Міністерство освіти і науки України

ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до лабораторних робіт по курсу
«МЕТОДИ ОБРОБКИ ІНФОРМАЦІЇ В ХІМІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЯХ»
для здобувачів вищої освіти за спеціальністю
161 – Хімічні технології та інженерія

Затверджено на засіданні кафедри ТНРЕ
Протокол № 11, від 24.05.2021 р.

Одеса: ОП, 2021

Методичні вказівки до лабораторних робіт по курсу «Методи обробки інформації в хімічних технологіях» для здобувачів вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія / уклад. В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ ; Держ. ун-т "Одес. політехніка". – Одеса, 2021. – 37 с.

Укладачі: Брем В.В., к.х.н., доцент,
Єпутатов Ю.М., к.х.н., доцент,
Макаров О.В., ст. викладач,
Борщ О.А., ст. викладач

В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ. 161 – Хімічні технології та інженерія. **Методичні вказівки до лабораторних робіт по курсу «Методи обробки інформації в хімічних технологіях».** В методичних вказівках наведені короткі теоретичні відомості за темами робіт, наведені приклади блок-схем і програмних модулів, пояснення роботи та інтерфейсу прикладних програм, а також рекомендації щодо ходу виконання лабораторних за окремими індивідуальними завданнями. Методичні вказівки призначено для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.

ЗМІСТ

ТЕМА 1. ОБРОБКА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ. НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №1. ВИБІР ВИДУ ЕМПІРИЧНОЇ ФОРМУЛИ. МЕТОД ВИРІВНЮВАННЯ

1 МЕТА РОБОТИ

Вивчення методу вирівнювання, як методу визначення виду емпіричної формули. Побудова графіків функцій за допомогою спеціальних програм.

2 ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

Експериментальні дані, отримані в лабораторних або промислових умовах, є основою для проведення подальших досліджень. Ці дані зазвичай використовуються для визначення констант відомих аналітичних залежностей, або для встановлення виду аналітичних залежностей. У першому випадку експериментальні значення підставляються у відповідні рівняння (наприклад, коефіцієнти обміну, дифузії, в'язкості і т.д.). У другому – сукупність експериментальних даних використовується для знаходження функціональної залежності, якій вони підпорядковані (наприклад, залежності швидкості хімічної реакції від складу і т.д.).

Тобто коли теорія процесу відсутня, дослідник змушений сам створювати математичну модель, тобто визначити її вид і обчислити коефіцієнти до неї. Найбільш коректно цю процедуру можна виконати з використанням МНК (*методу найменших квадратів*). Проте існують і інші достатньо прості способи підбору емпіричних рівнянь, основні з яких розглянуті нижче.

У деяких випадках вибір типу емпіричної формули робиться на основі теоретичних уявлень про характер залежності, що досліджується. У інших випадках доводиться підбирати формулу, порівнюючи криву, побудовану за даними спостережень, із типовими графіками формул. Такі графіки наведені в довідниках. Іноді виявляється, що емпірична крива схожа на декілька кривих, рівняння яких різні. Зміна чисельних коефіцієнтів, що входять у формулу, часто різко змінює вид її графіка. Вибір масштабу координатних осей відбивається на формі побудованої кривої, що також може призвести до відмінності експериментальної кривої від графіка цілком відповідної їй формули.

Тому, перед тим, як визначати чисельні значення коефіцієнтів в обраній емпіричній формулі, необхідно *перевірити можливість її використання*. Лише після цього можна перейти до відшукування тих значень постійних коефіцієнтів, що дадуть найкраще наближення дослідних і обчислених величин.

Метод вирівнювання полягає в зміні функції $y = F(x)$ (аналітичної залежності) таким чином, щоб перетворити її в лінійну. Досягається це шляхом заміни змінних x і y новими змінними $X=q(x,y)$ і $Y=g(x,y)$, що вибираються так, щоб утворилося рівняння прямої лінії:

$$Y = a + bX \tag{1.1}$$

Обчисливши значення X_i і Y_i по заданим x_i і y_i, наносять їх на графік (діаграму) із прямокутними координатами (X, Y). Якщо побудовані таким способом точки розташовуються поблизу прямої лінії, то обрана емпірична формула $y=F(x)$ підходить для характеристики залежності $y=f\ (x)$ (табличної функції).

ПРИКЛАД. Задана деяка функція y=f(x), яка представлена у вигляді таблиці.

Таблиця 1.1 – Дослідні дані експерименту

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x, г/л	4,0	2,0	0,5	2,5	3,0	1,0	3,5	5,0
y, %	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0

Із запропонованих формул необхідно визначити вид емпіричної залежності, яка найбільш точно буде відповідати дослідним даним.

$$y = a + b\cdot\sqrt{x}\,; \tag{1.2}$$

$$y = a + b\cdot x^2; \tag{1.3}$$

РІШЕННЯ. Перевіримо можливість використання емпіричних формул (1.2) і (1.3) для апроксимації табличної функції. Для цього введемо нові значення змінних так, щоб представлені формули перетворити на лінійні.

Для формули (1.2): $Y = y;\ X = \sqrt{x}$.

Для формули (1.3): $Y = y;\ X = x^2$.

Розрахуємо нові значення змінних X і Y для кожного випадку (табл. 1.2–1.3) і побудуємо графіки у координатах (X, Y) (рис. 1.1 – 1.2).

Таблиця 1.2

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = \sqrt{x}$	0,707	1	1,414	1,581	1,732	1,871	2	2,236
$Y = y$	5,5	6	9	11,2	14	17,4	21,3	30

Таблиця 1.3

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = x^2$	0,25	1	4	6,25	9	12,25	16	25
$Y = y$	5,5	6	9	11,2	14	17,4	21,3	30

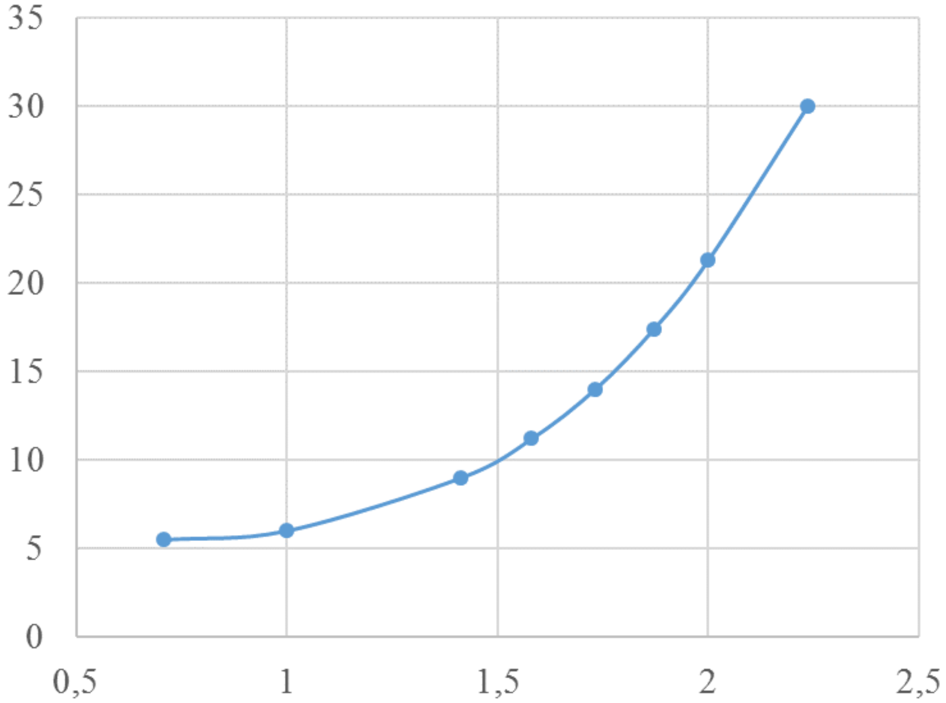

Рис. 1.1 – Графік функції по даним таблиці 1.2

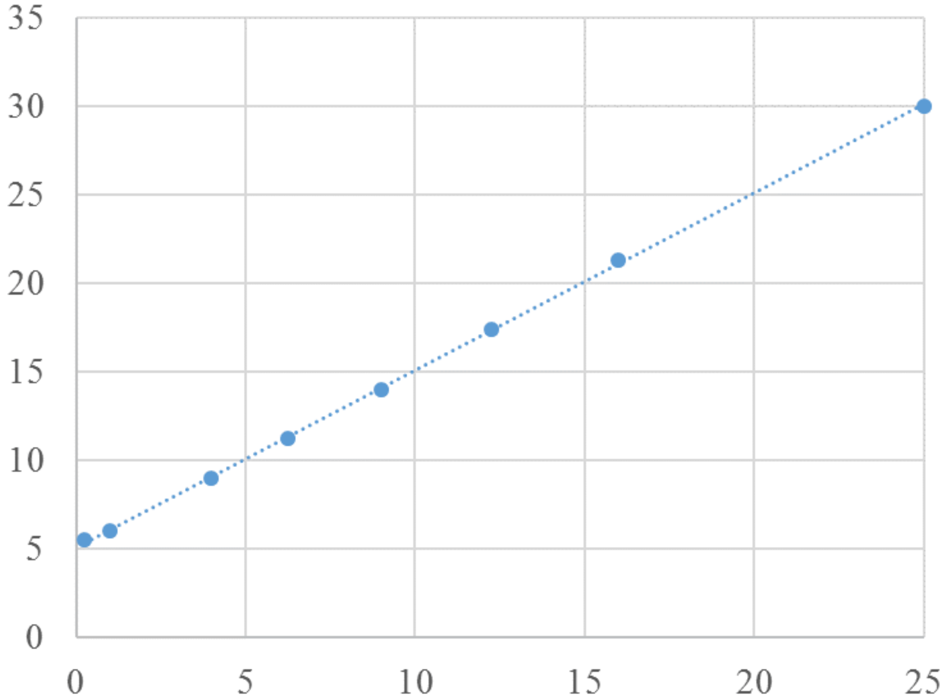

Рис. 1.2 – Графік функції по даним таблиці 1.3

Точки графіку рис. 1.2 добре укладаються на пряму лінію. Це доказує можливість застосування формули (1.3) ($y = a + b \cdot x^2$) для опису експериментальних даних. Тобто, даною аналітичною залежністю можливо замінити табличну функцію $y=f(x)$ (дані таблиці 1.1).

3 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ ЛАБОРАТОРНОЇ РОБОТИ №1

1. За індивідуальним завданням (номер завдання відповідає номеру ім'я та по-батькові студента за журналом) шляхом заміни змінних перетворити задані формули на лінійні залежності.
2. Розрахувати нові значення змінних, построїти відповідні графіки залежностей.
3. Визначити остаточний вид емпіричної формули.

4 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

В таблицях для кожного варіанту представлені дослідні дані експерименту. Окремо виділені формули, що пропонуються для апроксимації дослідних даних всіх варіантів.

