Е. Г. Евсеева, Ю. В. Абраменкова, С. С. Попова

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ХИМИИ

учебно-методическое пособие

для студентов химических специальностей

Донецк – 2016

УДК 54(075:8)
ББК 24в6я73
Е 25

Рекомендовано к печати Ученым советом
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»
Протокол № 1 от 29.01.2016 г.

Рецензенты:

В. М. Михальчук – доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой физической химии, ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»;

Г. М. Улитин – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой высшей математики, ГОУ ВПО «Донецкий национальный технический университет»

Евсеева Е. Г., Абраменкова Ю. В., Попова С. С.
Е 25 Математическое моделирование в химии: учебно-метод. пособие для студентов химических специальностей / Е. Г. Евсеева, Ю. В. Абраменкова, С. С. Попова. – Донецк: ДонНУ, 2016. – 194 с.

Пособие предназначено для самостоятельной работы студентов химических направлений подготовки и специальностей с целью освоения будущей профессиональной деятельности.

В пособии приведены профессионально ориентированные задачи по химии, которые решаются с применением математических методов, для студентов химических специальностей. Система задач предназначена для формирования у студентов умений выполнять действия по математическому моделированию, а также для формирования способов действий, необходимых им в профессиональной деятельности.

В пособии приводятся примеры применения прикладных программ, например таких, как AdvancedGrapher, GeoGebra, Gran-2D, MicrosoftMathematics, OSA Beta и др., для решения задач и анализа математических моделей профессионально ориентированных задач.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ 4

1. Линейная алгебра 7

2. Векторная алгебра. Аналитическая геометрия 33

3. Функция одной независимой переменной 58

4. Дифференциальное исчисление функции одной переменной 72

5. Интегральное исчисление функции одной переменной 92

6. Обыкновенные дифференциальные уравнения 113

7. Ряды 157

8. Итоговое тестирование……………………………...............172

ОТВЕТЫ 183

ЛИТЕРАТУРА 192

ВВЕДЕНИЕ

Учебно-методическое пособие разработано на принципах деятельностного подхода и предназначено для самостоятельной работы студентов химических специальностей, направленно на усвоение содержания математических дисциплин. Содержание обучения математике на принципах деятельностного подхода составляет система математических учебных действий, знания, которые обеспечивают выполнение этих действий, и способов действий, которые заданы характером будущей профессиональной деятельности.

С точки зрения деятельностного подхода, усваивать знания можно, только применяя их, оперируя ими, а механизмом осуществления учебной деятельности при обучении математике является решение задач. В пособии предложена система профессионально ориентированных задач, которая направлена на последовательное освоение математических действий, а также способов действий, необходимых будущим учителям химии, химикам-исследователям, химикам-технологам в профессиональной деятельности.

Чтобы решить профессионально ориентированную задачу, необходимо составить математическую модель процесса или явления, о которых идет речь в условии задачи. Примерами математических моделей, которые используются для решения задач, связанных с химией и химическими технологиями, могут быть алгебраические или дифференциальные уравнения, системы алгебраических или дифференциальных уравнений и т.д. При этом для решения одной и той же задачи могут быть применены различные математические модели.

Для того, чтобы привести задачу прикладного характера к математической задаче, необходимо произвести определенные действия по математическому моделированию. Целью данного пособия является предоставление помощи студентам химических направлений подготовки и специальностей в усвоении действий по математическому моделированию на примере решения профессионально ориентированных задач.

Решение прикладных задач обычно сводится к громоздким расчетам, также бывает необходимо провести исследования или выполнить чертёж, которые очень сложно сделать вручную. Из этого следует, что студенты должны также усвоить действия по применению педагогических программных средств для решения профессионально ориентированных задач. Поэтому в данном пособии мы предлагаем некоторые математические действия выполнять с помощью разных пакетов прикладных программ.

При решении профессионально ориентированных задач во время обучения математике студентов химических направлений подготовки и специальностей программные средства целесообразно применять для достижения следующих целей:

1) избежание громоздких расчётов или сокращение времени на них;
2) получения приближенных численных и функциональных выражений, а также приближенных решений уравнений, систем уравнений и т. п.;
3) визуализации и исследования функциональной зависимости при разных условиях;
4) создания геометрической интерпретации и визуализации, манипуляции геометрическими объектами, которые созданы с экрана или аналитически;
5) измерения и анализа изменений исследуемых величин;
6) создания аналитической записи зависимостей в явном или приближенном виде и т. д.

Для визуализации, создания геометрической интерпретации и исследования функциональной зависимости в различных условиях, для получения численных и функциональных выражений в пособии предлагается использование различных педагогических программных средств, среди которых Advanced Grapher, GeoGebra, Gran-1, Gran-2D, Microsoft Mathematics, OSABeta, Wolfram Alpha.

В пособии рассматриваются профессионально ориентированные задачи, сгруппированные по виду математической модели, описывающей химическое явление или процесс. Разделы пособия представляют темы курса математики, читаемого студентам химических специальностей, в которых могут быть рассмотрены приведенные в них задачи. Это такие темы:

1. Линейная алгебра.
2. Векторная алгебра. Аналитическая геометрия.
3. Функция одной независимой переменной.
4. Дифференциальное исчисление функции одной переменной.
5. Интегральное исчисление функции одной переменной.
6. Обыкновенные дифференциальные уравнения.
7. Ряды.

В решение каждой профессионально ориентированной задачи, рассмотренной в пособии, выделены пункты:

1) опорные знания по химии;
2) действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить;
3) опорные знания по математике;
4) выполнение математических действий;
5) применение средств ИКТ для решения и исследования задачи.

Также в рамках каждой темы для освоения студентами действий по математическому моделированию нами разработаны тестовые задания различных типов: тестовые задания закрытого типа, задания на соответствие, задания на установление правильной последовательности действий по математичекому моделированию.

Подробное решение и анализ профессионально ориентированных задач, наличие тестовых заданий и задач для самостоятельного решения (с ответами и указаниями) позволяют студентам самостоятельно работать с предложенным пособием.

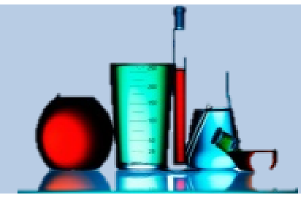
Таким образом, учебно-методическое пособие будет полезно для организации учебной деятельности по математике, как во время аудиторных занятий, так и в процессе внеаудиторной самостоятельной работы студентов химических специальностей.

