

Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Харківський національний університет

імені В. Н. Каразіна

**ІНФОРМАТИКА ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ
ДЛЯ ХІМІКІВ**

навчальний посібник

ХАРКІВ – 2011

УДК 54 : 004 (075.8)
ББК 24я73
I-74

Рецензенти: **С. А. Неділько** – д.х.н., професор, професор кафедри неорганічної хімії Київського національного університету імені Тараса Шевченка;
М. О. Мчедлов-Петросян – д.х.н., професор, завідувач кафедри фізичної хімії Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна;
С. Г. Степаньян – к.ф.-м.н., с.н.с. відділу молекулярної біофізики ФТНТ імені Б. І. Веркіна НАН України.

*Затверджено до друку рішенням Вченої ради
Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна
(протокол № 6 від 27.05.2011 р.)*

I-74 **Інформатика та інформаційні технології для хіміків** : навчальний посібник /
А. В. Пантелеймонов, І. В. Христенко, В. В. Іванов, Ю. В. Холін. – Х. : ХНУ імені
В. Н. Каразіна, 2011. – 61 с.

У посібнику наведено програму та структуру навчальної дисципліни, типові задачі для розв'язання, алгоритми розв'язання завдань, приклади модульних контрольних робіт. Наведені задачі мають різний рівень складності. Посібник розрахований на аудиторне та самостійне виконання завдань.

Електронна версія посібника розміщена на сайті кафедри хімічного матеріалознавства www.chemo.univer.kharkov.ua.

УДК 54 : 004 (075.8)
ББК 24я73

Навчальне видання

Пантелеймонов Антон Віталійович
Христенко Інна Василівна
Іванов Володимир Венедиктович
Холін Юрій Валентинович

Інформатика та інформаційні технології для хіміків

Навчальний посібник

Коректор Л. С. Стешенко
Комп'ютерна верстка А. В. Пантелеймонов
Макет обкладинки І. М. Дончик

Формат 60×84/16. Ум. друк. арк. 2,41. Тираж 100 пр. Зам. № 151/11

Видавець і виготовлювач
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна,
61077, м. Харків, пл. Свободи, 4.
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.2009

Видавництво ХНУ імені В. Н. Каразіна
Тел.: 705 24 32

© Харківський національний університет імені
В. Н. Каразіна, 2011
© Пантелеймонов А. В., Христенко І. В., Іванов В. В.,
Холін Ю. В., 2011
© Дончик І. М., макет обкладинки, 2011

Зміст

| | |
|--|----|
| Вступ | 4 |
| Програма навчальної дисципліни | 5 |
| Структура навчальної дисципліни | 9 |
| Розподіл балів, які отримують студенти | 10 |
| Шкала оцінювання | 10 |
| I. Знайомство з текстовим процесором MICROSOFT WORD | 11 |
| II. Робота у редакторі ISIS DRAW. Знайомство з MICROSOFT POWERPOINT | 15 |
| III. Знайомство з програмним пакетом MICROSOFT EXCEL | 18 |
| <i>Контрольна робота № 1</i> | 22 |
| IV. Знайомство з програмним пакетом MATCAD | 24 |
| <i>Контрольна робота № 2</i> | 31 |
| V. Матриці в описі хімічних рівнянь | 33 |
| VI. Рівняння матеріального балансу | 36 |
| <i>Контрольна робота № 3</i> | 38 |
| VII. Регресійний аналіз | 40 |
| VIII. Теорія графів і топологічні індекси | 44 |
| IX. Знаходження залежності «структура – властивість» | 46 |
| X. Адитивні схеми | 53 |
| <i>Контрольна робота № 4</i> | 57 |
| Додаток | 59 |
| Рекомендована література | 60 |

Вступ

Хімію неможливо уявити без експериментальних досліджень. Дані хімічного експерименту (від вимірювань температур плавлення до різноманітних спектральних досліджень) обов'язково вимагають обробки та структурування. Саме тому у ХХ сторіччі бурхливого розвитку набула така міждисциплінарна царина, як хімічна інформатика.

Розвиток хімічної інформатики тісно пов'язаний з можливостями обчислювальної техніки. Так, розрахунок середнього значення вибірки можливий за умов розвинених навичок усних розрахунків, в той час як інтегрування та диференціювання спектроскопічних піків вимагає залучення комп'ютерної техніки.

Даний посібник розрахований на студентів хімічних факультетів, які у навчанні, у курсах аналітичної, фізичної, колоїдної, теоретичної або органічної хімії використовують засоби обробки даних. У посібнику наведені алгоритми розв'язку основних задач, із якими стикаються студенти хімічних факультетів при виконанні лабораторних робіт при вивченні нормативних курсів.

Розв'язання задач посібника можна провести за допомогою комбінування різноманітних математичних та статистичних пакетів (R, SciLab, Matlab, MatCad, Excel). Основна увага в рамках даного посібнику приділена розрахункам в рамках пакетів MatCad і Excel як найбільш зручним, та таким, які не потребують спеціальних навичок користувача.

Програма навчальної дисципліни

| Модуль 1. Лекції | |
|------------------|---|
| № теми | Зміст теми |
| 1. | Поняття інформації, отримання, передача та збереження інформації. Кодування інформації. Двійкове кодування інформації в комп'ютері. Одиниці вимірювання інформації. Файл як центральна концепція інформатики. |
| 2. | Архітектура комп'ютера. Загальна схема пристроїв: системний блок, пристрої вводу та виводу інформації. Склад, принципи роботи та характеристики процесора. Пам'ять, різновиди пам'яті. Запам'ятовуючі пристрої (накопичувачі на жорстких та гнучких дисках, вінчестер, носії інформації). |
| 3. | Програмне забезпечення роботи комп'ютера. Класифікація програмного забезпечення: системне, прикладне, інструментальне. Системне програмне забезпечення. Поняття, функції, характеристики операційних систем. Типи операційних систем. Поняття файла, файлової системи. |
| 4. | Комп'ютерні мережі. Призначення та типи комп'ютерних мереж. Апаратне забезпечення мережі. Глобальна мережа Internet. Поняття протоколу. Правила адресації Internet. Основні служби Internet. |
| 5. | Програмне забезпечення для хіміків. Пошукові системи. Бази даних для хіміків. Сучасні редактори для хімічних текстів. Проблема сумісності хімічних редакторів з текстовими процесорами. Візуальне відображення молекул, структур та експериментальних даних. Спеціалізовані квантовохімічні програми. |

| | |
|----|---|
| 6. | Основи матричної алгебри. Алгебра векторів. Матриця як лінійне перетворення векторів. Спеціальні матриці (нульова, одинична, скалярна). Операції з матрицями. Функції від матриць. Ранг матриці. Вироджені матриці. Норма матриці. Детермінант матриці. Обернена матриця. Розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Матричне представлення. Числа обумовленості матриці. Задача на власні значення. Матриці проектування та спектральний розклад. |
| 7. | Використання матриць для опису будови хімічної речовини. Представлення брутто-формули речовини у вигляді векторів. Атомна матриця. Теорема про ранг атомної матриці. Побудова атомних матриць молекулярних та іон-молекулярних сумішей. Узагальнена атомна матриця, яка враховує структурну будову речовини, на прикладі насичених вуглеводнів. |
| 8. | Матриці у хімічних реакціях. Зображення реакцій в алгебраїчній формі. Кількість лінійно незалежних реакцій, що описують задану реакційну суміш. Ранг стехіометричної матриці. Стехіометричне правило Гіббса. Вибір незалежних компонентів у розрахунках стехіометричних коефіцієнтів. Приклади розрахунків для реакційних сумішей. |
| 9. | Рівняння матеріального балансу. Побудова стехіометричної матриці методом прямого обернення субматриць. Зміна кількості речовини при реакції. Повнота реакції. Розрахунок матеріального балансу за допомогою стехіометричних співвідношень. Параметричне рівняння простої та складної реакції. Ліва обернена матриця. Ключові речовини. Інваріант хімічної реакції. Теорема про змінення хімічного складу під час реакцій. |

| | |
|-----|--|
| 10. | Регресійний аналіз у хімії. Уявлення про рівняння регресії. Полілінійна (множинна лінійна) регресія. Метод найменших квадратів. Стандартне відхилення та коефіцієнт кореляції. Методики перехресного оцінювання (LOO). Метод найменших модулів. |
| 11. | Теорія інформації та її використання у хімії. Загальне поняття про інформацію. Формула Шеннона. Зв'язок інформації з імовірністю. Одиниці виміру інформації. Використання інформації у хімії. Зв'язок інформації з ентропією. Інформаційні структурні індекси. I_D , IC_0 , IC_1 , IC_2 та інші похідні індекси. Проблема прогнозування біологічної активності молекул. |
| 12. | Елементи теорії графів. Поняття про граф. Задача Ейлера. Орієнтований та неорієнтований графи. Дводольний граф. Маршрут у графі, ланцюг, цикл. Топологічна матриця. Матриця інцидентії та матриця дистанцій. Деякі теореми з теорії графів. Проблема перерахування ізомерів. Уявлення про теорію Пойа. Топологічні інваріанти графа. Структурні індекси молекул (індекс Вінера, індекс Рандіча). Застосування графів у дослідженні хімічних реакцій. |
| 13. | Адитивні схеми у проблемі розрахунків фізико-хімічних характеристик молекул. Методи розкладення структури молекул на фрагменти. Матричне формулювання розрахунків структурних інкрементів. Метод Татевського. Температури атомізації та ізомеризації насичених вуглеводнів. Ліпофільність вуглеводнів та октанові числа. Еквівалентність та нееквівалентність різноманітних адитивних схем. Проекційний та статистичний метод оцінювання адитивних схем. Матричне формулювання методу найменших квадратів. |

| | |
|--------------------------------------|---|
| 14. | Методи розв'язання некоректних задач регресійного аналізу. Загальне уявлення про коректні та некоректні фізико-хімічні задачі. Некоректність за Адамаром та Тихоновим. Число обумовленості матриці. Псевдообернена матриця. Рівняння Пуассона. Розрахунки псевдооберненої матриці. Псевдорозв'язання прикладної матричної задачі. Метод регуляризації за Тихоновим. Функціонал Тихонова. Нормальне рівняння. Вибір параметру регуляризації. |
| Модуль 2. Лабораторні заняття | |
| 15. | Створення документів за допомогою текстового процесора Microsoft Word. |
| 16. | Знайомство з редактором хімічних формул ISIS Draw. |
| 17. | Створення презентації (Power Point). |
| 18. | Знайомство з Excel. Створення таблиці даних. Робота з математичними та логічними функціями. Робота з масивами. Побудова діаграм та графіків. |
| 19. | Знайомство з MatCad. Основні арифметичні операції. Диференціювання. Інтегрування. Побудова графіків. Операції з матрицями. Розв'язання системи лінійних рівнянь. |
| 20. | Застосування матриць при описі хімічних реакцій. |
| 21. | Рівняння матеріального балансу. |
| 22. | Регресійний аналіз. |
| 23. | Теорія графів та топологічні індекси. Адитивні схеми. |
| 24. | Підсумкове заняття. |