Варіант 1

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	2,0	2,2	1,5	2,5	1,2	1,8	1,7	2,8
y	1,4	0,6	3,7	0,4	8,5	1,8	2,7	0,18

Варіант 2

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	6,8	5,3	2,9	0,5	0,2	1,0	9,0	4,2
y	8,8	7,6	6,5	3,6	2,8	4,1	9,8	7,2

Варіант 3

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	1,0	2,0	1,5	1,2	2,4	3,0	1,7	1,1
y	102	172	158	126	180	190	165	115

Варіант 4

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	18,0	11,5	7,0	3,8	2,2	7,7	15,2	22,0
y	12,2	9,3	7,0	5,0	3,6	7,7	11,3	13,7

Варіант 5

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	0,8	0,7	0,5	0,3	0,1	0,2	0,6	0,4
y	0,98	0,967	0,923	0,836	0,572	0,748	0,947	0,885

Варіант 6

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	31,0	21,5	5,13	2,71	0,61	1,68	7,86	13,5
y	295	1360	2890	3320	3620	3445	2685	1990

Варіант 7

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	3,0	1,5	0,5	0,2	1,0	2,0	0,8	0,1
y	2,4	2,7	3,9	7,0	3,1	2,6	3,3	11,8

Варіант 8

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	14,0	11,1	7,5	6,1	8,88	12,2	9,53	5,5
y	16500	10000	5400	3800	6900	12800	8100	3100

Варіант 9

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	3,5	3,0	2,0	0,5	2,5	1,0	1,5	4,0
y	27,5	32,5	43,9	49,0	39,2	48,1	46,5	20,7

Варіант 10

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	100	60	40	0	20	80	120	10
y	3,3	8,6	11,9	29,5	18,4	5,0	2,2	23,0

Варіант 11

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	10,0	4,0	1,0	0,5	2,0	6,0	8,0	14,0
y	20,4	13,7	6,0	3,3	8,8	17,0	18,9	21,0

Варіант 12

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	8,0	6,0	3,0	1,5	1,0	2,0	4,0	2,5
y	7,5	6,85	5,75	3,85	2,1	4,35	6,15	5,1

Варіант 13

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	5,0	3,0	1,0	0,5	3,5	2,0	4,0	2,5
y	122,0	56,8	24,2	20,8	68,5	35,6	82,4	45,0

Варіант 14

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	0,2	1,0	2,0	0,1	10,0	0,05	5,0	0,5
y	0,07	0,14	0,17	0,04	0,19	0,02	0,18	0,10

Варіант 15

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	8,0	4,0	1,0	11,0	0,2	2,0	6,0	0,5
y	1,6	2,3	3,8	1,4	4,7	3,5	2,1	4,3

Варіант 16

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	8,0	4,0	1,0	0,5	3,0	6,0	2,0	10,0
y	5,0	5,6	9,4	11,9	6,6	5,4	7,9	4,6

Варіант 17

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	1,0	3,0	4,5	5,0	0,5	2,0	4,0	5,5
y	0,8	3,5	11,1	16,5	0,6	2,0	8,0	23,5

Варіант 18

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	0,5	1,7	1,3	0,1	1,0	1,5	0,7	1,2
y	9,8	53,8	31,1	5,9	19,6	40,0	13,3	26,4

Варіант 19

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	400	800	200	600	120	300	150	500
y	0,29	0,375	0,185	0,36	0,10	0,25	0,135	0,32

Варіант 20

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	4,0	6,0	8,0	10,0	5,0	3,0	2,0	7,0
y	5,7	3,7	3,0	2,9	4,8	8,5	19,5	3,4

1) $y = a + b \cdot x$;
2) $y = a + \frac{b}{x}$;
3) $y = a + b \cdot \sqrt{x}$;
4) $y = a + b \cdot x^2$;
5) $y = a + b \cdot x^{(3/2)}$

6) $y = \dfrac{1}{a + b \cdot x}$;

7) $y = \dfrac{x}{a + b \cdot x}$;

8) $y = a \cdot x^b$;

9) $y = a \cdot e^{bx}$;

10) $y = a \cdot 10^{bx}$.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №2. ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЕМПІРИЧНОЇ ФОРМУЛИ. МЕТОДИ ВИБРАНИХ ТОЧОК І СЕРЕДНІХ

1 МЕТА РОБОТИ

Вивчення методів визначення параметрів емпіричної формули: метода вибраних точок і метода середніх. Освоєння та використання прикладних програм із бібліотеки програм ХТФ.

2 ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

2.1. Метод обраних точок

Після того як вид емпіричної залежності обрано, вирішується задача визначення найкращих коефіцієнтів (параметрів), що входять у цю формулу. *Як правило, пошук параметрів здійснюється для емпіричної формули, приведеної до лінійного виду*. В основному, застосовуються три методи: метод обраних точок, метод середніх і метод найменших квадратів.

Нехай емпірична формула має вид (1.1) Потрібно знайти значення коефіцієнтів a і b.

Нанесемо на координатну площину дослідні точки (X_i,Y_i). Як найближче до цих точок проводимо пряму (наближуюча пряма, рис. 2.1). На цій прямій вибираємо дві (по числу параметрів) довільні точки N_1 (X_1,Y_1) і N_2 (X_2,Y_2), не обов'язково збіжними з точками (X_i,Y_i) і якнайдалі віддаленими друг від друга. Координати цих точок підставляємо в рівняння (3.1), одержуємо систему:

$$Y_1 = a + b \cdot X_1$$
$$Y_2 = a + b \cdot X_2 \tag{2.1}$$

Вирішуючи її, знаходимо a і b.

ПРИКЛАД. По дослідним даним (табл. 1.2) визначити методом обраних точок коефіцієнти емпіричної залежності (1.3) прикладу лабораторної роботи

№1.

РІШЕННЯ. Для визначення коефіцієнтів формули (1.3) ($y = a + b \cdot x^2$) використовуємо її лінійний вид (1.1). Значення змінних $X = x^2$ і $Y = y$ з табл. 1.3. Графік залежності $Y=f(X)$ приведено на рис. 2.1.

Проведемо близько до точок графіку наближуючу пряму (рис. 2.1) і виберемо на ній *довільні* точки $N_1(X_1,Y_1)$ і $N_2(X_2,Y_2)$.

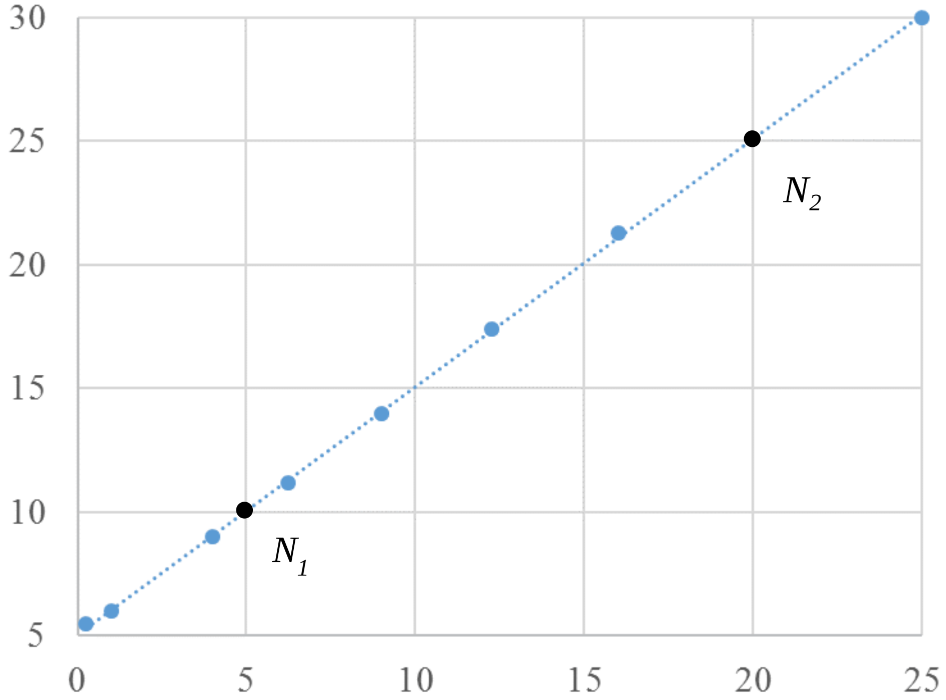

Рис. 3.5 – Наближуюча пряма до точок графіку залежності, який отримано за даними таблиці 1.3.

Координати цих точок N_1 *(5; 10)*, N_2 *(20; 25)* підставимо в рівняння (1.1) і одержимо таку систему:

$$10 = a + b \cdot 5$$
$$25 = a + b \cdot 20 \qquad (2.2)$$

Розв'язавши систему рівнянь (2.2), знайдемо значення коефіцієнтів формули (1.1), а також в нашому випадку і емпіричної формули (1.3) ($y = a + b \cdot x^2$):

$$a = 5$$
$$b = 1 \qquad (2.3)$$

Переходячи до початкового виду формули (1.3) одержимо остаточно її вид:

$$\tilde{y} = 5 + x^2 \qquad (2.4)$$

Оцінити точність розрахунку коефіцієнтів отриманої формули можливо по величині суми квадратів відхилень розрахункових даних від табличних (таблиця 2.1)

Таблиця 2.1 – Оцінка точності формули (1.3)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	0,5	1	2	2,5	3	3,5	4	5
y	5,5	6	9	11,2	14	17,4	21,3	30
$\tilde{y}_i$	5,25	6	9	11,25	14	17,25	21	30
$\Delta y_i = \tilde{y}_i - y_i$	–0,25	0	0	0,05	0	–0,15	–0,3	0
$(\Delta y_i)^2$	0,0625	0	0	0,0025	0	0,0225	0,09	0

$$\sum_{i=1}^{8}(\Delta y_i)^2 = 0,178.$$

2.2 Метод середніх

Нехай емпірична формула має вид (1.1). Підставимо у неї замість X і Y дослідні значення X_i і Y_i. Оскільки ліва частина формули звичайно не дорівнює правої, одержимо систему рівнянь:

$$\begin{aligned} a + b \cdot X_1 - Y_1 &= E_1; \\ a + b \cdot X_2 - Y_2 &= E_2; \\ &\dots\dots\dots\dots \\ a + b \cdot X_n - Y_n &= E_n; \end{aligned} \qquad (2.5)$$

де $E_1, E_2, \dots, E_n$ – відхилення, що можуть бути як позитивними, так і негативними.

Відповідно до методу середніх, за найкращу емпіричну залежність приймається та, що забезпечує *нульове значення суми відхилень* по всім експериментальним точкам, тобто алгебраїчна сума відхилень дорівнює нулю.

Для визначення параметрів a і b формули (1.1) поступають таким чином:

1) Складають умовні рівняння $Y_i = a + b \cdot X_i$, число котрих m дорівнює числу значень X_i і Y_i.
2) Умовні рівняння розбивають на приблизно рівні групи, число котрих n дорівнює числу коефіцієнтів, що потрібно визначити (у нашому випадку – 2).
3) Рівняння, що входять у кожну з цих груп, складають. Для даного випадку одержуємо два рівняння:

$$\sum_{i=1}^{k} Y_i = k \cdot a + b \cdot \sum_{i=1}^{k} X_i;$$

$$\sum_{i=k+1}^{m} Y_i = (m-k) \cdot a + b \cdot \sum_{i=k+1}^{m} X_i. \qquad (2.6)$$

4) З системи цих рівнянь знаходять невідомі коефіцієнти a і b.

