**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

« 5 » февраля 2016 г.

# МЕТОДЫ ПРИБЛИЖЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

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

Курск 2016

УДК 378.147.88

Составитель: А.В. Лысенко

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

**Методы приближенных вычислений в химии и химической технологии**: методические указания по выполнению лабораторной работы / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. Курск, 2016, 28 с.: ил., табл. Библиогр.: 28 с.

Излагаются методические рекомендации к лабораторной работе «Методы приближенных вычислений в химии и химической технологии» по дисциплине «Вычислительные методы в химии». Приведены элементы теории подобия. Рассмотрены примеры решения типовых задач. Представлены индивидуальные задания.

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 5.02.16 Форма 60x84 1/16.
Усл. печ. л. 1,7 Уч.-изд.л. 1,6 Тираж 100 экз. Заказ. 56 Бесплатно
Юго-Западный государственный университет.
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

## Содержание

**Цель работы:** Освоить методы приближенных вычислений в химии и химической технологии с помощью стандартных компьютерных программ

## 1 Элементы теории погрешностей

### 1.1 Приближенные значения величин. Источники и классификация погрешностей

При решении задач химии и химической технологии обычно оперируют с приближенными значениями тех или иных величин (приближенными числами).

**Приближенными** называется число, незначительно отличающееся от точного и заменяющее его в вычисления. Приближенное число имеет практическую ценность лишь тогда, когда можно указать степень его точности, т.е. оценить его погрешность.

**Источниками погрешностей** могут являться:

1. неточное математическое описание реальных процессов.

2. неточное задание исходной информации. Исходные величины являются в основном экспериментальными данными, поэтому степень их точности зависит от совершенства измерительных приборов и надежности операции измерения.

3. применение для решения задач приближенных методов. Получение точного решения задачи часто связано с большими, а иногда и непреодолимыми трудностями, поэтому приходится прибегать к приближенному решению.

4. конечная аппроксимация бесконечных математических процессов. Например, при вычислении $e^x$ (либо sinx, cosx, lnx и др.) путем разложения в ряд

$$e^x=1+x+\frac{x^2}{2*1}+\frac{x^3}{3*1}+\cdots$$

в качестве приближенного значения $e^x$ принимают сумму конечного числа слагаемых, допуская при этом погрешность.

5. округление исходных данных, промежуточных или окончательных результатов.

6. выполнение действий над приближенными числами приводит к приближенному числу.

Погрешности, возникающие во всех указанных случаях, можно подразделить на следующие группы:

- **неустранимые** (случаи 1, 2, 6), т.е. такие, которые неконтролируемые в процессе решения задачи и могут быть уменьшены только за счет более точного математического описания задачи и исходных данных. Исследование неустранимой погрешности может быть полезно для снижения предъявляемых требований к точности применяющегося метода: нецелесообразно применять метод решения задачи с погрешностью, существенно меньшей, чем величина неустранимой погрешности;
- **погрешность метода** (случай 3);
- **погрешность усечения** (случай 4); ее называют еще погрешностью ограничения, или остаточной погрешностью;
- **вычислительная погрешность**, или погрешность округления (случай 5).

При решении конкретной задачи те или иные погрешности могут отсутствовать либо оказывать ничтожно малое влияние. Однако в общем случае для полного анализа погрешностей необходимо учитывать все их виды.

## 1.2 Абсолютная и относительная погрешности

Пусть x - точное число (истинное значение величины), a - приближенное число (приближенное значение величины).

Погрешностью, или ошибкой, $\Delta a$ приближенного числа a называется разность между точным числом x и его приближенным значением a, т.е.

$$\Delta a = x - a. \qquad (1.1)$$

Если $x<a$, то $\Delta a<0$; если $x>a$, то $\Delta a>0$. В тех случаях, когда знак погрешности не представляет интереса, точность характеризуют абсолютной погрешностью.

Абсолютной погрешностью $\Delta$ приближенного числа a называется абсолютная величина разности между точным числом x и его приближенными значением a:

$$\Delta = |x - a|. \qquad (1.2)$$

Найти абсолютную погрешность $\Delta$ по формуле (1.2) не всегда возможно, так как точное число x чаще всего бывает неизвестно. Однако можно указать число, оценивающее сверхабсолютную погрешность приближенного числа а, т.е. границу абсолютной погрешности. Например, при измерении температуры тела мы можем судить о точности зафиксированной температуры, лишь оценивая точность измерения. Если мы убеждены, что погрешность при измерении температуры не больше 0,1°С, то можно считать, что абсолютная погрешность Δ не превышает 0,1°С. Это число и является границей абсолютной погрешности и называется **предельной абсолютной погрешностью**.

Следовательно, **предельная абсолютная погрешность** $\Delta_a$ приближенного числа а - это положительное число, заведомо превышающее абсолютную погрешность (или в крайнем случае равно ей), т.е.

$$\Delta = |x - a| \leq \Delta_a \tag{1.3}$$

Отсюда следует, что точное число $x$ заключено в границах:

$$a - \Delta_a \leq a + \Delta_{a'}$$

где $a - \Delta_a -$ приближенное значение числа $x$ по недостатку, а $a + \Delta_{a'} -$ по избытку. Применяют также следующую форму записи:

$$x = a \pm \Delta_{a'} \tag{1.4}$$

**Пример 1.1.** Определить абсолютную и предельную абсолютную погрешности числа а=0,67, взятого в качестве приближенного значения числа х=2/3.

**Решение.** Абсолютную погрешность Δ находим по формуле (1.2):

$$\Delta = |x - a| = \left|-\frac{1}{300}\right| .$$

В качестве предельной абсолютной погрешности $\Delta_a$ из всех чисел, удовлетворяющих неравенству (1.3), обычно выбирают возможно меньшее и простое по записи.

В нашем примере за предельную абсолютную погрешность $\Delta_a$ можно принять число 1/300 и любое большее число. В десятичной записи будем иметь 1/300= 0,0033… Заменяя это число большим и более простым по записи, примем:

$$\Delta_a = 0,004.$$

Абсолютная и предельная абсолютная погрешности являются числами именованными: они выражаются в тех же единицах (размерностях), что и определяемая величина.

