

**Московский Государственный университет
имени М.В.Ломоносова
Х и м и ч е с к и й ф а к у л ь т е т**

Калугина О.Б., Люцарев В.С., Дружинин С.И.

З А Д А Ч И

**ОСНОВЫ ПРОГРАММИРОВАНИЯ
И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ**

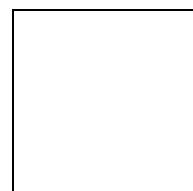


М е т о д и ч е с к а я р а з р а б о т к а

Москва - 1996

В данную методическую разработку включены задания по основным темам, изучаемым в рамках дисциплины “Программирование и решение задач на ЭВМ” студентами 1-го курса общего потока Химического факультета МГУ. Решение рассматриваемых задач предполагает изучение основ программирования на алгоритмическом языке Pascal и формирование общего представления о возможностях применения численных методов в химии.

Задания предназначены для выполнения на персональном компьютере в среде Borland Pascal for Windows.



Тема 1

Константы и переменные. Арифметические выражения. Использование стандартных математических функций. Операторы присвоения, ввода и вывода значений.

Вариант 1.

Вычислить средний свободный пробег молекулы в газе на основе данных температуры, давления и диаметра молекулы по формуле:

$$l = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \sigma^2 N \pi}$$

Здесь

- l - средний свободный пробег молекулы;
- σ - диаметр молекулы;
- N - число частиц в единице объема.

Молекулы рассматриваются как жесткие сферические частицы с диаметром σ . Число частиц в единице объема может быть вычислено из уравнения состояния идеального газа:

$$N = \frac{N_A \cdot P}{RT}$$

Числовые значения констант, необходимых в расчетах:

$$R = 8.2056 \cdot 10^{-5} \text{ м}^3 \cdot \text{атм} / \text{моль} / \text{К} \quad N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$

Пример выполнения расчетов по программе:

Давление (атм.), температура (К), диаметр молекулы (м)	
1 293 3.64e-10	<input type="button" value="Enter"/>
При давлении	1.00 атм
температуре	293.00 К
диаметре молекулы	3.640E-10 м
средний свободный пробег молекулы = 6.782184E-08 м	

Вариант 2.

Распределение скоростей молекул в газе, играющее важную роль в химической кинетике и термодинамике, задается формулой (распределением Максвелла):

$$P = 4\pi u^2 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mu^2}{2kT}}$$

Здесь

- k - константа Больцмана;
- T - температура;
- m - масса молекулы;
- u - скорость молекулы;
- P - плотность распределения частиц (Pdu - доля частиц, имеющих скорость в интервале от u до $u+du$)


Все вычисления в программе должны производиться в одной и той же системе единиц (*СИ* или *СГС*). Поэтому введенное значение массы необходимо перед подстановкой в формулу перевести соответственно в *кг* или *г*.

Числовые значения констант, необходимых в расчетах:

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$

$$k = 1.380662 \cdot 10^{-23} \text{ Дж / К}$$

Пример выполнения расчетов по программе:

Температура (К) , мол.вес (г/моль) , скорость молекулы (м/с)	
300 28 200	
При температуре	300.00 К
молекулярном весе	28.00 г/моль
скорости молекулы	200.00 м/с
плотность распределения частиц = 9.589786E-04 моль / (м/с)	

Вариант 3.

Закон Планка для объемной плотности энергии излучения абсолютно черного тела – наиболее фундаментальный из законов излучения. Плотность распределения энергии с частотой ν определяется уравнением:

$$P = \frac{8\pi\eta}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{e^{kT} - 1}$$

Здесь

η - постоянная Планка;

k - постоянная Больцмана;

c - скорость света;

T - температура;

ν - частота;

$Pd\nu$ - энергия на единицу объема в интервале частот от ν до $d\nu$.


Числовые значения констант, необходимых в расчетах:

$$\eta = 6.626176 \cdot 10^{-34} \text{ Дж/с}$$

$$c = 2.99792558 \cdot 10^8 \text{ м/с}$$

$$k = 1.380662 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$$

Пример выполнения расчетов по программе:

Частота (1/с), температура (К)	
1E13 1000	
При температуре	1000.00 К
частоте	1.0E+13 1/с
плотность энергии излучения = 1.003437E-24 Дж*с/см3	

Вариант 4.

Эта задача связана с вычислением диффузионных потенциалов - потенциалов, возникающих на границе двух растворов с разными концентрациями электролита. Необходимо составить программу для вычисления потенциала между двумя водными растворами с разной концентрацией электролитов при комнатной температуре.

$$\Delta E_{diff} [Volt] = \frac{u^- - u^+}{u^+ + u^-} \cdot \frac{0.058}{n_e} \cdot \ln \frac{c_1}{c_2}$$

Здесь

n_e - электрохимическая валентность;

0.058 - результат выражения $\frac{RT}{F}$, где F - постоянная Фарадея;

u^- - подвижность анионов;

u^+ - подвижность катионов;


c_1 - концентрация 1-го раствора;

c_2 - концентрация 2-го раствора;

Вместо подвижностей программа должна запрашивать безразмерную величину – число переноса:

$$H^- = \frac{u^-}{u^+ + u^-}$$

Пример выполнения расчетов по программе:

Число переноса, электрохимическая валентность, концентрация 1, концентрация 2			
0.4	2	0.1	0.01
			
При числе переноса	0.4		
электрохимической валентности	2		
концентрации 1	0.1		
концентрации 2	0.01		
диффузионный потенциал =	-1.335499E-02 Вольт		

Вариант 5.

Скорость истечения идеального газа (u) зависит от внутреннего (p_0) и внешнего (p) давления, молекулярной массы (M) газа, абсолютной температуры (T) внутри сосуда и, в связи с адиабатическим расширением, от отношения теплоемкостей $k = c_p/c_v$.


Формула такова:

$$u = \sqrt{\frac{2RT}{M} \frac{k}{k-1} \left(1 - \frac{p}{p_0}\right)^{\frac{k-1}{k}}}$$

Все вычисления в программе должны производиться в одной и той же системе единиц (СИ или СГС). Поэтому введенное значение массы необходимо перед подстановкой в формулу перевести соответственно в кг/моль или в г/моль.

Числовое значение константы: $R = 8.31441 \text{ Дж} / \text{К} / \text{моль}$

Пример выполнения расчетов по программе:

Температура (К), молекулярный вес (г/моль), c_p/c_v , внешнее давление (атм.), внутреннее давление (атм.)					
293	28.96	1.402	1.2	2.4	
При температуре	293 К				
молекулярном весе	28.96 г/моль				
c_p/c_v	1.402				
внешнем давлении	1.2 атм.				
внутреннем давлении	2.4 атм.				
Скорость истечения газа = 693.5353 м/с					

Вариант 6.

Число столкновений молекул A и B (молекулярной массой m_A и m_B соответственно) в 1 м^3 газа за 1 с рассчитывается по формуле:

$$z = z_0 n_A n_B, \quad \text{где} \quad z_0 = (r_A + r_B)^2 \sqrt{8\pi RT \left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B} \right)}$$

Здесь

- n_A и n_B - число молекул A и B в единице объема газа
- r_A и r_B - радиусы молекул A и B соответственно;
- m_A и m_B - молекулярные массы A и B соответственно;
- T - температура;

Число частиц в единице объема может быть вычислено из уравнения состояния идеального газа:

$$n_i = \frac{N_A \cdot p_i}{RT},$$

где p_i - соответствующее парциальное давление. Рассчитайте z_0 и z для столкновения H_2 с CH_4 при заданных температуре и парциальных давлениях.

