

# РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ НА ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНЕГО РАЗМЕРА ЧАСТИЦ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА В MSEXCEL И VBA

Душкевич О.Г.

Белорусский государственный университет, г. Минск

Курс «Основы информационных технологий» химического факультета БГУ завершается постановкой ряда прикладных задач [1, 2], решая которые, студенты закрепляют свои знания и умения, полученные на предыдущих занятиях. В качестве программных средств для их решения выбирается табличный процессор MSExcel и встроенная система программирования VBA.

Одним из наиболее интересных примеров такого рода является задача на определение среднего размера частиц коллоидного раствора.

*Постановка задачи.* В результате химического синтеза образуется коллоидный раствор, причем по данным электронной микроскопии форма полученных частиц близка к сферической, а их распределение по размерам подчиняется логарифмическому нормальному закону:

$$f(r) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln(r)-m)^2}{2\sigma^2}\right),$$

где  $r$  – радиус частиц,  $\sigma$  – величина дисперсии,  $m$  – параметр.

*Решение.* Средний размер частиц может быть найден, как отношение двух несобственных интегралов:

$$\bar{M} = \frac{\int_0^{+\infty} rf(r)dr}{\int_0^{+\infty} f(r)dr} \quad (1)$$

Для нахождения величины несобственного интеграла на листе Excel строится расчетная схема следующего вида:

Ячейки E2, E3 содержат начальные данные задачи. В ячейке E4 набираем формулу подынтегральной функции. В строках 6 и 7 строим две последовательности чисел, стремящихся к нижнему (0) и верхнему ( $+\infty$ ) пределам интегрирования.

В строке 9 последовательно находим значения определенных интегралов с пределами интегрирования из соответствующих ячеек строк 6 и 7. Процесс вычисления заканчивается, когда относительная разность двух последних интегралов (H9, I9) становится меньше 0,000001 (I11). В результате величина последнего определенного интеграла (I9) помещается в ячейку E12, как приближенное значение несобственного интеграла.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	<b>ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНЕГО РАЗМЕРА ЧАСТИЦ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА</b>										
2	Дисперсия				0,5						
3	Параметр				1,7						
4	Распределение частиц по размерам				4,4E-38			Найти интеграл			
5	Пределы интегрирования										
6	1	0,5	0,25	0,125	0,0625	0,03125	0,015625	0,0078125	0,0039063	0,0019531	
7	1	2	4	8	16	32	64	128	256	512	
8	Значения определенных интегралов										
9		0,037051	0,805025	3,734955	5,892858	6,195221	6,202736	6,202767	6,202767		
10	Относительная разность										
11			20,72735	3,639552	0,577759	0,05131	0,001213	4,98E-06	3,23E-09		
12	Значение несобственного интеграла				6,202767						
13											
14	Интеграл в числителе				49,40223						
15	Интеграл в знаменателе				6,202767						
16	Средний размер частиц				7,9645						

Нахождение интегралов и их относительных разностей, контроль за завершением вычислений и вывод результата в ячейку E12 выполняет макрос «Задача № 4». Для его запуска на листе Excel строится командная кнопка «Найти интеграл» (H3:I4).

```
Sub ЗадачаN4()
```

```
Range("9:9").Clear: Range("11:11").Clear: Cells(12, 5) = ""
```

```
For i = 2 To 100
```

```
  If Cells(6, i) = "" Or Cells(7, i) = "" Then _
```

```
    Cells(12, 5) = Cells(9, i - 1): Exit For
```

```
    t = Integral(Cells(6, i), Cells(6, i - 1)) + Integral(Cells(7, i - 1), Cells(7,
```

```
    i))
```

```
    Cells(9, i) = Cells(9, i - 1) + t
```

```
    If Cells(9, i - 1) <> 0 Then Cells(11, i) = t / Cells(9, i - 1)
```

```
    If Cells(11, i) > 0 And Cells(11, i) < 0.000001 Then _
```

```
      Cells(12, 5) = Cells(9, i): Exit For
```

```
  Next i
```

```
EndSub
```

Для вычисления определенных интегралов используется подпрограмма-функция «Integral», реализующая метод средних прямоугольников.

```
Function Integral(ByVal Lpoint, ByVal Rpoint)
```

```
  h = (Rpoint - Lpoint) / 100 : Cells(4, 6).Value = Lpoint + h / 2 : s = 0
```

```
  For i = 1 To 100
```

```
    s = s + Cells(4, 5).Value : Cells(4, 6).Value = Cells(4, 6).Value + h
```

```
  Next i
```

```
Integral = s * h
```

```
End Function
```

Найдя значения несобственных интегралов из формулы (1), помещаем их в ячейки E14, E15 и вычисляем отношение (E16), являющееся решением задачи.

## Литература

1. Скатецкий, В. Г. Математические методы в химии / В.Г. Скатецкий, Д.В. Свиридов, В.И. Яшкин. – Минск: ТетраСистемс, 2006. – 368 с.

2. Эберт, К. Компьютеры: применение в химии / К. Эберт, Х. Эдде-рер. – М: Мир, 1988. – 416 с.