МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждени
высшего образования
«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра фундаментальной химии и химической технологии

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
О.Г. Локтионова
« » ____________ 2016 г.

ПРИБЛИЖЕННЫЕ РЕШЕНИЯ

Методические указания
по выполнению лабораторных работ
для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия
и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Курск 2016

УДК 519.65

Составитель: Лысенко А.В.

Рецензент
Доктор химических наук, профессор *Л.М. Миронович*

Приближенные решения: методические указания по выполнению лабораторных работ для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. Курск, 2016, 15 с.: ил. 2, табл.. Библиогр.: 15 с.

Излагаются методические рекомендации к лабораторной работе «Приближенные решения» по дисциплине «Вычислительные методы в химии». Приведены теоретические основы по способам решения уравнений, систем уравнений и вычисления определенных интегралов. Рассмотрены примеры решения типовых задач. Для студентов представлены индивидуальные задания для решения.

Методические указания предназначены для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать 20.01.16. Форма 60x84 1/16.
Усл. печ. л. 0,9. Уч.-изд.л. 0,8. Тираж 100 экз. Заказ 32. Бесплатно
Юго-Западный государственный университет.
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

Содержание

Приближенные решения

Цель работы: освоить методы приближенного решения использую Microsoft office Excel

В ряде задач химической технологии возникает необходимость решения уравнений, систем уравнений или неравенств. Нередко строгое их решение представляет большие трудности, а иногда является невозможным. В таких случаях можно воспользоваться методами приближенного решения и получить результаты с точностью, соответствующей поставленным требованиям. Ниже приведены наиболее простые методы приближенных вычислений.

1 Решение уравнений

1.1 Графическое решение уравнений

Пусть дано уравнение f(x)=0. Для его решения строят график функции f(x) и находят точки пересечения полученной кривой с осью Ox. Каждая такая точка соответствует одному из корней заданного уравнения.

В некоторых случаях может оказаться более удобным преобразовать уравнение f(x)=0.

Если уравнение может быть приведено к виду $f_1(x)=C$, (C – постоянная), строят график функции $f_1(x)=C$ и находят точки его пересечения с прямой y=C.

Когда же уравнение может быть представлено в виде $f'(x)=f''(x)$, строят графики обеих функций; корнем уравнения является абсцисса точки их пересечения.

Пример 1. Определить графическим методом потери тепла на единицу трубы Q_n/l из уравнения

$$Q_n/l=1,87[5,53^4-\ (\frac{t+273}{100})^4]+2,1(280-t)^{1,29}=$$

$$2,68[(\frac{t+273}{100})^4-2,98^4]+1,49(t-25)^{1,25}\ \text{(Вт/м)},$$

где t – неизвестная температура.

Решение: Строим графики функций $Q_1(t)$, $Q_2(t)$:

$$Q_1(t)=1,87\cdot[5,53^4-\ (\frac{t+273}{100})^4]+2,1(280-t)^{1,29}$$

$$Q_2(t) = 2{,}68\cdot\left[\left(\frac{t+273}{100}\right)^4 - 2{,}98^4\right] + 1{,}49(t-25)^{1{,}25}$$

в зависимости от неизвестной температуры. По точке пересечения кривых находим величину потери тепла $Q_п/l$=1696 Вт/м и значение температуры t=183,3^{0}С.