Структура навчальної дисципліни

| № теми | Кількість годин | | | | |
|--------------|-----------------|--------------|-----------|-------------|---------------|
| | Усього | У тому числі | | | |
| | | лекції | практичні | лабораторні | індивідуальні |
| 1. | 4 | 2 | | | 2 |
| 2. | 7 | 3 | | | 4 |
| 3. | 7 | 3 | | | 4 |
| 4. | 6 | 2 | | | 4 |
| 5. | 5 | 2 | | | 3 |
| 6. | 8 | 4 | | | 4 |
| 7. | 6 | 2 | | | 4 |
| 8. | 7 | 2 | | | 5 |
| 9. | 7 | 2 | | | 5 |
| 10. | 9 | 4 | | | 5 |
| 11. | 7 | 2 | | | 5 |
| 12. | 7 | 2 | | | 5 |
| 13. | 7 | 2 | | | 5 |
| 14. | 9 | 4 | | | 5 |
| 15. | 4 | | | 2 | 2 |
| 16. | 2 | | | 1 | 1 |
| 17. | 3 | | | 1 | 2 |
| 18. | 9 | | | 6 | 3 |
| 19. | 6 | | | 2 | 4 |
| 20. | 10 | | | 6 | 4 |
| 21. | 8 | | | 4 | 4 |
| 22. | 6 | | | 4 | 2 |
| 23. | 4 | | | 2 | 2 |
| 24. | 14 | | | 8 | 6 |
| Усього годин | 162 | 36 | | 36 | 90 |

I. Знайомство з текстовим процесором MICROSOFT WORD

Розподіл балів, які отримують студенти

| Поточне тестування та самостійна робота | Модуль 1 | Модуль 2 | | | |
|---|-----------|-------------------|-----|--------|--------|
| | Теми 1-14 | T15-18 | T19 | T20-21 | T22-23 |
| | | Контрольна робота | | | |
| | | 20 | 20 | 30 | 30 |
| Сума | 100 | | | | |

Шкала оцінювання

| Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру | Оцінка ECTS | Оцінка за національною шкалою |
|--|-------------|-------------------------------|
| 90 – 100 | A | відмінно |
| 80 – 89 | B | добре |
| 70 – 79 | C | |
| 60 – 69 | D | задовільно |
| 50 – 59 | E | |
| 1 – 49 | FX | незадовільно |

Microsoft Word – потужний текстовий процесор, що використовується для виконання різноманітних операцій з обробки тексту. Word надає багато можливостей, як-то: набір тексту (різними шрифтами та мовами), верстка, перевірка орфографії, вставка в текст об'єктів (графіків, діаграм, баз даних і т. ін.), створення таблиць, різноманітні можливості редагування, наявність майстрів тексту й шаблонів, друк, можливості встановлення прав доступу до документу й багато іншого. За допомогою макрокоманд є можливість створювати команди-програми, які виконуються в текстових документах Word.

Цей процесор дозволяє відкривати багато вікон для сумісної роботи з декількома текстами. Існують можливості налаштування інтерфейсу й режиму роботи програми з урахуванням індивідуальних потреб користувача.

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. Відкрийте програму Microsoft Word і на основі готового шаблону створіть новий документ; збережіть його під своїм ім'ям.

2. Робота с текстом.

Введіть текст:

Информатика – отрасль науки, которая изучает свойства и структуру информации, а также способы поиска, обработки, сохранения и распространения информации в различных сферах деятельности.

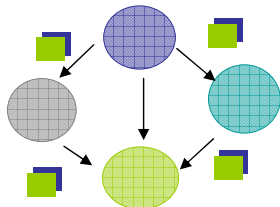
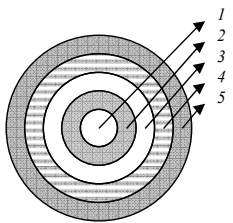
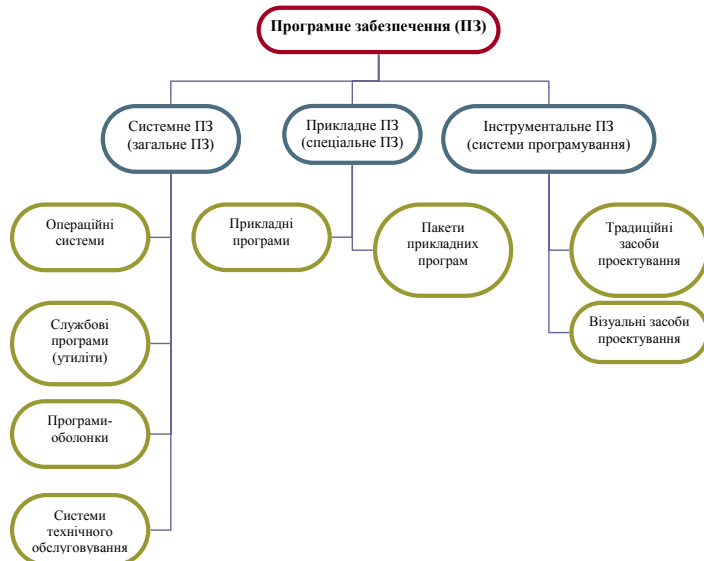
Информационные технологии – совокупность систематических и массовых способов переработки информации для получения информации нового качества на основе компьютерных вычислительных систем.

Химическая информатика изучает информационные процессы и системы в химических средах, проблемы управления в химических информационных структурах.

3. Для введеного тексту замініть стиль шрифту (Bookman Old Style, Courier, Impact, Verdana або інше) й розмір, встановіть відступ абзацу на 0.5 пт, міжрядковий інтервал – подвійний. Наведіть текст у вигляді маркованого списку. Встановіть параметри сторінки (всі поля 2 см), орієнтація – книжкова, масштаб відтворення сторінки – за шириною вікна. Розмістіть текст зліва, справа, за шириною сторінки.

Додайте другу сторінку та скопіюйте туди набраний текст; наведіть його в вигляді колонок.

4. Створіть діаграми:



5. Створіть таблиці:

| | | | | | | | |
|--|--|--|--|--|--|--|--|
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |

| | | | | | | | |
|--|--|--|--|--|--|--|--|
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |

| | | | | | | | |
|--|--|--|--|--|--|--|--|
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |

| | | | | | | | |
|--|--|--|--|--|--|--|--|
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |

6. Введіть формули й вирази, використовуючи редактор формул:

Гетерогенна рівновага: $K_n A_m \rightleftharpoons nK^{m+} + mA^{n-}$.

Добуток розчинності: $k_s = [K^{m+}]^n \cdot [A^{n-}]^m$.

Зміна ентропії реакції: $\Delta S^0 = \sum S_{\text{прод}}^0 - \sum S_{\text{реак}}^0$.

Рівняння Ареніуса: $k = k_0 e^{-E/RT}$.

Рівняння Нернста: $E = E^0 + \frac{RT}{nF} \ln a_{M^{n+}}$.

Хімічний потенціал для i -го компонента в газовій суміші:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln \tilde{P}_i.$$

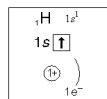
Густина розподілу Гауса: $p = \frac{e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}}$.

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \Psi^2(x) dx = 1.$$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 \leq x \leq a, \\ \infty, & x > a. \end{cases}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 6 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}.$$

7. Додайте рисунки й схеми:



вода



вугілля

бензол



сілікагель

8. Додайте до набраного тексту список Вашої групи в довільному порядку. Перетворіть текст на таблицю. Відсортуйте список в алфавітному порядку.

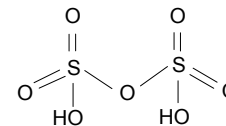
9. Збережіть зміни в документі та скопіюйте його на зовнішній носій інформації.

10. Підготуйте документ до друку, задайте параметри друку.

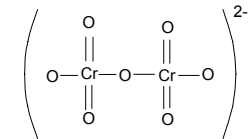
II. Робота у редакторі ISIS DRAW. Знайомство з MICROSOFT POWERPOINT

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

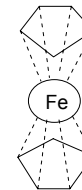
1. Введіть запропоновані структури за допомогою редактора ISIS DRAW 2.1.4.



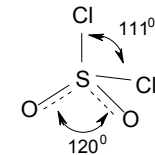
Піросірчана кислота



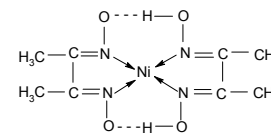
Дихромат-іон



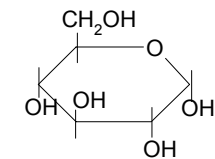
Фероцен $Fe(C_5H_5)_2$



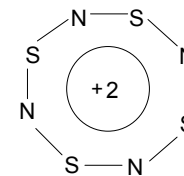
Сульфурилхлорид SO_2Cl_2



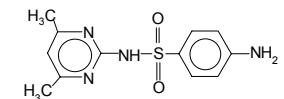
Диметилглюксимат нікелю



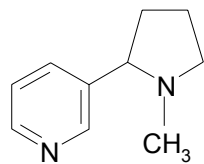
Глюкоза



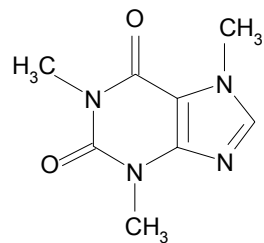
Структура іона $N_4S_4^{2+}$



Сульфадимідин
(антибіотик і стимулятор росту)

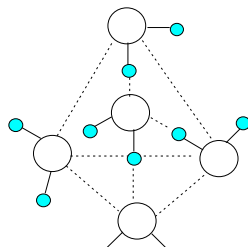


Нікотин

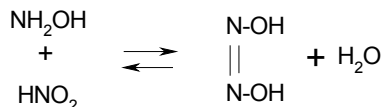


Кофеїн

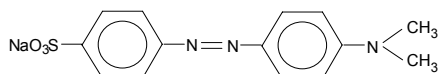
Схема водневих зв'язків для молекул води (структура льоду)



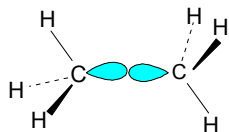
Кислоту $\text{H}_2\text{N}_2\text{O}_2$ можна добути в незначних кількостях при взаємодії гідроксиламіну й кислоти HNO_2 :



4-Диметиламіноазобензол-4-сульфокислоти натрієва сіль (метилловий оранжевий)



Утворення простого σ -зв'язку C-C в молекулі етану



Реакція окиснювального розщеплення ненасиченої аліциклічної сполуки призводить до утворення дикарбонової сполуки



вставку рисунків або діаграм; переключення між вбудованими макетами, додавання нового слайду з обраним макетом; додавання ефектів анімації й зміни слайдів; вставка (видалення) слайда; збереження документа; показ презентації.