Знания абсолютной (или предельной абсолютной) погрешности недостаточно для характеристики точности измерения или вычисления. Например, если при взвешивании двух тел получены результаты $a_1$=1000±1г и $a_2$=10±1 г, то, несмотря на совпадение предельных абсолютных погрешностей $\Delta_1 = \Delta a_2$=1 г, точность взвешивания в первом случае выше, чем во втором. Таким образом, следует учитывать величину отношения абсолютной или предельной абсолютной погрешности к измеряемой величине, которая носит название относительной или предельной относительной погрешности.

Относительной погрешностью δ приближенного числа $a$ называется отношение абсолютной погрешности Δ этого числа к модулю соответствующего точного числа x(x≠0), т.е.

$$\delta = \frac{\Delta}{|x|} \tag{1.5}$$

Поскольку точное число обычно неизвестно, его заменяют приближенным числом. Тогда

$$\delta = \frac{\Delta}{|a|} \tag{1.6}$$

Отсюда $\Delta = \delta^{|x|}$, или $\Delta = \delta^{|a|}$.

На практике обычно имеют дело с предельной относительной погрешностью $\delta_a$, представляющее собой число, заведомо превышающее относительную погрешность (или, в крайнем случае, равное ей):

$$\delta \le \delta_a. \tag{1.7}$$

Предельную относительную погрешность $\delta_a$ можно считать равной отношению предельной абсолютной погрешности $\Delta_a$ к модулю точного (или приближенного) числа:

$$\delta_a = \frac{\Delta_a}{|x|}, \tag{1.8}$$

или

$$\delta_a = \frac{\Delta_a}{|a|}. \qquad (1.9)$$

Отсюда $\Delta_a = \delta_a |x|$, или $\Delta_a = \delta_a |a|$.

Относительная и предельная относительная погрешности не зависят от единиц измерения соответствующих величин и выражаются часто в процентах.

## 1.3. Верные значащие цифры приближенного числа

Степень точности приближенного числа характеризуется числом его верных значащих цифр.

**Значащими цифрами числа** называют все цифры в его записи, начиная с первой ненулевой слева. Например, числа 0,003064 и 0,00306400 имеют соответственно 4 и 6 значащих цифр (подчеркнутые цифры - значащие).

Известно, что всякое положительное число a может быть представлено в виде конечной или бесконечной десятичной дроби:

$$a = \alpha_1 \cdot 10^m + \alpha_2 \cdot 10^{m-1} + \ldots + \alpha_n \cdot 10^{m-n+1} + \ldots, \qquad (1.10)$$

где $\alpha_i (i = 1, 2, \ldots, n, \ldots)$ - цифры числа a, причем $\alpha_1 \neq 0$;

m - некоторое целое число, равное степени числа 10 старшего разряда числа a. Например, число a=0,02345, согласно (1.10), запишется так:

$$0{,}02345 = 2 \cdot 10^{-2} + 3 \cdot 10^{-3} + 4 \cdot 10^{-4} + 5 \cdot 10^{-5},$$

Здесь $m = -2$; $\alpha_1 = 2$.

Из записи (1.10) видно, что значение единицы n-го десятичного разряда равно $10^{m-n+1}$.

Приближенное число a содержит n верных значащих цифр в узком смысле, если абсолютная погрешность Δ этого числа не превышает половины единицы десятичного разряда, выражаемого n-й значащей цифрой (считая слева направо), т.е. выполняется неравенство

$$\Delta \leq 0{,}5 \cdot 10^{m-n+1} \qquad (1.11)$$

Приближенное число a содержит n верных значащих цифр в широком смысле, если абсолютная погрешность Δ этого числа не превышает единицы десятичного разряда, выражаемого n-й значащей цифрой (считая слева направо), т.е. выполняется неравенство

$$\Delta \leq 1 \cdot 10^{m-n+1}. \qquad (1.12)$$

**Пример 1.3.** Определить количество верных значащих цифр (в узком и широком смысле) в числе a = 0,04318, если известна его абсолютная погрешность Δ=0,2 · 10-4.

**Решение.** В силу (1.1) имеем:

$$\Delta = 0{,}2 \cdot 10^{-4} < 0{,}5 \cdot 10^{-4},$$

т.е. для цифры 1 числа а условие (1.1) выполняется; следовательно, она является верной в узком смысле. Все значащие цифры, предшествующие единице, тоже верные. Таким образом, число верных значащих цифр в узком смысле n= 3 (4, 3, 1).

В силу (1.12) имеем:

$$\Delta = 0{,}2 \cdot 10^{-4} < 1 \cdot 10^{-4},$$

т.е. как и в предыдущем случае, цифра 1 верная в широком смысле. Следовательно, число верных значащих цифр в широком смысле также равно трем (4, 3, 1).

Цифры, не являющиеся верными, называются **сомнительными**. В примере 1.3 сомнительной будет цифра 8.

### 1.4. Правила округления чисел

Чтобы округлить число, точное или приближенное, до nзначащих цифр, отбрасывают все цифры, или, если это нужно для сохранения разрядов, заменяют их нулями. При этом:

- если первая из отбрасываемых цифр больше 5, то последнюю из оставшихся цифр увеличивают на единицу. Например, округляя число 67,382 до десятых долей, получим 67,4;

- если первая из отбрасываемых цифр равна 5 и среди следующих за ней цифр имеются отличные от нуля, то последнюю из оставшихся цифр увеличивают на единицу. Например, округляя число 46,2501 до десятых долей, получим 46,3;

- если первая из отбрасываемых цифр равна 5 и за ней следуют нули, то последняя из оставшихся цифр сохраняется неизменной, если она четная, и увеличивается на единицу, если она нечетная (правило четной цифры). Например, при округлении числа 13,6500 до десятых долей, получим 13,6, а при округлении числа 13,7500 до десятых долей, получим 13,8;

- если первая из отбрасываемых цифр меньше 5, то оставшиеся цифры не изменяются. Например, округляя число 81,2347 до сотых долей, получим 81,23.