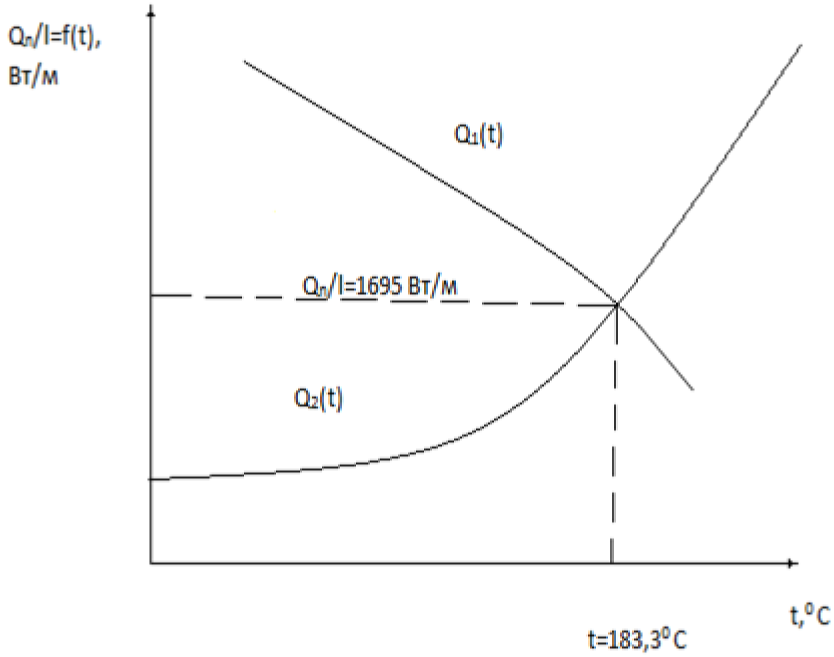

Рисунок 1 - Графическое определения потерь тепла

1.2 Решение уравнений методом итераций (последовательных приближений)

Преобразуют подлежащее решению уравнение f(x)=0 к виду x=φ(x). Принимая в нулевом приближении $x=x_0$ (где x_0- произвольное значение неизвестного), находят последовательно более точные приближения: $x_1=\varphi(x_0)$; $x_2=\varphi(x_1)$ и т.д. При условии, что в интервале между первым приближением и корнем уравнения производная функции φ(x) меньше единицы, можно найти решение уравнения с любой степенью точности. Для выполнения этого условия иногда необходимо преобразовать исходное уравнение, например заменить его обратной функцией. Рекомендуется также получить предварительную оценку корней (графическим методом или методом проб и ошибок).

Пример 2. При помощи методов последовательных приближений найти корень уравнения

$$f(x)=1/(3x)+\ln x=0.$$

Решение: Преобразуем уравнение к виду

$$x=-1/(3\ln x) = \varphi(x)$$

Определяем методом подбора приближенное значение корня, принимаем x’=0,3, тогда

$$\varphi(x') = -\frac{1}{3ln0{,}3} = -\frac{1}{3(ln3-ln10)} = -\frac{1}{3(1{,}099-2{,}303)} = 0{,}276$$

Так как $\varphi(x') < x'$ то $x < x' = 0{,}3$, принимаем $x'' = 0{,}2$, тогда

$$\varphi(x'') = -\frac{1}{3ln0{,}2} = -\frac{1}{3(0{,}693-2{,}303)} = 0{,}207 > x''$$

Следовательно, x>0,2.

Так как 0,2<x<0,3, в нулевом приближении принимаем $x_0 = 0{,}25$.

При x=$x_0 = 0{,}25$ производная функции $\varphi(x)$

$$\varphi'(x) = -\frac{1}{3(lnx)^2 x}$$

меньше единицы:

$$\varphi'(x_0) = \frac{1}{3(ln0{,}25)^2 0{,}25} = 0{,}687 < 1$$

Это производная меньше единицы во всем интервале 0,2<x<0,3; поэтому уравнение f(x)=0 может быть решено методом последовательных приближений.

Начиная с нулевого приближения, получим последовательно

$$x_1 = \varphi(x_0) = -\frac{1}{3ln0{,}25} = -\frac{1}{3(0{,}916-2{,}303)} = 0{,}240$$

$$x_2 = \varphi(x_1) = -\frac{1}{3ln0{,}240} = 0{,}234$$

$$x_3 = \varphi(x_2) = -\frac{1}{3ln0{,}234} = 0{,}229$$

$$x_4 = \varphi(x_3) = -\frac{1}{3ln0{,}229} = 0{,}226$$

$$x_5 = 0{,}224$$

$$x_6 = 0{,}223$$
$$x_7 = 0{,}222$$
$$x_8 = 0{,}221$$
$$x_9 = 0{,}221$$

Следовательно, корнем уравнения f(x)=0 является $x_9 = 0{,}221$.