Угруповання умовних рівнянь перед їхнім підсумовуванням можливо провести різноманітними способами, причому кожний із них дає декілька значень коефіцієнтів, що відрізняються. *Рекомендується групувати рівняння в порядку монотонної зміни однієї зі змінних*.

ПРИКЛАД. По дослідним даним (табл. 1.3) визначити методом середніх коефіцієнти емпіричної залежності (1.3).

РІШЕННЯ. Для визначення коефіцієнтів формули (1.3) ($y = a + b{\cdot}x^2$) використовуємо її лінійний вид (1.1). Значення змінних $X = x^2$ і $Y = y$ беруться з табл. 1.3. 8 пар значень розбиваємо на 2 групи і складаємо для кожної групи по 4 умовних рівняння $Y_i = a + b \cdot X_i$:

$5{,}5 = a + b \cdot 0{,}25$	$14 = a + b \cdot 9$
$6 = a + b \cdot 1$	$17{,}4 = a + b \cdot 12{,}25$
$9 = a + b \cdot 4$	$21{,}3 = a + b \cdot 16$
$11{,}2 = a + b \cdot 6{,}25$	$30 = a + b \cdot 25$

Підсумовуючи почленно кожну групу, одержимо систему нормальних рівнянь:

$$31{,}7 = 4 \cdot a + b \cdot 11{,}5$$
$$82{,}7 = 4 \cdot a + b \cdot 62{,}25$$

Розв'язавши систему, знаходимо значення коефіцієнтів формули (1.3), приведеної до лінійного виду, а також в нашому випадку і вихідної залежності ($y = a + b{\cdot}x^2$):

$$a = 5{,}036$$
$$b = 1{,}005 \qquad (2.7)$$

Переходячи до початкового виду формули (1.3) одержимо остаточно її вид:

$$\tilde{y} = 5{,}036 + 1{,}005\, x^2 \qquad (2.8)$$

Оцінити точність отриманої формули також можливо по величині суми квадратів відхилень розрахункових даних від табличних.

Для вирішення систем лінійних рівнянь можливо використовувати в лабораторній роботі програмний комплекс *gz.exe* бібліотеки прикладних програм ХТФ.

3 ОПИС ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ *GZ.EXE*

Даний програмний комплекс знаходиться в директорії LABS. Для його використання необхідно скопіювати програму в свою робочу папку.

Програмний комплекс *gz.exe* реалізує методи Гауса і Зейделя. Ввід висхідних даних з клавіатури відбувається у діалоговому режимі в системі "меню".

Для вирішення системи лінійних рівнянь необхідно спочатку ввести число рівнянь, що вирішуються. Потім послідовно потрібно задавати коефіцієнти при невідомих і вільні члени кожного з рівнянь. В методі Зейделя додатково потрібно ввести початкові приближення невідомих.

Результати розрахунків, що виводяться на екран монітора, можна записати як текстовий файл і зберегти на носії інформації (на диску).

3 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ ЛАБОРАТОРНОЇ РОБОТИ №2

1. За індивідуальним завданням (номер завдання відповідає номеру ім’я та по-батькові студента за журналом) для обраного варіанту формули лабораторної роботи №1 розрахувати методами обраних точок та середніх параметри емпіричної залежності.
2. Виконати оцінку обчислених коефіцієнтів по величині суми квадратів відхилень розрахункових даних від табличних

4 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Для виконання роботи потрібно скористатися результатами та індивідуальними завданнями лабораторної роботи №1.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №3. ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ. ІНТЕРПОЛЯЦІЙНА ФОРМУЛА ЛАГРАНЖА

1 МЕТА РОБОТИ

Вивчення методів параболічного інтерполювання та методу Лагранжа. Освоєння та використання прикладних програм із бібліотеки програм ХТФ.

2 ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

2.1 Постановка задачі інтерполяції

Нехай деяка функція $y=f(x)$ задана таблицею (табл. 3.1), тобто при значеннях аргументу $x=x_0, x_1, \dots, x_n$ функція $f(x)$ приймає відповідні значення $y_0, y_1, \dots, y_n$.

Таблиця 3.1 – Таблиця експериментальних значень

x	x_0	x_1	x_2	....	x_n
y	y_0	y_1	y_2	....	y_n

Також нехай необхідно визначити значення $y=f(\bar{x})$, ($x_{i-1}<\bar{x}<x_i$). Величина $x=\bar{x}$ потрапляє між двома табличними значеннями, тому для обчислення значення функції необхідно запропонувати деякий характер її зміни між відомими експериментальними даними.

Інтерполяцію можна розглядати як процес визначення для даного аргументу x значення функції $y=f(x)$ по її декількох відомих значеннях. При цьому розрізняють *інтерполяцію у вузькому смислі*, коли x знаходиться між x_0 і x_n, і *екстраполювання,* коли x знаходиться поза відрізком інтерполяції $[x_0 , x_n]$.

Задача інтерполяції полягає в наступному. На відрізку $[a, b]$ задані $n+1$ точки $x_0, x_1, \dots , x_n$, що називаються *вузлами інтерполяції*, і значення деякої функції $f(x)$ у цих точках.

$$f(x_0) = y_0;$$
$$f(x_1) = y_1;$$
$$\dots\dots\dots\dots$$
$$f(x_n) = y_n \tag{3.1}$$

Потрібно побудувати функцію $P_n(x)$ (*інтерполюючу функцію*), яка б задовольняла таким умовам:

$$P_n(x_0) = y_0;$$
$$P_n(x_1) = y_1;$$
$$\dots\dots\dots\dots$$
$$P_n(x_n) = y_n \tag{3.2}$$

тобто інтерполююча функція $P_n(x)$ повинна приймати ті ж значення, що і функція $f(x)$, для вузлових значень аргументу $x_0, x_1, \dots , x_n$.

Геометрично це означає, що потрібно знайти криву $y=P_n(x)$ деякого визначеного типу, що проходить через задану систему точок M_i (x_i,y_i) $(i=0,1,2,..,n)$. Очевидно, можна побудувати множину неперервних функцій, що будуть проходити через задані вузлові точки.

Заміна функції $f(x)$ її інтерполяційним багаточленом $P_n(x)$ може знадобитися не тільки тоді, коли відома лише таблиця її значень, але і коли аналітичний вираз для $f(x)$ відомо, проте є занадто складним і незручним для подальших математичних перетворень (наприклад, для інтегрування, диференціювання та ін.). Іноді розглядаються задачі тригонометричної інтерполяції (інтерполююча функція – тригонометричний поліном). Інтерполюючою може бути також раціональна функція.

У загалі залежність, якою підпорядковується функція, може бути апроксимована багаточленом ступеня n:

$$P_n(x) = y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n. \tag{3.3}$$

Таку задачу називають задачею *параболічної інтерполяції (або інтерполюванням).*

2.2 Параболічна інтерполяція

Для визначення коефіцієнтів багаточлена (3.3) необхідно мати $n+1$ вузлову точку. Аналітичне визначення коефіцієнтів інтерполяційного багаточлена для $n+1$ точки зводиться до рішення системи лінійних рівнянь $n+1$ порядку, кожне з яких являє собою вираз (3.3), записаний для визначеної вузлової точки

$$y_i = a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + ... + a_n \cdot x_i^n, \qquad (3.4)$$

де $i = 1, 2,. . . n+1$.

Даним методом побудови інтерполяційного поліному зручно користуватися, маючи ЕОМ і відповідні програми. У бібліотеці прикладних програм ХТФ «Одеської політехніки» є програми для рішення систем лінійних рівнянь методами Гауса і Зейделя *(gz.exe)*, якими можна користуватися при вирішенні цієї задачі.

Даний метод не є єдиним способом побудови інтерполяційного поліному. Інший підхід, яким часто користуються на практиці, називається методом Лагранжа.

2.3 Метод Лагранжа

Нехай при $x=x_0, x_1, ... , x_n$ функція $f(x)$ приймає відповідно значення $y_0, y_1,... , y_n$. Багаточлен ступеня не вище n, що приймає у вузлових точках задані значення, має вид:

$$P_n(x)=y=\sum_{i=1}^{n}\frac{(x-x_0)(x-x_1).....(x-x_{i-1})(x-x_{i+1}).....(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1).....(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}).....(x_i-x_n)}\cdot y_i . \qquad (3.5)$$

Цей багаточлен (3.5) називається *інтерполяційною формулою Лагранжа* і має такі властивості:

1. При заданій сукупності вузлових точок будова багаточлена можлива тільки єдиним способом.
2. Багаточлен Лагранжа може бути побудовано при будь-якому розташуванні вузлів інтерполяції (включаючи і нерівномірне).

У розгорнутому виді форма Лагранжа має вид:

$$\begin{aligned}P_n(x)= &\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)......(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)......(x_0-x_n)}\cdot y_0 + \\ &+\frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)......(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)......(x_1-x_n)}\cdot y_1 + \\ &+ \ldots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)......(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})......(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)......(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})......(x_i-x_n)}\cdot y_i + \\ &+ \ldots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)......(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)(x_n-x_2)......(x_n-x_{n-1})}\cdot y_n . \end{aligned} \qquad (3.6)$$

При $n=1$ формула Лагранжа має вид:

$$P(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1}\cdot y_0 + \frac{x-x_0}{x_1-x_0}\cdot y_1 \qquad (3.7)$$

і називається формулою лінійної інтерполяції.

При $n=2$ одержимо формулу квадратичної інтерполяції:

$$P(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\cdot y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\cdot y_1+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\cdot y_2 \qquad (3.8)$$

2.4 Зворотна інтерполяція

Нехай функція $y= f(x)$ задана таблицею. Задача зворотної інтерполяції полягає в тому, щоб по заданому значенню функції y визначити відповідне значення аргументу x.

Якщо вузли інтерполяції $x_0, x_1, x_2, \ldots x_n$ нерівновіддалені, задача легко вирішується за допомогою інтерполяційної формули Лагранжа (3.5). Для цього достатньо прийняти y за незалежну змінну, а x вважати функцією. Тоді отримаємо

$$x=\sum_{i=0}^{n}x_i\frac{(y-y_0)(y-y_1)\ldots(y-y_{i-1})(y-y_{i+1})\ldots(y-y_n)}{(y_i-y_0)(y_i-y_1)\ldots(y_i-y_{i-1})(y_i-y_{i+1})\ldots(y_i-y_n)} \qquad (3.9)$$

ПРИКЛАД. Термодинамічні характеристики води на лінії насичення представлені в таблиці 3.1.

Таблиця .3.1 – Термодинамічні характеристики води на лінії насичення

Т, °С	**110**	**120**	**130**	140	150	160	170	180
$\mu\cdot10^6$, Па·с	**256**	**231**	**212**	196	185	174	163	153
$\beta\cdot10^4$, 1/К	8,0	8,6	9,2	9,7	10,3	10,8	11,5	12,2
i, кДж/кг	461	503	545	587	629	671	713	755

Використовуючи метод параболічної інтерполяції, визначити необхідну ступінь поліному, його коефіцієнти і значення параметрів у зазначених невузлових точках (при Т=115°С); аналогічні розрахунки виконати з використанням формули Лагранжу.