При соблюдении этих правил, абсолютная погрешность округления не превосходит половины единицы разряда, определяемого последней оставленной значащей цифрой.

При округлении приближенного числа a получаем новое приближенное число $a_1$, предельная абсолютная погрешность которого равна сумме предельной абсолютной погрешности числа a и погрешности округления, т.е.

$$\Delta_{a1} = \Delta_a + \Delta_{окр}. \tag{1.13}$$

## 1.5. Связь между количеством верных цифр и погрешностью приближенного числа

По количеству верных значащих цифр приближенного числа легко определить его предельную абсолютную погрешность, воспользовавшись неравенствами (1.11), (1.12).

**Пример 1.5.** Определить предельные абсолютные погрешности $\Delta_a$ и $\Delta_b$ приближенных чисел $a = 68{,}347$ и $b = 3{,}64$, если они содержат только верные цифры в узком и широком смысле соответственно.

**Решение.** Поскольку для числа $a$=68,347 последняя цифра 7, стоящая в разряде тысячных долей, является верной значащей цифрой в узком смысле, то в силу (1.11)

$$\Delta \le 0{,}5\cdot 10^{-3}, \text{ т.е. } \Delta_a = 0{,}5\cdot 10^{-3}.$$

Последняя верная в широком смысле цифра 4 приближенного числа $b$=3,64 стоит в разряде сотых долей. В силу (1.12)

$$\Delta \le 1\cdot 10^{-2}, \text{ т.е. } \Delta_b = 1\cdot 10^{-2}.$$

По известной абсолютной погрешности приближенного числа, используя неравенства (1.11), (1.12), можно определить число верных значащих цифр (в узком и широком смысле) (пример 1.3).

По числу верных значащих цифр приближенного числа а можно определить его предельную относительную погрешность, воспользовавшись формулами:

$$\delta_a = \frac{1}{2\alpha_1 . 10^{n-1}} \text{ (если цифры верны в узком смысле)} \qquad (1.14)$$

и

$$\delta_a = \frac{1}{\alpha_1 . 10^{n-1}} \text{ (если цифры верны в широком смысле)} \qquad (1.15)$$

где $\alpha_1$ - первая значащая цифра приближенного числа; n - количество верных значащих цифр.

**Пример 1.7.** Объем газа V газа в реакционном сосуде, равный 711 $м^3$, найден с относительной погрешностью δ=1%. Определить число верных цифр приближенного числа V.

**Решение.** Подставив в неравенство (1.16) $\alpha_1$=7, $\delta_V = 0{,}01$, получим: (7+1)·0,01≤$10^{-s}$; 0,08≤$10^{-s}$. Наибольшее значение s, для которого выполняется это равенство, равно 1. Тогда число верных цифр n=s+1=1+1=2.

Из неравенства (1.16) следует, что если $\delta_a \leq \frac{1}{10^n}$, то число а заведомо имеет n верных десятичных знаков в широком смысле; если же $\delta_a \leq \frac{1}{2 \cdot 10^n}$, то число а имеет n верных знаков в узком смысле.

Приближенные числа принято записывать так, чтобы вид числа показывал его абсолютную погрешность, т. е. в записи числа сохраняют только верные значащие цифры. Например, если в результате измерения температуры некоторого тела найдена величина 46,2˚С, то это означает, что температура определена с точностью до 0,05˚С. Если же измерения производили с точностью до 0,005˚С, то следует считать, что измеренная температура равна 46,20˚С.

Обычно приближенные числа записывают в виде произведения двух сомножителей, например,

$3560000=356\cdot10^4=356\cdot10^6$. Причем, если в числе 3560000 верными являются лишь две значащие цифры, то его следует записать так $3{,}6\cdot10^6$; если верны три цифры, - то $3{,}56\cdot10^6$; при четырех верных цифрах - $3{,}560\cdot10^6$. Число 0,00061 записывается $6{,}1\cdot10^{-4}$, если в нем две верные значащие цифры, $6{,}10\cdot10^{-4}$ - при трех верных значащих цифрах и т. п. При такой форме записи количество верных значащих цифр приближенного числа равно количеству верных цифр первого сомножителя, который обычно записывается так, что запятая ставится после первой слева значащей цифры, а предельная абсолютная погрешность приближенного числа равна произведению абсолютной погрешности первого сомножителя на 10 в соответствующей степени. Например, если $a=1{,}27\cdot10^{-4}$, то $\Delta_a=\frac{1}{2}\cdot0{,}01\cdot10^{-4}=0{,}005\cdot10^{-4}$.

На практике предельная абсолютная и предельная относительная погрешности часто называются просто абсолютной и относительной погрешностями, так как с истинными значениями абсолютной и относительной погрешностей почти не приходится иметь дело. В записях абсолютной и относительной погрешностей обычно сохраняют одну или две значащие цифры.

## 1.6. Погрешность суммы, разности, произведения, частного, степени и корня приближенных чисел

При выполнении действий над приближенными числами получают также приближенное число.

Рассмотрим некоторые правила, позволяющие определить предельную абсолютную и предельную относительную погрешности результата действий над приближенными числами.

### 1.6.1. Погрешность суммы

**Предельная абсолютная погрешность алгебраической суммы нескольких приближенных чисел** равна сумме предельных абсолютных погрешностей слагаемых.