Все вычисления должны быть выполнены в системе СИ.

Числовые значения, необходимые в расчетах:

$$R = 8.314 \text{ Дж} / \text{моль} / \text{К}$$

$$1 \text{ Э} = 10^{-10} \text{ м}$$

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$

$$1 \text{ атм} = 101325 \text{ Па}$$

Пример выполнения расчетов по программе:

Температура (К)

273



Расчеты при температуре 273.00 К

Ввод парциального давления (атм),
диаметра молекулы (А), молекулярной массы (г/моль)
для первого вещества:

0.75 2.73 2



для второго вещества:

0.25 4.158 16



парциальное давление (атм)	0.750	0.250
диаметр молекулы (А)	2.730	4.158
молекулярная масса (г/моль)	2.000	16.000

$z_0 = 6.71883247E-16$ м³/с
число столкновений $z = 9.10467562E+34$ 1/м³/с

Тема 2


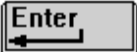
Организация циклов в программах. Оператор For ... do ... Составной оператор.

Задание:

Модифицировать программу по теме 1 так, чтобы в результате расчетов по ней была получена таблица значений в заданном числовом интервале.

Примеры выполнения расчетов по программе:

Вариант 1.

```
Давление (атм.), диаметр молекулы (м) ?
1      3.64e-10      
Температура (К): нач., кон. значения и шаг ?
293   353   10      
Давление                1.00 атм
Диаметр молекулы        3.640E-10 м
Температура (К)         Средний свободный пробег молекулы (м)
293.00                   6.782184E-08
303.00                   7.013658E-08
. . .
323.00                   7.476606E-08
. . .
353.00                   8.171027E-08
```

Вариант 2.

Температура (К), Мол.вес (г/моль)?

300 28

скорость молекулы(м/с): нач., кон. значения и шаг?

150 600 50

Температура 300.00 К
Молекулярный вес 28.00 г/моль

Скорость молекулы м/с Плотность распределения моль/(м/с)

150.00	5.950994E-04
200.00	9.589786E-04
250.00	1.320635E-03
.
400.00	1.955945E-03
.
600.00	1.432249E-03

Вариант 3.

Температура (К)

1000

Частота (1/с): нач., кон. значения и шаг ?

1e13 1e14 5e12

Температура 1000 (К)

Частота (1/с) Плотность энергии излучения (Дж*с/см³)

1.00E+13	1.003437E-24
.
6.00E+13	7.943587E-24
.
9.50E+13	5.606589E-24
1.00E+14	5.132557E-24

Вариант 4.

Число переноса, электрохимическая валентность

0.4 2



Концентрация 1 (начальное, конечное значения и шаг)

0.05 0.15 0.01



Концентрация 2

0.01



Число переноса 0.4

Электрохимическая валентность 2

Концентрация 2 0.01

Концентрация 1 Диффузионный потенциал

0.05	-9.334740E-03
0.06	-1.039220E-02
0.07	-1.128628E-02
.
0.11	-1.390779E-02
.
0.14	-1.530653E-02
0.15	-1.570669E-02

Вариант 5.

Температура (К), молекулярный вес (г/моль), Ср/Сv

293 28.96 1.402



Внутреннее давление (атм.)

2.4



Внешнее давление (атм.) (нач., кон. значения и шаг)

1.0 2.0 0.1



Температура	293.0 К
Молекулярный вес	28.96 г/моль
Ср/Сv	1.402
Внутреннее давление	2.4 атм.

Внешнее давление	Скорость истечения газа (м/с)
------------------	-------------------------------

1.0	709.0331
1.1	701.5398
1.2	693.5353
.
1.7	641.9613
.
1.9	611.7289
2.0	592.4686

Вариант 6.

Температура (К): нач., кон. значения и шаг ?

273 353 10



Ввод парциального давления (атм),
диаметра молекулы (А), молекулярной массы (г/моль):

для первого вещества:

0.75 2.73 2



для второго вещества:

0.25 4.158 16



Парциальное давление (атм)	0.750	0.250
Диаметр молекулы (А)	2.730	4.158
Молекулярная масса (г/моль)	2.000	16.000

Температура (К)	z0 (м3/с)	z (1/м3/с)
273.00	6.71883247E-16	9.10467562E+34
283.00	6.84078131E-16	8.62638416E+34
· · ·	· · ·	· · ·
313.00	7.19423562E-16	7.41637944E+34
· · ·	· · ·	· · ·
353.00	7.64011405E-16	6.19222017E+34

Тема 3

Операторы повторений

Repeat ... until ...

While ... do ...

Правила организации вложенных циклов.
Суммирование ряда с заданной точностью.

Задание 1.

Согласно квантовой теории, энергия гармонического осциллятора, колеблющегося с частотой ν , принимает только дискретные значения, равные

$$E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \cdot \eta\omega, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots, K$$

где

- η - постоянная Планка;
- ω - волновое число, или частота колебания;
- ν - колебательное квантовое число.

Статистическая сумма по состояниям с такими энергиями определяется выражением

$$F_\nu = \sum_{\nu=0}^{\infty} e^{-\left[\nu + \frac{1}{2} \right] \frac{\eta\omega}{kT}}$$

где

- k - постоянная Больцмана;
- T - абсолютная температура;

Заселенность квантового уровня с колебательным числом ν

$$N_\nu = \frac{e^{-\left[\nu + \frac{1}{2}\right] \frac{\eta\omega}{kT}}}{F_\nu},$$

а средняя энергия гармонического колебания

$$\frac{1}{\eta} \langle E_\nu \rangle = \frac{1}{\eta} \sum_{\nu=0}^{\infty} E_\nu N_\nu = \frac{\sum_{\nu=0}^{\infty} \left[\nu + \frac{1}{2}\right] \omega \cdot e^{-\left[\nu + \frac{1}{2}\right] \frac{\eta\omega}{kT}}}{\sum_{\nu=0}^{\infty} e^{-\left[\nu + \frac{1}{2}\right] \frac{\eta\omega}{kT}}}$$

Рассчитайте с точностью $\varepsilon = 10^{-6}$ при $\omega = 10, 100$ и 1000 см^{-1} :

- 1) статистическую сумму по состояниям гармонического осциллятора;
- 2) среднюю энергию гармонического осциллятора;

Расчеты оформить в виде таблицы значений при температуре от 100 до 2000 К с шагом 100.