РІШЕННЯ. Для визначення, наприклад, значення коефіцієнта в'язкості (μ) в невузловій точці при температурі Т=115°С потрібно припустити на початку самий простіший характер зв'язку між коефіцієнтом в'язкості (μ) і температурою (Т) – *лінійний*. Тобто ступінь поліному дорівнює одиниці. Так, можна записати:

$$\mu^{(1)} = a + b \cdot T \qquad (3.10)$$

Для визначення коефіцієнтів a і b прямої потрібно вибрати з таблиці 3.1 *дві вузлові точки* між якими розташовано задане значення Т=115°С (або найближчі значення до нього для випадку екстраполювання). В нашому випадку це значення коефіцієнта в'язкості для температур 110°С і 120°С. Використовуючи основну властивість інтерполюючого поліному (3.2) можна записати систему рівнянь і розрахувати за допомогою методу Гауса коефіцієнти a і b.

$$256 = a + b \cdot 110$$
$$231 = a + b \cdot 120$$
$$a = 531$$
$$b = -2{,}5$$

Остаточний вигляд залежності (5.10)

$$\mu^{(1)} = 531 - 2{,}5 \cdot T \qquad (3.11)$$

Визначимо коефіцієнт в'язкості для заданої температури:

$$\mu^{(1)} = 531 - 2{,}5 \cdot 115 = 243{,}5\ (\cdot 10^{-6},\ Па \cdot с)$$

Тепер припустимо більш складніший тип зв’язку між коефіцієнтом в'язкості (μ) і температурою (T) – *квадратичний*. Тоді можна записати наступне:

$$\mu^{(2)} = a + b \cdot T + c \cdot T^2 \qquad (3.12)$$

Для визначення коефіцієнтів параболи потрібно вибрати вже три вузлові точки. В нашому випадку це значення коефіцієнта в'язкості для температур 110°C, 120°C і 130°C. Тоді стає можливим скласти систему 3 рівнянь, а також і розрахувати за допомогою методу Гауса коефіцієнти a, b і c.

$$256 = a + b \cdot 110 + c \cdot 110^2$$
$$231 = a + b \cdot 120 + c \cdot 120^2$$
$$212 = a + b \cdot 130 + c \cdot 130^2$$
$$a = 927$$
$$b = -9{,}4$$
$$c = 0{,}03$$

Тоді поліном другого порядку остаточно:

$$\mu^{(2)} = 927 - 9{,}4 \cdot T + 0{,}03 \cdot T^2 = 242{,}75\ (\cdot 10^{-6},\ Па \cdot с) \qquad (3.13)$$

Розрахуємо відносну похибку обчислень, виконаних для одного і того ж значення по температурі:

$$\beta = \frac{\left|\mu^{(2)} - \mu^{(1)}\right|}{\mu^{(1)}} \cdot 100\% = \frac{\left|242{,}75 - 243{,}5\right|}{243{,}5} \cdot 100\% = 0{,}31\%$$

Якщо прийняти за стандарт похибки експерименту величину 3%, то отримане нами значення виявляється значно меншим. Тобто для виконання задачі інтерполювання у випадку розрахунку коефіцієнта в'язкості для заданої температури остаточно приймаємо *лінійний* характер зв’язку.

Для заданих значень повторюємо обчислення за допомогою формули Лагранжа.

При $n=1$

$$\mu^{(1)}(T) = \frac{115 - 120}{110 - 120} \cdot 256 + \frac{115 - 110}{120 - 110} \cdot 231 = 243{,}5(\cdot 10^{-6},\ Па \cdot с)$$

Як бачимо, значення параметрів, розрахованих за допомогою параболічної інтерполяції і формули Лагранжа збігаються між собою.

При $n=2$

$$\mu^{(2)}(T)=\frac{(115-120)(115-130)}{(110-120)(110-130)}\cdot 256+\frac{(115-110)(115-130)}{(120-110)(120-130)}\cdot 231+$$

$$+\frac{(115-110)(115-120)}{(130-110)(130-120)}\cdot 212=242{,}75\ (\cdot 10^{-6},\ Па\cdot с)$$

Для вирішення задач інтерполяції з використанням формули Лагранжа в лабораторній роботі можна застосовувати прикладну програму *lagrang.exe*.

3 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ ЛАБОРАТОРНОЇ РОБОТИ №2

1. За індивідуальним завданням (номер завдання відповідає номеру ім’я та по-батькові студента за журналом) виконати розрахунки заданих термодинамічних величин, використовуючи перший і другий порядок формул параболічного інтерполювання і формули Лагранжа.
2. Виконати оцінку обчислених значень по відносній похибці.

4 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

В таблицях для кожного варіанту представлені табличні залежності термодинамічних параметрів від температури. Визначити параметри для заданих температур.

Варіант 1

T, K	300	350	400	450	500	550	600	650
$\mu\cdot 10^8$, Па· с	1790	1996	2190	2380	2558	2729	2829	3049
$\lambda\cdot 10^4$, Вт/(м·К)	257	291	324	356	387	417	446	474

T = 285 K, 427 K, 590 K

Варіант 2

T, °C	10	30	50	70	90	110	130	150
$\mu\cdot 10^6$, Па· с	1310	804	545	406	315	256	212	185
$\beta\cdot 10^4$, 1/К	0,7	3,21	4,49	5,70	6,95	8,0	9,2	10,3

T = 158 °C, 123 °C, 35 °C

Варіант 3

T, °C	0	10	20	30	40	50	60	70
p, кгс/см^2	0,0062	0,0125	0,0238	0,0433	0,0752	0,1258	0,2031	0,3177
$\rho\cdot 10^2$, кг/м^3	0,484	0,940	1,729	3,036	5,114	8,300	13,01	19,79

T = 18 °C, 43 °C, 75 °C

Варіант 4

T, K	223	233	243	253	263	273	283	293
p, кгс/см^2	0,4168	0,7318	1,219	1,940	2,966	4,379	6,271	8,741
$\rho\cdot10^2$, кг/м^3	38,2	64,5	103,8	160,4	239,0	345,2	485,9	669,4

T = 228 K, 270 K, 300 K

Варіант 5

T, °C	100	200	300	400	500	600	700	800
$\mu\cdot10^8$, Па· с	2070	2450	2790	3120	3440	3730	4040	4320
$\lambda\cdot10^4$, Вт/(м·К)	242	335	432	535	640	748	861	970

T = 155 ℃, 428 ℃, 850 ℃

Варіант 6

T, °C	0	100	200	300	400	500	600	700
$\mu\cdot10^8$, Па· с	686	940	1210	1470	1740	2000	2280	2570
$\lambda\cdot10^4$, Вт/(м·К)	97,2	173,3	268,7	386,1	521,0	674,5	846,7	1037

T = 230 ℃, 590 ℃, 740 ℃

Варіант 7

T, °C	0	20	40	60	80	100	120	140
$\mu\cdot10^3$, Па· с	10,20	4,40	2,30	1,50	1,10	0,80	0,59	0,34
ρ, кг/(м^3)	1037	1023	1007	990	972	952	933	914

T = 25 ℃, 72 ℃, 145 ℃

Варіант 8

T, °C	0	20	40	60	80	100	120	140
$\mu\cdot10^3$, Па· с	0,381	0,312	0,267	0,228	0,191	0,160	0,133	0,110
ρ, кг/(м^3)	677	660	641	622	602	581	559	534

T = 45 ℃, 113 ℃, 150 ℃

Варіант 9

T, °C	0	20	40	60	80	100	120	140
$\lambda\cdot10^2$, Вт/(м·К)	55,1	59,9	63,4	65,9	67,5	68,3	68,6	68,5
$\nu\cdot10^6$, м^2/с	1,79	1,01	0,66	0,478	0,365	0,295	0,244	0,212

T = 5 ℃, 88 ℃, 148 ℃

Варіант 10

T, °C	0	100	200	300	400	500	600	700
$\mu \cdot 10^8$, Па· с	785	1080	1370	1670	1970	2270	2570	2880
$\lambda \cdot 10^4$, Вт/(м·К)	129	230	351	500	668	858	4075	1319

T = 55 °C, 570 °C, 820 °C

Варіант 11

T, К	125	175	225	275	325	375	425	475
$\mu \cdot 10^8$, Па· с	861	1117	1427	1673	1896	2091	2285	2472
$\lambda \cdot 10^4$, Вт/(м·К)	116	162	204	240	275	306	336	365

T = 150 K, 340 K, 490 K

Варіант 12

T, К	200	300	400	500	600	700	800	900
$\mu \cdot 10^8$, Па· с	1464	2057	2566	3012	3414	3781	4117	4433
$\lambda \cdot 10^4$, Вт/(м·К)	182	260	336	406	468	522	571	660

T = 250 K, 640 K, 940 K

Варіант 13

T, °C	0	100	200	300	400	500	600	700
$\lambda \cdot 10^4$, Вт/(м·К)	300	447	621	819	1035	1189	1390	1592
c_p, кДж/(кг·К)	2,231	2,450	2,805	3,176	3,531	3,858	4,155	4,425

T = 170 °C, 540 °C, 730 °C

Варіант 14

T, К	350	400	450	500	550	600	650	700
$\mu \cdot 10^8$, Па· с	1214	1397	1577	1754	1926	2100	2266	2440
c_p, кДж/(кг·К)	2,21	2,29	2,38	2,47	2,57	2,69	2,83	2,99

T = 380 K, 475 K, 760 K

Варіант 15

T, К	193	203	213	223	233	243	253	263
ρ, кг/м^3	0,47	0,888	1,56	2,60	4,1	6,2	9,4	12,8
r, кДж/кг	185,0	182,0	178,0	175,0	171,0	167,6	163,8	160,0

T = 200 K, 240 K, 273 K

Варіант 16

T, °C	110	120	130	140	150	160	170	180
$\beta \cdot 10^4$, 1/К	8,0	8,6	9,2	9,7	10,3	10,8	11,5	12,2
i, кДж/кг	461	503	545	587	629	671	713	755

T = 127 °C, 154 °C, 195 °C

Варіант 17

T, °C	20	40	60	80	100	120	140	160
ρ, кг/(м^3)	1259	1250	1238	1224	1208	1188	1163	1126
λ, Вт/(м·К)	0,2790	0,2816	0,2839	0,2862	0,2884	0,2907	0,2930	0,2953

T = 33 °C, 92 °C, 172 °C

Варіант 18

T, °C	0	100	200	300	400	500	600	700
$\lambda \cdot 10^4$, Вт/(м·К)	111	195	303	433	582	752	942	1154
c_p, кДж/(кг·К)	1,2432	1,6409	2,0260	2,4070	2,7795	3,1395	3,4995	3,8511

T = 160 °C, 380 °C, 730 °C

Варіант 19

T, °C	0	100	200	300	400	500	600	700
$\lambda \cdot 10^4$, Вт/(м·К)	90,60	166	263	383	522	682	869	1089
c_p, кДж/(кг·К)	1,1679	1,4651	1,7414	2,0051	2,2563	2,4990	2,7293	2,9469

T = 240 °C, 570 °C, 780 °C

Варіант 20

T, °C	10	30	50	70	90	110	130	150
$\nu \cdot 10^6$, м^2/с	1,31	0,81	0,556	0,415	0,326	0,268	0,226	0,202
ρ, кг/м^3	1000	996	988	978	965	951	935	917

T = 6 °C, 95 °C, 142 °C

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ДО ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ №№ 1–3

1. Критерії адекватності.
2. Метод вирівнювання.
3. Метод обраних точок.
4. Метод середніх.
5. Метод найменших квадратів.
6. Параболічне інтерполювання.
7. Інтерполяційна формула Лагранжа.
8. Блок-схема формули Лагранжа.
9. Визначення порядку інтерполяційного поліному.