Пусть $a_1$, $a_2, \ldots, a_n$ - данные приближенные числа; $\Delta_{a1}$, $\Delta_{a2}$, …, $\Delta_{an}$ - их предельные абсолютные погрешности, а $u= a_1+a_2+_{\ldots}+a_n$ - алгебраическая сумма этих чисел, тогда

$$\Delta_u= \Delta_{a1}+ \Delta_{a2}+ \ldots+ \Delta_{an}. \qquad (1.17)$$

Зная предельную абсолютную погрешность $\Delta_u$ суммы u, можно определить ее предельную относительную погрешность $\delta_u$ по формуле

$$\delta_u = \Delta_u / |u| \tag{1.18}$$

Положим, $a_1$, $a_2$, ... $a_n$ - десятичные дробные числа с различным количеством верных знаков после запятой. Для того чтобы при их сложении не производить вычислений с лишними знаками, не оказывающими влияния на точность результата, целесообразно поступать следующим образом:

- выделить числа с наименьшим количеством знаков после запятой, т. е. имеющие наибольшую абсолютную погрешность, и оставить их без изменения;

- остальные числа округлить таким образом, чтобы сохранить в них на один знак больше, чем в выделенных числах;

- произвести сложение данных чисел, учитывая все сохраненные знаки;

- полученный результат округлить на один знак. Для оценки точности результата следует найти:

а) сумму предельных абсолютных погрешностей исходных данных $\Delta_1=\Delta a_1+\Delta a_2+\ldots\Delta a_n$

б) абсолютную величину суммы погрешностей (с учетом их знаков) округления слагаемых ($\Delta_2$);

в) погрешность округления результата ($\Delta_3$).

Тогда полная погрешность результата будет равна:

$$\Delta_u=\Delta_1+\Delta_2+\Delta_3$$

**Пример 1.8.** Найти суммарную массу колбы с газообразным хлором, если массы колбы и хлора соответственно равны 327,4 и 3,0854 г (в записи чисел все цифры верны в широком смысле).

**Решение.** Поскольку в данных числах все цифры верны (в широком смысле), то их предельные абсолютные погрешности соответственно равны 0,1 и 0,0001 г. Число 327,4, как менее точное, оставляем без изменений, а второе число 3,0854 округляем таким образом, чтобы сохранить в нем на один знак больше, чем в первом. Тогда получим 3,09. Найдем сумму:

$$327{,}4 \text{ г} + 3{,}09 \text{ г} = 330{,}49 \text{ г}.$$

Полученный результат округляем до 0,1. Суммарная масса будет равно: u=330,5 г. Оценим Точность этого результата, для чего вычислим:

$$\Delta_1=0,1\ 4\text{-}0,0001=0,1001\ (г);$$
$$\Delta_2=|\ 3,09-3,08541=0,0046\ (г);$$
$$\Delta_3=|\ 330,49-330,51=0,01\ (г);$$
$$\Delta_u=\Delta_1+\Delta_2+\Delta_3=0,1001\ 4\ 0,0046+0,01=0,1147\ (г);$$
$$\Delta_u<0,2\ г.$$

Окончательно получим: и = 330,5 ± 0,2 г.

Таким образом, величина полной погрешности Δu определяется в основном предельной абсолютной погрешностью наименее точного из заданных чисел, равной 0,1 г.

### 1.6.2. Погрешность разности

Пусть $a_1$ и $a_2$ - заданные приближенные числа, $\Delta_{a1}$ и $\Delta_{a2}$ - их предельные абсолютные погрешности. Тогда предельная абсолютная погрешность разности $u=a_1-a_2$ будет равна сумме предельных абсолютных погрешностей уменьшаемого вычитаемого:

$$\Delta_u=\Delta_{a1}+\Delta_{a2} \tag{1.19}$$

Предельную относительную погрешность $\delta_u$ разности u определяют по формуле

$$\delta_u=\Delta_u/|u| \tag{1.20}$$

**Пример 1.9.** При электроосаждении меди на катоде взвешиванием на аналитических весах найдена суммарная масса катода и меди, равная 13,8476 г. Рассчитать, сколько меди осадилось при электролизе, если известна масса катодной пластины, равная 12,18 г (в записи чисел все цифры верны в широком смысле).

**Решение.** Обозначим число 13,8476 г через $a_1$, 12,18 г - $a_2$. Так как по условию в этих числах все цифры верны в широком смысле, то их предельные абсолютные погрешности соответственно равны: $\Delta_{a1}=0,0001$ г, $\Delta_{a2}=0,01$ г. Для вычитания чисел $a_1$ и $a_2$ с различными погрешностями $\Delta a_1$ и $\Delta a_2$ воспользуемся правилом, сформулированным в п. 1.6.1. Число $a_2$ оставим без изменений, как менее точное; в числе $a_l$ пользуясь правилами округления, оставим на один десятичный знак больше, чем в$a_t$,после чего получим $a_x$=13,848 г (при этом абсолютная величина погрешности округления числа $a_1$ равна $\Delta_{окр}$ =|13,848-13,8476|=0,0004 г).

Вычислим разность u=13,848-12,18=1,668 (г). Округляя до двух десятичных знаков, получим u=1,67 г.

Полная погрешность этого числа складывается из трех слагаемых:

- суммы предельных абсолютных погрешностей исходных данных:

$$\Delta_1= \Delta_{a1}+\Delta_{a2}=0{,}0001 + 0{,}01=0{,}0101;$$

- абсолютной величины погрешности округления $a_1$:

$$\Delta_2=\Delta_{окр}=0{,}0004;$$

- заключительной погрешности округления результата u:

$$\Delta_3=|1{,}668-1{,}671|=0{,}002.$$

Следовательно,

$$\Delta_u=\Delta_1+\Delta_2+\Delta_3=0{,}0101+0{,}0004+0{,}002=0{,}0125<0{,}02.$$

Таким образом, окончательно имеем:

$$u=1{,}67\pm0{,}02 \text{ г.}$$

Справедливо утверждение: при вычитании приближенных чисел в результате следует сохранить столько десятичных знаков, сколько их в наименее точном числе.

При вычитании близких чисел предельная относительная погрешность разности будет значительно превышать предельные относительные погрешности уменьшаемого и вычитаемого.

Так в примере 1.9 имеет:

$$\delta_{a1} = \frac{\Delta_{a1}}{|a_1|} = \frac{0.0001}{13.8476} \approx 0.0007\%;$$

$$\delta_{a2} = \frac{\Delta_{a2}}{|a_2|} = \frac{0.01}{12.18} \approx 0.08\%;$$

$$\delta_u = \frac{\Delta_u}{|u|} = \frac{0.02}{1.67} \approx 1.2\%,$$

т.е $\delta_u > \delta_{a2},$ в 15 раз и $\delta_u > \delta_{a1}$ в 1714 раз.