Числовые значения констант, необходимых в расчетах:

$$\eta = 1.986 \cdot 10^{-16} \text{ эрг} \cdot \text{см} \quad k = 1.381 \cdot 10^{-16} \text{ эрг} \cdot \text{град}$$

Примеры выполнения расчетов по программе:

Частота колебания: 10 (см-1)		
Температура	Сумма по состояниям	Средняя энергия
100	6.9477	6.96557083E+01
.
400	27.8132	2.78173238E+02
500	34.7671	3.47703034E+02
.
1000	69.5361	6.95370117E+02
1100	76.4898	7.64904816E+02
.
1700	118.2120	1.18211570E+03
1800	125.1657	1.25165109E+03
1900	132.1194	1.32118653E+03
2000	139.0731	1.39072200E+03

Частота колебания: 100 (см-1)		
Температура	Сумма по состояниям	Средняя энергия
100	0.6389	8.11269483E+01
.
400	2.7665	2.81133438E+02
500	3.4649	3.50073591E+02
.
1000	6.9477	6.96557083E+02
1100	7.6436	7.65984482E+02
.
1700	11.8177	1.18281426E+03
1800	12.5133	1.25231138E+03
1900	13.2088	1.32181261E+03
2000	13.9043	1.39131616E+03

Частота колебания: 1000 (1/см)		
Температура	Сумма по состояниям	Средняя энергия
100	0.0008	5.00000568E+02
.
400	0.1704	5.28229575E+02
500	0.2516	5.59714514E+02
.
1000	0.6389	8.11269483E+02
1100	0.7130	8.70866233E+02
.
1700	1.1476	1.25178305E+03
1800	1.2190	1.31753188E+03
1900	1.2902	1.38366751E+03
2000	1.3612	1.45013407E+03

Задание 2.

Имеется стержень длиной 3 из материала с теплопроводностью $k = 100$. На его концах поддерживается температура $T(0) = -5^\circ\text{C}$, $T(3) = +25^\circ\text{C}$:

$$t < 0 \quad -5^\circ\text{C} \quad \boxed{\hspace{4cm}} \quad +25^\circ\text{C}$$

При этом температура в точке $L(0 \leq L \leq 3)$ может быть вычислена по формуле $T(L) = 10 \cdot L - 5$. В момент времени $t = 0$ температуру повысили на 15°C на обоих концах:

$$t \geq 0 \quad +10^\circ\text{C} \quad \boxed{\hspace{4cm}} \quad +40^\circ\text{C}$$

Как будет меняться во времени температура в различных точках стержня? Решение задается формулой:

$$T(L, t) = 10 \cdot L + 10 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{30}{n\pi} e^{\frac{-2n^2\pi^2 t}{9k}} (\cos(n\pi) - 1) \sin\left(\frac{n\pi L}{3}\right)$$

Указания:

1. Написать программу, которая по заданным L, t рассчитывает значение температуры.
2. Модифицировать программу так, чтобы при заданном t печаталось распределение температуры по длине стержня (от 0.2 до 2.8 с шагом 0.2).
3. Добиться печати последовательности таких распределений при различных значениях времени в виде следующей таблицы:

L	t (time)								
	1	2	...	6	7	8	9	10	
0.2	1.760	4.193	...	7.246	7.582	7.855	8.083	8.278	
0.4	-0.317	1.359	...	5.213	5.745	6.193	6.575	6.907	
0.6	1.040	1.508	...	4.310	4.853	5.333	5.761	6.144	
...	
2.4	19.040	19.508	...	22.310	22.853	23.333	23.761	24.144	
2.6	21.683	23.359	...	27.213	27.745	28.193	28.575	28.907	
2.8	27.760	30.193	...	33.246	33.582	33.855	34.083	34.278	

Указание:

При вычислении суммы критерием сходимости является значение экспоненты, так как именно она определяет максимально возможное значение слагаемого. Чтобы убедиться в этом, достаточно распечатать два десятка слагаемых, например, при $L = 1$.

**Численное интегрирование
в физико-химических расчетах.
Организация и использование
Function в программах.**


Задание 1.

Написать программу для нахождения определенного интеграла $\int_{0.5}^{1.5} \frac{1}{x} dx$,

используя различные методы численного интегрирования: прямоугольников (по левым и правым границам элементарных отрезков соответственно), трапеций и парабол. Сравнить полученные значения с аналитическим решением.

Подынтегральную функцию оформить в программе в виде function.

Пример выполнения расчетов по программе:

Число элементарных отрезков?		
100		
метод	полученное значение	погрешность
прямоуг. (лев.гр.)	1.105309	-6.696295E-03
прямоуг. (прав.гр.)	1.091975	6.637038E-03
трапеций	1.098642	-2.962831E-05
парабол	1.098612	-5.258698E-09

Задание 2.

Применение методов численного интегрирования в физико-химических расчетах.

Вариант 1.

В результате рассеяния электронов на двухатомном газе получена дифракционная кривая, описываемая уравнением:

$$M(s) = \frac{e^{-0.0076 \cdot s^2} \cdot \sin(2.67 \cdot s - 0.00004 \cdot s^3)}{s}$$

Построить функцию плотности распределения межъядерного расстояния в молекуле по формуле:

$$P(r) = \int_0^{30} M(s) \frac{\sin sr}{sr} ds$$

в интервале $r = 2.2 - 3.0 \text{ \AA}$ с шагом 0.05. Шаг интегрирования должен быть не меньше 0.1.

Пример выполнения расчетов по программе:

```
Начальное, конечное значения и шаг по r?
2.2  3.0  0.05  [Enter]
Нижний и верхний пределы и шаг интегрирования?
0  30  0.2  [Enter]
r      P(r)
2.20  1.57080
2.25  1.57079
. . .
2.55  1.56454
. . .
2.80  1.49233
. . .
3.00  1.39789
```

Вариант 2.

Молярная теплоемкость гипотетического вещества задана формулой:

$$C_p = \frac{3 \ln(T+1)}{1 + \ln(T+1)}$$

C_p выражена в единицах универсальной газовой постоянной R . В этой формуле C_p стремится к $3R$, когда температура стремится к бесконечности. Пусть при $T = 0$ энтальпия H равна нулю. Тогда

$$H(T) = \int_0^T C_p(t) dt$$

Напечатайте таблицу значений C_p и H при $T = 0, 50, 100, \dots, 300$. Интегрирование произвести методом трапеций.

Пример выполнения расчетов по программе:

```
Начальное и конечное значения и шаг по температуре?  
0 300 50   
Шаг интегрирования?  
0.1   
  
      T           Cp           H (T)  
      0           0           0  
      50          2.39171      109.91260  
      100         2.46573      231.63661  
      . . .       . . .       . . .  
      300         2.55271      735.53324
```


Тема 5

Организация разветвлений в программах; оператор If ... then ... else ... Использование численных методов решения нелинейных уравнений при расчете состава равновесной смеси.

Задание 1.

Написать программу для нахождения корней уравнения методом половинного деления и решить с ее помощью уравнение $e^{-x} = x$, оформив последнее в виде function.

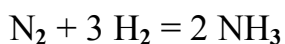
Пример выполнения расчетов по программе:

Задайте границы отрезка и точность вычислений			
0	1	0.1E-5	
Корень уравнения $\exp(-x)=x$ на отрезке $[0,1]$			
равен 0.5671434 (с точностью 0.1E-05)			

Задание 2.

Для проведения химической реакции исходные вещества были взяты в стехиометрических количествах. Реакция проводилась при постоянных давлении и температуре. Требуется вычислить равновесный состав смеси (в мольных процентах), если известен десятичный логарифм константы равновесия при этой температуре.

Рассмотрим эту задачу на примере химической реакции:



При постоянных давлении P и температуре T $\lg K_p = k$.

Решение:

Пусть прореагировало x моль азота. Напомним, что вещества взяты в стехиометрических количествах (т.е. на 1 моль азота 3 моля водорода).