2. Створіть короткий тезовий документ або слайд-шоу з презентацією для вищенаведеного матеріалу, використовуючи шаблони оформлення,

III. Знайомство з програмним пакетом MICROSOFT EXCEL.

Матричні операції. Розв'язання рівнянь

Вказівки до розв'язання задач

Усі розрахунки в програмі MICROSOFT EXCEL починаються з введення символу «=».

При виконанні операцій з матрицями слід виділити пусті клітинки під результуючу матрицю, записати необхідний вираз та натиснути комбінацію клавіш [Ctrl] + [Shift] + [Enter].

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. Подайте дані про середньодобову температуру (табл. III.1) у вигляді графіків (точковий, лінійний, гістограма).

2. Побудуйте діаграму (у вигляді гістограми) відвідування студентами занять (табл. III.2). На одній діаграмі покажіть відвідування всіх груп.

Табл. III.1

| Дата | Середня температура, °C |
|---------|-------------------------|
| 24.9.09 | 23.5 |
| 25.9.09 | 21.3 |
| 26.9.09 | 20.4 |
| 27.9.09 | 21.1 |
| 28.9.09 | 19.6 |
| 29.9.09 | 19.6 |
| 30.9.09 | 18.9 |
| 1.10.09 | 19.2 |
| 2.10.09 | 17.5 |

Табл. III.2

| Дата | Кількість студентів | | |
|----------|---------------------|-----------|-----------|
| | Група X-1 | Група X-2 | Група X-3 |
| 27 бер. | 12 | 13 | 9 |
| 28 бер. | 11 | 11 | 9 |
| 31 бер. | 12 | 10 | 10 |
| 1 квіт. | 11 | 10 | 9 |
| 2 квіт. | 9 | 12 | 8 |
| 3 квіт. | 10 | 12 | 8 |
| 4 квіт. | 8 | 11 | 9 |
| 7 квіт. | 11 | 11 | 10 |
| 8 квіт. | 10 | 11 | 9 |
| 9 квіт. | 9 | 10 | 8 |
| 10 квіт. | 8 | 12 | 9 |
| 11 квіт. | 10 | 12 | 9 |
| 14 квіт. | 12 | 13 | 9 |
| 15 квіт. | 10 | 13 | 10 |

3. Знайдіть значення виразу $\sum_{n=1}^{10} \frac{n+1}{\sqrt{n^3}}$.

4. Обчисліть $\frac{9! - 7!}{8!}$.

5. Побудуйте графік функції $f(x) = \begin{cases} x^2, & x \geq 3 \\ x^4 + 5, & x > 4 \\ x^3 + 4, & x > 6 \\ x^2 + 5, & x > 8 \end{cases}$, якщо x змінюється від 3

до 10 з кроком 0.5.

6. Розрахуйте значення функції $f(x) = \frac{e^x}{\sum x}$ для $x = [0.6; 0.62; \dots; 0.98]$.

7. Знайдіть графічно розв'язок системи рівнянь $\begin{cases} y = \frac{\sqrt{x}}{\cos(x/\pi)} \\ y = \frac{\sin(\pi/x)}{x} \end{cases}$ в діапазоні

$x = [0.2; 0.23; \dots; 0.77]$.

8. Побудуйте на одній діаграмі графіки функцій $y_1 = \frac{\sqrt{x}}{\ln x}$ та $y_2 = \frac{x}{3x^2 - 0.3x}$ для $x = [30.2; 32.2; \dots; 83]$.

9. Для $x = [1; 1.75; \dots; 11.5]$ розрахуйте значення функцій $Y_1 = 3.5 \cdot x^2 - 25$ і $Y_2 = 0.3 \cdot x^3 - 1.67 \cdot x^2 + 3 \cdot x + 5$ та представте їх у графічному вигляді як згладжені лінії.

10. Для масивів

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 7 \\ 0 & 3 & -1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 7 \\ 8 & 1 & 6 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 7 & 9 & 0 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 11 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}:$$

а) знайдіть детермінанти, обернені та транспоновані матриці. Переконайтеся, що добуток прямої й оберненої матриці (для квадратних не вироджених матриць B та C) є одиничною матрицею;

б) обчисліть добутки матриць $A \cdot B$, $A \cdot D$, $D \cdot A$, $B \cdot C$ та $C \cdot B$. Переконайтеся у відсутності комутативності добутку матриць;

в) знайдіть $B + C$;

г) розрахуйте $0.5 \times B$ та $-2 \times A$.

11. Розв'яжіть системи лінійних рівнянь $\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 7 \\ x_1 + 5x_2 - 2x_3 = 6 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 9 \end{cases}$ та

$$\begin{cases} 11x_1 + 9x_2 + x_3 = 17 \\ 7x_1 + 5x_2 + 2x_3 + 10x_4 = 10 \\ 12x_2 + 9x_3 + 5x_4 = 19 \\ 8x_1 + 3x_2 + 10x_3 + 4x_4 = 27 \end{cases}$$

12. Розв'яжіть рівняння $x^3 - 3x^2 + x = -1$ за допомогою підгонки параметрів та графічно (в інтервалі $x = [-3; -2.8; \dots; 3]$).

13. Побудуйте гіперболічний параболоїд $\frac{x^2}{9} - \frac{y^2}{4} = 2z$ для $x = [-3; -2.5; \dots; 3]$ і $y = [-2; -2.5; \dots; 2]$.

14. Побудуйте графіки поверхонь $z = \frac{1+x-y}{\sqrt{1+x^2+y^2}}$ та $x^2 + y^2 + z^2 = 25$ при x та y , які приймають значення від $-5 \div 5$ з кроком 0.5.

15. При $x = [1; 1.5; \dots; 20]$ обчисліть функції $y(x) = x^2$, $y(x) = \sqrt{x}$, $y(x) = \log(x)$ та розрахуйте коефіцієнти кореляції $r = \frac{\sum_i (y_i - \bar{y}) \sum_i (x_i - \bar{x})}{\sqrt{\sum_i (y_i - \bar{y})^2} \sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}$ для всіх пар функцій.

Контрольна робота № 1

Тема «Microsoft Excel»

1. У таблиці наведено дані (сумарний бал) результатів контрольної роботи студентів у чотирьох групах. Розрахуйте середній бал у кожній групі й впишіть його в нижній рядок.

| | 1 | 2 | 3 | 4 |
|--------------|----|----|----|----|
| | 25 | 20 | 19 | 18 |
| | 20 | 18 | 22 | 20 |
| | 14 | 19 | 20 | 21 |
| | 22 | 21 | 16 | 19 |
| | 19 | 17 | 19 | 25 |
| | 21 | 25 | 21 | 24 |
| | 17 | | 25 | 13 |
| | 22 | | 23 | |
| Середній бал | — | — | — | — |

2. Система рівнянь $\begin{cases} 2y^2 + x^2 = 1 \\ y = 5x^2 \end{cases}$ в діапазоні x від -0.5 до 0.5 з кроком 0.05

має ___ розв'язків, а саме:

3. Знайдіть розв'язок системи лінійних рівнянь.

$$\begin{cases} 5x_1 + 3x_2 - x_3 - 2x_4 = 15 \\ x_1 - 6x_3 + x_4 = 10 \\ 10x_1 - x_2 + x_3 + x_4 = 19 \\ x_1 + 2x_2 - 7x_3 = 9 \end{cases} \quad \begin{matrix} x_1 = \\ x_2 = \\ x_3 = \\ x_4 = \end{matrix}$$

4. Для матриць $A = \begin{pmatrix} 3 & 10 & 1 \\ 5 & 1 & 7 \\ 0 & 13 & 5 \end{pmatrix}$ й $B = \begin{pmatrix} 1 & 9 & 5 \\ 8 & 1 & 3 \\ 11 & 0 & 2 \end{pmatrix}$

знайдіть детермінанти ($|A| = \underline{\hspace{2cm}}$, $|B| = \underline{\hspace{2cm}}$).

Обчисліть добутки:

$AB = \underline{\hspace{2cm}}$; $BA = \underline{\hspace{2cm}}$.

5. Знайдіть корені рівняння $x^3 - 5x^2 + 2x = -2$ й запишіть їх нижче (вказівка – корені слід шукати в діапазоні x від -2 до 6):

IV. Знайомство з програмним пакетом MATCAD.

Матричні операції. Розв'язання рівнянь

Вказівки до розв'язання задач

Основний оператор програми MATCAD – оператор присвоєння, який задається комбінацією клавіш [Shift] + [:] (запис на екрані :=). Використовуйте його для присвоєння змінним вказаних значень чи інтервалів та розрахунку значень функцій.

Якщо необхідно обчислити значення виразу в загальному вигляді (знайти диференціал або інтеграл функції, для роботи з матрицями у загальному вигляді), то замість знака «=» необхідно використовувати оператор «→».

Для розв'язання квадратних та кубічних рівнянь можна використати функції «root» (запис [root(рівняння, x)]), при цьому необхідно ввести початкове наближення або «solve» (запис [рівняння solve, x →]).

При побудові поверхонь відповідні координати точок задаються у вигляді матриць.

Функції для операцій з матрицями:

- розміщення A справа від B : `augment(A,B)`;
- розміщення A під B : `stack(A,B)`;
- виділення з матриці A довільного блоку: `submatrix(A,i,j,k,l)`, де i,j,k,l – індекси, які позначають номери початку і кінця строки (i,j) та стовпця (k,l) блоку, що виділяється (нумерація строк та стовпців починається з 0);
- приведення матриці A до діагонального вигляду: `diag(A)`.

