

УДК 519.6:544(075.5)

ББК 22.19:24.5я7

Ч-67

*Печатается по решению кафедры физической и коллоидной химии  
имени профессора В. А. Когана Южного федерального университета  
(протокол № 6 от 12 января 2023 г.)*

**Рецензенты:**

доктор технических наук, заведующая кафедрой химии Донского  
государственного технического университета, профессор *В. Э. Бурлакова*;

доктор химических наук, заведующий кафедрой аналитической химии  
Южного федерального университета, профессор *И. Е. Уфлянд*

Ч-67 **Численные методы в физико-химическом эксперименте.**

**Программирование в MS Excel** : учебное пособие : в 2 ч. Часть 1 /  
И. Н. Щербаков, С. Н. Любченко, Ю. П. Туполова, С. А. Бородкин ;  
Южный федеральный университет. – Ростов-на-Дону ; Таганрог :  
Издательство Южного федерального университета, 2024. – 136 с.

ISBN 978-5-9275-4518-6

ISBN 978-5-9275-4519-3 (Ч. 1)

В учебном пособии рассматриваются основные вычислительные методы, применяемые в обработке, представлении экспериментальных данных и для прогнозирования результатов исследований. Особое внимание уделяется реализации программирования в среде MS Excel. Теоретический материал содержит контрольные вопросы, позволяющие оценить уровень усвоения по каждому разделу.

Предназначено для студентов специалитета, обучающихся по направлению 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия». Книга также может быть полезна для студентов и преподавателей естественных факультетов вузов, использующих численные методы в своей работе.

УДК 519.6:544(075.5)

ББК 22.19:24.5я7

ISBN 978-5-9275-4519-3 (Ч. 1)

ISBN 978-5-9275-4518-6

© Южный федеральный университет, 2024

© Щербаков И. Н., Любченко С. Н.,  
Туполова Ю. П., Бородкин С. А., 2024

© Оформление. Макет. Издательство  
Южного федерального университета, 2024

## ОГЛАВЛЕНИЕ

СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЕНИЙ .....	6
ПРЕДИСЛОВИЕ.....	7
<b>ГЛАВА 1. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ</b> . 9	
Контрольные вопросы.....	18
<b>ГЛАВА 2. ПОГРЕШНОСТИ РЕЗУЛЬТАТА ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ</b> .. 19	
2.1. Источники погрешности.....	19
2.2. Погрешность действий .....	20
2.3. Правила записи приближенных чисел .....	22
2.3.1. Значащие цифры.....	23
2.3.2. Неявная запись приближенных чисел.....	26
2.3.3. Явная запись приближенных чисел.....	28
2.4. Погрешность при проведении расчетов.....	30
2.4.1. Функции одного аргумента .....	31
2.4.2. Функции нескольких аргументов .....	32
2.5. Итерационные алгоритмы .....	38
2.5.1. Термины и характеристики процессов .....	39
2.5.2. Порядок сходимости итерационных процессов.....	41
2.5.3. Критерии сходимости .....	41
2.5.4. Блок-схемы алгоритмов.....	42
Контрольные вопросы.....	44
<b>ГЛАВА 3. КОРНИ УРАВНЕНИЙ</b> .....	45
3.1. Решение уравнений одной переменной .....	45
3.1.1. Процедура локализации корней.....	45
3.1.2. Критерии сходимости при решении уравнений.....	48
3.2. Метод простой итерации .....	48
3.3. Метод Ньютона – Рафсона .....	51
3.4. Метод дихотомии .....	54
3.5. Метод хорд.....	58
3.6. Оценка скорости сходимости методов.....	60

3.7. Химические задачи, сводимые к решению уравнений.....	62
3.7.1. Равновесие в произвольной химической реакции .....	62
3.7.2. Моделирование состава раствора слабой трехосновной кислоты.....	64
3.7.3. Моделирование состава буферного раствора слабой двухосновной кислоты.....	65
3.7.4. Моделирование состава буферного раствора слабой <i>n</i> -основной кислоты и соответствующих солей.....	68
Контрольные вопросы.....	70
<b>ГЛАВА 4. СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ .....</b>	<b>71</b>
4.1. Обусловленность линейных алгебраических систем .....	76
4.2. Прямые (точные) методы.....	80
4.2.1. Метод Крамера.....	80
4.2.2. Метод обратной матрицы .....	81
4.3. Приближенные (итерационные) методы.....	83
4.3.1. Метод минимальных невязок.....	83
4.4. Задачи, сводимые к системам линейных уравнений .....	85
4.4.1. Спектрофотометрическое определение состава смеси .....	85
4.4.2. Масс-спектрометрическое определение состава смеси .....	87
4.4.3. Интерполяция таблично заданной функции.....	88
4.4.4. Интерполирование функций полиномами.....	92
Контрольные вопросы.....	94
<b>ГЛАВА 5. СИСТЕМЫ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ .....</b>	<b>95</b>
5.1. Метод простой итерации .....	96
5.2. Метод Зейделя.....	97
5.3. Метод Ньютона.....	98
5.4. Задачи, сводящиеся к решению системы нелинейных уравнений	103
Контрольные вопросы.....	105
<b>ГЛАВА 6. РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ .....</b>	<b>106</b>
6.1. Метод наименьших квадратов .....	108
6.2. Линейная модель парной регрессии .....	110

6.3. Обобщенная линейная регрессия.....	118
6.4. Регрессионные модели, сводимые к линейным .....	121
Контрольные вопросы.....	127
ГЛОССАРИЙ .....	128
ЛИТЕРАТУРА .....	132
ПРИЛОЖЕНИЕ .....	134