2 Решение систем уравнений

Когда строгое решение систем уравнений невозможно или затруднительно, рекомендуется пользоваться методом итераций.

С этой целью систему из n уравнений делят на две подсистемы, содержащие p и q уравнений (p+q=n). В общем случае эти подсистемы являются неопределенными, так как число неизвестных больше числа уравнений.

Выбирают одну из подсистем, например подсистему, содержащую p уравнений и (в общем случае) n неизвестных. Принимают в нулевом приближении произвольные значения для n-p=q неизвестных, так что система становится определенной.

Решая подсистему из p уравнений с p неизвестными, получают в первом приближении значения всех p неизвестных. Полученные значения подставляют во вторую подсистему из q уравнений, которая, таким образом, становится определенной, и находят в первом приближении значения всех q неизвестных этой подсистемы. Операцию повторяют, начиная на этот раз с полученных в первом приближении q значений неизвестных и т.д. Система считается решенной, когда последовательные значения, полученные для всех неизвестных, достаточно близки, чтобы их можно было принять равными.

Если подсистемы также нельзя решить достаточно строго, то их, в свою очередь, решают с помощью последовательных приближений, используя ту же методику.

Пример 3. Найти корни системы уравнений

$$x \cdot \lg x + z^2 = -0{,}05 \qquad (1)$$
$$8 \cdot x^2 \cdot z + 0{,}1 \cdot y = 0{,}15 \qquad (2)$$
$$x + y + z = 1 \qquad (3)$$

где x, y, z – мольные доли.

Решение. Делим систему на две подсистемы: в первую входит уравнение (1), а во вторую - уравнения (2) и (3).

Уравнение (1) становится определённым, если принять для одного из неизвестных какое-нибудь значение. В нулевом приближении принимаем $x_0=0{,}4$ (принято произвольно, но в пределах между 0 и 1, так как неизвестные представляют собой мольные доли).

Из уравнения (1) получаем в первом приближении

$$z_1=\sqrt{-0{,}05-\ x_0\cdot\lg x_0}=\sqrt{-0{,}05-\ 0{,}4\cdot\lg 0{,}4}=0{,}33$$

Подставив значение $z_1=0{,}33$ в подсистему, содержащую уравнения (2) и (3), получим:

$$8\cdot x_1^2\cdot 0{,}33+0{,}1\cdot y_1=0{,}15$$
$$x_1+y_1+0{,}33=1$$

Решая эту подсистему в первом приближении, находим $x_1=0{,}197$ и $y_1=0{,}473$.

В связи с тем, что значение $x_1=0{,}197$, полученное в первом приближении, отличается от принятой произвольно величины $x_0=0{,}4$, повторяем вычисления, принимая на этот раз в качестве исходной величину, полученную при расчёте.

При этом

$$z_2=\sqrt{-0{,}05-\ x_1\cdot\lg x_1}=\sqrt{-0{,}05-\ 0{,}197\cdot\lg 0{,}197}=0{,}298$$

и т. д.

В приближении различного порядка получаем следующие значения корней, приведенные в таблице 1.

Таблица 1 – Значения корней в приближении различного порядка

Порядок приближения	x	y	z
0	0,4	–	–
1	0,197	0,473	0,33
2	0,205	0,497	0,298
3	0,204	0,495	0,301
4	0,204	0,495	0,301

Корни системы уравнений имеют, таким образом, следующие значения: x=0,204, y=0,495 и z=0,301.

3 Вычисление определенных интегралов

3.1 Графический метод

Для вычисления определенного интеграла $I = \int_{x_0}^{x_n} F(x)dx$ необходимо построить график функции F(x) и определить площадь S, ограниченную кривой F(x), осью Ox и прямыми $x=x_0$ и $x=x_n$. Численное значение интеграла I получают, умножив величину площади S на ее масштабный коэффициент.