ТЕМА 2. ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІЙНИХ РІВНЯНЬ

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №4. МЕТОД ЕЙЛЕРА

1 МЕТА РОБОТИ

Освоєння методу чисельного інтегрування звичайних диференційних рівнянь. Складання блок-схеми і програми на мові програмування Turbo C.

2 ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

Диференційне рівняння встановлює зв'язок між незалежними змінними, невідомими (шуканими) функціями та їх похідними.

Рішення диференційного рівняння *n*-го порядку

$$y(n) = f(x, y, y', y'', \dots y(n-1)) \tag{4.1}$$

полягає у відшуканні функції $y=y(x)$, котра задовольняє (4.1) та початковим умовам:

$$y(x_0) = y_0;\ y'(x_0) = y'_0\ ;\ y''(x_0) = y''_0\ ;\ y^{(n)}(x_0)= y^{(n-1)}{}_0, \tag{4.2}$$

де $y_o, y'_o, y''_o, \dots, y^{(n-1)}{}_o$ – задані числа.

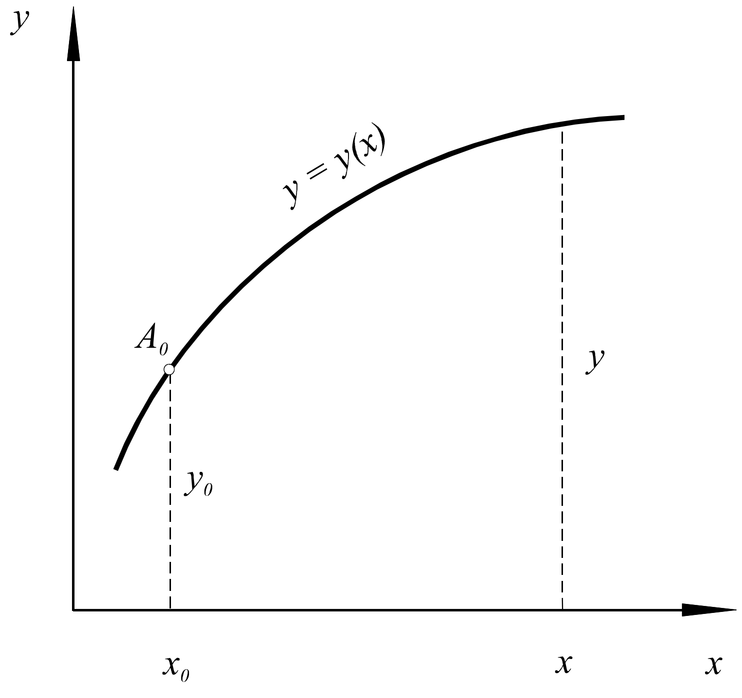

Рис. 4.1 – Графік інтегральної кривої $y=y(x)$, що проходить через задану точку $A(x_0,y_0)$

Така задача називається задачею Коши. Для звичайного диференційного рівняння першого порядку

$$y' = f(x,y) \tag{4.3}$$

початкова умова має вигляд:

$$y(x_0)=y_0. \qquad (4.4)$$

Геометричний смисл рішення цієї задачі полягає в знаходженні інтегральної кривої $y=y(x)$, яка проходить через задану точку $A(x_0,y_0)$ (рис. 4.1). Рівняння (4.3) установлює зв'язок між координатами та похідної від функції в наданій точці в системі координат $y–x$. Отже, для будь-якої точки за (4.3) можливо обчислити похідну, тобто тангенс кута нахилу дотичної до кривої $y=y(x)$. Інакше кажучи, рівняння (4.3) можливо розглядати як визначення кривої через її похідну.

Чисельне рішення задачі Коши полягає в знаходженні значень $y_1,y_2,...,y_n$ в точках $x_1=x_0+h$, $x_2=x_0+2h$, ..., $x_n=x_0+nh$ відрізка $[a,b]$, де h – шаг інтегрування, $x_0=a$, $x_n=b$. Завдавши точки (x_0,y_0), (x_1,y_1),..., (x_n,y_n) на координатній площині та з'єднав їх відрізками прямої, одержимо ламану лінію, яка зветься ламана Ейлера – приблизне зображення шуканої кривої (рис. 4.2)

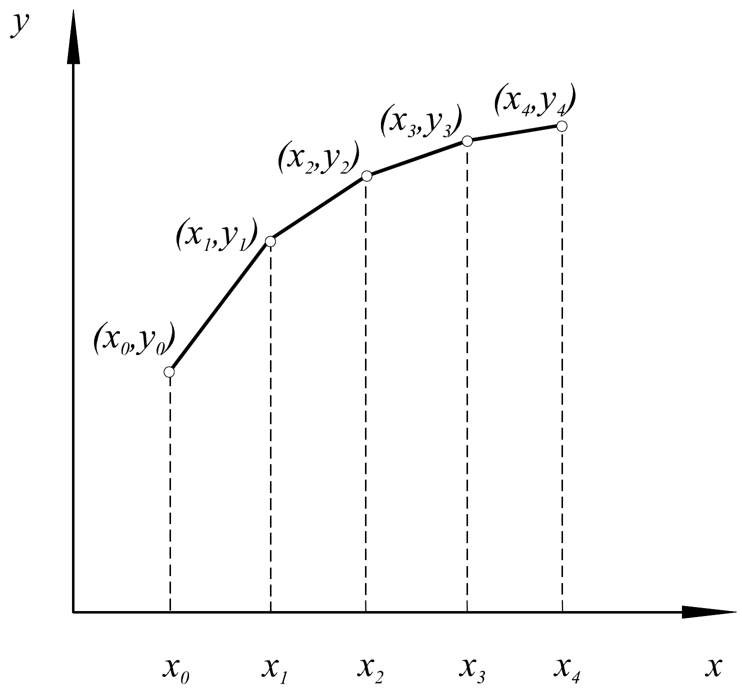

Рис. 4.2 – Ламана Ейлера

Цей метод рішення диференційного рівняння називається методом Ейлера. Цілком зрозуміло, що у цьому найпростішому методі безліч недоліків. Ми намагаємося описати криву відрізками прямої, що може приводити до помітних похибок (рис. 4.2). Очевидно, що яким-небудь способом необхідно облічувати кривизну шуканого рішення. Для цього розроблено ряд методів, котрі підрозділяються на два класи – одноступінчаті та багатоступінчаті методи.

1. В одноступінчатих методах використовується тільки інформація про шукану криву в одній точці та не робляться ітерації. Одним з таких методів є рішення рівнянь за допомогою рядів Тейлора. Практично зручними методами виявляються методи Рунге-Кута.

2. У багатоступінчатих методах використовується інформація про криву як мінімум у двох точках та вживається ітераційна процедура. До цих методів належать методи прогнозу та корекції.

2.1 Одноступінчасті методи. Рішення за допомогою рядів Тейлора

Методика чисельного рішення будь-якого диференційного рівняння зв'язана з розкладом рішення у ряд Тейлора у h-околу точки x:

$$y_{i+1}=y_i+hy_i' + (h^2/2!)\cdot y_i'' + (h^3/3!)\cdot y_i'''+ \ldots \qquad (4.5)$$

де $y_i^{(k)}$ – k-а похідна функції $y=f(x)$ у точках $x=x_k$; $h=x_{i+1}-x_i$.

Пошук рішення за допомогою ряду Тейлора являється одноступінчатим методом, тому що для обчислення y_{i+1} потрібна інформація тільки про одну попередню точку. Принципово (4.5) може бути використана при інтегруванні будь-якого диференційного рівняння з будь-якою наперед заданою точністю, від якої буде залежати число членів ряду. На практиці через необхідність обчислення функції та всіх її похідних, що дуже складно, цей метод використовується як спосіб оцінки точності інших формул, тобто наскільки той або інший метод погоджується з розкладом у ряд Тейлора. Деякі методи будуть погоджуватися до членів порядку h, другі – аж до членів порядку h^4 і т.п.

2.2. Метод Ейлера

Нехай дано рівняння (4.3), яке задовольняє початковій умові (4.4). Рішенням цього рівняння виявляється функція $y=y(x)$, яка визначена на інтервалі $[a,b]$. Для інтегрування скористуємося (4.5), обмежуючись двома членами ряду:

$$y_{i+1}=y_i+hy_i'=y_i+h\,f(x_i,y_i)\,. \qquad (4.6)$$

Інтегрування за методом Ейлера полягає у послідовному застосуванні формули (4.6) до рівняння (4.3), починаючи з $i=1$. У присутності початкової умови (4.4) для обчислення y_1 не потрібна додаткова інформація – достатньо обчислити праву частину (4.3) при заданих значеннях x_0 та y_0.

Обчислення y_1 аналогічне проведенню дотичної в точці (x_0,y_0), тангенс кута нахилу якої задається правою частиною (4.3) при $x=x_0$, $y=y_0$, до перетинання з вертикальною прямою, проведеною із точки $x=x_1$ (рис. 4.2). При наступному кроці, тобто при обчисленні y_2, знов визначається похідна, але вже у точці з координатами (x_1,y_1). З цієї точки проводиться дотична до перетинання з прямою $x=x_2$. Аналогічно повторюються обчислення для y_3, y_4,....

При достатньо малій величині кроку h метод Ейлера дає рішення з достатньою точністю, тому що похибка рішення близька до h^2 ($h<<1$) на кожному кроці інтегрування. До недоліків методу необхідно віднести сильну залежність одержаного рішення від величини кроку h та збільшення об'єму обчислень для досягнення задовільної точності.

ПРИКЛАД: Рівняння швидкості реакцій, що протікають послідовно

$$A \xrightarrow{K_1} P \xrightarrow{K_2} C$$

записується у наступному вигляді:

$$dp/dt = K_1 \cdot [A_o] \cdot exp(-K_1 \cdot t) - K_2 \cdot [p]\ , \qquad (4.7)$$

де $[p]$ – концентрація речовини P на час t від початку реакції; $K_1=0,05$ і $K_2=0,0065$ – константи швидкостей першої та другої реакцій, відповідно, л/(моль·хв); $[A_o]$ – початкова концентрація речовини A.

Знайти, чому будуть дорівнювати значення $[p]$ через 1, 2, 3, 4 хв. після початку реакції, якщо при $t=0$ $[p]=0$, а $[A_o]=1$.

РІШЕННЯ: Позначимо $y=[p]$, $x=t$. Тоді рівняння (4.7) після підстановки чисельних значень констант прийме вигляд:

$$dy/dx = f(x,y)=0,05 \cdot exp(-0,05 \cdot x)-0,0065 \cdot y\ . \qquad (4.8)$$

Результати обчислень заносимо у табл. 4.1 (заповнюючи її по строкам). Згідно з умовою задачі крок $h=1$.