1. ЛИНЕЙНАЯ АЛГЕБРА

Одним из применений линейной алгебры в химии является составление баланса химических реакций. Обоснованием этого является закон сохранения массы, который гласит следующее: Масса не может быть ни создана, ни уничтожена в любой химической реакции. Поэтому балансировка уравнений, требует одного и того же количества атомов по обе стороны химической реакции. Масса всех веществ, вступающих в реакцию, должна быть равна массе продуктов (веществ, образующихся в результате реакции).

В качестве примера рассмотрим следующую задачу.

1.1. Модель балансирования химической реакции



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 1.1. Дано уравнение химической реакции:

$$C_2H_6 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O.$$

Сбалансируйте это уравнение.

Опорные знания по химии

Закон сохранения массы: масса веществ, вступающих в химическую реакцию, равна массе веществ, образующихся в результате реакции.

Балансировка химической реакции — процесс уравнивания количества химических элементов в обеих частях химического уравнения. Это значит, что количество атомов, содержащихся в реагентах, до реакции и после — одинаково.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Обозначим количество молекул каждого вещества через: C_2H_6 – x, O_2 – y, CO_2 – z, H_2O – t.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Поскольку x, y, z и t это количество молекул, то они должны принимать значения из множества натуральных чисел.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Сбалансировать эту химическую реакцию – значит найти значения x, y, z и t, так что число атомов каждого элемента одинаково на обе стороны уравнения:

$$x\,C_2H_6 + y\,O_2 \rightarrow z\,CO_2 + t\,H_2O.$$

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

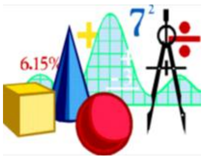
Уравниваем количество атомов каждого элемента по обе стороны уравнения реакции. Для этого заполняем таблицу:

<table>
<tr><th rowspan="2">Элемент</th><th colspan="3">Левая часть уравнения реакции</th><th colspan="3">Правая часть уравнения реакции</th><th rowspan="2">Полученное равенство</th></tr>
<tr><th>молекул</th><th>атомов в молекуле</th><th>всего атомов</th><th>молекул</th><th>атомов в молекуле</th><th>всего атомов</th></tr>
<tr><td>C</td><td>x</td><td>2</td><td>$2x$</td><td>z</td><td>1</td><td>z</td><td>$2x = z$</td></tr>
<tr><td>H</td><td>x</td><td>6</td><td>$6x$</td><td>t</td><td>2</td><td>$2t$</td><td>$6x = 2t$</td></tr>
<tr><td rowspan="2">O</td><td rowspan="2">y</td><td rowspan="2">2</td><td rowspan="2">$2y$</td><td>z</td><td>2</td><td rowspan="2">$2z + t$</td><td rowspan="2">$2y = 2z + t$</td></tr>
<tr><td>t</td><td>1</td></tr>
</table>

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Найти на множестве натуральных чисел решение системы линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} 2x = z; \\ 6x = 2t; \\ 2y = 2z + t. \end{cases}$$



Опорные знания по математике

1. Алгоритм метода Гаусса.
2. Теорема Кронеккера-Капелли.
3. Понятие ранга матрицы.
4. Теорема о ранге матрицы.

Выполняем математические действия

Полученная система уравнений содержит 3 уравнения и 4 переменные, значит её размер 3х4. Количество уравнений не равно количеству неизвестных, поэтому решать систему будем методом Гаусса.

1. Перенесем все переменные в левые части уравнений:

$$\begin{cases} 2x - z = 0; \\ 6x - 2t = 0; \\ 2y - 2z - t = 0. \end{cases}$$

2. Запишем расширенную матрицу полученной системы:

$$A_p = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

3. Преобразуем расширенную матрицу к ступенчатому виду:

$$A_p = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & -2 & 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2/3 & 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -7/6 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2/3 & 0 \end{pmatrix}.$$

4. Запишем систему уравнений, которая соответствует преобразованной расширенной матрице.

$$\begin{cases} x - t/3 = 0; \\ y - 7t/6 = 0; \\ z - 2t/3 = 0. \end{cases}$$

5. Проанализируем по теореме Кронеккера-Капелли, сколько решений имеет полученная система уравнений. Для этого определим ранги главной и расширенной матрицы системы.

В преобразованной расширенной матрице есть ненулевой минор третьего порядка, равный определителю единичной матрицы:

$$|E| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1.$$

Поскольку порядок минора является наибольшим и для главной и для расширенной матрицы системы, то можно сделать вывод, что ранги обеих матриц равны трём: $rangA = rangA_p = 3.$ Это значит, что система совместна и имеет решения. При этом количество неизвестных $n = 4$. Поскольку ранги главной и расширенной матрицы равны между собой, но не равны количеству неизвестных:

$$rangA = rangA_p = 3 \neq n = 4,$$

то по теореме Кронеккера-Капелли система не определена и имеет бесконечно много решений.

6. Запишем общее решение системы уравнений:

$$\begin{cases} x = t/3; \\ y = 7t/6; \\ z = 2t/3; \\ t \in R. \end{cases}$$

Выбирая положительные значения *t* кратные 6, будем получать натуральные значения переменных *x, y, z*. Например, если выбрать *t* =6, то получим:

$$\begin{cases} x = 6/3; \\ y = 42/6; \\ z = 12/3; \\ t = 6, \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} x = 2; \\ y = 7; \\ z = 4; \\ t = 6. \end{cases}$$

6)*Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.*

Сбалансированное уравнение:

$$2C_2H_6 + 7O_2 \rightarrow 4CO_2 + 6H_2O.$$

Таким образом, математической моделью, применяемой при балансировании уравнений химических реакций, является система линейных алгебраических уравнений, решаемая на множестве натуральных чисел.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Решение системы линейных уравнений в задаче 1.1. также может быть найдено с помощью пакетов компьютерной математики, например, с помощью программы *Wolfram|Alpha*.

Для этого следует зайти на сайт *Wolfram|Alpha: ComputationalKnowledgeEngine* (http://www.wolframalpha.com/), перейти по разделам *Examples> Mathematics> Algebra* и в разделе *EQUATIONSOLVING* выбрать пункт *solve a systemoflinearequations*.