Для розв'язання системи лінійних рівнянь можна використати кілька способів. Нехай матриця коефіцієнтів задається як K , вектор правої частини рівнянь позначимо b , а вектор коренів – x . Таким чином, необхідно розв'язати рівняння $Kx = b$ відносно x .

| | |
|---|---|
| 1 | Обчислити K^{-1} та знайти добуток $K^{-1}b$. Отриманий вектор дорівнює x . |
| 2 | Використати спеціальну функцію [lsolve(K,b)=]. |
| 3 | Задати початкове наближення $x:=0$ (матрично) та використати блок команд: Given $Kx=b$ Find (x)= Отриманий вектор дорівнює x . Зверніть увагу, що в блоці Given знак «=» має бути записаний як знак булевої алгебри (комбінацією клавіш [Ctrl] + [=]). |
| 4 | Використати функцію [$Kx=b$ solve, $x \rightarrow$]. |
| 5 | Якщо матриця K вироджена, необхідно виділити мінор матриці K за допомогою функції $Z:=\text{rref}(K)$. У блоці Given записати рівняння $Zx = b$, які не є лінійними комбінаціями одного з іншим. За допомогою функції Find знайти рівняння для обчислення змінних, через які можна виразити всі інші змінні. Сформувати функцію від змінних, що залишилися, яка буде обчислювати вектор x . |

Наприклад, необхідно розв'язати систему лінійних рівнянь

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 0 \\ 7x_1 + 8x_2 + 9x_3 + 10x_4 = 0 \\ 5x_1 + 4x_2 + 3x_3 + 2x_4 = 0 \\ 1x_2 + 2x_3 + 3x_4 = 0 \end{cases} \cdot \text{Необхідно задати } K := \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 7 & 8 & 9 & 10 \\ 5 & 4 & 3 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \text{ та обчислити}$$

$$|K|=0. \text{ Мінор } Z := \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Given

$$x_1 - x_3 - 2x_4 = 0$$

$$x_2 + 2x_3 + 3x_4 = 0$$

$$\text{Find}(x_1, x_2) \rightarrow \begin{pmatrix} x_3 + 2x_4 \\ -2x_3 - 3x_4 \end{pmatrix}$$

$$X(x_3, x_4) := \begin{pmatrix} x_3 + 2x_4 \\ -2x_3 - 3x_4 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}, X(0,1) = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, X(1,2) = \begin{pmatrix} 5 \\ -8 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \text{ і т. ін.}$$

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. Запишіть вирази: $a:=2\cdot 3$, $a:=3^6$, $a:=\sqrt{76}$, $a:=19/7.5$. Знайдіть значення a .

2. Знайдіть значення виразу $\frac{123 + \sqrt{7.5}}{6.3^3} - \sqrt[3]{17\frac{3}{4} - 16\frac{1}{5}} + \frac{e^4}{4!}$.

3. Знайдіть значення виразів $y = \frac{\ln(x)}{x^2 + \cos\left(\frac{\pi}{3}\right)}$, $z = \frac{\sqrt{x} - \log(y)}{\sqrt{y^3 - x^3}}$,

$$s = \frac{\sqrt[3]{\cos\left(\frac{\pi}{3}\right)^2 - x}}{(x+y)^3 - \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)}, \quad d = \sqrt{2\cos\left(\frac{\pi}{18.6}\right)^3} \cdot \frac{\ln\left[\sin\left(\frac{\pi^3}{3}\right)\right]}{2} + \sqrt[3]{x+y} \quad \text{при вказаних}$$

викладачем значеннях змінних.

4. Визначте функцію $f(x, y, z) = \frac{\sqrt{\cos(x) \cdot \sin(x)}}{(x^2 + y^2)} + \ln(z)$ при значеннях змінних $t = 19.9$, $u = 13.2$ та розрахуйте $f(\sin(t), \ln(u), u^2)$; $f(t, t^{0.5}, u^2)$; $f(f(1, 2, 3), 4, 5)$.

5. Знайдіть перші похідні функцій $f(x) = x^2 + \frac{e^x}{(x-0.5)^3}$ та $f(x) = (a-b \cdot x^3)^2$.

6. Знайдіть часткові перші та другі похідні функцій $g(x, y, z) = x^3 + z^2 - 3 \cdot y \cdot \sqrt{z}$ та $u(x, z) = \frac{\ln(x+z)}{(x-z)^2}$.

7. Розрахуйте інтеграли $\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x) \cos(x)^3 dx$ та $\int \sin(x)^3 \cos(x) dx$.

8. Знайдіть значення виразу $\frac{\sqrt{t + \exp(y) \sin(u)}}{y \sin(t) y} \int_t^y \int_t^y (x^2 + z^2) dz dx$ при $t = 19.42$, $y = 34.75$,

$u = -67.98$.

9. Знайдіть корені квадратних рівнянь $x^2 + x - 1 = 0$, $4x^2 + 2x - 5 = 0$, $x^2 - 12x - 347 = 0$, $x^2 - 57x + 350 = 0$.

10. Знайдіть корені кубічних рівнянь $0.1x^3 + 2.4x^2 + x - 2.6 = 0$, $y^3 - y^2 + 9y - 9 = 0$.

11. Розв'яжіть рівняння $at^2 + c = 0$, $2g^2 - 5g - 3 = 0$, $0.5p^2 + 12 = 0$ відносно змінних.

12. Знайдіть для наступних матриць і векторів $H = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 7 \end{pmatrix}$, $F = \begin{pmatrix} 0.3 \\ -2 \\ 1 \\ 4.5 \end{pmatrix}$, $a = 17$,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 7 & 9 \\ 8 & 5 & 1 & 2 \\ 7 & 3 & 2 & 1 \\ 10 & 1 & 0 & 4 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 11 & 6 & 0 & 1 \\ 5 & 2 & 2 & 0 \\ 7 & 4 & 12 & 9 \\ 9 & 1 & 8 & 3 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 21 & 7 & 1 & 5 \\ 0 & 16 & 3 & 7 \\ 9 & 2 & 0 & 6 \\ 8 & 13 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D_1 = \begin{pmatrix} 2 & y & 0 \\ s & p & 1 \\ r & f & v \end{pmatrix}, D_2 = \begin{pmatrix} l & m & n \\ i & j & k \\ v & w & u \end{pmatrix} :$$

а) $A + B + C$;

б) $B - C$;

в) $(A + C) \cdot B$;

г) $a \cdot A$;

д) B^{-1}, A^2, C^3 ;

е) $(A + C)^T$;

ж) $D_1 + D_2$;

з) D_1^{-1} ;

і) $|D_2|, |D_1|, |A|$;

й) $D_1 \cdot D_2$;

к) $\text{rank}(A), \text{rank}(D_1)$;

л) матрицю, сформовану з масивів X_1 і X_2 шляхом розміщення масиву X_2 справа від X_1 ($X_1 = A, D_1; X_2 = B, D_2$);

м) матрицю, сформовану з масивів X_1 і X_2 шляхом розміщення масиву X_2 під X_1 ($X_1 = C, D_1; X_2 = A, D_2$);

н) виділіть матрицю розміром $2 \times 2, 3 \times 3$ з матриці B ;

о) для векторів H і F створіть діагональну матрицю.

13. Знайдіть детермінанти і обернені матриці для масивів

$$A := \begin{pmatrix} -x & 1 & 0 \\ 0 & -x & -1 \\ 1 & -1 & -x \end{pmatrix} \text{ і } A := \begin{pmatrix} 1 + \cos(y) & 1 + \sin(y) & 1 \\ 1 - \sin(y) & 1 + \cos(y) & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

14. Розв'яжіть системи лінійних рівнянь $\begin{cases} x + y + z = 3 \\ x - y + 2z = 1 \\ 2x + 7y - z = 9 \end{cases}$ та

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 10 \\ 4x_1 + 5x_2 + 6x_3 = 20 \\ 7x_1 - 8x_2 - 9x_3 = 30 \end{cases}$$

15. Розв'яжіть системи лінійних рівнянь $\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 0 \\ 2x_1 + 3x_2 + 4x_3 + 5x_4 = 0 \\ x_2 + 2x_3 + 3x_4 = 0 \end{cases}$ та

$$\begin{cases} 0.6x_1 + 0.6x_2 + 0.3x_3 + x_4 + 0.05x_5 = 3 \\ 0.4x_1 + 1.2x_2 + 2.4x_3 + 3.6x_4 + 4x_5 = 4 \\ 5x_1 + 0.3x_2 + 0.4x_3 + 0.5x_4 + 0.1x_5 = 5 \\ 3.2x_1 + 1.2x_2 + x_3 + 0.5x_4 + x_5 = 6 \\ 2.1x_1 + 1.1x_2 + 1.2x_3 + 4.1x_4 + 3x_5 = 9 \end{cases}$$

16. Визначте змінну x , що приймає значення від 1 до 4 із вказаним викладачем кроком. Розрахуйте значення функції $y(x) = \ln(x) + x^{0.5}$. Виведіть значення x і y на екран. Побудуйте на одній діаграмі графіки $y(x)$ та $y'(x)$.

Побудуйте графік функції $f(x) = \frac{\sin(x) \cdot \cos(x)}{x}$ та графік її похідної, якщо $x = -10 \dots 10$.

17. Знайдіть рівняння дотичної до сигмоїди $f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-2x)}$ в

заданих викладачем точках. Рівняння дотичної до кривої $f(x)$ у точці t розраховується за формулою $y(x) = f(t) + f'(t) \cdot (x - t)$, побудуйте графіки функції та її дотичної.

18. Побудуйте фігуру Лісажу за умов $N = 100, N1 = 4, N2 = 5, j = 1, \dots, N$.

$$\begin{cases} x_j = \sin\left(N1 \cdot 2\pi \cdot \frac{j}{N}\right) \\ y_j = \cos\left(N2 \cdot 2\pi \cdot \frac{j}{N}\right) \end{cases}.$$
 Змініть співвідношення $N1$ та $N2$ за вказівкою

викладача.

19. Побудуйте графіки поверхонь:

(X, Y, Z) : при $\alpha = 0 \dots 3\pi, \beta = -\pi \dots \pi$, якщо $X(\alpha, \beta) = \sin(\alpha) \cdot \cos(\beta)$, $Y(\alpha, \beta) = \sin(\alpha) \cdot \sin(\beta), Z = \sin(\alpha)$.

Контрольна робота № 2

Тема «MatCad»

М: $M_{i,j} := \sin((x_i)^2 + (y_j)^2)$ при $i = 0 \dots 20$ та $j = 0 \dots 20$, якщо $x_i = -1 + 0.1 \cdot i$, $y_j = -1 + 0.1 \cdot j$.