Поэтому во избежание потерь точности при вычислениях не следует применять формулы (если это возможно), в которые входит разность близких чисел. В противном случае следует по возможности увеличить точность исходных данных , т.е, брать их с достаточным числом запасных верных знаков: если известно, что при вычитании чисел $a_1$ и $a_2$ и первые m значащих их цифр пропадают, а результат необходимо получить с n верными значащими цифрами, то следует взять $a_1$ и $a_2$ с m+n верными значащими цифрами.

### 1.6.3. Погрешность измерения

**Предельная относительная погрешность произведения нескольких приближенных чисел** равна сумме предельных относительных погрешностей сомножителей:

$$\delta_u = \delta_{a1} + \delta_{a2} + \cdots + \delta_{a_n}, \tag{1.21}$$

где $u=a_1a_2a_3...a_n$.

Зная предельную относительную погрешность $\delta_u$ произведения u, можно определить его предельную абсолютную погрешность $\Delta_u$ по формуле

$$\Delta_u = |u|\delta_u. \tag{1.22}$$

**Пример 1.10**˙ Определить количество молей вещества, содержащегося в 34,5 мл раствора с концентрацией 0,0715 М (в записи чисел все цифры верны в широком смысле).

**Решение.** Обозначим число 34,5 через $a_1$, 0,0715 - через $a_2$, искомый результат (количество молей вещества) - через u. Поскольку в исходных данных все цифры верны в широком смысле, можем определить их предельные относительные погрешности $\delta_{a1}$ и $\delta_{a2}$, воспользовавшись формулой (1.15):

$$\delta_{a1} = \frac{1}{a_1 * 10^{n-1}} = \frac{1}{3 * 10^2} \approx 0.33\%$$

$$\delta_{a2} = \frac{1}{a_1 * 10^{n-1}} = \frac{1}{7 * 10^2} \approx 0.14\%.$$

В соответствии с формулой (1.21)

$$\delta_u = '\delta_{a1} + \delta_{a2} = 0.47\% \approx 0.5\%.$$

Поскольку $\delta_u = 0.5 * 10^{-2} < 1 * 10^{-2}$ (см. 1.5), то произведение u будет иметь, по меньшей мере две верных значащих цифры в широком смысле:

$$u = 34.5 * 0.0715 \approx 2.47.$$

По формуле (1.22) вычислим предельную абсолютную погрешность произведения:

$$\Delta_u = |u|\delta_u = 2.47 * 0.005 \approx 0.01,$$

тогда

$$u=2,47\pm0,01 \text{ моль}$$

Если каждый из n ($n\leq10$) сомножителей $a_1, a_2,\ldots,a_n$ имеет m($m > 1$) верных значащих цифр, то число верных знаков произведения на одну или на две единицы меньше m.

В примере 1.10 сомножители $a_1$ и $a_2$ имеют одинаковое количество верных в широком смысле значащих цифры. Таким образом, чтобы в произведении обеспечить m верных значащих цифр, необходимо каждый из сомножителей взять с m+1 или m+2 значащими цифрами.

При перемножении чисел с различным количеством верных значащих цифр рекомендуется поступать следующим образом:

- выделить число (или числа) с наименьшим количеством верных значащих цифр (наименее точное);
- округлить остальные сомножители так, чтобы каждый из них содержа на одну (или две) значащую цифру больше, чем количество верных значащих цифр в выделенном числе;
- в результате умножения сохранить столько значащих цифр, сколько верных цифр имеет выделенное (наименее точное) число.

Если из n переменных чисел $a_1,a_2,\ldots,a_n$ только одно является приближенным, например $a_1$, а остальные - точные, то, согласно формуле (1.21), предельная относительная погрешность их произведения u совпадает с придельной относительной погрешностью приближенного числа $a_1$:

$$\delta_u = \delta_{a1}$$

В частности при умножении приближенного числа a на точный множитель k предельна относительная погрешность произведения u=ka равна предельной относительной погрешности приближенного числа а $(\delta_u = \delta_a)$, а придельная абсолютная погрешность $\Delta_u$ в |k| раз больше предельной абсолютной погрешности числа а:

$$\Delta_u = |k| * \Delta_a$$

### 1.6.4. Погрешность частного

**Предельная относительная погрешность частного от деления двух приближенных чисел** равна сумме предельных относительных погрешностей делимого и делителя.

Если $u = \frac{a_1}{a_2}$, то

$$\delta_u = \delta_{a_1} + \delta_{a_2} \tag{1.23}$$

Зная предельную относительную погрешность $\delta_u$ частного и, легко определить предельную абсолютную погрешность $\Delta_u$ по формуле

$$\Delta_u = |u|\delta_u \tag{1.24}$$

При делении приближенных чисел следует пользоваться правилами, сформулированными для умножения.

Пусть $\alpha_1$ и $\beta_1$ - первые значащие цифры чисел $a_1$ и $a_2$, имеющих по n верных значащих цифр. Тогда, согласно формулам (1.14), (1.15) и (1.23), за предельную относительную погрешность частного u может быть принята величина

$$\delta_u = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\beta_1}\right)\left(\frac{1}{10}\right)^{n-1} \tag{1.25}$$

если цифры верны в узком смысле, и

$$\delta_u = \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\beta_1}\right)\left(\frac{1}{10}\right)^{n-1} \tag{1.26}$$

если цифры верны в широком смысле.

Отсюда следует правило: 1) если $\alpha_1 \geq 2$ и $\beta_1 \geq 2$ ,то частное u имеет по меньшей мере n - 1 верных значащих цифр; 2) если $\alpha_1 = 1$ и $\beta_1 = 1$, то частное u заведомо имеет n - 2 верные значащие цифры.

