого кола завдань в хімії і хімічній технології неможливе без звернення до математики та методів, які надають саме математика та її прикладні розділи (чисельні методи, математичне моделювання, методи оптимізації тощо). Вміння обробляти результати спостережень, здатність оцінювати параметри статистичних рядів розподілу, що отримані в результаті експериментальних досліджень, є ключовим вмінням для бакалавра з хімічних технологій.

Мета дисципліни – поглибити знання і вміння студентів використовувати сучасні програмні продукти для вирішення завдань хімії та хімічних технологій, використовувати сучасні методи статистичної обробки експериментальних даних та чисельного моделювання хімічних і хіміко-технологічних процесів.

Теми лекційних занять.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Поняття сучасних комп'ютерних продуктів.	4
2.	Сучасні комп'ютерні продукти для вирішення завдань хімії та хімічної технології.	4
3.	Сучасні комп'ютерні продукти для вирішення завдання чисельного моделювання хімічних і хіміко-технологічних процесів.	4
4.	Основні етапи роботи в програмному середовищі Origin.	4
5.	Обробка експериментальних даних в програмному середовищі Origin.	4
6.	Аналіз експериментальних даних в програмному середовищі Origin.	4

Теми практичних занять.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Сучасний стан комп'ютерного програмного забезпечення для хімічних технологій.	2
2.	Найпростіші обчислення в системі сучасних програмних продуктів MathCad.	2
3.	Практика використання чисельних методів для вирішення завдань хімії та хімічної технології.	2
4.	Статична обробка експериментальних даних та встановлення числових характеристики випадкових величин (математичне сподівання, дисперсія, середнє	4

	квадратичне відхилення, довірчий інтервал) з використанням сучасних програмних продуктів MathCad.	
5.	Математичні моделі реакцій і хімічних процесів та їх вирішення сучасними продуктами. Обробка даних хімічного експерименту.	2
6.	Обробка та візуалізація експериментальних даних за допомогою Origin.	6
7	Пошук та проведення найпростіших математичних залежностей в Origin. Апроксимація графічних даних.	6

ПИТАННЯ ДО САМОСТІЙНОЇ ТА КОНТРОЛЬНОЇ РОБОТИ

1. Охарактеризувати сучасний стан комп'ютерного програмного забезпечення для хімічної технології та інженерії.

2. Що таке сучасні комп'ютерні продукти? Що дозволяє виконувати ця програма?

3. Основи роботи в середовищі програмного продукту MathCad. Наведіть приклади головних команд.

4. Що таке вбудовані функції для пошуку розв'язку рівнянь в програмному продукті MathCad? Навести приклади. Технології використання функції.

5. Описати можливості та призначення програмних продуктів MathCad.

6. Який існує алгоритм розрахунку статичної обробки експериментальних даних в середовищі програмного продукту MathCad?

7. За допомогою яких вбудованих функцій здійснюється розв'язання задачі точкової нелінійної апроксимації в середовищі програмного продукту MathCad? Технології використання функції.

8. Охарактеризувати загальне формулювання задач наближення функцій в середовищі MathCad.

9. Які існують вбудовані функції для пошуку розв'язку рівнянь? Їх призначення. Навести приклад в середовищі MathCad.

10. Поняття сучасних комп'ютерних продуктів. Призначення. Класифікація.

11. Охарактеризувати функції для розв'язання рівнянь у середовищі програмного продукту MathCad? Навести приклади та відмінності.

12. Суть теорії оптимізації. Типи задач оптимізації в середовищі MathCad.

13. Охарактеризувати скалярні, векторні, пошукові, аналітичні, обчислювальні, теоретико-імовірнісні методи оптимізації.

14. Застосування сучасних програмних продуктів для моделювання хімічних процесів.

15. Принцип комп'ютерного моделювання хімічних процесів в середовищі MathCad.

16. Математичні моделі реакцій і хімічних процесів та їх комп'ютерна реалізація.

17. Вибір і обґрунтування програмних продуктів статистичної обробки даних.

18. Застосування комп'ютерних продуктів для статичної обробки результатів аналізу, встановлення числових характеристики випадкових величин (математичне сподівання, дисперсія випадкових величин, середнє квадратичне відхилення, довірчий інтервал).
19. Алгоритм статистичної обробки результатів аналізу в середовищі MathCad..
20. Джерела похибок процесу аналізу. Закон поширення випадкових похибок.
21. Правильність результатів та способи її оцінювання. Види похибок.
22. Використання t-розподілу для перевірки промахів в середовищі MathCad.
23. Перевірка правильності результатів аналізу за Z-критеріями в середовищі MathCad.
24. Перевірка правильності результатів аналізу за t-критеріями в середовищі MathCad.
25. Сучасні методи комп'ютерної обробки графічних експериментальних даних.
26. Основні етапи роботи в програмному середовищі Origin.
27. Мета, переваги, властивості візуалізації даних в програмі Origin.
28. Візуалізація та графічне відображення даних за допомогою пакета Origin.
29. Основні властивості та основи аналізу графічних даних в середовищі Origin.
30. Апроксимація графічних даних в програмному пакеті Origin. Типи апроксимації.
31. Технології обробки та зображення даних експерименту в середовищі Origin.
32. Процедура лінійної апроксимації та її реалізація засобами пакетів програм Origin.
33. Процедура степеневі апроксимації та її реалізація засобами пакетів програм Origin.
34. Описати процедуру обробки графічних експериментальних даних в середовищі Origin.
35. Що таке лінійна апроксимація точок на графіку в середовищі Origin? Навести приклад.
36. Правила побудови графіків в Origin.
37. Що таке степенева апроксимація точок на графіку в середовищі Origin? Навести приклад.
38. Обробка даних та їх представлення в програмному середовищі Origin.
39. Графічне відображення даних з використанням м пакета Origin.
40. Основи обробки та аналізу експериментальних даних у програмному середовищі Origin.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Дубинін А. І. Використання пакета Mathcad у хімічній інженерії : навч. посіб. Львів : Львівська політехніка, 2010. 240с.
2. Литвин В. В. Методи та засоби інженерії даних та знань : навч. посіб. Львів : Магнолія 2006, 2012. 241с.
3. Николайчук Я. М., Возна Н. Я., Пітух І. Р. Проектування спеціалізованих комп'ютерних систем : навч. посіб. Тернопіль : ТзОВ "Терно-граф", 2010. 392с.
4. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия [Электронный ресурс] : полнотекстовая база. Москва : Солон-Пресс, 2005. 536с.
5. Болотін О. В., Мага І. М., Нечипорук В. В., Ткач В. І. Математичне моделювання в мікробіології та хімічній технології харчових добавок : навч. посіб. Ужгород : В. Падяка, 2014. 368с.
6. Куліков С. І., Волкова С. А., Чернишов А. А. Основи програмування та обчислювальної математики : навч. посіб. Дніпро : ДВНЗ УДХТУ, 2018. 159 с.
7. Гумеров Ас. М., Валеев Н. Н., Гумеров Аз. М., Емельянов В. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учеб. пособ. Москва : КолосС, 2008. 159с.
8. Очков В. Mathcad 12 для студентов и инженеров. СПб. : БХВ-Петербург, 2005. 464с.
9. Галеус В. І., Карасик О. В. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології : навч. посіб. Дніпропетровськ : Літограф, 2016. 160с.
10. Поликарпов В. М., Ушаков И. В., Головин Ю. М. Современные методы компьютерной обработки экспериментальных данных : учебн. пособ. Тамбов : Издательство ТГТУ, 2006. 84 с.