3.2 Метод Симпсона

Делят интервал интегрирования на n равных отрезков (иногда достаточно одного отрезка) и аппроксимируют кривую F(x) дугами парабол. Для вычисления интеграла используют формулу

$$I = \int_{x_0}^{x_n} F(x)dx = \frac{x_n - x_0}{6n}\left\{F(x_0) + F(x_n) + 2[F(x_1) + F(x_2) + \cdots + F(x_{n-1})] + 4\left[F\left(x_{1/2}\right) + F\left(x_{3/2}\right) + \cdots + F\left(x_{n-1/2}\right)\right]\right\}$$

где $x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}$ - абсциссы точек разбивки интервала интегрирования;

$x_{1/2}, x_{3/2}, \ldots x_{n-1/2}$- абсциссы середин отрезков, на которые разбит интервал интегрирования; $F(x_0) \ldots, F\left(x_{n-1/2}\right)$ - значения функции F(x) в точках $x=x_0,\ldots,x=x_{n-1/2}$

Пример 4: Вычислить определенный интеграл $I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ и сравнить найденные приближенные значения с величиной, полученной аналитически:

$$I = arctg\, x \;|_0^1 = \frac{\pi}{4} = 0{,}785398$$

Решение. Строим график функции $F(x)=1/(1+x^2)$.

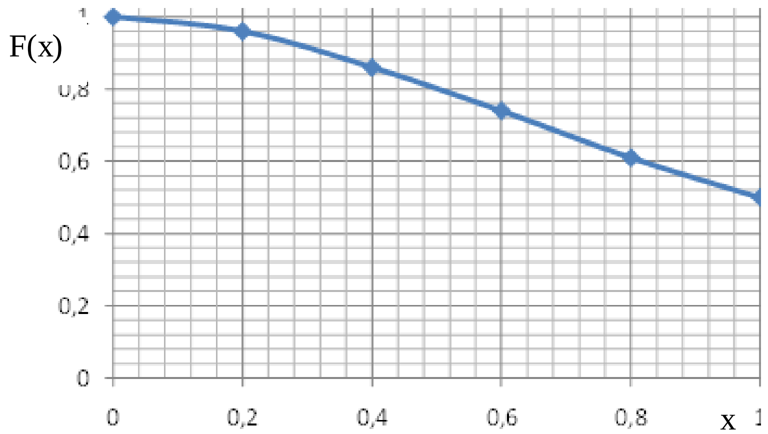

Рисунок 2 – Графическое интегрирование

Согласно рисунку 2, площадь, ограниченная кривой S=19,61 см^2. Так как 1 см^2 на графике соответствует $0{,}2 \cdot 0{,}2 = 4 \cdot 10^{-2}$, интеграл равен

$$I = 19{,}63 \cdot 4 \cdot 10^{-2} = 0{,}7852$$

Вычислим этот же интеграл по формуле Симпсона. Разделим интеграл интегрирования на два (n=2) отрезка. Следовательно,

$$x_0=0;\ x_1=0{,}5;\ x_2=1;\ x_{1/2}=0{,}25 \text{ и } x_{3/2}=0{,}75.$$

Вычислив значение функции $F(x)=1/(1+x^2)$ при указанных значениях x получим:

$$F(x_0) = \frac{1}{1+0} = 1; \qquad F(x_1) = \frac{1}{1+0{,}5^2} = 0{,}8;$$

$$F(x_2) = \frac{1}{1+1} = 0{,}5; \quad F(x_{1/2})=0{,}94118 \text{ и } F\left(x_{3/2}\right) = 0{,}64$$

Подставив эти величины в уравнение, найдем:

$$I = \frac{1-0}{6 \cdot 2}[1 + 0{,}5 + 2 \cdot 0{,}8 + 4(0{,}94118 + 0{,}64)] = 0{,}78539\ldots$$

Как видно из сравнения полученных величин, при графическом интегрировании только три первые значащие цифры получаются точными, в то время как по формуле Симпсона, даже если разделить интеграл интегрирования лишь на два отрезка, точными оказываются пять первых значащих цифр.