20. 3s-атомна орбіталь атому гідрогена описується функцією $R(r) = \left(27 - \frac{18r}{a} + \frac{2r}{a^2}\right)^3 \exp\left(\frac{-r}{3a}\right)$, де $a = 0.5292$, r – відстань від електрона до ядра ($r = [0; \infty)$). Побудуйте графік функції та знайдіть корені рівняння $R(r)=0$.

1. Значення виразу $y = \frac{1}{z^2 + x^2} + \frac{\sqrt[3]{z}}{\pi \cdot \ln(x)}$ при $x = 100$ и $z = 16$ складає _____, а при $x = 3$ и $z = 30$ складає _____.

2. Запишіть аналітичні вирази для всіх можливих перших часткових похідних функції $f(\alpha, \beta) = \frac{\alpha^2}{(\pi - \beta)^3} + \sqrt{0.5 \cdot \beta}$.

3. У графіка функції $b(a) = 0.2 \cdot a^3 + 7 \cdot a - 10$ і графіка її другої похідної, побудованих в інтервалі $a = -5 \div 5$ (крок 0.75), спостерігається _____ точок перетину.

Рівняння $0.2 \cdot a^3 + 7 \cdot a = 10$ має _____ коренів у дійсній області, а саме _____.

4. Запишіть аналітичний вираз інтеграла функції $f(t) = \sin(3t)^3$ _____ . Значення цього інтеграла в межах $[\pi; 2\pi/3]$ складає _____.

5. Для матриць $M = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 7 \\ 5 & 9 & 2 \\ 6 & 1 & 4 \end{pmatrix}$, $N = \begin{pmatrix} n/3 & n & 1 \\ 0 & -n & 0 \\ 2n & 1 & 1 \end{pmatrix}$, знайдіть:

M^{-1} M^T N^{-1} N^T

Добуток MN.

6. Вкажіть три можливих розв'язки системи лінійних рівнянь

$$\begin{cases} 1x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 0 \\ 5x_1 + 6x_2 + 7x_3 + 8x_4 = 0 \\ 1x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 7x_4 = 0 \\ 9x_1 + 10x_2 + 11x_3 + 12x_4 = 0 \end{cases}$$

V. Матриці в описі хімічних рівнянь

Вказівки до розв'язання задач

Методи лінійної алгебри активно використовуються для прогнозування всіх можливих реакцій, які можуть протікати між заданими речовинами. Але зацікавленість викликають лінійно незалежні реакції (в яких з головних (базисних) компонентів можуть бути отримані всі сполуки в реакційній суміші). Існує декілька алгоритмів складання припустимих рівнянь реакцій, два з них наведені нижче.

| Алгоритм 1 | Алгоритм 2 |
|---|--|
| 1. Сформуувати атомну матрицю β , стовпці якої відповідають атомам (усього M атомів), рядки – існуючим сполукам (усього N сполук). | |
| 2. Обчислити ранг атомної матриці $r = \text{rank}(\beta)$. | |
| 3. Обчислити число лінійно-незалежних рівнянь системи як різницю між кількістю існуючих сполук і рангом атомної матриці. | 3. Розкласти матрицю β на матриці b_1 та b_2 , причому $ b_1 \neq 0$, розмірність $b_1 = [r \times r]$, де $r = \text{rank}(\beta)$, b_2 – залишок матриці β . |
| 4. Записати рівняння між усіма сполуками системи в канонічному вигляді, тобто $\sum_{i=1}^N a_i X_i = 0$, де a – стехіометричні коефіцієнти, X – сполуки. | 4. Обчислити матриці $a_1 = -b_2 \cdot b_1^{-1}$ та a_2 , причому a_2 – одинична квадратна матриця розмірності $[N - r \times N - r]$. |
| 5. Розв'язати систему лінійних рівнянь $a \cdot \beta = 0$ за допомогою функцій <code>ref</code> , <code>solve</code> , або блоку <code>given – find</code> . | 5. Розмістити масив a_2 праворуч від a_1 . |
| 6. Отримана матриця i є матрицею стехіометричних коефіцієнтів рівнянь хімічних реакцій у системі. Їх можна записати у звичному вигляді, тобто «реагенти = продукти» (стехіометричні коефіцієнти продуктів реакції негативні). | |

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. Проаналізуйте реакцію синтезу метанолу з CO і H₂ в присутності CO₂ і H₂O. Складіть припустимі рівняння реакцій.

2. Побудуйте систему лінійно незалежних реакцій між сполуками CH₄, CH₂O, O₂, H₂O.

3. При взаємодії водяної пари з вугіллям в реакційній суміші з'являються такі речовини: H₂O, C, CO, H₂, CO₂. Скількома рівняннями реакцій може бути описана ця система? Знайдіть ці реакції та їх стехіометричні коефіцієнти.

4. Реакція $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$ відбувається за участю проміжних сполук H, HO та атомарного кисню O. Складіть рівняння незалежних реакцій і знайдіть стехіометричні коефіцієнти.

5. Встановіть можливі стехіометрично незалежні реакції, що описують систему, яка містить C₂H₄, Cl₂, C₂H₃Cl, C₂H₄Cl₂, HCl. Який ще (крім знайденого) можливий вибір незалежних реакцій?

6. Встановіть стехіометричні коефіцієнти можливих реакцій за участю набору речовин: H₂, O₂, CO, CO₂, H₂CO, H₂O, CH₃OH, C₂H₅OH, (CH₃)₂CO, CH₃CHO, CH₄.

7. При УФ-опроміненні газової суміші Cl₂ і O₂ відбувається низка процесів. Спектральними методами було встановлено, що в суміші, крім Cl₂ і O₂, містяться також, вільний радикал ClO і атомарний хлор. Побудуйте можливу систему хімічних реакцій.

8. Запишіть хімічні реакції для набору речовин: H₂, O₂, HCl, H, H⁺, Cl₂, Cl, Cl⁻, H₂O, O.

9. Запишіть рівняння реакції гідролізу Na₂CO₃ (у складі розчину є компоненти: Na₂CO₃, Na⁺, CO₃²⁻, HCO₃⁻, H₂O, H₃O⁺, H⁺, HO⁻, H₂CO₃, CO₂), перевірте придатність в якості базисних функцій H, O, C, Na, +1. Оберіть в якості базисного набору наступні компоненти: CO₂, H⁺, OH⁻, Na⁺.

10. Складіть рівняння, що описують повний гідроліз FeCl₃. У розчині містяться такі компоненти: FeCl₃, H₂O, Fe³⁺, H⁺, Fe(OH)²⁺, Fe(OH)₂⁺, Fe(OH)₃ і Cl⁻. В якості базисних елементів можна обрати Fe³⁺, H⁺, Cl⁻, OH⁻.

11. В реакції парової конверсії беруть участь такі речовини: C₂H₄, O₂, CO₂, H₂O, H₂, C₆H₆, CO, CH₄, C. Знайдіть можливі рівняння реакцій, що описують парову конверсію.

12. Реакція піролізу етилену проходить за вільнорадикальним механізмом за участю п'яти стабільних частинок (C₂H₆, CH₄, C₂H₄, H₂, C₄H₁₀) і трьох інтермедіатів (активних сполук з неспареним електроном) CH₃, C₂H₅, H. Знайдіть можливу систему хімічних рівнянь, які пов'язують ці сполуки.

13. Реакція взаємодії метану з водяною парою проходить за участю каталізатора Z. У реакційній суміші виявлено речовини CH₄, H₂O, H₂, CO, CO₂, а також адсорбовані на активних центрах молекули й інтермедіати (ZCH₂, ZCO, ZO). Побудуйте можливі рівняння хімічних реакцій, які пов'язують ці речовини.

VI. Рівняння матеріального балансу

Вказівки до розв'язання задач

У цьому розділі методами лінійної алгебри з усіх існуючих компонентів системи виділяють ключові (такі, з яких можна отримати всі інші компоненти системи) та знаходять залежність зміни концентрацій неключових компонентів від концентрацій ключових. Алгоритм розрахунків такий:

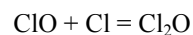
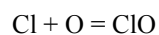
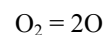
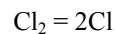
- | |
|---|
| 1. Сформуйте стехіометричну матрицю A розмірністю $[N \times M]$, де N – кількість компонентів системи, M – кількість реакцій. |
| 2. Розкладіть матрицю A на матриці A_1 та A_2 , причому $ A_1 \neq 0$, розмірність A_1 – $[r \times r]$, де $r = \text{rank}(A)$, A_2 – залишок матриці A . Рядки матриці A_1 – ключові сполуки (N_1), рядки A_2 – неключові сполуки (N_2). |
| 3. Зміна концентрацій неключових сполук ΔN_2 через зміну концентрацій ключових ΔN_1 задається рівнянням $\Delta N_2 = A_2 A_1^{-1} \Delta N_1$. |

Комбінуючи методи, описані в розділі V з методами розділу VI, маємо можливість, припускаючи лише наявність певних компонентів в реакційній суміші, скласти систему хімічних рівнянь, що їх пов'язують, та виділити ключові компоненти.

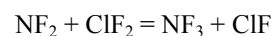
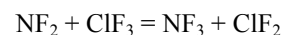
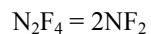
Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. Для нижченаведених систем знайдіть ключові речовини та виразіть зміну концентрацій неключових речовин через ключові.

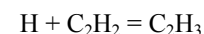
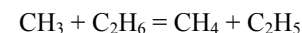
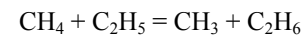
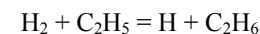
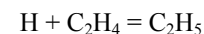
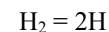
Система 1



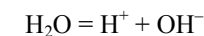
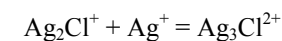
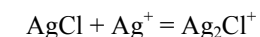
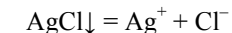
Система 2



Система 3



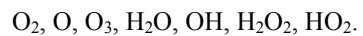
Система 4



Контрольна робота № 3

Тема «Матриці в описі хімічних реакцій. Рівняння матеріального балансу»

В фотохімічній реакції беруть участь такі молекули і вільні радикали:



| <p>1. Атомна матриця для даної системи має вигляд:</p> | <p>2. У цій системі _____ лінійно-незалежних реакцій, тому що _____.</p> <p>3. Результуюча матриця стехіометричних коефіцієнтів:</p> | | | | |
|--|---|------------------------|--------------------------|--|--|
| <p>4. Система хімічних рівнянь</p> | <p>5.</p> <table border="1" data-bbox="490 932 1010 1289"> <thead> <tr> <th data-bbox="490 932 752 1026">Ключовими сполуками є:</th> <th data-bbox="752 932 1010 1026">Неключовими сполуками є:</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="490 1026 752 1289"></td> <td data-bbox="752 1026 1010 1289"></td> </tr> </tbody> </table> | Ключовими сполуками є: | Неключовими сполуками є: | | |
| Ключовими сполуками є: | Неключовими сполуками є: | | | | |
| | | | | | |

| | |
|--|---|
| <p>6. Зміна концентрацій неключових сполук виражається залежністю:</p> | <p>7. Знайдена в п. 4 система хімічних рівнянь є (потрібне підкресліть) єдино можливою / існують альтернативні, а саме:</p> |
|--|---|

VII. Регресійний аналіз

Вказівки до розв'язання задач

Задачі цього розділу розв'язуються за допомогою вбудованого в програму MICROSOFT EXCEL пакета аналізу. Його необхідно активувати в меню «Сервіс → Надбудови → Пакет аналізу».