На открывшейся странице в поле ввода ввести через запятую уравнения системы

$$2x-z = 0,\ 6x-2t = 0,\ 2y-2z-t = 0$$

и нажать клавишу *Enter*.

После чего программа выведет на экран решение системы(рис. 1.1).

Также в *Wolfram|Alpha* есть возможность ознакомиться с поэтапным ходом решения задачи (кнопка 

).

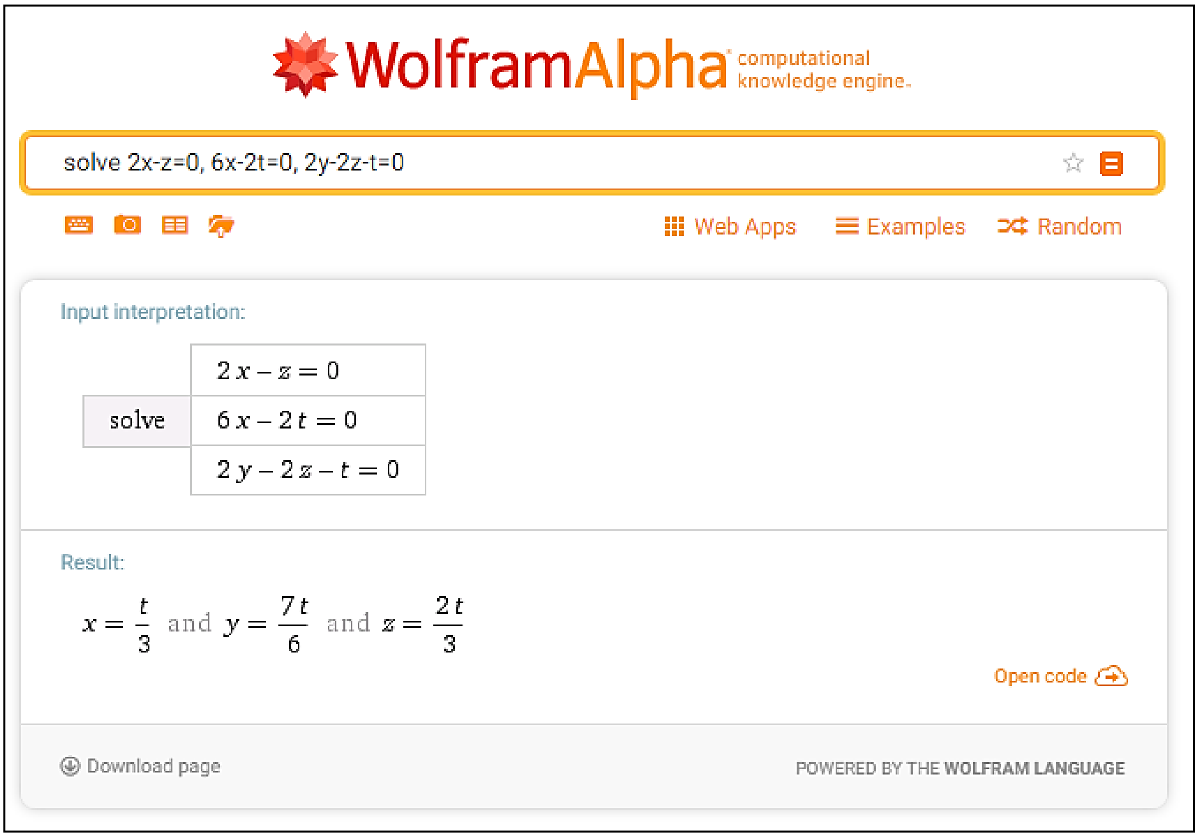


Рисунок 1.1 – Решение системы линейных уравнений в задаче 1.1 с помощью программы *Wolfram|Alpha*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 1.1. При балансировании уравнений химических реакций вводятся переменные, которые равны количеству…

А:	атомов в левой и правой части уравнения
Б:	молекул в левой и правой части уравнения
В:	атомов каждого элемента, участвующего в реакции
Г:	молекул каждого вещества, участвующего в реакции
Д:	молей каждого вещества, участвующего в реакции

Задание 1.2. Какое количество уравнений необходимо ввести для балансировки уравнения химической реакции

А:	равное количеству атомов в левой и правой части уравнения
Б:	равное количеству молекул в левой и правой части уравнения
В:	равное количеству элементов, участвующих в реакции
Г:	равное количеству веществ, участвующих в реакции
Д:	равное количеству молей каждого вещества, участвующего в реакции

Задание 1.3. Какое количество переменных необходимо ввести для балансировки уравнения химической реакции…

А:	равное количеству атомов в левой и правой части уравнения
Б:	равное количеству молекул в левой и правой части уравнения
В:	равное количеству элементов, участвующих в реакции
Г:	равное количеству веществ, участвующих в реакции
Д:	равное количеству молей каждого вещества, участвующего в реакции

Задание 1.4. При балансировании уравнений химических реакций вводятся переменные, которые принимают значения из множества…

А:	целых чисел
Б:	натуральных чисел
В:	вещественных чисел
Г:	рациональных чисел
Д:	иррациональных чисел

Задание 1.5. Математическая модель для составления баланса уравнения химических реакций представляет собой…

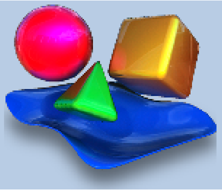
А:	квадратное уравнение
Б:	систему линейных неравенств
В:	систему квадратных уравнений
Г:	линейное алгебраическое уравнение
Д:	систему линейных алгебраических уравнений

Задание 1.6. Для получения баланса уравнения химических реакций приравниваются количества…

А:	атомов каждого элемента в левой и правой части уравнения
Б:	молекул каждого вещества в левой и правой части уравнения
В:	весовых долей каждого элемента, участвующего в реакции
Г:	процентных долей, участвующего в реакции
Д:	молей каждого вещества, участвующего в реакции

Задание 1.7. Определите правильную последовательность действий по математическому моделированию, которые нужно выполнить для получения математической модели при составлении баланса уравнения химической реакции:

1.	**А:**	составить соотношения, связывающие введенные переменные
2.	**Б:**	определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные
3.	**В:**	сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная задача
4.	**Г:**	определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче
5.	**Д:**	ввести переменные
6.	**Е:**	интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи



Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 1.8. Укажите количество переменных, которые необходимо ввести для балансирования уравнения химической реакции $N_2 + H_2 \rightarrow NH_3$:

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
одну	две	три	четыре	пять

Задание 1.9. Укажите количество уравнений, которые необходимо ввести для балансирования уравнения химической реакции $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$, если через *x, y, z* обозначены количества молекул H_2 , O_2 и H_2O соответственно.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
одно	два	три	четыре	пять

Задание 1.10. Укажите соотношение, уравнивающее количество водорода (Н) в правой и левой части уравнения химической реакции $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$, если через *x, y, z* обозначены количества молекул H_2 , O_2 и H_2O соответственно.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$2x= 2z$	$2y = 2z$	$2y = z$	$2x= z$	$x= 2z$

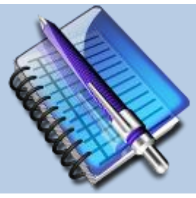
Задание 1.11. Укажите систему уравнений, являющуюся математической моделью при балансировании уравнения химической реакции $Na_2 + Cl_2 \rightarrow NaCl$, если через *x, y, z* обозначены количества молекул Na_2 , Cl_2 и $NaCl$ соответственно.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$\begin{cases} x = 2z; \\ y = 2z. \end{cases}$	$\begin{cases} x = 2z; \\ 2y = 2z. \end{cases}$	$\begin{cases} 2x = 2z; \\ 2y = 2z. \end{cases}$	$\begin{cases} 2x = 2z; \\ 2y = z. \end{cases}$	$\begin{cases} 2x = z; \\ 2y = z. \end{cases}$

Задание 1.12. Установите соответствие между уравнениями химических реакций и математическими моделями для балансирования уравнений этих реакций, если через *x, y, z* и *t* обозначено количество молекул веществ, принимающих участие в реакции:

1	$C_3H_8 + O_2 \rightarrow H_2O + CO_2$	**А**	$\begin{cases} 4x = 2t; \\ x = z; \\ 2y = 2z + t. \end{cases}$
2	$AgCl+Na_2S \rightarrow Ag_2S+NaCl$	**Б**	$\begin{cases} 5x = t; \\ x = z; \\ 2y = 3z + t; \\ y = 4z. \end{cases}$

3	$CH_4 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$	**В**	$\begin{cases} 3x = t; \\ 8x = 2z; \\ 2y = z + 2t. \end{cases}$
4	$PCl_5 + H_2O = H_3PO_4 + HCl$	**Г**	$\begin{cases} 4x = t; \\ 2x = z; \\ y = 2z + t. \end{cases}$
		Д	$\begin{cases} x = t; \\ x = 2z; \\ 2y = t; \\ y = z. \end{cases}$



Решите задачи самостоятельно

В задачах 1.2–1.11 сбалансируйте уравнения химических реакций:

Задача 1.2. $N_2 + H_2 \rightarrow NH_3$.

Задача 1.3. $CH_4 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$.

Задача 1.4. $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$.

Задача 1.5. $Na_2 + Cl_2 \rightarrow NaCl$.

Задача 1.6. $Al + S \rightarrow Al_2S_3$.

Задача 1.7. $AgCl + Na_2S \rightarrow Ag_2S + NaCl$.

Задача 1.8. $ZrCl_4 \rightarrow ZrCl_3 + ZrCl_2 + ZrCl + Cl_2$.

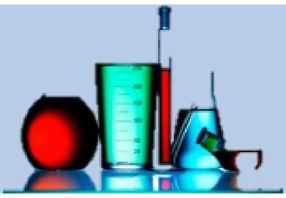
Задача 1.9. $NaOH + Cl_2 + Br_2 \rightarrow NaBrO_3 + NaCl + H_2O$.

Задача 1.10. $C_3H_8 + O_2 \rightarrow H_2O + CO_2$.

Задача 1.11. $PCl_5 + H_2O \rightarrow H_3PO_4 + HCL$.

1.2. *Модель материального баланса в производственном планировании*

Математическое решение уравнения материального баланса в производственном планировании принято называть шахматной схемой, так как задача ставится и может быть решена только при полной взаимозависимости составляющих.



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 1.12. Необходимо увязать производство трех групп химических заводов как по линии взаимных связей, так и по линии точного выполнения заданной им программы на производство продукции для удовлетворения нужд потребителей (конечная продукция). Увяжем группу заводов нефтехимической промышленности, для которой задана программа выпуска конечной продукции 50000 т, химической промышленности, которой задана программа 30000 т продукта, и группу заводов, изготовляющих изделия из пластмассы, которой задана программа на конечную продукцию 80000 т изделий. При этом известны (найдены расчетом, опытом и т. п.) прогрессивные величины норм расхода этих продуктов, как сырья для взаимного и собственного воспроизводства, которые заданы в таблице.

Группа заводов	*Нормы расхода для изготовления 1 т этого продукта*		
	нефтехимического продукта	*химического продукта*	*изделий из пластмасс*
на нефтехимических заводах	0,08	0,07	0,09
на химических заводах	0,04	0,06	0,08
на заводах пластмасс	0,01	0,02	0,01

То есть

0,08 т/т – норма расхода нефтехимического продукта для изготовления 1 т этого продукта на нефтехимических заводах;

0,04 т/т – норма расхода нефтехимического продукта для изготовления 1 т продукта на химических заводах;

0,01 т/т – норма расхода нефтехимического продукта для изготовления 1 т продукта на заводах пластмасс;

0,07 т/т – норма расхода химического продукта для изготовления 1 т продукта на нефтехимических заводах;

0,06 т/т – норма расхода химического продукта для изготовления 1 т продукта на химических заводах;

0,02 т/т – норма расхода химического продукта для изготовления 1 т продукта на заводах пластмасс;

0,09 т/т – норма расхода изделий из пластмасс для получения 1 т продукта на нефтехимических заводах;

0,08 т/т – норма расхода изделий из пластмасс для получения 1 т продукта на химических заводах;

0,01 т/т – норма расхода изделий из пластмасс для получения 1 т продукта на заводах пластмасс.