Тогда водорода осталось $(3-3x)$ моль, а аммиака образовалось $2x$ моль.

В равновесной смеси всего $(1-x) + (3-3x) + 2x = (4 - 2x)$ моль.

Тогда парциальное давление, например, азота равно $P_{\text{N}_2} = P \cdot \frac{(1-x)}{(4-2x)}$.

Подставив аналогичные выражения для всех парциальных давлений в определение константы равновесия, получим:

$$10^k = \frac{p_{\text{NH}_3}^2}{p_{\text{N}_2} \cdot p_{\text{H}_2}^3} = \frac{(2x)^2 \cdot (4-2x)^2}{P^2 \cdot (1-x) \cdot (3-3x)^3}$$

что является уравнением относительно x . Заметим, что по смыслу x определено лишь в пределах от 0 до 1.

Внесите необходимые изменения в программу к заданию 1 и вычислите равновесный состав смеси для одной из приведенных ниже химических реакций.

Вариант 1.



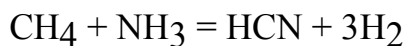
При давлении 10 атм и $\lg K_p = -6.88$ ответ: 0.26% C_2H_2

Вариант 2.



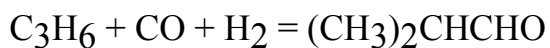
При давлении 3 атм и $\lg K_p = 1.27$ ответ: 22.49% $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$

Вариант 3.



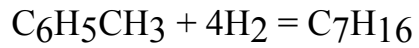
При давлении 0.4 атм и $\lg K_p = -2.361$ ответ: 9.82% HCN

Вариант 4.



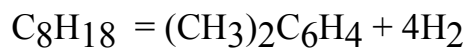
При давлении 5 атм и $\lg K_p = 0.192$ ответ: 36.6% $(\text{CH}_3)_2\text{CHCHO}$

Вариант 5.



При давлении 10 атм и $\lg K_p = -4.613$ ответ: 1.82 % C_7H_{16}

Вариант 6.



При давлении 2 атм и $\lg K_p = -2.077$ ответ: 6.71 % $(\text{CH}_3)_2\text{C}_6\text{H}_4$

Вариант 7.



При давлении 0.7 атм и $\lg K_p = 2.941$ ответ: 77,01% $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$

Тема 6

Массивы переменных. Взаимодействие программы с внешними файлами данных. Метод линейной регрессии для обработки экспериментальных данных.

Задание:

Написать программу, которая считывает из внешнего файла данных число экспериментальных точек n , а затем пары вещественных чисел (x_i, y_i) , $i = \overline{1, n}$ в соответствующие массивы переменных. Программа должна рассчитать и вывести на экран параметры линейной регрессии a и b , коэффициент корреляции r , а также таблицу с исходными данными и расчетными значениями.

Примеры выполнения расчетов по программе:

Вариант 1.

a = -5.021		b = -9.230		r = . . .	
N	x	y	a*x+b	a*x+b-y	
1	21.664	-118.255	-117.996	0.259	
2	16.376	-91.938	-91.447	0.491	
3	19.121	-105.703	-105.228	0.475	
4	22.335	-120.717	-121.364	-0.647	
5	4.920	-33.446	-33.931	-0.485	
6	4.234	-30.552	-30.487	0.065	
7	3.583	-27.487	-27.219	0.268	
8	25.039	-134.468	-134.940	-0.472	
9	16.481	-91.838	-91.974	-0.136	
10	11.861	-68.673	-68.779	-0.106	
11	13.080	-74.918	-74.899	0.019	
12	9.757	-58.212	-58.216	-0.004	
13	27.962	-149.568	-149.615	-0.047	
14	19.542	-107.339	-107.342	-0.003	
15	28.907	-154.683	-154.359	0.324	

Вариант 2.

a = -4.834		b = -7.539		r = . . .	
N	x	y	a*x+b	a*x+b-y	
1	27.193	-138.865	-138.991	-0.126	
2	20.323	-106.595	-105.781	0.814	
3	12.322	-66.261	-67.104	-0.843	
4	16.443	-87.001	-87.025	-0.024	
5	11.862	-65.434	-64.880	0.554	
6	24.817	-127.061	-127.505	-0.444	
7	5.358	-33.328	-33.440	-0.112	
8	11.363	-62.462	-62.468	-0.006	
9	5.619	-35.524	-34.701	0.823	
10	16.801	-88.209	-88.755	-0.546	
11	9.674	-54.413	-54.303	0.110	
12	2.621	-19.805	-20.209	-0.404	
13	10.462	-58.660	-58.113	0.547	
14	16.087	-85.581	-85.304	0.277	
15	4.608	-29.194	-29.814	-0.620	

Вариант 3.

a = 0.729		b = -5.031		r = . . .	
N	x	y	a*x+b	a*x+b-y	
1	6.587	-0.167	-0.230	-0.063	
2	14.785	4.966	5.745	0.779	
3	4.580	-2.300	-1.693	0.607	
4	6.391	-0.082	-0.373	-0.291	
5	18.354	8.683	8.347	-0.336	
6	6.722	0.716	-0.131	-0.847	
7	14.450	6.385	5.501	-0.884	
8	20.477	9.927	9.894	-0.033	
9	19.023	8.193	8.834	0.641	
10	5.610	-1.545	-0.942	0.603	
11	3.617	-2.441	-2.395	0.046	
12	10.378	2.452	2.533	0.081	
13	4.222	-1.773	-1.954	-0.181	
14	21.954	11.039	10.971	-0.068	
15	18.875	8.783	8.727	-0.056	

Вариант 4.

a = -1.863		b = -3.482		r = . . .	
N	x	y	a*x+b	a*x+b-y	
1	24.181	-48.283	-48.539	-0.256	
2	28.721	-56.867	-56.998	-0.131	
3	16.006	-33.298	-33.306	-0.008	
4	3.118	-9.249	-9.292	-0.043	
5	24.700	-50.360	-49.506	0.854	
6	5.750	-13.546	-14.196	-0.650	
7	10.137	-22.828	-22.370	0.458	
8	28.304	-55.658	-56.221	-0.563	
9	6.885	-16.977	-16.311	0.666	
10	2.917	-9.073	-8.917	0.156	
11	4.843	-11.684	-12.506	-0.822	
12	20.324	-41.612	-41.352	0.260	
13	25.622	-51.145	-51.224	-0.079	
14	12.053	-25.925	-25.940	-0.015	
15	0.000	-3.654	-3.482	0.172	

Вариант 5.

a = -3.387		b = 7.778		r = . . .	
N	x	y	a*x+b	a*x+b-y	
1	0.283	7.047	6.819	-0.228	
2	10.526	-27.882	-27.879	0.003	
3	4.014	-6.296	-5.820	0.476	
4	22.343	-68.457	-67.908	0.549	
5	22.465	-68.765	-68.321	0.444	
6	15.429	-44.810	-44.487	0.323	
7	3.463	-3.947	-3.953	-0.006	
8	21.653	-65.018	-65.570	-0.552	
9	7.302	-17.218	-16.957	0.261	
10	27.421	-84.999	-85.109	-0.110	
11	11.894	-32.391	-32.513	-0.122	
12	15.109	-42.917	-43.403	-0.486	
13	11.187	-30.267	-30.118	0.149	
14	16.048	-46.492	-46.584	-0.092	
15	12.170	-32.838	-33.447	-0.609	