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. Запропонуйте функцію для обчислення теплоти згоряння нормальних алканів, алкенів з кінцевим подвійним зв'язком та первинних спиртів (експериментальні дані наведені в табл. VII.1, VII.2 та VII.3). Оцініть теплоту згоряння сполук з 12 та 14 атомами карбону. Розрахуйте дисперсію та коефіцієнт кореляції. Побудуйте графік залежності експериментальних і теоретично розрахованих теплот згоряння.

Табл. VII.1

| № | Сполука | Брутто-формула | Теплота згоряння, кДж/моль |
|---|----------|--------------------------------|----------------------------|
| 1 | метан | CH ₄ | 890.95 |
| 2 | етан | C ₂ H ₆ | 1560.92 |
| 3 | пропан | C ₃ H ₈ | 2221.52 |
| 4 | н-бутан | C ₄ H ₁₀ | 2880.43 |
| 5 | н-пентан | C ₅ H ₁₂ | 3539.1 |
| 6 | н-гексан | C ₆ H ₁₄ | 4197.7 |
| 7 | н-гептан | C ₇ H ₁₆ | 4856.7 |
| 8 | н-октан | C ₈ H ₁₈ | 5515.7 |

Табл. VII.2

| № | Сполука | Формула | Теплота згоряння, кДж/моль |
|----|------------|---|----------------------------|
| 1 | етилен | H ₂ C=CH ₂ | 1411.91 |
| 2 | пропен | H ₂ C=CHCH ₃ | 2059.86 |
| 3 | н-бутен-1 | H ₂ C=CHC ₂ H ₅ | 2720.42 |
| 4 | н-пентен-1 | H ₂ C=CHC ₃ H ₇ | 3377.9 |
| 6 | н-гексен-1 | H ₂ C=CHC ₄ H ₉ | 4037.3 |
| 7 | н-гептен-1 | H ₂ C=CHC ₅ H ₁₁ | 4696.3 |
| 8 | н-октен-1 | H ₂ C=CHC ₆ H ₁₃ | 5355.3 |
| 9 | н-нонен-1 | H ₂ C=CHC ₇ H ₁₅ | 6014.8 |
| 10 | н-децен-1 | H ₂ C=CHC ₈ H ₁₇ | 6673.8 |

Табл. VII.3

| № | Сполука | Формула | Теплота згоряння, кДж/моль |
|----|----------|------------------------------------|----------------------------|
| 1 | метанол | CH ₃ OH | 764.43 |
| 2 | етанол | C ₂ H ₅ OH | 1410.03 |
| 3 | пропанол | C ₃ H ₇ OH | 2064.93 |
| 4 | бутанол | C ₄ H ₉ OH | 2721.00 |
| 5 | пентанол | C ₅ H ₁₁ OH | 3377.70 |
| 6 | гексанол | C ₆ H ₁₃ OH | 4034.40 |
| 7 | гептанол | C ₇ H ₁₅ OH | 4691.73 |
| 8 | октанол | C ₈ H ₁₇ OH | 5349.06 |
| 9 | нонанол | C ₉ H ₁₉ OH | 6006.38 |
| 10 | деканол | C ₁₀ H ₂₁ OH | 6663.71 |

2. Експериментальні дані щодо залежності мольної теплоємності ацетилену та метану від температури при тиску 1 атм представлені в табл. VII.4 та VII.5.

Табл. VII.4

| T, °K | C _p ^o , ккал/моль·K |
|-------|---|
| 300 | 9.91 |
| 400 | 11.07 |
| 500 | 12.13 |
| 600 | 13.04 |
| 700 | 13.82 |
| 800 | 14.51 |
| 900 | 15.1 |
| 1000 | 15.63 |

Табл. VII.5

| T, °K | C _p ^o , Дж/моль·K |
|-------|---|
| 298 | 35.73 |
| 400 | 40.73 |
| 500 | 46.57 |
| 600 | 52.51 |
| 700 | 58.07 |
| 800 | 63.18 |
| 900 | 67.82 |
| 1000 | 72 |
| 1100 | 75.69 |
| 1200 | 78.99 |

Припускаючи квадратичну $C_p^o = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2$ та/або кубічну $C_p^o = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 + a_3 \cdot T^3$ залежності мольної теплоємності сполук від температури, розрахуйте параметри цих моделей та оцініть якість апроксимації кожної з них, порівнюючи коефіцієнти кореляції та дисперсії. Побудуйте графіки залежності експериментальних і теоретично розрахованих теплоємностей.

3. Знайдіть коефіцієнти поліному третього ступеня для опису залежності теплоємності води від температури (табл. VII.6). Дані з таблиці занесіть у два стовпчики – T та C_p, тобто отримайте 21 рядок даних.

Табл. VII.6

| T, °C | C _p | T, °C | C _p | T, °C | C _p |
|-------|----------------|-------|----------------|-------|----------------|
| 0 | 1.00762 | 35 | 0.99818 | 70 | 1.00091 |
| 5 | 1.00392 | 40 | 0.99828 | 75 | 1.00167 |
| 10 | 1.00153 | 45 | 0.99837 | 80 | 1.00253 |
| 15 | 1.00000 | 50 | 0.99849 | 85 | 1.00351 |
| 20 | 0.99907 | 55 | 0.99919 | 90 | 1.00461 |
| 25 | 0.99852 | 60 | 0.99967 | 95 | 1.00586 |
| 30 | 0.99826 | 65 | 1.00024 | 100 | 1.00721 |

VIII. Теорія графів і топологічні індекси

Вказівки до розв'язання задач

Топологічні індекси відіграють важливу роль у розрахунку кількісних співвідношень «структура-властивість» та «структура-активність» (QSPR- і QSAR-аналіз).

Для розрахунку індексів необхідно побудувати молекулярний граф сполуки, матрицю суміжності A і матрицю відстаней D . Обидві матриці мають розмірність $N \times N$, де N – кількість атомів карбону в молекулі. Матриця суміжності складається з 0 і 1, причому $A_{ij} = 1$ якщо атом i напряму зв'язаний хімічним зв'язком з атомом j . Елементи D_{ij} – цілі числа, які можуть приймати значення від 0 до $N - 1$ (у разі лінійної молекули, при наявності ізомерів максимальне значення D_{ij} менше $N - 1$). Вони показують кількість хімічних зв'язків, розташованих між атомами i та j .

Далі необхідно обчислити ступені вершин $v_i = \sum_j A_{ij}$ відповідного графа.

Набір індексів обчислюється за формулами:

- індекс Рандіча $\chi^{(1)} = \sum_{(i,j)} (v_i v_j)^{-1/2} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{A_{ij}}{\sqrt{v_j} \sqrt{v_i}}$;

- індекс $M_1(G) = \sum_i v_i^2$;

- індекс $M_2(G) = \sum_{(i,j)} (v_i v_j)$;

- індекс $IC_1 = -\sum_{k=1}^K \frac{m}{N} \log\left(\frac{m}{N}\right)$, де K – кількість сортів атомів, m – кількість атомів даного сорту;

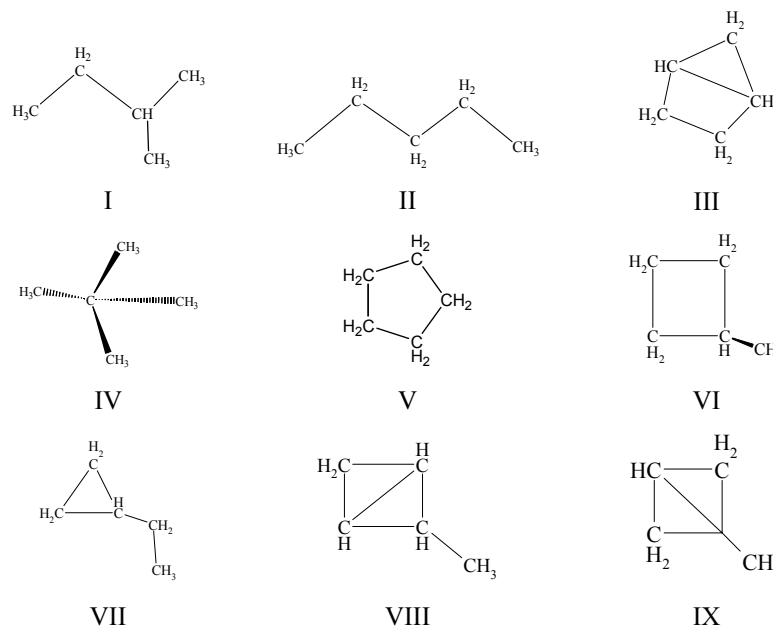
- індекс Вінера $W = \frac{1}{2} \sum_{i,j} D_{ij}$.

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. Для дев'яти вуглеводнів, наведених нижче, побудуйте таблицю індексів.

| Вуглеводень | $\chi^{(1)}$ | $M_1(G)$ | $M_2(G)$ | W | IC_1 |
|-------------|--------------|----------|----------|-----|--------|
| I | | | | | |
| II | | | | | |
| ... | | | | | |
| IX | | | | | |

Розрахуйте коефіцієнти кореляції між індексами. З'ясуйте, які з наведених індексів найбільше корелюють між собою.



IX. Знаходження залежності «структура – властивість»

Вказівки до розв'язання задач

Задачі цього розділу розв'язуються з використанням алгоритму розрахунку топологічних індексів молекул та вбудованого в програму MICROSOFT EXCEL пакету аналізу.