Опорные знания по химии

Материальный баланс представляет вещественное выражение *закона сохранения массы* применительно к химико-технологическому процессу: масса веществ, поступивших на технологическую операцию (приход) равна массе веществ, полученных в этой операции (расход), что записывается в виде уравнения баланса:

$$\sum m_{приход} = \sum m_{расход}.$$

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Обозначим группы заводов через:

$$Y_1 = 50000 \text{ т}, Y_2 = 30000 \text{ т}, Y_3 = 80000 \text{ т}.$$

$a_{11} = 0{,}08$ т/т – норма расхода нефтехимического продукта для изготовления 1 т этого продукта на нефтехимических заводах;

$a_{12} = 0{,}04$ т/т – норма расхода нефтехимического продукта для изготовления 1m продукта на химических заводах;

$a_{13} = 0{,}01$ т/т – норма расхода нефтехимического продукта для изготовления 1 т продукта на заводах пластмасс;

$a_{21} = 0{,}07$ т/т – норма расхода химического продукта для изготовления 1 т продукта на нефтехимических заводах;

$a_{22} = 0{,}06$ т/т – норма расхода химического продукта для изготовления 1 т продукта на химических заводах;

$a_{23} = 0{,}02$ т/т – норма расхода химического продукта для изготовления 1 т продукта на заводах пластмасс;

$a_{31} = 0{,}09$ т/т – норма расхода изделий из пластмасс для получения 1 т продукта на нефтехимических заводах;

$a_{32} = 0{,}08$ т/т – норма расхода изделий из пластмасс для получения 1 т продукта на химических заводах;

$a_{33} = 0{,}01$ т/т – норма расхода изделий из пластмасс для получения 1 т продукта на заводах пластмасс.

Тогда валовые выпуски данных групп заводов X_1 – нефтехимии, X_2 – химии, X_3 – пластмасс.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Так как валовая продукция – это показатель, который характеризует общий объем продукции отдельных объединений, отраслей, предприятий и т.п., то переменные X_1, X_2 и X_3 должны принимать значения из множества положительных действительных чисел.

3) *Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.*

Для того чтобы увязать производство трех групп химических заводов как по линии взаимных связей, так и по линии точного выполнения заданной им программы на производство продукции для удовлетворения нужд потребителей необходимо найти валовые выпуски данных групп заводов X_1 – нефтехимии, X_2 – химии, X_3 – пластмасс.

4) *Составить соотношения, связывающие введенные переменные.*

Валовые выпуски данных групп заводов X_1 – нефтехимии, X_2 – химии, X_3 – пластмасс будут увязаны следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} (1-a_{11})X_1 - a_{12}X_2 - a_{13}X_3 = Y_1, \\ -a_{21}X_1 + (1-a_{22})X_2 - a_{23}X_3 = Y_2, \\ -a_{31}X_1 - a_{32}X_2 + (1-a_{33})X_3 = Y_3. \end{cases}$$

Подставляем в систему известные нам значения a_{ij} и Y_j и определяем валовые выпуски:

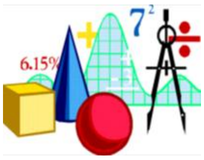
$$\begin{cases} (1-0{,}08)X_1 - 0{,}04X_2 - 0{,}01X_3 = 50000, \\ -0{,}07X_1 + (1-0{,}06)X_2 - 0{,}02X_3 = 30000, \\ -0{,}09X_1 - 0{,}08X_2 + (1-0{,}01)X_3 = 80000. \end{cases}$$

5) *Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.*

Решить систему линейных уравнений

$$\begin{cases} (1-0{,}08)X_1 - 0{,}04X_2 - 0{,}01X_3 = 50000, \\ -0{,}07X_1 + (1-0{,}06)X_2 - 0{,}02X_3 = 30000, \\ -0{,}09X_1 - 0{,}08X_2 + (1-0{,}01)X_3 = 80000. \end{cases} \quad (2.1)$$

при условии $X_i > 0$, $i = 1, 2, 3$.



Опорные знания по математике

1. Определители и их свойства.
2. Разложение определителя по строке (столбцу).
3. Системы линейных уравнений, их запись в матричной форме. Обратная матрица.
4. Матричный метод решения систем линейных алгебраических уравнений.

Выполняем математические действия

1. Полученная система уравнений содержит 3 уравнения и 3 переменные, значит её размер 3x3.

Системе соответствует главная матрица

$$B=\begin{pmatrix} 0,92 & -0,04 & -0,01 \\ -0,07 & 0,94 & -0,02 \\ -0,09 & -0,08 & 0,99 \end{pmatrix}.$$

2. Находим определитель ΔB матрицы B.

С целью использования для нахождения определителя ΔB свойства алгебраических дополнений, превращаем элементы второй и третьей строк третьего столбца определителя в нули, для чего первоначально первую строку умножаем на 2 и вычитаем из второй строки и затем первую же строку умножаем на 99 и прибавляем к третьей строке. Определитель вычисляем разложением по третьему столбцу, а именно:

$$\begin{vmatrix} 0,92 & -0,04 & -0,01 \\ -0,07 & 0,94 & -0,02 \\ -0,09 & -0,08 & 0,99 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0,92 & -0,04 & -0,01 \\ -1,91 & 1,02 & 0 \\ -0,09 & -0,08 & 0,99 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0,92 & -0,04 & -0,01 \\ -1,91 & 1,02 & 0 \\ 90,99 & -4,04 & 0 \end{vmatrix} =$$

$$= -0,01(-1)^{1+3}\begin{vmatrix} -1,91 & 1,02 \\ 90,99 & -4,04 \end{vmatrix} = 0,01\left[(-1,91)(-4,04) - 90,99\cdot 1,02\right] \approx 0,85.$$