Таблиця 4.1 – Рішення рівняння (4.8) методом Ейлера

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	$h \cdot f(x_i, y_i)$
0	0	0	0,05	0,05
1	1	0,05	0,0473	0,0473
2	2	0,0973	0,0446	0,0446
3	3	0,0143	0,0421	0,0421
4	4	0,184		

Вирішення задачі – сукупність значень y $(i=0,1,..,4)$.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №5. МОДИФІКОВАНИЙ МЕТОД ЕЙЛЕРА

1 МЕТА РОБОТИ

Освоєння методу чисельного інтегрування звичайних диференційних рівнянь. Складання блок-схеми і програми на мові програмування Turbo C.

2 ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

2.1. Модифікований метод Ейлера

На відміну від звичайного метода Ейлера в цьому методі використовується оцінка поведінки інтегральної кривої в наступних точках. Порядок побудови рішення в модифікованому методі Ейлера полягає в наступному.

Через точку $P_i(x_i,y_i)$ (рис. 5.1) проводиться дотична A_1 з тангенсом кута нахилу $f(x_i,y_i)$ до перетинання з ординатою в точці $x=x_i+h/2$ (по методу Ейлера (4.6)). Одержуємо точку перетинання B з координатами $(x_i+h/2,\ y_i+h/2{\cdot}y_i')$. Вираховуємо тангенс кута нахилу дотичної в цій точці: $K_i=y_i'+1/2=f(x_i+h/2,\ y_i+h/2{\cdot}y_i')$. Пряма з таким нахилом, яка проходить через точку B, позначена A_2. Далі, через точку $P_i(x_i,y_i)$ проводимо пряму A_0, паралельну A_2. Перетинання прямої A_0 з ординатою $x=x_{i+1}$ і дає шукану точку $P_{i+1}(x_{i+1},y_{i+1})$.

Рівняння прямої A_0 можна записати:

$$y_{i+1} = y_i + K_i \cdot (x_{i+1}-x_i) = y_i + h \cdot f(x_i+h/2,\, y_i+h/2{\cdot}y_i')\,. \qquad (5.1)$$

Формула (5.1) описує модифікований метод Ейлера. Інтегрування за модифікованим методом Ейлера міститься у послідовному застосуванні формул (4.6) (при $h=h/2$) і (5.1) до рівняння (4.3), починаючи з $i=1$. Цей метод є більш точним (другий порядок точності), ніж метод Ейлера, який має перший порядок точності.

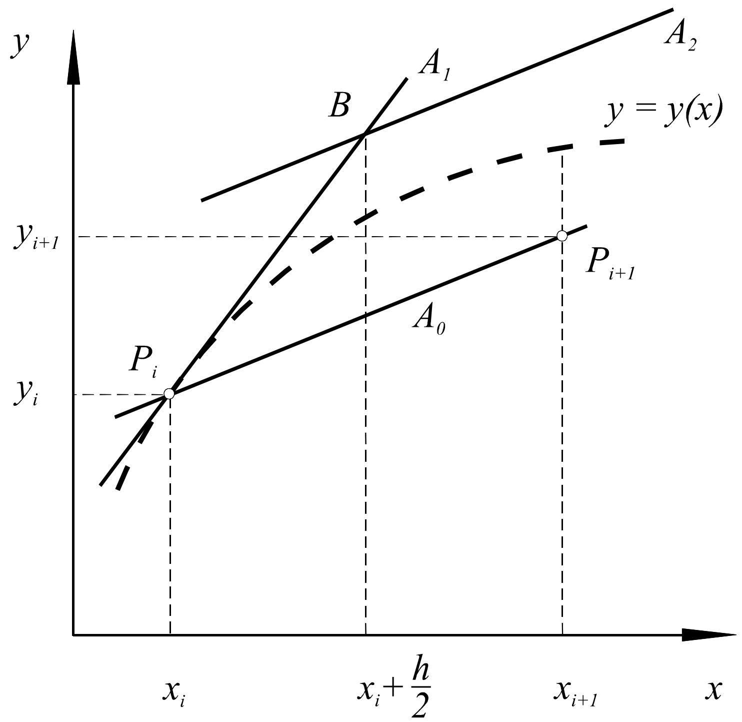

Рис. 5.1 – Графічна ілюстрація модифікованого методу Ейлера

ПРИКЛАД: Розв'язати модифікованим метод Ейлера рівняння (4.8) з початковою умовою $y_0=0$, на відрізку $[0;\ 4]$, крок $h=1$. Результати обчислень заносимо у табл. 5.1

Таблиця 5.1 – Рішення рівняння (4.8) модифікованим методом Ейлера

i	x_i	y_i	$y_i'=f(x_i,y_i)$	$x_{i+1/2}= =x_i+h/2$	$y_{i+1/2}= y_i+h/2y_i'$	$y'_{i+1/2}= f(x_{i+1/2}, y_{i+1/2})$	$h\,y'_{i+1/2}$
0	0	0	0,05	0,5	0,025	0,0486	0,0486
1	1	0,0486	0,0473	1,5	0,0722	0,0459	0,0459
2	2	0,0945	0,0446	2,5	0,117	0,0434	0,0434
3	3	0,138	0,0421	3,5	0,159	0,0410	0,0410
4	4	0,179					

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №6. УДОСКОНАЛЕНИЙ МЕТОД ЕЙЛЕРА-КОШИ

1 МЕТА РОБОТИ

Освоєння методу чисельного інтегрування звичайних диференційних рівнянь. Складання блок-схеми і програми на мові програмування Turbo C.

2 ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

2.1. Метод Ейлера-Коши

В цьому методі також використовується оцінка поведінки інтегральної кривої в подальших точках. Суть метода Ейлера-Коши полягає в наступному (дивись рис. 6.1).

За допомогою метода Ейлера (4.6) відшукується точка $A(x_{i+h},y_i+hy_i')$. Для чого в точці $Д(x_i,y_i)$ проводимо дотичну L_1 до перетинання з ординатою, яка відновлену в точці $x_{i+1}=x_i+h$. В точці A знову обчислюється тангенс кута нахилу дотичної і проводиться дотична L_2. В точці A проводимо пряму $\overline{L}$, тангенс кута нахилу якої є середнє арифметичне тангенсів кутів нахилу дотичних L_1 і L_2. Через точку $Д(x_i,y_i)$ проводимо пряму L, паралельну $\overline{L}$. Точка, в котрій пряма перетне ординату, відновлену в точці $x_{i+1}=x_i+h$ і буде шуканою точкою в (x_{i+1}, y_{i+1}). Формула метода Ейлера-Коши має наступний вигляд:

$$y_{i+1}=y_i+h\cdot\frac{f(x_i,y_i)+f(x_i+h,y_i+h\cdot y_i')}{2}. \tag{6.1}$$

Інтегрування по методу Ейлера-Коши полягає в послідовному застосуванні формул (4.6) і (6.1), починаючи з $i=1$. Спочатку, по (4.6) обчислюють приблизні значення $y_в$. Потім, визначивши $y_в$, по (6.1) обчислюють шукане y_{i+1}. Даний метод, також як і модифікований метод Ейлера, має другий порядок точності.

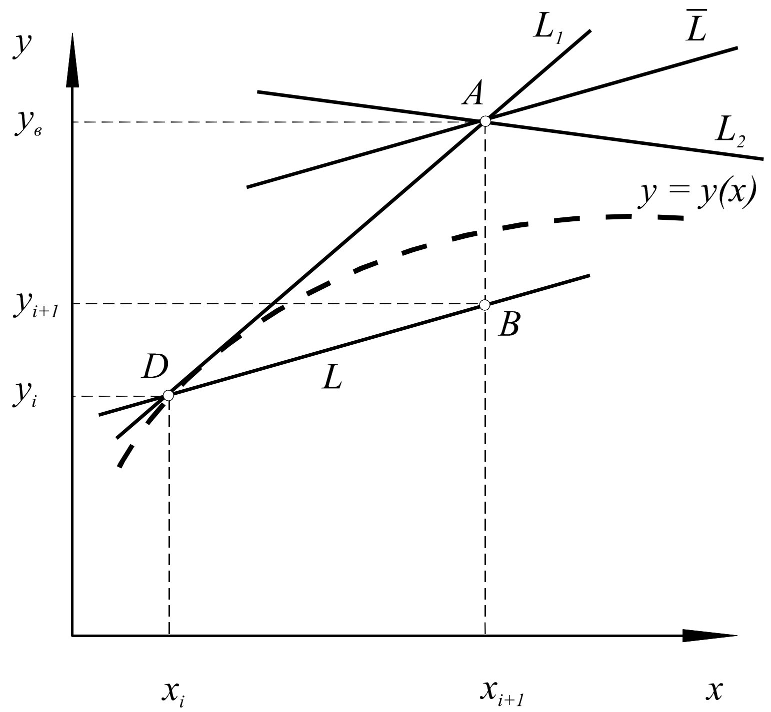

Рис. 6.1– Графічна ілюстрація методу Ейлера-Коши

ПРИКЛАД: Користуючись методом Ейлера-Коши, розв'язати рівняння (4.8) з початковою умовою $y_0=0$, на відрізку $[0; 4]$, крок $h=1$.

РІШЕННЯ: Результати обчислень приведенні в табл. 6.1.

Таблиця 6.1 – Рішення рівняння (4.8) методом Ейлера-Коши

i	x_i	y_i	$y_i'=f(x_i,y_i)$	x_{i+1} = $=x_i+h$	$y_в=y_i+hy_i'$	$y'_в=$ $=f(x_{i+1}, y_в)$	$h(y'_i+y_в)/2$
0	0	0	0,05	1	0,05	0,0473	0,0486
1	1	0,0486	0,0473	2	0,0959	0,0446	0,0460
2	2	0,0945	0,0446	3	0,139	0,0421	0,0434
3	3	0,138	0,0421	4	0,180	0,0398	0,0410
4	4	0,179					

2.2. Методи Рунге-Кута

Найбільш поширеними у практиці інтегрування звичайних диференційних рівнянь є методи Рунге-Кутта різноманітного порядку точності. Перевагою цих методів є те, що при їх використовуванні не треба обчислювати похідні вище першого порядку, а їх головний недолік – значний об'єм обчислень на кожному кроці.

До методів Рунге-Кута відносяться метод Ейлера – метод Рунге-Кута першого порядку точності; модифікований метод Ейлера і метод Ейлера-Коши

– методи Рунге-Кута другого порядку.

Метод Рунге-Кута четвертого порядку точності – один із найуживаніших методів інтегрування диференційних рівнянь. Взагалі його називають просто "методом Рунге-Кута". Цей метод описується системою п'яти рівнянь:

$$y_{i+1} = y_i + h/6 \cdot (K_1+2 \cdot K_2+2 \cdot K_3+K_4), \qquad (6.2)$$

де

$$K_1=f(x_i,y_i), \qquad (6.3)$$

$$K_2=f(x_i+h/2,y_i+h \cdot K_1/2), \qquad (6.4)$$

$$K_3=f(x_i+h/2,y_i+h \cdot K_2/2), \qquad (6.5)$$

$$K_4=f(x_i+h, y_i+h \cdot K_3). \qquad (6.6)$$

Інтегрування по методу Рунге-Кутта полягає в наступному. Для кожної i-ої точки $(i=1, 2,.., n-1)$ по (4.12)–(4.15) обчислюються значення K_j $(j = 1, 2, 3, 4)$. Потім по (6.2) послідовно визначаються значення y_i $(i=1, 2, .., n)$.