Индивидуальные задания

1. Определить графическим методом потери тепла на единицу трубы Q_n/l из уравнения

$$Q_n/l=2{,}39[2{,}15^3- \left(\frac{t+273}{100}\right)^3]+0{,}12(290-t)^{1{,}99}=$$

$$1{,}42[(\frac{t+273}{100})^3-1{,}74^3]+1{,}17(t-23)^{1{,}3}\ \text{(Вт/м)},$$

где t – неизвестная температура.

2 Определить графическим методом потери тепла на единицу трубы Q_n/l из уравнения $Q_n/l=3{,}16[1{,}72^4-(\frac{t+273}{100})^4]+1{,}75(270-t)^{2{,}5}=2{,}02[(\frac{t+273}{100})^4-2{,}43^4]+2{,}24(t-24)^2$ (Вт/м), где t – неизвестная температура.

3 Определить графическим методом потери тепла на единицу трубы Q_n/l из уравнения $Q_n/l=4{,}26[1{,}25^3-(\frac{t+273}{100})^3]+3{,}28(290-t)^{0{,}99}=2{,}38[(\frac{t+273}{100})^3-0{,}92^3]+0{,}92(t-25)^{0{,}3}$ (Вт/м),

4 Определить графическим методом потери тепла на единицу трубы Q_n/l из уравнения $Q_n/l=2{,}16[1{,}72^4-(\frac{t+273}{100})^4]+2{,}75(270-t)^{2{,}5}=5{,}07[(\frac{t+273}{100})^4-2{,}43^4]+5{,}27(t-24)^2$ (Вт/м), где t – неизвестная температура.

5 Определить графическим методом потери тепла на единицу трубы Q_n/l из уравнения $Q_n/l=2{,}37[5{,}53^4-(\frac{t+273}{100})^4]+7{,}1(280-t)^{1{,}29}=2{,}66[(\frac{t+273}{100})^4-2{,}99^4]+1{,}73(t-25)^{1{,}25}$ (Вт/м), где t – неизвестная температура.

6 При помощи методов последовательных приближений найти корень уравнения $f(x)=1/(6x)+\cos x=0$.

7 При помощи методов последовательных приближений найти корень уравнения $f(x)=1/(7x)+\lg x=0$.

8 При помощи методов последовательных приближений найти корень уравнения $f(x)=1/(4x)+\sin x=0$.

9 При помощи методов последовательных приближений найти корень уравнения $f(x)=1/(3{,}5x)+\ln x=0$.

10 При помощи методов последовательных приближений найти корень уравнения $f(x)=1/(2x)+\lg x=0$.

11 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} x+\ \ y+\ \ z=2, \\ -2x-2y-2z=-4, \\ 6x+6y+6z=12. \end{cases}$, где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

12 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} x+\ y+z=2, \\ 2x+2y \quad\ \ =-2, \\ 3x+3y+z=0; \end{cases}$, где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

13 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} x+\ y+z=2, \\ 2x+2y \quad\ \ =-2, \\ 3x+\ \ y+z=4; \end{cases}$, где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

14 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} 4x-\ 7y+8z=0, \\ x-\ 2y-\ z=-3, \\ 6x-11y+6z=6; \end{cases}$, где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

15 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} 4x-7y+8z=0, \\ x-2y-\ \ z=-3, \\ 6x+2y+3z=-9; \end{cases}$, где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

16 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} x+\ y+z=2, \\ 2x+2y \quad\ \ =-2, \\ 3x+3y+z=0; \end{cases}$, где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

17 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} 4x-\ 7y+8z=0, \\ x-\ 2y-\ z=-3, \\ 6x-11y+6z=-6; \end{cases}$, где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

18 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} 4x-8y-4z=-12 \\ x-2y-z=-3 \\ 6x-12y-6z=-18 \end{cases}$ где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

19 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} 2x-y+3z=9 \\ 3x-5y+z=-4 \\ 4x-7y+z=5 \end{cases}$ где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

20 Найти корни системы уравнений $\begin{cases} 2x-3y+z=-1 \\ 5x+2y-z=0 \\ x-y+2z=3 \end{cases}$ где *x*, *y*, *z* – мольные доли.