**Пример 1.11.** Рассчитать плотность ρ жидкости, если ее масса P равна 1,8468 г, а объем V=1,24 см$^3$ (в записи чисел все цифры верные в широком смысле), найти предельную абсолютную и предельную относительную погрешности результата.

**Решение.** $\rho = \frac{P}{V} = \frac{1{,}8468}{1{,}24}$.

Поскольку в делимом пять верных значащих цифр, а в делителе - три, делимое округляем до четырех значащих цифр и производим деление: $\rho = 1{,}8468 \div 1{,}24 \approx 1{,}49$ (в результате оставляем столько значащих цифр, сколько имеется в числе с меньшим их количеством).

Предельную относительную погрешность частного $\rho$ вычислим по формуле (1.26), так как делимое и делитель содержат верные цифры в широком смысле; n=3, т. е. равно количеству верных значащих цифр в менее точном числе; $\alpha_1 = 1$; $\beta_2 = 1$. Следовательно,

$$\delta_u = \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\beta_1}\right) \cdot \frac{1}{10^{n-1}} = \left(\frac{1}{1} + \frac{1}{1}\right) \cdot \frac{1}{10^2} = 2 \cdot 10^{-2} = 2\%.$$

Определим предельную абсолютную погрешность частного $\rho$ по формуле (1.24)

$$\Delta_\rho = |\rho|\delta_\rho = 1{,}49 \cdot 0{,}02 \approx 0{,}03.$$

Окончательный результат следует записать так:

$$\rho = 1{,}49 \pm 0{,}03 \text{ (г/см}^3\text{)}.$$

Следует отметить, что цифра сотых долей является сомнительной, поскольку Δρ= 0,03>0,01. Если записать результат только с верными цифрами, то необходимо его округлить и учесть погрешность округления $\Delta_{\text{окр}} = |1{,}5 - 1{,}49| = 0{,}01.$

Тогда ρ=1,5±0,04 г/см$^3$.

### 1.6.5. Погрешность степени

**Предельная относительная погрешность n-й степени приближенного числа** (n - натуральное число) равна произведению показателя степени n на предельную относительную погрешность основания.

Пусть $u=a^n$. Тогда n

$$\delta_u = n\delta_a \tag{1.27}$$

При возведении, приближенного числа в степень в результате следует оставить столько значащих цифр, сколько верных значащих цифр содержится в основании степени.

Предельную абсолютную погрешность степени определяют по формуле

$$\Delta_a = \delta_u |a^n|. \tag{1.28}$$

**Пример 1.12.** Известно, что длина ребра кубического реактора равна 2,34±0,01 м. Найти объем реактора, предельные относительную и абсолютную погрешности.ρρρρ

**Решение.** Обозначим: а = 2,34; $\Delta_a$= 0,01; $V = a^3 =$ $2{,}34^3 \approx 12{,}8$ м$^3$. Определим предельную относительную погрешность основания степени:

$$\delta_a = \frac{\Delta_a}{|a|} = \frac{0{,}01}{2{,}34} \approx 0{,}004.$$

Тогда по формуле (1.27) найдем:

$$\delta_V = 3\delta_a = 3 \cdot 0{,}004 = 0{,}012.$$

По формуле (1.28) определим предельную абсолютную погрешность степени:

$$\Delta_V = \delta_V |V| = 0{,}012 \cdot 12{,}8 \approx 0{,}2.$$

Окончательный ответ можно записать так:

V= 12,8 ±0,2 м$^3$.

### 1.6.6. Погрешность корня

**Предельная относительная погрешность корня n-й степени из приближенного числа** равна предельной относительной погрешности подкоренного числа, деленной на показатель степени корня.

Пусть $u = \sqrt[n]{a}$. Тогда

$$\delta_u = \frac{\delta_a}{n} \tag{1.29}$$

При извлечении корня n-й степени из приближенного числа в результате следует брать столько значащих цифр, сколько верных значащих цифр имеет подкоренное число.

**Пример 1.13.** С какими предельными относительной и абсолютной погрешностями следует определить длину ребра кубического реактора, объём которого должен быть равен V = 12,8 ± 0,2 м$^3$?

**Решение.** Обозначим: a=12,8; $\Delta_a$=0,2; $u=\sqrt[3]{a}=\sqrt[3]{12{,}8}\approx 2{,}34$. Определим предельную относительную погрешность подкоренного числа a = 1,28:

$$\delta_a = \frac{\Delta a}{|a|} = \frac{0{,}2}{12{,}8} \simeq 0{,}015$$

По формуле (1.29) найдем:

$$\delta_u = \frac{\delta a}{3} = \frac{0{,}015}{3} = 0{,}005$$

Предельную абсолютную погрешность корня определим по формуле

$$\Delta_u = \delta_u |u| = 0{,}005 \cdot 2{,}34 \simeq 0{,}01.$$

Таким образом,u = 2,34 ± 0,01м.

### 1.6.7. Вычисления по формуле

На практике часто приходится оценивать погрешность приближенного значения величины, полученного в результате вычислений по формуле, которая содержит не одно, а несколько действий. Для решения такой задачи необходимо последовательное применять сформулированные выше правила определения погрешности простейших действий над приближенными числами.

**Пример 1.14** Тепловой эффект ($\Delta H_T$) химической реакции образованная n моль вещества, протекающей при абсолютной температуре Т, равен $\Delta H_T = [\Delta H_{298} + \Delta c_p(T \leftarrow 298{,}15)]n$,
где $\Delta 298$ - тепловой эффект химической реакции образования 1 моль при 298 К;

$\Delta c_p$ - изменение теплоемкости системы в результате химической реакции.