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. Обчисліть функцію, яка описує залежність швидкості бромовання метилбензолів ($\lg v$) від кількості (n) та положення метильних груп (наприклад, $\lg v = a_0 + a_1n + a_2IC_1$, $\lg v = a_0 + a_1n + a_2\chi_1 + a_3IC_1$, $\lg v = a_0 + a_1n + a_2M_2 + a_3IC_1$). На підставі знайдених статистичних параметрів побудованих регресійних моделей зробіть висновок, яка з функцій найкраще описує експериментальні дані. Експериментальні дані наведені в табл. IX.1.

Табл. IX.1

| Похідні бензолу | $\lg v$ |
|--------------------------|---------|
| бензол | 0 |
| толуол | 2.78 |
| 1,4-діметилбензол | 3.39 |
| 1,2-діметилбензол | 3.72 |
| 1,3-діметилбензол | 5.71 |
| 1,2,4-триметилбензол | 6.18 |
| 1,2,3-триметилбензол | 6.22 |
| 1,2,3,4-тетраметилбензол | 7.04 |
| 1,3,5-триметилбензол | 8.28 |
| 1,2,3,5-тетраметилбензол | 8.62 |
| пентаметилбензол | 8.91 |

Табл. IX.2

| Алкільна група | Відносна швидкість реакції |
|----------------|----------------------------|
| метил | 30 |
| етил | 1 |
| н-пропіл | 0.4 |
| н-бутил | 0.4 |
| ізопропіл | 0.025 |
| ізобутил | 0.03 |
| трет-бутил | 0.005 |
| неопентил | 0.00001 |

Табл. IX.3

| № | Сполука | Розчинність (у мольних частках), -lg X |
|----|-----------------|---|
| 1 | бутанол-1 | 1.750 |
| 2 | 2-метилпропанол | 1.743 |
| 3 | бутанол-2 | 1.724 |
| 4 | 3-метилбутанол | 2.254 |
| 5 | 2-метилбутанол | 2.207 |
| 6 | пентанол-2 | 2.025 |
| 7 | пентанол-3 | 1.961 |
| 8 | гексанол-1 | 2.957 |
| 9 | гексанол-2 | 2.961 |
| 10 | гексанол-3 | 2.542 |

2. Запропонуйте функцію для апроксимації відносної швидкості нуклеофільного заміщення хлорпохідних насичених вуглеводнів від структури молекули. Експериментальні дані наведені в табл. IX.2.

3. Для ряду насичених спиртів з табл. IX.3 побудуйте функцію залежності розчинності $-\lg X$ від структурних параметрів. Оцініть якість апроксимації. Розрахуйте розчинність 3-метилбутанола-2 та пентанола і порівняйте її з експериментальними значеннями ($-\lg X$ дорівнює 1.926 та 2.332 відповідно).

4. Енергія дисоціації хімічного зв'язку R-X залежить від структури вуглеводневого радикала й замісника. Побудуйте емпіричну функцію для опису залежності енергії дисоціації від параметрів X і R, виходячи з даних табл. IX.4.

Табл. IX.4

| R | H | I |
|---|-----|-----|
| CH ₃ - | 427 | 226 |
| CH ₃ CH ₂ - | 410 | 218 |
| CH ₃ CH ₂ CH ₂ - | 398 | 209 |
| (CH ₃) ₂ CH- | 373 | 197 |
| (CH ₃) ₃ C- | 230 | 188 |
| (CH ₃) ₃ CCH ₂ - | 210 | 151 |
| CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃ CH ₂)- | 197 | 163 |
| CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)- | 150 | 230 |
| CH ₃ (CH ₂) ₅ - | 161 | 239 |

5. Похідні барбітурової кислоти володіють снодійним ефектом різної тривалості (табл. IX.5). Обчисліть функцію, яка описує тривалість дії барбітуратів залежно від параметрів замісника R₂ (наприклад, $t = a_0 + a_1N + a_2\chi^{(1)}$, $t = a_0 + a_1N + a_2IC_1$, $t = a_0 + a_1N + a_2M_1$, $t = a_0 + a_1N + a_2M_2$).

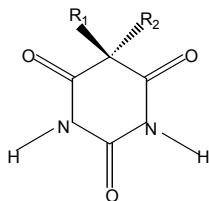


Табл. IX.5

| R ₁ = CH ₃ CH ₂ - | | | |
|--|----------------------------------|---|----------------------|
| № | R ₂ | Структура R ₂ | Тривалість дії (хв.) |
| 1 | C ₂ H ₅ - | CH ₃ CH ₂ - | 1400 |
| 2 | C ₃ H ₇ - | CH ₃ CH ₂ CH ₂ - | 1140 |
| 3 | C ₃ H ₇ - | CH ₃ CH(CH ₃)- | 1520 |
| 4 | C ₄ H ₉ - | CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ - | 450 |
| 5 | C ₆ H ₁₃ - | CH ₃ (CH ₂) ₅ - | 45 |
| 6 | C ₆ H ₁₃ - | CH ₃ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ - | 60 |
| 7 | C ₆ H ₁₃ - | CH ₃ (CH ₂) ₃ CH(CH ₃)- | 90 |
| 8 | C ₆ H ₁₃ - | CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃ CH ₂)CH ₂ - | 300 |
| 9 | C ₇ H ₁₅ - | CH ₃ (CH ₂) ₆ - | 120 |
| 10 | C ₇ H ₁₅ - | (CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ - | 54 |
| 11 | C ₇ H ₁₅ - | (CH ₃) ₂ CH(CH ₂) ₂ CH(CH ₃)- | 50 |
| 12 | C ₇ H ₁₅ - | CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)- | 74 |

6. Логарифм константи розподілу речовини між двома фазами, що не змішуються (октанол – вода), $\lg P$, $P = \frac{C_{ocanol}}{C_{water}}$ є важливою фармакологічною характеристикою. Побудуйте регресійну модель виду $\lg P = a_0 + a_1N + a_2IC_1$ (експериментальні дані наведені в табл. IX.6) для опису цих величин у спиртах.

Табл. IX.6

| № | Структура | $\lg P$ |
|----|--------------------|---------|
| 1 | метанол | -0.77 |
| 2 | етанол | -0.31 |
| 3 | 2-пропанол | 0.05 |
| 4 | 1-пропанол | 0.25 |
| 5 | 2-метил-2-пропанол | 0.35 |
| 6 | 2-бутанол | 0.61 |
| 7 | 2-метил-1-пропанол | 0.76 |
| 8 | 1-бутанол | 0.88 |
| 9 | 1-пентанол | 1.56 |
| 10 | 1-гексанол | 2.03 |
| 11 | 1-гептанол | 2.72 |
| 12 | 1-октанол | 2.97 |

7. Побудуйте функцію, яка описує температуру кипіння алканів (табл. IX.7). Як незалежні змінні можна вибрати число атомів вуглецю (N), IC_1 , $\chi^{(1)}$, M_1 , M_2 .

Табл. IX.7

| № | Вуглеводень | T , °C |
|---|-------------------|----------|
| 1 | етан | -88.63 |
| 2 | пропан | -42.07 |
| 3 | н-бутан | -0.5 |
| 4 | 2-метилпропан | -11.73 |
| 5 | н-пентан | 36.074 |
| 6 | 2-метилбутан | 27.852 |
| 7 | 2,2-диметилпропан | 9.503 |

Табл. IX.7. Продовження

| | | |
|----|----------------------|---------|
| 8 | н-гексан | 68.74 |
| 9 | 2-метилпентан | 60.271 |
| 10 | 3-метилпентан | 63.282 |
| 11 | 2,2-диметилбутан | 49.741 |
| 12 | 2,3-диметилбутан | 57.988 |
| 13 | н-гептан | 98.427 |
| 14 | 2-метилгексан | 90.052 |
| 15 | 3-метилгексан | 91.85 |
| 16 | 3-етилпентан | 93.475 |
| 17 | 2,2-диметилпентан | 79.197 |
| 18 | 2,3-диметилпентан | 89.784 |
| 19 | 2,4-диметилпентан | 80.5 |
| 20 | 3,3-диметилпентан | 86.064 |
| 21 | 2,2,3-триметилбутан | 80.882 |
| 22 | н-октан | 125.665 |
| 23 | 2-метилгептан | 117.647 |
| 24 | 3-метилгептан | 118.925 |
| 25 | 4-метилгексан | 117.709 |
| 26 | 3-етилгексан | 118.534 |
| 27 | 2,2-диметилгексан | 106.84 |
| 28 | 2,3-диметилгексан | 115.607 |
| 29 | 2,4-диметилгексан | 109.429 |
| 30 | 2,5-диметилгексан | 109.103 |
| 31 | 3,3-диметилгексан | 111.969 |
| 32 | 3,4-диметилгексан | 117.725 |
| 33 | 2-метил-3-етилпентан | 115.65 |
| 34 | 3-метил-3-етилпентан | 118.259 |
| 35 | 2,2,3-триметилпентан | 109.841 |
| 36 | 2,2,4-триметилпентан | 99.238 |

Табл. IX.7. Продовження

| | | |
|----|-------------------------|---------|
| 37 | 2,3,3-триметилпентан | 114.76 |
| 38 | 2,3,4-триметилпентан | 113.467 |
| 39 | 2,2,3,3-тетраметилбутан | 106.47 |

X. Адитивні схеми

Вказівки до розв'язання задач

При побудові адитивної схеми для розрахунку властивостей сполук використовують представлення властивості у вигляді $Y = \sum_{i=1}^N n_i \chi_i$, де n_i – кількість атомів або молекулярних фрагментів даного сорту, χ_i – парціальна величина, що визначає внесок атомів або молекулярних фрагментів даного сорту у властивість Y .

Для знаходження парціальних величин необхідно сформувати матрицю A розмірністю $[N \times M]$, де N – кількість молекул у вибірці, M – кількість сортів атомів (для насичених вуглеводнів можна обрати чотири сорти атомів – первинні, вторинні, третинні та четвертинні атоми карбону) та вектор-стовпчик Y , який містить властивості молекул.

Вектор парціальних величин знаходять як $\chi = (A^T A)^{-1} A^T Y$.

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання

1. В табл. X.1 наведені експериментальні дані про ліпофільність насичених вуглеводнів.