Далее находим значения алгебраических дополнений A_{ij} каждого из элементов матрицыB по формуле $A_{ij}=(-1)^{i+j}\cdot M_{ij}$, где M_{ij} – минор элемента b_{ij}:

$$A_{11}=(-1)^{1+1}\begin{vmatrix}0,94 & -0,02\\ -0,08 & 0,99\end{vmatrix}=0,94\cdot 0,99-\left(-0,08\right)\cdot\left(0,02\right)=0,93;$$

$$A_{12}=(-1)^{1+2}\begin{vmatrix}-0,07 & -0,02\\ -0,09 & -0,99\end{vmatrix}=-1\left[0,99\left(-0,07\right)-(-0,99)\left(0,02\right)\right]=0,07;$$

$$A_{13}=(-1)^{1+3}\begin{vmatrix}-0,07 & 0,94\\ -0,09 & -0,08\end{vmatrix}=\left(-0,07\right)(-0,08)-\left(-0,09\right)0,94=0,09;$$

$$A_{21}=(-1)^{2+1}\begin{vmatrix}-0,04 & -0,01\\ 0,08 & 0,99\end{vmatrix}=-1\left[\left(-0,04\right)0,99-\left(-0,08\right)\left(0,01\right)\right]=0,04;$$

$$A_{22}=(-1)^{2+2}\begin{vmatrix}0,92 & -0,01\\ -0,09 & 0,99\end{vmatrix}=0,92\cdot 0,99-\left(-0,09\right)(-0,06)=0,91;$$

$$A_{23}=(-1)^{2+3}\begin{vmatrix}0,92 & -0,04\\ -0,09 & -0,08\end{vmatrix}=-1\left[0,92\left(-0,08\right)-(-0,09)\left(-0,04\right)\right]=0,08;$$

$$A_{31}=(-1)^{3+1}\begin{vmatrix}-0,04 & -0,01\\ 0,94 & -0,02\end{vmatrix}=\left(-0,04\right)(-0,02)-0,94(-0,01)=0,01;$$

$$A_{32}=(-1)^{3+2}\begin{vmatrix}0,92 & -0,01\\ -0,07 & -0,02\end{vmatrix}=-1\left[0,92(-0,02)-\left(-0,07\right)\left(-0,01\right)\right]=0,02;$$

$$A_{33}=(-1)^{3+3}\begin{vmatrix}0,92 & -0,04\\ -0,07 & 0,94\end{vmatrix}=0,92\cdot 0,94-(-0,07)(-0,04)=0,86.$$

3. Составляем присоединённую матрицу $\tilde{B}$, транспонировав матрицу, составленную из алгебраических дополнений к элементам матрицы B:

$$\tilde{B}=\begin{pmatrix}0,93 & 0,07 & 0,09\\ 0,04 & 0,91 & 0,08\\ 0,01 & 0,02 & 0,86\end{pmatrix}^T=\begin{pmatrix}0,93 & 0,04 & 0,01\\ 0,07 & 0,91 & 0,02\\ 0,09 & 0,08 & 0,86\end{pmatrix}.$$

4. Определяем обратную матрицу B^{-1} по формуле $B^{-1} = \frac{1}{\Delta B} \cdot \tilde{B}$:

$$\text{B}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{0,93}{0,85} & \frac{0,04}{0,85} & \frac{0,01}{0,85} \\ \frac{0,07}{0,85} & \frac{0,91}{0,85} & \frac{0,02}{0,85} \\ \frac{0,09}{0,85} & \frac{0,08}{0,85} & \frac{0,86}{0,85} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,094 & 0,047 & 0,012 \\ 0,082 & 1,070 & 0,024 \\ 0,106 & 0,094 & 1,010 \end{pmatrix}.$$

5. Находим решение системы (2.1) по формуле $\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = B^{-1} \cdot \begin{pmatrix} 50000 \\ 30000 \\ 80000 \end{pmatrix}$:

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,094 & 0,047 & 0,012 \\ 0,082 & 1,070 & 0,024 \\ 0,106 & 0,094 & 1,010 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 50000 \\ 30000 \\ 80000 \end{pmatrix}.$$

Отсюда получаем:

$$X_1 = 1,094 \cdot 50000 + 0,047 \cdot 30000 + 0,012 \cdot 80000 = 57070 \text{ (т)};$$

$$X_2 = 0,082 \cdot 50000 + 1,070 \cdot 30000 + 0,024 \cdot 80000 = 38120 \text{ (т)};$$

$$X_3 = 0,106 \cdot 50000 + 0,094 \cdot 30000 + 1,010 \cdot 80000 = 88920 \text{ (т)}.$$

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Валовой выпуск группы нефтехимических заводов равен 57070 т, группы химических заводов – 38120 т, группы заводов пластмасс – 88920 т.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

При вычислении определителей, работе с матрицами и нахождении решений систем линейных алгебраических уравнений, которые содержат дробные или большие числа, часть вычислительной работы можно «переложить» на компьютер.

Например, нахождение определителя матрицы*B* и нахождение решений системы (нахождение произведений обратной матрицы на матрицу-столбец свободных членов) в задаче 1.2 можно реализовать с помощью программы *Калькулятор OpenedSourceAlgorithms* (*OSA Beta*).

Для этого следует во вкладке *Вычисление* главного меню программы выбрать пункт *Системы линейных уравнений*, а в нем подпункт *Определитель*. Затем необходимо выбрать размерность вычисляемого определителя (в правой части экрана поле *Размер матрицы*), ввести в появившуюся таблицу его значения и нажать кнопку*Вычислить* (рис. 1.2).

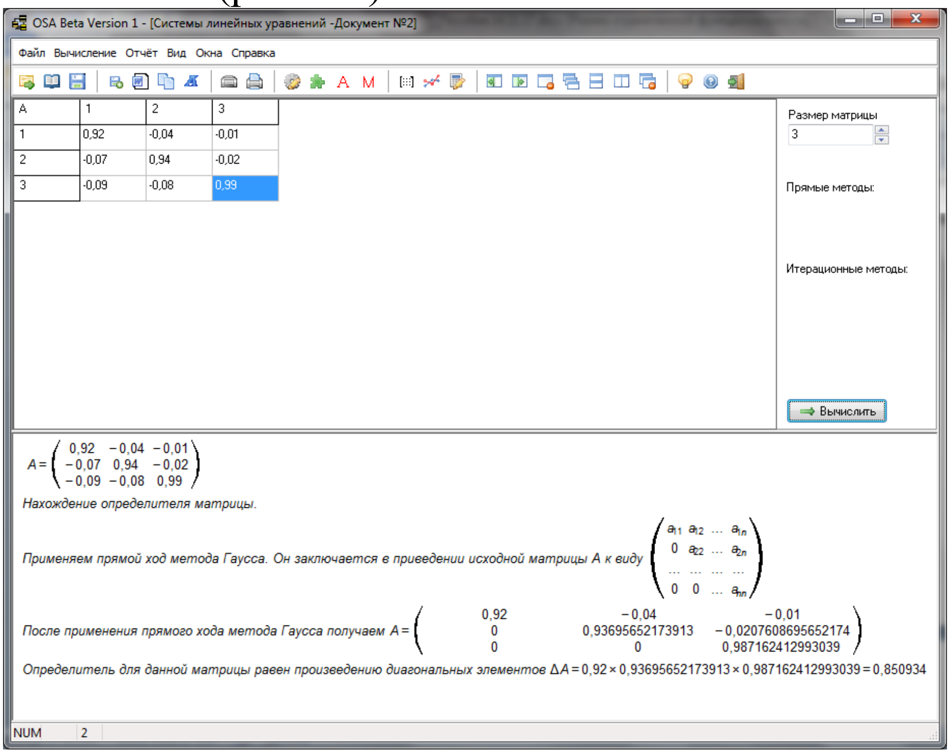


Рисунок 1.2 – Вычисление определителя в задаче 1.2 с помощью программы *OSA Beta*

Следует отметить, что точность вычислений (количество знаков после запятой) можно выбирать в настройках программы.