Вариант 6.

a = 4.298		b = -3.713		r = . . .	
N	x	y	a*x+b	a*x+b-y	
1	0.736	-0.407	-0.550	-0.143	
2	23.948	99.484	99.222	-0.262	
3	21.777	89.939	89.890	-0.049	
4	28.000	116.659	116.638	-0.021	
5	23.763	98.744	98.427	-0.317	
6	1.248	1.877	1.651	-0.226	
7	3.165	9.137	9.891	0.754	
8	25.365	104.268	105.313	1.045	
9	9.007	34.985	35.001	0.016	
10	18.748	77.484	76.871	-0.613	
11	2.861	8.847	8.584	-0.263	
12	9.065	35.569	35.251	-0.318	
13	4.614	16.140	16.119	-0.021	
14	19.819	81.650	81.474	-0.176	
15	9.309	35.707	36.300	0.593	

Вариант 7.

a = 2.911		b = -10.111		r = . . .	
N	x	y	a*x+b	a*x+b-y	
1	15.359	35.354	34.602	-0.752	
2	11.074	21.404	22.127	0.723	
3	9.480	17.233	17.487	0.254	
4	24.780	63.058	62.028	-1.030	
5	8.620	14.109	14.983	0.874	
6	1.780	-4.872	-4.929	-0.057	
7	4.222	2.148	2.180	0.032	
8	21.745	52.749	53.192	0.443	
9	29.112	74.360	74.639	0.279	
10	22.026	53.980	54.010	0.030	
11	12.355	26.239	25.856	-0.383	
12	1.278	-5.716	-6.391	-0.675	
13	2.354	-2.273	-3.258	-0.985	
14	9.631	17.239	17.926	0.687	
15	3.533	-0.386	0.174	0.560	

Задание 2:

При обработке результатов химического эксперимента очень часто встает задача определения параметров линейной регрессии. Внесите необходимые изменения в программу к заданию 1, чтобы она выполняла расчеты для одного из приведенных ниже вариантов.

Вариант 1.

Для уксусной кислоты ($AcOH$) получены следующие значения аналитических концентраций в водной (C_s) и органической фазах (C_w) при 297.23 °C.

N	C_s , моль/л	C_w , моль/л
1	0.00303	0.2291
2	0.00776	0.4328
3	0.01551	0.6661
4	0.02480	0.8855
5	0.03586	1.0900

Методом линейной регрессии вычислите константы распределения

уксусной кислоты между бензолом и водой $K_1 = \frac{[AcOH]_s}{[AcOH]_w}$ и

димеризации $AcOH$ в бензоле $K_2 = \frac{[AcOH]_s^2}{[(AcOH)_2]_s}$ по уравнению

$$\frac{C_s}{C_w} = K_1 + \frac{2K_1^2}{K_2} C_w$$

В качестве аргумента и функции используйте величины C_w и $\frac{C_s}{C_w}$ соответственно.

Напечатайте вычисленные значения параметров линейной регрессии, коэффициента корреляции, таблицу, а также полученные константы K_1 и K_2 :

	a = 0.022725	b = 0.008055	r = 0.9999	
N	Cw	Cs/Cw	(Cs/Cw) выч	Погрешность
1	0.2291	0.013226	0.013261	-3.5E-05
...
5	1.0900	0.032899	0.032825	7.4E-05
Константы: K1 = 0.008055 K2 = 0.005710				

Используя приложение Excel, постройте график зависимости C_s/C_w и $(C_s/C_w)_{\text{выч}}$ от C_w . Точки C_s/C_w покажите в виде символов, а точки $(C_s/C_w)_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечание.

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n, а следующие n строк - пары значений C_s и C_w .

Вариант 2.

В результате измерения электропроводности (Λ_v) растворов уксусной кислоты разной концентрации (C) получены следующие результаты:

N	C , моль/л	Λ_v , $\text{ом}^{-1} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{экв}^{-1}$
1	2.80E-5	210.32
2	1.1135E-4	127.71
3	1.532E-4	112.02
4	2.184E-4	96.47
5	1.0283E-3	48.13
6	1.3634E-3	42.215
7	2.4140E-3	32.21
8	3.34065E-3	27.19
9	5.9115E-3	20.96

Согласно закону разведения Оствальда эти величины связаны уравнением:

$$C \cdot \Lambda_v = -K \cdot \Lambda_\infty + \frac{K \cdot \Lambda_\infty^2}{\Lambda_v},$$

которое приводится к линейному виду, если в качестве аргумента и функции использовать величины $\frac{1}{\Lambda_v}$ и $C \cdot \Lambda_v$ соответственно.

Определите константу диссоциации уксусной кислоты (K) и предельную электропроводность (Λ_∞).

Напечатайте вычисленные значения параметров линейной регрессии, коэффициента корреляции, таблицу, а также полученные K и Λ_∞ :

	a = 2.722154	b = -0.007160	r = 0.9998	
N	1/Lv	C·Lv	(C·Lv) выч	Погрешность
1	0.004755	0.005889	0.005783	-0.00103
...
5	0.020777	0.049492	0.049398	-0.02862
...
9	0.04771	0.123905	0.122714	-0.075
	K = 1.88E-05	Предел.электропроводность = 380.1899		

Используя приложение Excel, постройте график зависимости $C \cdot L_v$ и $(C \cdot L_v)_{\text{выч}}$ от $1/L_v$. Точки $C \cdot L_v$ покажите в виде символов, а точки $(C \cdot L_v)_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечание.

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n, а следующие n строк - пары значений C и L_v .

Вариант 3.

Для поверхностного натяжения (γ) и эффективной площади (ω), занимаемой молекулой CCl_4 , получены следующие данные:

N	$t, ^\circ\text{C}$	$\gamma, \text{эрг}/\text{см}^2$	$\omega, \text{см}^2$
1	0	27.99	3.637E-15
2	40	23.27	3.756E-15
3	80	18.69	3.892E-15
4	120	14.33	4.048E-15
5	160	10.21	4.237E-15
6	200	6.35	4.497E-15
7	240	2.79	4.849E-15
8	250	1.94	5.090E-15
9	283.15	-0.70	7.454E-15

Методом линейной регрессии вычислите коэффициенты A и B температурной зависимости поверхностной энергии ($\gamma \omega$) по уравнению:

$$\gamma \omega = A - BT$$

Напечатайте вычисленные значения параметров линейной регрессии, коэффициента корреляции и таблицу:

a = -3.73243E-16 b = 2.04448E-13 r = 0.9997				
N	T	$\gamma \cdot \omega$	($\gamma \cdot \omega$) выч	Погрешность
1	273.15	1.018E-13	1.025E-13	-6.971E-16
...
5	433.15	4.326E-14	4.278E-14	4.819E-16
...
9	556.30	-5.218E-15	-3.187E-15	-2.031E-15

Используя приложение Excel, постройте график зависимости $\sigma \cdot \omega$ и $(\sigma \cdot \omega)_{\text{выч}}$ от T . Точки $\sigma \cdot \omega$ покажите в виде символов, а точки $(\sigma \cdot \omega)_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечания.