Рассчитать тепловой эффект реакции образования 0,247 моль дисиликата натрия при Т=700 К:

$$Na_2CO_3 + 2SiO_2 = Na_2Si_2O_5 + CO_2,$$

Считая, что $\Delta c_p$ не зависит от температуры, и оценить погрешность результата, если известно, что

$$\Delta H_{298} = 56{,}1 \pm 0{,}2 \text{ (кДж/моль)};$$
$$\Delta c_p = -5{,}3 \cdot 10\text{-}3 \pm 0{,}1 \cdot 10\text{-}3 \text{ (кДж/моль} \cdot \text{К)};$$
$$n = 0{,}247 \pm 0{,}001;\ T = 700 \pm 0{,}1 \text{ К}.$$

**Решение.** Для удобства вычислений введем обозначения:

$$X = \Delta H_T;\quad d = \Delta H_{298}\quad b = \Delta c_p\quad a = T - 298{,}15$$

По условию, $\Delta_d = 0{,}2$ кДж/моль, $\Delta_b = 0{,}1 \cdot 10^{-3}$ кДж/(моль · К); $\Delta_a = \Delta T = 0{,}1$.

Пользуясь правилами вычисления погрешностей простейших действий над приближенными числами, найдем:

$$\delta_x = \delta_{d+ba} + \delta_n = \frac{\Delta_{d+ba}}{|d+ba|} + \frac{\Delta_n}{|n|} = \frac{\Delta_d + \Delta_{ba}}{|d+ba|} + \frac{\Delta_n}{|n|} = \frac{\Delta_d + \delta_{ba}|ba|}{|d+ba|} + \frac{\Delta_n}{|n|} =$$
$$\frac{\Delta_d + \left(\frac{\Delta_b}{|b|} + \frac{\Delta_a}{|a|}\right)|ba|}{|d+ba|} + \frac{\Delta_n}{|n|}.$$

$$\frac{\Delta_b}{|b|} = \frac{0{,}1 \cdot 10^{-3}}{|-5{,}3 \cdot 10^{-3}|} \simeq 0{,}02;\quad \frac{\Delta_a}{|a|} = \frac{0{,}1}{401{,}85} \simeq 0{,}2 \cdot 10^{-3};\ |ba| \simeq 2{,}13;\ |d+ba| = 54{,}0;$$

$$\delta_x = \frac{0{,}2 + (0{,}02 + 0{,}2 \cdot 10^{-3}) \cdot 2{,}13}{54{,}0} + \frac{0{,}001}{0{,}247} \simeq 0{,}008 = 0{,}8\%;$$
$$X = [56{,}1 - 5{,}3 \cdot 10^{-3}(700 - 298{,}15)] \cdot 0{,}247 \simeq 13{,}3\%;$$
$$\Delta_x = \delta_x|x| = 0{,}008 \cdot 13{,}3 \simeq 0{,}01.$$

Возвращаясь к обозначения условия задачи, запишем окончательный ответ:

$$\Delta H = 13{,}3 \pm 0{,}1 \text{ кДж}$$

## 2 Решение типовых задач

**Пример 1.** Определить предельную относительную погрешность измерения плотности бензола при температуре 20°С, если в результате измерения получено $\rho = 0{,}88 \pm 0{,}005$ (г/см$^3$).

**Решение.** Для определения предельной относительной погрешности $\delta_\rho$ воспользуемся формулой (1.9):

$$\delta_\rho = 0{,}005/0{,}88 = 0{,}0057,\ \delta_\rho = 0{,}57\%.$$

**Пример 2.** Масса навески, найденная взвешиванием на аналитических весах, равна 0,6794±0,0002 г. Округлить сомнительные цифры полученного результата и определить его предельную абсолютную погрешность.

**Решение.** Приближенное число a=0,6794 имеет три верные цифры в узком смысле: 6, 7, 9, так как $\Delta_a = 0{,}0002 < 0{,}0005$. Применяя четвертое правило округления, найдем приближенное значение $a_1=0{,}679$. Тогда, в силу (1.13), $\Delta_{a1}=\Delta_a+\Delta_{окр}=0{,}0002+0{,}0004 =0{,}0006$. Поэтому в записи числа $a_1$ все цифры верны (в широком смысле).

**Пример 3.** Плотность вещества равна 0,82 г/см$^3$. В этом числе две верные в узком смысле цифры. Найти его предельную относительную погрешность.

**Решение.** По условию a=0,82; $\alpha_1=8$; n=2. По формуле (1.14)

$$\delta_a = \frac{1}{2\alpha_1 \cdot 10^{n-1}} = \frac{1}{2 \cdot 8 \cdot 10} \approx 0{,}006 = 0{,}6\%.$$

**Пример 4.** Объем газа V газа в реакционном сосуде, равный 711 м$^3$, найден с относительной погрешностью δ=1%. Определить число верных цифр приближенного числа V.

**Решение.** Подставив в неравенство (1.16) $\alpha_1=7$, $\delta_V = 0{,}01$, получим: $(7+1)\cdot 0{,}01 \le 10^{-s}$; $0{,}08 \le 10^{-s}$. Наибольшее значение s, для которого выполняется это равенство, равно 1. Тогда число верных цифр n=s+1=1+1=2.

**Пример 5.** Определить количество молей вещества, содержащегося в 34,5 мл раствора с концентрацией 0,0715 М (в записи чисел все цифры верны в широком смысле).

**Решение.** Обозначим число 34,5 через $a_1$, 0,0715 через $a_2$, искомый результат (количество молей вещества) - через u. Поскольку в исходных данных все цифры верны в широком смысле, можем определить их предельные относительные погрешности $\delta_{a1}$ и $\delta_{a2}$, воспользовавшись формулой (1.15):

$$\delta_{a1} = \frac{1}{a_1 * 10^{n-1}} = \frac{1}{3 * 10^2} \approx 0.33\%$$

$$\delta_{a2} = \frac{1}{a_1 * 10^{n-1}} = \frac{1}{7 * 10^2} \approx 0.14\%.$$

В соответствии с формулой (1.21)

$$\delta_u = '\delta_{a1} + \delta_{a2} = 0.47\% \approx 0.5\%.$$

Поскольку $\delta_u = 0.5 * 10^{-2} < 1 * 10^{-2}$ (см. 1.5), то произведение u будет иметь, по меньшей мере две верных значащих цифры в широком смысле:

$$u = 34.5 * 0.0715 \approx 2.47.$$

По формуле (1.22) вычислим предельную абсолютную погрешность произведения:

$$\Delta_u = |u|\delta_u = 2.47 * 0.005 \approx 0.01,$$

тогда

u=2,47±0,01 моль

**Пример 6.** Известно, что длина ребра кубического реактора равна 2,34±0,01 м. Найти объем реактора, предельные относительную и абсолютную погрешности.