Рассмотрим порядок нахождения решения системы линейных алгебраических уравнений (умножение обратной матрицы на матрицу-столбец свободных членов), реализуемый с помощью программы *Калькулятор «OpenedSourceAlgorithms»*.

Для этого во вкладке *Вычисление* главного мены программы необходимо выбрать пункт *Матрицы*. Затем в правой части экрана следует выбрать размерности двух матриц, действие, которое необходимо выполнить над ними (*Умножение*), ввести в рабочей области программы элементы матриц и нажать кнопку*Вычислить* (рис. 1.3).

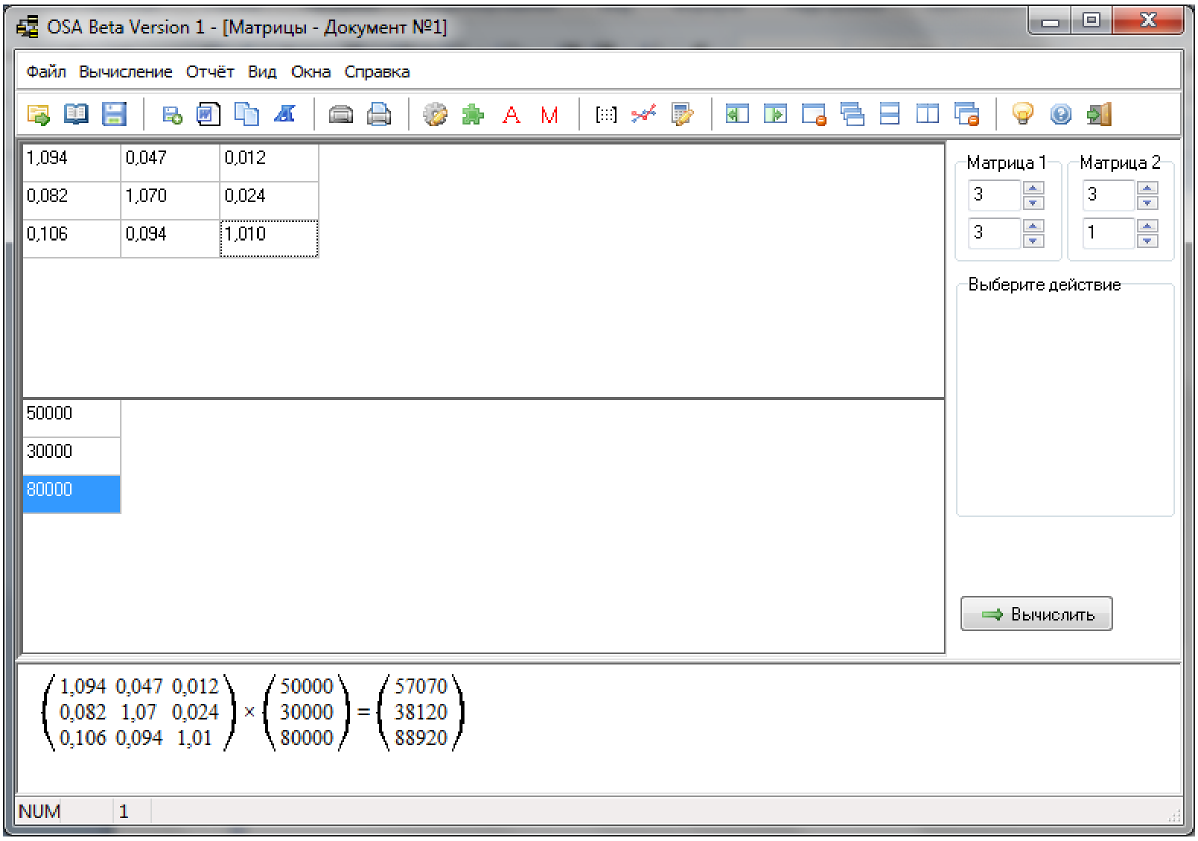


Рисунок 1.3 – Вычисление произведения матриц в задаче 1.2 с помощью программы *OSA Beta*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задача 1.13. Для производства стали определенной марки, в которую должны входить химические элементы А,В,С, нужна шихта трех видов I, II и III. Содержание легирующих элементов в 1 т шихты каждого вида и в выплавляемой стали приведены в таблице:

Химический элемент	***Содержание элемента в 1т шихты (кг)***		
	I	**II**	**III**
A	2	3	1
B	2	1	4
C	5	0	2

Необходимо увязать химические элементы А, В и С с необходимым объемом каждого вида шихт, если для производства стали необходимо шихты I вида 140 т, II вида – 134 т, II I вида – 153 т.

Задача 1.14. Требуется приготовить 4250 кг нитрующей смеси 1 следующего состава: воды 22%, HNO_3 16%, H_2SO_4 62%. Исходными компонентами являются: 1) меланж, т.е. смесь состава H_2O – 5%, HNO_3 – 85%, H_2SO_4 – 10%; 2) олеум, т.е. раствор SO_3в безводной H_2SO_4: H_2O – 0%, HNO_3 – 0%, H_2SO_4 – 104%; 3) отработанная серная кислота H_2O – 30%, HNO3 – 0%, H2SO4 – 70%. Найти расход кислот, идущих на приготовление смеси.