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n , а следующие n строк - тройки значений t , γ и ω . При расчете A и B преобразуйте t в абсолютную температуру T .

Вариант 4.

Для давления пара (p) над жидкой ртутью получены следующие данные

N	$t, ^\circ\text{C}$	$p, \text{мм рт. ст.}$
1	0	0.000185
2	40	0.00597
3	80	0.0843
4	120	0.739
5	160	4.01
6	200	17.1
7	240	56.9
8	280	158
9	320	378
10	360	806
11	400	1620
12	500	6350
13	600	17900
14	700	40400
15	800	77700

Методом линейной регрессии вычислите параметры A и C температурной зависимости p по уравнению Кирхгофа-Ренкина-Дюпре:

$$\lg p = A - B \cdot \lg T - \frac{C}{T}$$

где $B = -\frac{\Delta C_p}{R}$, а ΔC_p - разность теплоемкостей пара и жидкости.

Определите теплоту испарения жидкой ртути $\Delta H_v = C \cdot R \cdot \ln 10$.

В качестве аргумента и функции используйте величины $\frac{1}{T}$ и

$\lg p + B \cdot \lg T$ соответственно.

Напечатайте вычисленные значения параметров линейной регрессии, коэффициента корреляции и таблицу, в которой через Y обозначена величина $\lg p + B \cdot \lg T$:

	a = -3345.13		b = 12.68		r = 0.9999
N	T	1/T	Y	Y выч	Погрешность
1	273.15	0.003661	0.43938	0.43004	0.009337
...
5	433.15	0.002309	4.94361	4.95374	-0.01013
...
15	1073.15	0.000932	9.56199	9.55942	0.002564
	A = 12.677		B = 0.840		C = 3345.129
	DHv = 64041.3				

Используя приложение Excel, постройте график зависимости γ и $\gamma_{\text{выч}}$ от $1/T$. Точки γ покажите в виде символов, а точки $\gamma_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечания.

Числовые значения, необходимые в расчетах:

$$B = 0.8403 \qquad 1 \text{ мм.рт.ст.} = 133.322 \text{ Н/м}^2$$

$$R = 8.31441 \text{ Дж / моль / К}$$

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n , а следующие n строк - пары значений t и p . При расчете коэффициентов A и C преобразуйте t в абсолютную температуру T .

Вариант 5.

Для константы (k) скорости реакции разложения иодистого водорода



N	T, K	$k, \text{ л/моль} \cdot \text{с}^{-1}$
1	556	3.52E-7
2	575	1.22E-6
3	629	3.02E-5
4	647	8.59E-5
5	666	2.19E-4
6	683	5.12E-4
7	700	1.16E-3
8	716	2.50E-3
9	731	3.95E-3

Используя метод линейной регрессии, рассчитайте параметры уравнения Аррениуса:

$$\ln k = \ln k_0 - \frac{E_a}{RT}$$

где k_0 - предэкспоненциальный множитель, E_a - энергия активации реакции.

В качестве аргумента и функции используйте величины $\frac{1}{T}$ и $\ln k$ соответственно.

Напечатайте вычисленные значения коэффициентов прямой (а и b), коэффициента корреляции, таблицу, а также полученные параметры уравнения Аррениуса - константу скорости реакции и энергию активации:

a = -21924.7		b = 24.5		r = 0.9998
N	1/T	ln k	ln k выч	Погрешность
1	0.001799	-14.8596	-14.9077	0.0481
...
5	0.001502	-8.4264	-8.3948	-0.0316
...
9	0.001368	-5.5340	-5.4676	-0.0665
k0 = 4.48E+10		Ea = 182290.98		

Используя приложение Excel, постройте график зависимости $\ln k$ и $\ln k_{\text{выч}}$ от $1/T$. Точки $\ln k$ покажите в виде символов, а точки $\ln k_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечания.

$$R = 8.31441 \text{ Дж / моль / К}$$

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n , а следующие n строк - пары значений T и k .

Вариант 6.

Для водного раствора изоамилового спирта при 20°C сталагмометрическим методом (измерение веса капель) получены следующие величины поверхностного давления:

N	C, моль/л	П, Н/м
1	0.015	12.5E-3
2	0.03	18.5E-3
3	0.06	25.7E-3
4	0.09	30.8E-3
5	0.12	34.4E-3
6	0.15	36.6E-3

Методом линейной регрессии рассчитайте предельную (при $\Pi \rightarrow \infty$) площадь (ω^0), занимаемую одной молекулой спирта по уравнению

$$\ln\left(\frac{C}{\Pi}\right) = A + \left(\frac{\omega^0}{kT}\right) \cdot \Pi,$$

где k - постоянная Больцмана,

T - абсолютная температура,

A - некоторая константа.

В качестве аргумента и функции используйте величины Π и $\ln\left(\frac{C}{\Pi}\right)$ соответственно.

Напечатайте вычисленные значения параметров линейной регрессии, коэффициента корреляции и таблицу:

	$a = 49.7562$	$b = -0.4401$	$r = 0.99915$	
N	П	$\ln(C/P)$	$\ln(C/P)_{\text{выч}}$	Погрешность
1	0.0125	0.18232	0.18188	0.000442
...
5	0.0344	1.24944	1.27154	-0.02211
6	0.0366	1.41059	1.38100	0.029583

Используя приложение Excel, постройте график зависимости $\ln(C/P)$ и $\ln(C/P)_{\text{выч}}$ от П. Точки $\ln(C/P)$ покажите в виде символов, а точки $\ln(C/P)_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечания.

$$k = 1.380622 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$$

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n , а следующие n строк - пары значений C и P .

Вариант 7.

Для времени жизни (τ) возбужденных молекул 26-ди-(4-метоксифенил)-4-фенилпиридина (B^*) в диоксане в присутствии уксусной кислоты ($AcOH$) получены следующие данные:

N	[AcOH], моль/л	τ , нс
1	0	3.12
2	2.18	1.75
3	2.91	1.53
4	3.49	1.39
5	4.37	1.27

Методом линейной регрессии вычислите константу скорости (k) протонирования B^* при взаимодействии с $AcOH$ и время жизни B^* в отсутствие $AcOH$ (τ_0) по уравнению Штерна-Фольмера:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} + k[AcOH]$$

В качестве аргумента и функции используйте величины $[AcOH]$ и $\frac{1}{\tau}$ соответственно.

Напечатайте вычисленные значения параметров линейной регрессии, коэффициента корреляции и таблицу:

a = 0.10895		b = 0.32829		r = 0.9998
N	AcOH	1/t	1/t выч	Погрешность
1	0	0.320513	0.328285	-0.00777
...
5	4.37	0.787402	0.804408	-0.01701
		t0 =3.05	k =0.11	

Используя приложение Excel, постройте график зависимости $1/\tau$ и $1/\tau_{\text{выч}}$ от $A_{\text{сОН}}$. Точки $1/\tau$ покажите в виде символов, а точки $1/\tau_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечания.

$$1 \text{ нс} = 10^{-9} \text{ с.}$$

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n , а следующие n строк - пары значений $[A_{\text{сОН}}]$ и $\frac{1}{\tau}$.

Вариант 8.