21 Вычислить определенный интеграл $I = \int_0^1 \frac{2dx}{2+x^2}$ и сравнить найденные приближенные значения с величиной, полученной аналитически: $I = arctgx \Big|_0^1 = \frac{\pi}{11} = 0{,}28545$.

22 Вычислить определенный интеграл $I = \int_0^1 \frac{dx}{3+x^2}$ и сравнить найденные приближенные значения с величиной, полученной аналитически: $I = arcctgx \Big|_0^1 = \frac{\pi}{3} = 1{,}0467$.

23 Вычислить определенный интеграл $I = \int_0^1 \frac{2dx}{2+x^2}$ и сравнить найденные приближенные значения с величиной, полученной аналитически: $I = arctgx \Big|_0^1 = \frac{\pi}{4} = 0{,}78598$.

24 Вычислить определенный интеграл $I = \int\limits_0^1 \frac{3dx}{1+x^2}$ и сравнить найденные приближенные значения с величиной, полученной аналитически: $I = arctgx \Big|_0^1 = \frac{\pi}{1,34} = 2,35$.

25 Вычислить определенный интеграл $I = \int\limits_0^1 \frac{4dx}{2+x^2}$ и сравнить найденные приближенные значения с величиной, полученной аналитически: $I = arcctgx \Big|_0^1 = \frac{\pi}{2} = 1,57$.

Список использованных источников

1 ***Батунер, Л.М.*** Математические методы в химической технике [Текст]: уч. / Л.М. Батунер, М.Е. Позин. - 5-е изд. - М.: Химия. - 1968. - 823 с.

2 ***Безикович, Я.*** Приближенные вычисления [Текст]: уч. / Я. Безикович. - Гостехиздат. - 1949. - 354 с.

3 ***Вычислительная математика в химии и химической технологии*** [Текст]: уч. пособие / С.В. Брановицкая, Р.Б. Медведев, Ю.Я. Фиалков. - Высшая школа. - Головное издательство. - 1986. - 216 с.

4 ***Пентковский, М.В.*** Считающие чертежи (номограммы) [Текст]: уч. пособие. - ГИТТЛ. - 1953. - 157 с.

5 Семендяев К.А. Эмпирические формулы. М.: Гостехиздат. - 1933. - 88 с.

6 ***Яковлев, К.И.*** Математическая обработка результатов измерений [Текст]: уч. пособие / К.И. Яковлев. - Гостехиздат. - 1953. - 274 с.

7 ***Флореа, О.*** Расчеты по процессам и аппаратам химической технологии [Текст]: уч. / О. Флореа, О.М Смигельский. - Химия. - 1971. - 448 с.

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра фундаментальной химии и химической технологии

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
_____________О.Г. Локтионова
«____»______________ 2016 г.

ПРИБЛИЖЕННЫЕ РЕШЕНИЯ

Методические указания
по выполнению лабораторных работ
для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия
и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Курск 2016

УДК 519.65

Составитель: Лысенко А.В.

Рецензент
Доктор химических наук, профессор *Л.М. Миронович*

Приближенные решения: методические указания по выполнению лабораторных работ для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. Курск, 2016, 15 с.: ил. 2, табл.. Библиогр.: 15 с.

Излагаются методические рекомендации к лабораторной работе «Приближенные решения» по дисциплине «Вычислительные методы в химии». Приведены теоретические основы по способам решения уравнений, систем уравнений и вычисления определенных интегралов. Рассмотрены примеры решения типовых задач. Для студентов представлены индивидуальные задания для решения.

Методические указания предназначены для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать Форма 60х84 1/16.
Усл. печ. л. Уч.-изд.л. Тираж 100 экз. Заказ. Бесплатно
Юго-Западный государственный университет.
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.