Лабораторна робота №7. Удосконалений метод Ейлера-Коши з наступною ітераційною обробкою (метод прогнозу та корекції)

1 МЕТА РОБОТИ

Освоєння методу чисельного інтегрування звичайних диференційних рівнянь. Складання блок-схеми і програми на мові програмування Turbo C.

2 ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

2.1 Багатоступінчаті методи. Метод прогнозу та корекції

Відмінною рисою методів Рунге-Кута є те, що при обчислюванні наступної точки (x_{i+1},y_{i+1}) використовується інформація тільки про точки (x_i,y_i). У методах другого порядку і вище доводиться обчислювати значення функції в одній чи кількох проміжних точках. Це не завжди раціонально, оскільки, якщо процес інтегрування вже просунувся на декілька кроків, то маємо ту додаткову інформацію (про попередні точки рішення), для використання якої не потрібно обчислювати значення функцій.

Методи прогнозу та корекції відрізняються тією властивістю, що за їх допомогою неможливо почати рішення диференційного рівняння, тому що в них необхідно використовувати інформацію про попередні точки рішення. Для початку рішення рівняння, маючи тільки одну точку, визначену первісною умовою, необхідно використовувати метод типу Рунге-Кута.

З назви метода зрозуміло, що спочатку "забачається" значення $y^{(0)}_{i+1}$, а потім використовується той чи інший метод для "коректування" отриманого значення. Звичайно, після цього можна використовувати ту ж саму формулу для повторного коректування значення y_{i+1}. Цей ітераційний процес можна повторювати скільки завгодно разів, але з точки зору ефективності доцільно зменшувати число ітерацій, вибираючи відповідний крок інтегрування.

Для прогнозу значення y_{i+1} можна використовувати різні формули. Формула другого порядку точності має вигляд:

$$y^{(0)}_{i+1} = y_{i-1} + 2 \cdot h \cdot f(x_i, y_i)\ , \qquad (7.1)$$

де верхній індекс *(0)* означає первісне наближення до y_{i+1}, тобто передбачене значення.

З (7.1) видно, що за її допомогою неможливо обчислити y_i. Тому для обчислення y_i використовується метод Рунге-Кута. Всі послідуючі точки будуть обчислятися з використанням інформації про попередні точки рішення без додаткових обчислень значення функції. Це дозволяє класифікувати методи прогнозу та корекції як багатоступінчаті методи рішення диференційних рівнянь.

Алгоритм рішення рівняння методом прогнозу та корекції наступний. По (7.1) обчислюється значення $y^{(0)}_{i+1}$, що передбачається. Геометрично прогноз зводиться до того, що знаходиться кут нахилу дотичної в точці (x_i, y_i) (пряма L_1 на рис. 7.1). Після цього через точку (x_{i-1}, y_{i-1}) проводиться пряма L'_1, паралельна L_1. Передбачене значення y_{i+1} буде розташоване там, де пряма L'_1 перетне ординату $x = x_{i+1}$.

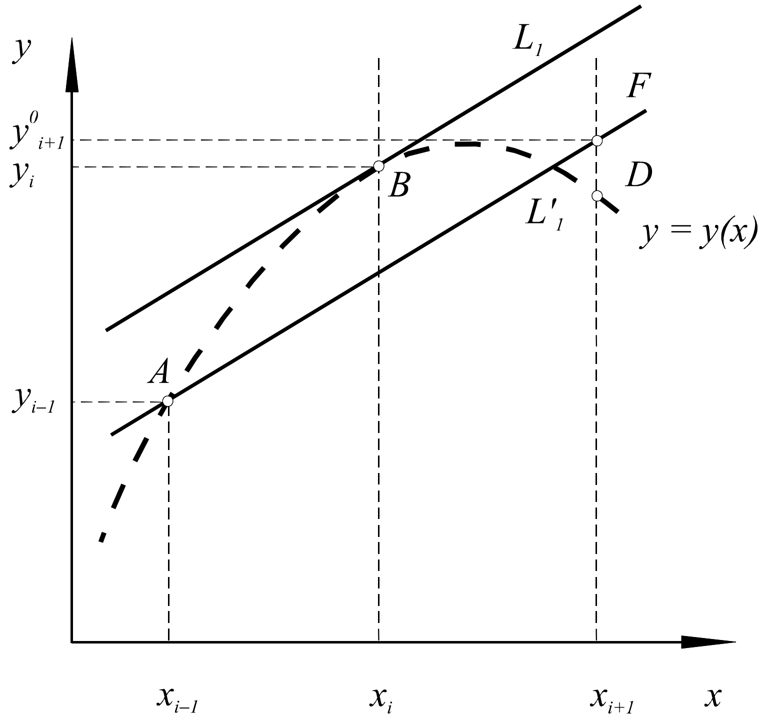

Рис. 7.1 – Графічна ілюстрація методу прогнозу та корекції. Стадія прогнозу

Тепер потребується деякий метод корекції передбаченого значення. Виходячи з того, що величина $y^{(0)}_{i+1}$ відома, можна обчислити нахил дотичної в точці (x_{i+1}, y_{i+1}). Ця дотична відображена на рис. 7.2 і позначена L'_1. Пряма L'_1 на рис. 7.2 становить собою те ж саме, що й на рис. 7.1, і усереднюючи тангенси кутів нахилу ліній L'_1 і L_2, отримаємо лінію $\overline{L}$. Через точку (x_i, y_i)

проводимо пряму L, паралельну $\overline{L}$. Точка перетинання цієї лінії з ординатою $x=x_{i+1}$ дає нове наближення до y_{i+1}.

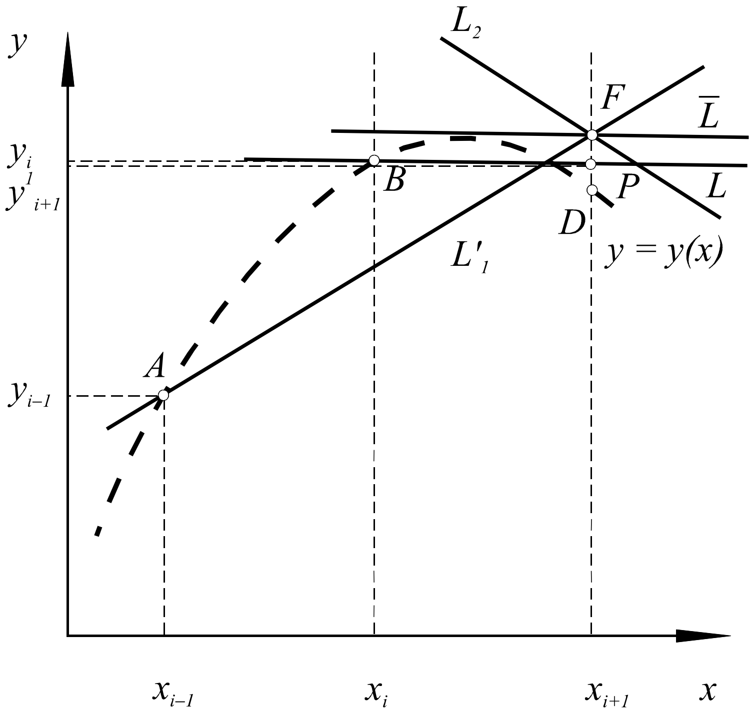

Рис. 7.2 – Графічна ілюстрація методу прогнозу та корекції. Стадія корекції

Назвемо це наближення скоректованим значенням $y^{(1)}_{i+1}$. Обчислити це скоректоване значення можливо по формулі:

$$y^{(1)}_{i+1}=y_i+h/2\cdot[f(x_i,y_i)+f(x_{i+1},y^{(0)}_{i+1})]. \qquad (7.2)$$

Можна знайти нове, можливо, ще найкраще наближення до y_{i+1}, використовуючи знайдене значення y_{i+1} і корегуючи знов. В загальному випадку, k-те наближення до y_{i+1} обчислюється по формулі:

$$y^{(k)}_{i+1}=y_i+h/2\cdot [(f(x_i,y_i)+f(x_{i+1},y^{(k-1)}_{i+1})], \qquad (7.3)$$

для $k=1, 2, 3, \ldots$.

Ітераційний процес завершується, коли

$$|y^{(k+1)}_{i+1} - y^{(k)}_{i+1}| < \varepsilon \qquad (7.4)$$

Обираючи шаг для метода прогнозу та корекції необхідно користуватися таким емпіричним правилом: мінімальний об'єм обчислень досягається при числі ітерацій, що дорівнює 2. Іншими словами, крок інтегрування потрібно вибирати так, щоб умова (7.4) виконувалась після двох ітерацій. При більшому числі ітерацій крок h необхідно зменшувати, в іншому випадку він може бути збільшений.

Блок-схема методу прогнозу і корекції приведена на рис. 7.3.

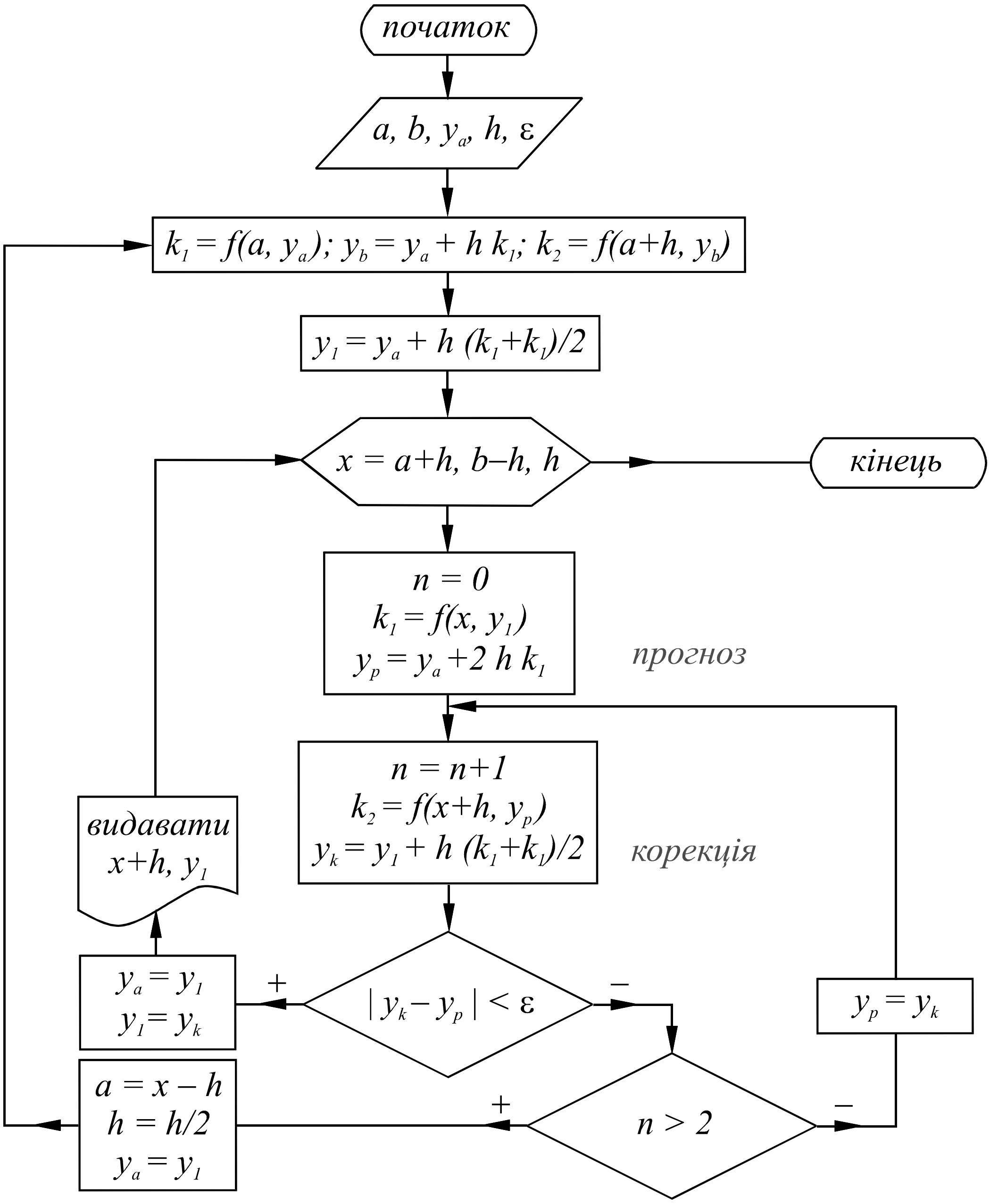

Рис. 7.3 – Блок-схема методу прогнозу і корекції

ПРИКЛАД: Використовуючи метод прогнозу та корекції, знайти з точністю ε=0,001 значення y_2 та y_3 рішення $y=y(x)$ диференційного рівняння (4.8) з первісною умовою $y_0=0$. Візьмемо крок $h=1$.