Имеются значения электродвижущих сил (E) элемента



при различных давлениях (p) H_2 , Cl_2 и HCl

N	p_{H_2} , мм рт. ст.	p_{Cl_2} , мм рт. ст.	p_{HCl} , мм рт. ст.	E, В
1	750	750	0.24	1.19
2	750	750	0.69	1.147
3	621	621	134	1.005
4	566	566	189	0.999
5	442	442	313	0.981
6	415	415	337	0.974

при температуре $T = 303.1 \text{ K}$.

Методом линейной регрессии для реакции $\text{H}_2 + \text{Cl}_2 \rightleftharpoons 2\text{HCl}$ в газовой фазе вычислите константу равновесия (K) и заряд электрона (e) по уравнению

$$E = -\frac{kT}{ze} \ln K + \frac{kT}{ze} \ln \frac{p_{\text{HCl}}^2}{p_{\text{H}_2} p_{\text{Cl}_2}}$$

В качестве аргумента и функции используйте величины $\ln \frac{p_{\text{HCl}}^2}{p_{\text{H}_2} p_{\text{Cl}_2}}$ и

E соответственно.

Напечатайте вычисленные значения параметров линейной регрессии, коэффициента корреляции и таблицу:

	a = -0.01332	b = 0.96841	r = 0.9983	
N	$\ln(p_{2\text{HCl}}/p_{\text{H}_2}/p_{\text{Cl}_2})$	E	E выч	Погрешность
1	-16.0944	1.190	1.1828	7.1E-03
...
6	-0.4164	0.974	0.9740	4.2E-05
		K = 3.7E+31	e = -1.6E-19	

Используя приложение Excel, постройте графики зависимости E и $E_{\text{выч}}$ от $\ln(p_{2\text{HCl}}/p_{\text{H}_2}/p_{\text{Cl}_2})$. Точки E покажите в виде символов, а точки $E_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечания.

Числовые значения, необходимые в расчетах:

$$k = 1.380622 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К} \quad \text{Число электронов } z = 2$$

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n , а следующие n строк - четверки значений p_{H_2} , p_{Cl_2} , p_{HCl} , E .

Вариант 9.

Для реакции термической диссоциации $I_2 \rightleftharpoons 2I$ получены значения

константы равновесия $K_p = \frac{p_I^2}{p_{I_2}}$ при разных температурах (t):

N	t, °C	K _p , атм
1	800	0.0114
2	900	0.0474
3	1000	0.165
4	1100	0.492
5	1200	1.23

Методом линейной регрессии вычислите энергию диссоциации молекулы I_2 и параметр A по уравнению:

$$\ln K_p = A + \frac{1}{2} \ln T - \frac{\Delta H_0}{RT}$$

В качестве аргумента и функции используйте величины $\frac{1}{T}$ и

$\ln K_p - \frac{1}{2} \ln T$ соответственно.

Напечатайте вычисленные значения параметров линейной регрессии, коэффициента корреляции и таблицу, в которой через Y обозначена

величина $\ln K_p - \frac{1}{2} \ln T$:

	$a = -17928.1$	$b = 20.24829$	$r = 0.9999$		
N	T	1/T	Y	Y _{выч}	Погрешность
1	1073.15	0.000932	3.56277	3.54223	0.02054
...
9	1473.15	0.000679	8.08552	8.07837	0.00715
			$A = 20.2$	$dH = 149061.6$	

Используя приложение Excel, постройте график зависимости Y и $Y_{\text{выч}}$ от $1/T$. Точки Y покажите в виде символов, а точки $Y_{\text{выч}}$ соедините линией.

Примечания.

Числовые значения, необходимые в расчетах:

$$R = 8.31441 \text{ Дж/моль/К} \quad 1 \text{ атм} = 101324.72 \text{ Па}$$

При расчете преобразуйте температуру t в абсолютную температуру T .

Исходные данные необходимо прочитать из файла, первая строка которого содержит число точек n , а следующие n строк - пары значений t и K_p .

Тема 7

Метод Эйлера для решения задачи Коши. Решение системы дифференциальных уравнений.

Задание 1.

Написать программу для решения задачи Коши: $y'(x)=F(x,y)$, $y(x_0)=y_0$.
Функцию $F(x,y)$ задать в виде `function`. Программа должна
запрашивать x_0 , $x_{\text{кон}}$, h , y_0 и печатать таблицу значений функции $y(x)$
в интервале от x_0 до $x_{\text{кон}}$ с шагом h .

Вариант 1.

Решить следующую задачу Коши: $y'(x) = y + x$, $y(0)=0$. Вычислить
погрешность полученных значений, если известно точное решение:
 $y(x) = e^x - x - 1$.

Пример выполнения расчетов по программе:

Начальные условия (x0,y0)?			
0	0		
Конечное значение и шаг для x?			
1	0.1		
x	метод Эйлера	Точное зн-е	Погрешность
0.0	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	0.0000	0.0052	0.0052
0.2	0.0100	0.0214	0.0114
· · ·	· · ·	· · ·	· · ·
0.5	0.1105	0.1487	0.0382
0.6	0.1716	0.2221	0.0505
· · ·	· · ·	· · ·	· · ·
0.9	0.4579	0.5596	0.1017

1.0	0.5937	0.7183	0.1246
-----	--------	--------	--------

Вариант 2.

Решить следующую задачу Коши: $y'(x) = 2(x^2 + y(x))$, $y(0)=1$.

Вычислить погрешность полученных значений, если известно точное решение:

$$y(x) = 1.5 e^{2x} - x^2 - x - 0.5.$$

Пример выполнения расчетов по программе:

Начальные условия (x0, y0)?

0 1

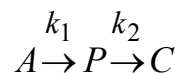
Конечное значение и шаг для x?

1 0.1

x	метод Эйлера	Точное зн-е	Погрешность
0.0	1.0000	1.0000	0.0000
0.1	1.2000	1.2221	0.0221
0.2	1.4420	1.4977	0.0557
· · ·	· · ·	· · ·	· · ·
0.5	2.5569	2.8274	0.2705
0.6	3.1183	3.5202	0.4019
· · ·	· · ·	· · ·	· · ·
0.9	5.7376	6.8645	1.1269
1.0	7.0472	8.5836	1.5364

Задание 2.

Уравнение скорости реакции



записывается так:

$$\frac{d[P]}{dt} = k_1[A_0] e^{-k_1 t} - k_2[P],$$

Здесь

$[P]$ - концентрация соединения P к моменту времени t от начала реакции;

k_1 - константа скорости первой стадии процесса, равная $5 \cdot 10^{-2} \text{ дм}^3 \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{мин}^{-1}$;

k_2 - константа скорости второй стадии последовательной реакции, равная $6,5 \cdot 10^{-3} \text{ дм}^3 \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{мин}^{-1}$;

$[A_0]$ - исходная концентрация соединения A .

Найти зависимость $[P]$ от времени t , если при $t = 0$ $[P] = 0$, а $[A_0] = 1$.

Пример выполнения расчетов по программе:

```
Начальные значения t и P?
0 0
Enter
Конечное t и шаг интегрирования?
500 10
Enter
t P (по методу Эйлера)
0 0.0000
10 0.5000
20 0.7708
...
70 0.9050
80 0.8613
...
330 0.1657
...
490 0.0565
500 0.0529
```

Используя приложение Excel, постройте график зависимости концентрации P от времени t .

Задание 3.