**Решение.** Обозначим: a = 2,34; Δa= 0,01; $V=a^3= 2{,}34^3 \approx 2{,}8$ м$^3$. Определим предельную относительную погрешность основания степени:

$$\delta_a = \frac{\Delta_a}{|a|} = \frac{0{,}01}{2{,}34} \approx 0{,}004.$$

Тогда по формуле (1.27) найдем:

$$\delta_V = 3\delta_a = 3 \cdot 0{,}004 = 0{,}012.$$

По формуле (1.28) определим предельную абсолютную погрешность степени:

$$\Delta_V = \delta_V |V| = 0{,}012 \cdot 12{,}8 \approx 0{,}2.$$

Окончательный ответ можно записать так:

$$V = 12{,}8 \pm 0{,}2 \text{ м}^3.$$

**Пример 7.** С какими предельными относительной и абсолютной погрешностями следует определить длину ребра кубического реактора, объём которого должен быть равен $V=12{,}8\pm0{,}2$ м$^3$?

**Решение.** Обозначим: $a=12{,}8$; $\Delta_a=0{,}2$; $u=\sqrt[3]{a}=\sqrt[3]{12{,}8}\approx2{,}34$. Определим предельную относительную погрешность подкоренного числа $a=1{,}28$:

$$\delta_a=\frac{\Delta a}{|a|}=\frac{0{,}2}{12{,}8}\simeq0{,}015$$

По формуле (1.29) найдем:

$$\delta_u=\frac{\delta a}{3}=\frac{0{,}015}{3}=0{,}005$$

Предельную абсолютную погрешность корня определим по формуле

$$\Delta_u=\delta_u|u|=0{,}005\cdot2{,}34\simeq0{,}01.$$

Таким образом, $u=2{,}34\pm0{,}01$ м.

## 3 Индивидуальные задания

1 Определить предельную относительную погрешность измерения плотности бензола при температуре 40°C, если в результате измерения получено $\rho$=0,63±0,005 (г/см$^3$).

2 Определить предельную относительную погрешность измерения плотности бензола при $\rho$=0,53±0,005 (г/см$^3$), если в результате измерения температура 28°C.

3 Масса навески, найденная взвешиванием на аналитических весах, равна 0,1389±0,0002 г. Округлить сомнительные цифры полученного результата и определить его предельную абсолютную погрешность.

4 Округлить сомнительные цифры полученного результата и определить его предельную абсолютную погрешность, если масса навески, найденная взвешиванием на аналитических весах, равна 0,8794±0,0002 г.

5 Плотность вещества равна 0,53 г/см$^3$. В этом числе две верные в узком смысле цифры. Найти его предельную относительную погрешность.

6 Плотность вещества равна 0,62 г/см$^3$. В этом числе одна верная в узком смысле цифра. Найти его предельную относительную погрешность.

7 Определить число верных цифр приближенного числа V, если объем газа V газа в реакционном сосуде, равный 711 м$^3$, найден с относительной погрешностью $\delta$=1%.

8 Объем газа V газа в реакционном сосуде, равный 257 м$^3$, найден с относительной погрешностью $\delta$=4%. Определить число верных цифр приближенного числа V.

9 Определить количество молей вещества, содержащегося в 67,5 мл раствора с концентрацией 0,0945 М (в записи чисел все цифры верны в широком смысле).

10 Определить количество молей вещества, содержащегося в 59,5 мл раствора с концентрацией 0,146 М (в записи чисел все цифры верны в широком смысле).

11 Известно, что длина ребра кубического реактора равна 2,79±0,01 м. Найти объем реактора, предельные относительную и абсолютную погрешности

12 Известно, что длина ребра кубического реактора равна 7,14±0,01 м. Найти объем реактора, предельные относительную и абсолютную погрешности

13 С какими предельными относительной и абсолютной погрешностями следует определить длину ребра кубического реактора, объём которого должен быть равен $V=29{,}7\pm0{,}2$ м$^3$?

14 Объём кубического реактора должен быть равен $V=12{,}8\pm0{,}2$ м$^3$. С какими предельными относительной и абсолютной погрешностями следует определить длину его ребра?

## Список использованных источников

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

2 ***Вычислительная математика в химии и химической технологии*** [Текст]: учеб. / С.В. Брановицкая, Р.Б. Медведев, Ю.Я. Фиалков; Высшая школа. Головное издательство, М., 1986. 216 с.

3 ***Основы вычислительной математики*** [Текст]: учеб. / Б.П. Демидович, И.А. Марон; Наука. М. 1970. 664 с.

4 ***Теория вероятностей и математическая статистика*** [Текст]: учеб. / В.Е. Гмурман; Высшая школа. М. 1977. 479 с.

5 ***Теория вероятностей*** [Текст]: учеб. / Е.С. Вентцель; Наука. М. 1969. 576 с.

6 ***Элементы численного анализа и математической обработки результатов опыта*** [Текст]: учеб. / Р.С. Гутер, Б.В. Овчинский; Наука. М. 1970. 432 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.

# МЕТОДЫ ПРИБЛИЖЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

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

Курск 2016

УДК 378.147.88

Составитель: А.В. Лысенко

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

**Методы приближенных вычислений в химии и химической технологии**: методические указания по выполнению лабораторной работы / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. Курск, 2016, 28 с.: ил., табл. Библиогр.: 28 с.

Излагаются методические рекомендации к лабораторной работе «Методы приближенных вычислений в химии и химической технологии» по дисциплине «Вычислительные методы в химии». Приведены элементы теории подобия. Рассмотрены примеры решения типовых задач. Представлены индивидуальные задания.

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.