РІШЕННЯ: Приймаючи до уваги те, що для використання формули (7.1) необхідна інформація про дві точки, то значення y_1 візьмемо з попереднього прикладу, обчисленого за допомогою метода Ейлера-Коши, $y_1=0,0486$. Тепер по формулі (7.1) обчислимо передбачене значення в точці $y^{(0)}_2$

$$y^{(0)}_2 = y_0+2 \cdot h \cdot f(x_1,y_1)=0+2 \cdot 1 \cdot 0,0473=0,0972.$$

Корекцію оптимального значення виконаємо по формулі (7.3). Перше наближення:

$$y^{(1)}_2 = y_1 + h/2 \cdot [f(x_1,y_1) + f(x_2,y^{(0)}_2)] = 0{,}0486 + 1/2 \cdot (0{,}0473 + 0{,}0446) = 0{,}0944.$$

Друге наближення:

$$y^{(2)}_2 = y_1 + h/2 \cdot [f(x_1,y_1) + f(x_2,y^{(1)}_2)] = 0{,}0486 + 1/2 \cdot (0{,}0473 + 0{,}0446) = 0{,}0946.$$

Перевірка виконання умови (7.4)

$$|y^{(2)}_2 - y^{(1)}_2| < \varepsilon$$

В зв'язку з тим, що умова виконується, то приймаємо $y_2=0{,}0946$. Далі по (7.1) обчислюємо передбачене значення в точці y_3.

$$y^{(0)}_3 = y_1 + 2 \cdot h \cdot f(x_2,y_2) = 0{,}0486 + 2 \cdot 1 \cdot 0{,}0446 = 0{,}1378.$$

Корекцію отриманого значення виконаємо по формулі (7.3). Перше наближення:

$$y^{(1)}_3 = y_2 + h/2 \cdot [f(x_2,y_2) + f(x_3,y^{(0)}_3)] = 0{,}0946 + 1/2 \cdot (0{,}0446 + 0{,}0421) = 0{,}1380.$$

Друге наближення:

$$y^{(2)}_3 = y_2 + h/2 \cdot [f(x_2,y_2) + f(x_3,y^{(1)}_3)] = 0{,}0946 + 1/2 \cdot (0{,}0446 + 0{,}0421) = 0{,}1380.$$

Перевірка виконання умови (7.4)

$$|y^{(2)}_3 - y^{(1)}_3| < \varepsilon$$

В зв'язку з тим, що умова виконується, то приймаємо $y_3=0{,}1380$.

Метод прогнозу та корекції являється більш точним, ніж раніше розглянуті методи другого порядку точності.

ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ №№ 4 –7

ПРИ ПІДГОТОВЦІ ДО ЗАЙНЯТТЯ:

1. Вивчити теоретичні відомості по роботі.
2. Скласти програму для виконання індивідуального завдання. При реалізації методів чисельного інтегрування звичайних диференційних рівнянь з заданою точністю для розрахунку $y'=f(x,y)$ використати допоміжні функції. Вигляд рівняння обирається по номеру з окремої таблиці. Точність корекції в останньому методі (прозу та корекції) прийняти 0,001–0,0001

ПІД ЧАС ЗАЙНЯТТЯ:

1. Створити файл, набрати і налагодити програму.
2. За індивідуальним завданням (номер завдання відповідає номеру ім’я по батькові студента за журналом) провести чисельне інтегрування звичайних диференційних рівнянь методами Ейлера, модифікованим методом Ейлера, методом Ейлера-Коши та прогнозу і корекції.
3. Отримати результати розрахунку і остаточний лістінг програми.
4. За отриманими даними построїти графіки залежностей.
5. Оформити протокол лабораторної роботи.

ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Таблиця – Варіанти індивідуальних завдань для лабораторних робіт №№4–7

№ вар.	№ диф. рівн.	*Коефіцієнти*		*Початкові значення*		*Величина відрізку*	*Шаг інтегрування*
		K_1	K_2	x_0	y_0		
1	7	*0,50*	*0,40*	*0,00*	*0,40*	*0 – 4*	*0,5 – 1,25*
2	4	*–0,40*	*3,10*	*1,00*	*1,80*	*1 – 13*	*2 – 0,5*
3	2	*1,30*	*3,60*	*1,00*	*2,00*	*1 – 7*	*1 – 0,25*
4	1	*0,85*	*1,80*	*0,50*	*0,20*	*0,5 – 4,5*	*0,5 – 0,125*
5	3	*0,02*	*4,10*	*0,00*	*0,40*	*0 – 10*	*1 – 0,25*
6	5	*1,80*	*2,60*	*1,00*	*0,50*	*1 – 2,6*	*0,2 – 0,05*
7	6	*0,40*	*0,50*	*1,00*	*1,20*	*1 – 5*	*0,5 – 0,125*
8	7	*–0,05*	*1,20*	*1,00*	*0,90*	*1 – 5*	*0,5 – 0,125*
9	2	*0,30*	*4,90*	*0,00*	*2,00*	*1 – 17*	*2 – 0,5*
10	1	*–0,05*	*0,10*	*0,00*	*1,40*	*0 – 8*	*0,5 – 0,125*
11	6	*0,70*	*–0,20*	*1,00*	*0,60*	*1 – 5*	*0,5 – 0,125*
12	5	*0,80*	*0,90*	*2,00*	*1,00*	*2 – 3,6*	*0,2 – 0,05*
13	3	*–0,22*	*0,80*	*1,00*	*0,50*	*1 – 9*	*1 – 0,25*
14	4	*0,08*	*1,40*	*4,00*	*5,00*	*4 – 36*	*4 – 1*
15	7	*–0,20*	*0,60*	*0,00*	*0,95*	*0 – 5*	*0,5 – 0,125*
16	5	*0,14*	*0,30*	*0,40*	*0,60*	*0,4 – 2,8*	*0,2 – 0,05*
17	3	*–0,15*	*2,30*	*0,00*	*0,30*	*0 – 4*	*0,5 – 0,125*
18	1	*0,20*	*1,30*	*1,00*	*0,80*	*1 – 5*	*0,5 – 0,125*
19	2	*0,40*	*1,70*	*1,00*	*1,00*	*1 – 9*	*1 – 0,25*
20	4	*–0,06*	*0,50*	*1,00*	*1,80*	*1 – 33*	*4 – 1*
21	6	*0,15*	*0,60*	*2,00*	*2,00*	*2 – 6*	*0,5 – 0,125*
22	5	*–0,25*	*3,40*	*0,50*	*0,20*	*0,5 – 2,9*	*0,3 – 0,075*
23	2	*–1,80*	*3,40*	*1,00*	*4,00*	*1 – 9*	*1 – 0,25*
24	7	*0,25*	*0,50*	*0,00*	*0,14*	*0 – 8*	*1 – 0,25*
25	3	*–0,05*	*1,60*	*1,00*	*1,00*	*1 – 4,2*	*0,4 – 0,1*
26	5	*0,50*	*1,20*	*0,80*	*0,10*	*0,8 – 2*	*0,1 – 0,025*
27	4	*0,20*	*1,00*	*2,00*	*4,00*	*2 – 10*	*1 – 0,25*
28	1	*–4,20*	*3,50*	*0,00*	*2,50*	*0 – 0,8*	*0,1 – 0,025*
29	6	*0,90*	*–0,10*	*2,00*	*1,00*	*2 – 6*	*0,5 – 0,125*
30	5	*–0,10*	*0,50*	*0,30*	*0,30*	*0,3 – 1,9*	*0,1 – 0,025*

Таблиця – Види диференційних рівнянь для лабораторних робіт №№4–7

№ диф. рівн.	*Вид рівняння*
1	$\dfrac{dy}{dx}=\dfrac{K_1y^2}{x+K_2y}(1+x)$
2	$\dfrac{dy}{dx}=\dfrac{K_1y}{x+K_2y^2}$
3	$\dfrac{dy}{dx}=\dfrac{x\cdot e^{K_1y}}{1+K_2y}$
4	$\dfrac{dy}{dx}=\dfrac{\frac{x}{y}-e^{K_1y}}{1+K_2y}$
5	$\dfrac{dy}{dx}=K_2\,x\,e^{-K_1x}(y^2+K_2)$
6	$\dfrac{dy}{dx}=\dfrac{K_1}{x^2}-K_2y^2$
7	$\dfrac{dy}{dx}=K_1\,y^{K_2}(1-y)(1+x)$

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ДО ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ №№ 4–7

1. Вирішення диференційного рівняння. Основні поняття.
2. Вирішення за допомогою рядів Тейлора.
3. Метод Ейлера. Блок-схема методу.
4. Метод Ейлера-Коши. Блок-схема методу.
5. Модифікований метод Ейлера. Блок-схема методу.
6. Методи Рунге-Кута.
7. Метод прогнозу і корекції.
8. Блок-схема методу прогнозу і корекції.

ЛІТЕРАТУРА

1. Брановицька С. В., Медведєв Р. Б., Фіалков Ю. Я. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. Підручник. – К: ІВЦ “Видавництво «Політехніка»”, 2004. – 220 с.
2. Математична обробка даних хімічного експерименту. Навчальний посібник/ Укладачі: В.О Мінаєва, В.М. Бочарнікова, Т.А. Григоренко. – Черкаси, Вид. від. ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2003. – 208 с.
3. Поршнев С.В. Вычислительная математика. Курс лекций. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 320 с
4. Березин Б.И., Березин С.Б. Начальный курс С и С++. – М.: Диалог-МИФИ, 1998. – 288 с.
5. Математическая обработка результатов эксперимента / Л.З.Румшинский – М.: Наука, 1971. – 192 с.
6. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики – М.: Наука, 1966. – 664 с.
7. Хемминг Р.В. Численные методы. – М.: Наука, 1972. – 400 с.