Табл. X.1

| | Сполука | Формула | lg P |
|---|-------------------|---|------|
| 1 | етан | $\text{CH}_3\text{-CH}_3$ | 1.81 |
| 2 | пропан | $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ | 2.36 |
| 3 | бутан | $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ | 2.89 |
| 4 | 2-метилпропан | $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CH}_3$ | 2.76 |
| 5 | пентан | C_5H_{12} | 3.39 |
| 6 | 2-метилбутан | $(\text{CH}_3)_2\text{CH-CH}_2\text{-CH}_3$ | 3.77 |
| 7 | 2,2-диметилпропан | $\text{C}(\text{CH}_3)_4$ | 3.11 |

Табл. X.1. Продовження

| | | | |
|----|------------------|-------------------------|------|
| 8 | гексан | C_6H_{14} | 3.90 |
| 9 | 2,2-диметилбутан | $(CH_3)_3C-CH_2-CH_3$ | 3.82 |
| 10 | 2,3-диметилбутан | $(CH_3)_2CH-CH(CH_3)_2$ | 3.42 |
| 11 | гептан | C_7H_{16} | 4.66 |
| 12 | октан | C_8H_{18} | 5.18 |
| 13 | декан | $C_{10}H_{22}$ | 5.01 |
| 14 | н-додекан | $C_{12}H_{26}$ | 6.10 |
| 15 | тетрадекан | $C_{14}H_{30}$ | 7.20 |

Розробіть адитивну схему для передбачення ліпофільності насичених вуглеводнів. Розрахуйте парціальні ліпофільності обраних фрагментів. Який вклад вносять обрані фрагменти у загальну ліпофільність? Оцініть якість апроксимації за величинами дисперсій і кореляцій між експериментальними і теоретичними значеннями ліпофільності. З дев'яти можливих ізомерів гептану оберіть сполуки з максимальним та мінімальним значеннями ліпофільності.

2. В табл. X.2 наведено експериментальні теплоти утворення алканів. Для 80% сполук з таблиці (вибірка має містити сполуки з малими, середніми та великими значеннями теплот утворення) побудуйте адитивну схему, оцініть її якість. Для сполук, що не увійшли у вибірку, розрахуйте теоретичні значення теплот утворення та порівняйте їх з експериментальними.

Табл. X.2

| № | Вуглеводень | $\Delta H_{298,16}^\circ$ (ккал/моль) |
|---|-------------|---------------------------------------|
| 1 | метан | -352.61 |
| 2 | етан | -585.49 |

Табл. X.2. Продовження

| | | |
|----|---------------------|----------|
| 3 | пропан | -820.62 |
| 4 | н-бутан | -1056.15 |
| 5 | 2-метилпропан | -1057.79 |
| 6 | н-пентан | -1291.88 |
| 7 | 2-метилбутан | -1293.80 |
| 8 | 2,2-диметилпропан | -1296.55 |
| 9 | н-гексан | -1527.38 |
| 10 | 2-метилпентан | -1529.08 |
| 11 | 3-метилпентан | -1528.44 |
| 12 | 2,2-диметилбутан | -1531.77 |
| 13 | 2,3-диметилбутан | -1529.91 |
| 14 | н-гептан | -1762.85 |
| 15 | 2-метилгексан | -1764.56 |
| 16 | 3-метилгексан | -1763.92 |
| 17 | 3-етилпентан | -1763.30 |
| 18 | 2,2-диметилпентан | -1767.25 |
| 19 | 2,3-диметилпентан | -1765.58 |
| 20 | 2,4-диметилпентан | -1766.26 |
| 21 | 3,3-диметилпентан | -1766.13 |
| 22 | 2,2,3-триметилбутан | -1766.92 |
| 23 | н-октан | -1998.32 |
| 24 | 2-метилгептан | -2000.00 |
| 25 | 3-метилгептан | -1999.34 |
| 26 | 4-метилгексан | -1999.20 |
| 27 | 3-етилгексан | -1998.90 |
| 28 | 2,2-диметилгексан | -2002.21 |
| 29 | 2,3-диметилгексан | -1999.63 |
| 30 | 2,4-диметилгексан | -2000.94 |

Табл. X.2. Продовження

| | | |
|----|-------------------------|----------|
| 31 | 2,5-диметилгексан | -2001.71 |
| 32 | 3,3-диметилгексан | -2001.11 |
| 33 | 3,4-диметилгексан | -1999.41 |
| 34 | 2-метил-3-етилпентан | -1998.98 |
| 35 | 3-метил-3-етилпентан | -1999.88 |
| 36 | 2,2,3-триметилпентан | -2001.11 |
| 37 | 2,2,4-триметилпентан | -2002.07 |
| 38 | 2,3,3-триметилпентан | -2000.23 |
| 39 | 2,3,4-триметилпентан | -2000.47 |
| 40 | 2,2,3,3-тетраметилбутан | -2002.49 |
| 41 | н-нонан | -2233.78 |
| 42 | н-декан | -2469.25 |
| 43 | н-додекан | -2940.18 |
| 44 | н-гексадекан | -3882.05 |

Контрольна робота № 4

Тема «Регресійний аналіз. Теорія графів»

В таблиці наведено дані, що описують теплоту утворення алканів.

| № | Алкан | $\Delta H_{298,16}^{\circ}$ (ккал/моль) |
|----|----------------------|---|
| 1 | метан | -352.61 |
| 2 | пропан | -820.62 |
| 3 | н-бутан | -1056.15 |
| 4 | н-пентан | -1291.88 |
| 5 | 2-метилбутан | -1293.80 |
| 6 | н-гексан | -1527.38 |
| 7 | 3-метилпентан | -1528.44 |
| 8 | 2,2-диметилбутан | -1531.77 |
| 9 | 2-метилгексан | -1764.56 |
| 10 | 3-етилпентан | -1763.30 |
| 11 | 2,3-диметилпентан | -1765.58 |
| 12 | н-октан | -1998.32 |
| 13 | 2-метилгептан | -2000.00 |
| 14 | 4-метилгексан | -1999.20 |
| 15 | 3-етилгексан | -1998.90 |
| 16 | 2,3-диметилгексан | -1999.63 |
| 17 | 3,3-диметилгексан | -2001.11 |
| 18 | 3-метил-3-етилпентан | -1999.88 |
| 19 | 2,2,4-триметилпентан | -2002.07 |
| 20 | н-декан | -2469.25 |

1. Знайдіть коефіцієнти в рівняннях регресій та запишіть самі рівняння (до навчаючої виборки відберіть 50% молекул, які позначте в таблиці):

а) $\Delta H = a_0 + a_1 N_C + a_2 \chi^{(1)}$
 _____, $r =$ _____, $s =$ _____.

б) $\Delta H = a_0 + a_1 N_C + a_2 M_1$
 _____, $r =$ _____, $s =$ _____.

2. Запишіть рівняння залежності $\Delta H_{\text{теор}}$ від $\Delta H_{\text{експ}}$:

а) _____, $r =$ _____, $s =$ _____.

б) _____, $r =$ _____, $s =$ _____.

3. Для опису цього набору даних слід використовувати рівняння а / б (необхідне підкресліть), тому що

4. Для трьох молекул, що не увійшли до навчаючої вибірки, обчисліть ΔH

Додаток

Нижче наведено основні функції, вбудовані в розглянуті розрахункові пакети, які використовуються для розв'язання задач посібника.

| Опис функції | Запис функції | |
|--|---------------|---------------------------|
| | MatCad | Excel |
| Обчислення e^x | exp(x) | exp(x) |
| Знаходження логарифма | | |
| - десятинного | log(x) | log10(x) |
| - натурального | ln(x) | ln(x) |
| Обчислення x^y | x^y | x^y |
| Обчислення модуля a | a | abs(a) |
| Добуток матриць $A \cdot B$ | A·B | мумнож(A;B) mmult(A;B) |
| Знаходження матриці, оберненої до A | A^{-1} | мобр(A) minverse(A) |
| Знаходження матриці, транспонованої до A | A^T | трансп(A) transpose(A) |
| Знаходження детермінанта матриці A | A | мопред(A) mdeterm(A) |

Рекомендована література

Основна

1. Вступ до інформаційних технологій : методичний посібник для викладачів і студентів / за ред. І. Т. Зарецької, М. В. Владимирової. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2006. – 364 с.
2. Яшин В. И. Численные методы в химии. Аппаратное и программное обеспечение / В. И. Яшин. – Минск : БГУ, 2002. – 95 с.
3. Неділько С. А. Математичні методи в хімії / С. А. Неділько. – Київ : Либідь, 2005. – 256 с.
4. Иванов В. В. Расчетные методы прогноза биологической активности органических соединений / В. В. Иванов, Л. А. Слета. – Х. : ЧП Азамаев В. Р., 2003. – 75 с.
5. Демиденко Е. З. Линейная и нелинейная регрессии / Е. З. Демиденко. – М. : Финансы и статистика, 1981. – 302 с.
6. Степанов Н. Ф. Методы линейной алгебры в физической химии / Н. Ф. Степанов, М. Е. Ерлыкина, Г. Г. Филиппов. – М. : Изд-во МГУ, 1976. – 360 с.
7. Лоусон Ч. Численное решение задач метода наименьших квадратов / Ч. Лоусон, Р. Хенсон. – М. : Наука, 1986. – 230 с.

Допоміжна

1. Кристиан К. Введение в операционную систему UNIX / К. Кристиан. – М. : Финансы и статистика, 1985. – 318 с.
2. Информатика. Базовый курс / под ред. Симонович С.В. и др. – СПб. : Питер, 2001. – 640 с.
3. Таненбаум Э. Архитектура компьютера / Э. Таненбаум. – СПб. : Питер, 2003. – 698 с.
4. Беклемишев Д. В. Дополнительные главы линейной алгебры / Д. В. Беклемишев. – М. : Наука, 1983. – 335 с.
5. Джонсон К. Численные методы в химии / К. Джонсон. – М. : Мир, 1983. – 503 с.
6. Шараф М. А. Хемометрика / М. А. Шараф, Д. П. Иллмен, Б. Р. Ковальски. – Л. : Химия, 1989. – 269 с.
7. Мудров В. И. Метод наименьших модулей / В. И. Мудров, В. Л. Кушко. – М. : Знание, 1971. – 60 с.
8. Мудров В. И. Методы обработки измерений / В. И. Мудров, В. Л. Кушко. – М. : Советское радио, 1976. – 190 с.
9. Тихонов А. Н. Методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. – М. : Наука, 1986. – 287.
10. Морозов В. А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач / В. А. Морозов. – М. : Наука, 1987. – 239 с.
11. Доерфель К. Статистика в аналитической химии / К. Доерфель. – М. : Мир, 1969. – 248 с.