Найдите методом Эйлера приближенное решение дифференциального уравнения с заданными начальными условиями, интервалом по x , шагом h и точностью ε .

При решении дифференциального уравнения на каждом из отрезков $[x_i, x_i+h]$ необходимо выбрать оптимальный шаг интегрирования. Для этого сравнивают приближенные значения функции $y(x_i+h)$, полученные при шагах: h и $\frac{h}{2}$; $\frac{h}{2}$ и $\frac{h}{4}$; ... $\frac{h}{n}$ и $\frac{h}{2n}$. Шаг

уменьшается вдвое до тех пор, пока модуль разности значений функции не станет меньше ε .

Результаты расчетов представить в виде таблицы, содержащей значения x , y , y' , оптимального шага $\frac{h}{2n}$ и числа разбиений $2n$.

Указания: Условимся каждую пару значений x, y в приведенной ниже таблице называть узлом. При расчете каждого последующего значения y в качестве y_0 следует принимать значение y из предыдущего узла.

Вариант 1.

$$\frac{dy}{dx} = e^{-x} - 0.3y$$

с начальным условием $y(0) = 0$ в интервале по x $[0,8]$ с шагом $h = 0.4$ и точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
0.0	0.0000	1.0E+00		
0.4	0.3096	5.8E-01	7.8E-04	512
0.8	0.4824	3.0E-01	3.1E-03	128
...
4.4	0.3651	-9.7E-02	1.0E-01	4
...
7.6	0.1449	-4.3E-02	5.0E-02	8
8.0	0.1286	-3.8E-02	5.0E-02	8

Вариант 2.

$$\frac{dy}{dx} = \cos(y) + \sin(x)$$

с начальным условием $y(2.5) = 0$ в интервале $x [2.5, 4.0]$ с шагом

$h = 0.25$ с точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
2.50	0.0000	1.6E+00		
2.75	0.3676	1.3E+00	2.0E-03	128
...
3.50	0.9370	2.4E-01	3.9E-03	64
...
4.00	0.9435	-1.7E-01	7.8E-03	32

Вариант 3.

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{x+y}$$

с начальным условием $y(0) = 1$ в интервале $x [0,8]$ с шагом $h = 0.5$ с

точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
0.0	1.000	1.0E+00		
0.5	1.357	5.4E-01	3.9E-03	128
1.0	1.585	3.9E-01	1.6E-02	32
...
4.0	2.304	1.6E-01	2.5E-01	2
...
7.5	2.742	9.8E-02	2.5E-01	2
8.0	2.790	9.3E-02	2.5E-01	2

Вариант 4.

$$\frac{dy}{dx} = e^{-x} - 0.2y^2$$

с начальным условием $y(0) = 0$ в интервале $x [0,10]$ с шагом $h = 0.5$ с

точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
0.0	0.0000	1.0E+00		
0.5	0.3879	5.8E-01	9.8E-04	512
1.0	0.6011	3.0E-01	3.9E-03	128
...
4.0	0.6551	-6.8E-02	2.5E-01	2
...
7.5	0.4581	-4.1E-02	1.3E-01	4
...
9.5	0.3864	-3.0E-02	2.5E-01	2
10.0	0.3718	-2.8E-02	2.5E-01	2

Вариант 5.

$$\frac{dy}{dx} = -0.1y$$

с начальным условием $y(0) = 1$ в интервале $x [0,20]$ с шагом $h = 1$ с

точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
0	0.1000	-1.0E-01		
1	0.9043	-9.0E-02	1.3E-01	8
2	0.8177	-8.2E-02	1.3E-01	8
...
10	0.3656	-3.7E-02	1.3E-01	8
...
16	0.1999	-2.0E-02	1.3E-01	8
...
19	0.1478	-1.5E-02	1.3E-01	8
20	0.1336	-1.3E-02	1.3E-01	8

Вариант 6.

$$\frac{dy}{dx} = -0.3y^2$$

с начальным условием $y(0) = 1$ в интервале $x [0,20]$ с шагом $h = 1$ с

точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
0	0.1000	-3.0E-01		
1	0.7685	-1.8E-01	1.6E-02	64
2	0.6241	-1.2E-01	1.6E-02	64
...
10	0.2488	-1.9E-02	1.3E-01	8
...
15	0.1806	-9.8E-03	2.5E-01	4
...
19	0.1481	-6.6E-03	2.5E-01	4
20	0.1418	-6.0E-03	2.5E-01	4

Вариант 7.

$$\frac{dy}{dx} = -0.3y^3$$

с начальным условием $y(0) = 1$ в интервале $x [0,20]$ с шагом $h = 1$ с

точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
0	0.1000	-3.0E-01		
1	0.7902	-1.5E-01	7.8E-03	128
2	0.6736	-9.2E-02	1.6E-02	64
...
10	0.3763	-1.6E-02	2.5E-01	4
...
16	0.3053	-8.5E-03	5.0E-01	2
...
19	0.2821	-6.7E-03	5.0E-01	2
20	0.2755	-6.3E-03	5.0E-01	2

Вариант 8.

$$\frac{dy}{dx} = x - y^2$$

с начальным условием $y(0) = 1$ в интервале $x [0,20]$ с шагом $h = 1$ с

точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
0	1.000	-1.0E+00		
1	0.833	3.1E-01	2.0E-03	512
2	1.249	4.4E-01	2.5E-01	4
...
10	3.137	1.6E-01	2.5E-01	4
...
16	3.983	1.3E-01	5.0E-01	2
...
20	4.459	1.2E-01	5.0E-01	2

Вариант 9.

$$\frac{dy}{dx} = e^{-x} - 0.4y^3$$

с начальным условием $y(0) = 0$ в интервале $x [0,20]$ с шагом $h = 1$ с

точностью $\varepsilon = 0.001$.

x	y	y'	h/2n	2n
0	0.0000	1.0E+00		
1	0.6016	2.8E-01	9.8E-04	1024
2	0.7088	-7.1E-03	3.9E-03	256
...
10	0.3669	-2.0E-02	1.3E-01	8
...
16	0.2851	-9.3E-03	5.0E-01	2
...
19	0.2603	-7.1E-03	5.0E-01	2
20	0.2534	-6.5E-03	5.0E-01	2

Задание 4.

Материальная точка с единичной массой совершает колебательное движение в несимметричной “яме”, в которой зависимость потенциальной энергии U от координаты x определяется формулой:

$$U(x) = (1 - \exp(-x))^2.$$

1) Построить средствами программы Excel график этой функции в интервале $x \in [-1, 5]$.

Траектория движения $x(t)$ может быть получена, исходя из уравнения Ньютона:

$$x''(t) = \frac{f(x, t)}{m},$$

где сила f равна производной от потенциала $f(x) = -U'(x)$. Эту производную можно взять аналитически, а уравнение Ньютона преобразовать к системе двух дифференциальных уравнений первого порядка.

2) Составить программу для нахождения траектории $x(t)$ методом Эйлера. Входными параметрами должны являться начальная координата и шаг интегрирования по времени. Убедиться, что изменения значения координаты соответствуют колебательному движению материальной точки.

3) Момент прохождения точки поворота в процессе колебания можно определить по изменению знака скорости. Модифицировать программу так, чтобы она вычисляла период колебаний.