Задание 1.13. Математической моделью материального баланса является …

А:	система линейных алгебраических уравнений
Б:	функция
В:	алгебраическое уравнение
Г:	дифференциальное уравнение
Д:	многочлен

Задание 1.14. При материальном балансе вводятся переменные, которые принимают значения из множества …

А:	натуральных чисел
Б:	целых чисел
В:	рациональных чисел
Г:	положительных действительных чисел
Д:	отрицательных действительных чисел

Задание 1.15. Материальный баланс представляет вещественное выражение закона сохранения массы применительно к химико-технологическому процессу…

А:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию не равна массе веществ, полученных в этой операции
Б:	концентрация веществ, поступивших на технологическую операцию равна концентрации веществ, полученных в этой операции
В:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию равна массе веществ, полученных в этой операции
Г:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию не больше массы веществ, полученных в этой операции
Д:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию не меньше массы веществ, полученных в этой операции

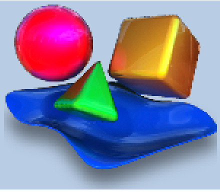
Задание 1.16. При составлении уравнений материального баланса приравнивается …

А:	концентрация веществ, поступивших на технологическую операцию и полученных в этой операции
Б:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию и полученных в этой операции
В:	вес веществ, поступивших на технологическую операцию и полученных в этой операции
Г:	состав веществ, поступивших на технологическую операцию и полученных в этой операции

Д:	валентность веществ, поступивших на технологическую операцию и полученных в этой операции

Задание 1.17. Материальный баланс – это математическое выражение …

А:	закона сохранения массы или энергии
Б:	стехиометрических законов химии
В:	газовых законов химии
Г:	законов Ньютона
Д:	законов химической термодинамики



Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 1.18. Укажите количество переменных, которые следует ввести для решения задачи 1.3.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
две	три	четыре	пять	шесть

Задание 1.19. Укажите количество уравнений, которые следует составить для решения задачи 1.3.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
одно	два	три	четыре	пять

Задание 1.20. Укажите систему уравнений, являющуюся математической моделью в задаче 1.3, если через *x, y, z* обозначены необходимые количества химических элементов А, В, С:

А:	$\begin{cases} 2x+3y+z=140; \\ 2x+y+4z=134; \\ 5x+2z=153. \end{cases}$
Б:	$\begin{cases} 2x+2y+5z=140; \\ 3x+y=134; \\ x+4y+2z=153. \end{cases}$

В:	$\begin{cases} 2x+3y+z=134; \\ 2x+y+4z=140; \\ 5x+2z=153. \end{cases}$
Г:	$\begin{cases} 2x+3y+z=134; \\ 2x+y+4z=153; \\ 5x+2z=140. \end{cases}$
Д:	$\begin{cases} 2x+3y+z=153; \\ 2x+y+4z=134; \\ 5x+2z=140. \end{cases}$

Задание 1.21. Укажите имеет ли решения задача 1.3. Если имеет, то укажите их количество:

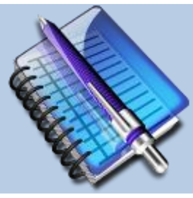
А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
не имеет решений	имеет одно решение	имеет два решения	имеет три решения	имеет бесконечно много решений

Задание 1.22. Установите соответствие между названиями матриц, соответствующих системе уравнений, являющейся математической моделью задачи 1.14:

$$\begin{cases} 5x_1+0x_2+30x_3=22; \\ 85x_1+0x_2+0x_3=16; \\ 10x_1+104x_2+70x_3=62. \end{cases}$$

1	главная матрица системы	**А**	$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 30 & 22 \\ 85 & 0 & 0 & 16 \\ 10 & 104 & 70 & 62 \end{pmatrix}$
2	матрица столбец переменных	**Б**	$\begin{pmatrix} 22 \\ 16 \\ 62 \end{pmatrix}$
3	матрица столбец правых частей уравнений	**В**	$(x_1;\ x_2;\ x_3)$

4	расширенная матрица системы	**Г**	$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$
		Д	$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 30 \\ 85 & 0 & 0 \\ 10 & 104 & 70 \end{pmatrix}$



Решите задачи самостоятельно

Задача 1.13. Для производства стали определенной марки, в которую должны входить химические элементы A,B,C, нужна шихта трех видов I, II и III. Содержание легирующих элементов в 1 т шихты каждого вида и в выплавляемой стали приведены в таблице:

Химический элемент	*Содержание элемента в 1т шихты (кг)*		
	I	II	III
A	2	3	1
B	2	1	4
C	5	0	2

Необходимо увязать химические элементы А, В и С с необходимым объемом каждого вида шихт, если для производства стали необходимо шихты I вида 140 т, II вида – 134 т, II I вида – 153 т.

Задача 1.14. Требуется приготовить 4250 кг нитрующей смеси 1 следующего состава: воды 22%, HNO_3 16%, H_2SO_4 62%. Исходными компонентами являются: 1) меланж, т.е. смесь состава H_2O – 5%, HNO_3 – 85%, H_2SO_4 – 10%; 2) олеум, т.е. раствор SO_3в безводной H_2SO_4: H_2O – 0%, HNO_3 – 0%, H_2SO_4 – 104%; 3) отработанная серная кислота H_2O – 30%, HNO3 – 0%, H2SO4 – 70%. Найти расход кислот, идущих на приготовление смеси.

Задача 1.15. Даны три емкости с растворами серной кислоты различной концентрации. Если смешать растворы в определенных соотношениях, то получиться кислота заданной концентрации. Найти неизвестные концентрации растворов серной кислоты в трех емкостях. Исходные данные представлены в таблице:

Соотношение концентраций	*Конечная концентрация кислоты, %*
1:2:4	31
5:1:2	20
1:1:1	12

Задача 1.16. Сколько граммов кристаллической соды $Na_2CO_3 \times 10H_2O$ и 10%-го раствора карбоната натрия надо взять для приготовления 200г 20%-го раствора карбоната натрия (масса $Na_2CO_3 \times 10\ H_2O$ =286 г/моль, масса Na_2CO_3=106г/моль).

Задача 1.17. Смесь карбонатов калия и натрия массой 7 г обработали серной кислотой, взятой в избытке. При этом выделившийся газ занял объем 1,344 л (н.у.). Определить массовые доли карбонатов в исходной смеси.

Задача 1.18. Найти сколько килограммов каждого компонента пойдет на приготовление 4250 кг нитрующей смеси следующего состава: H_2O – 22%, HNO_3 – 16% и H_2SO_4 – 62%, если она приготовлена из меланжа (H_2O – 5%, HNO_3 – 85%, H_2SO_4 – 10%), олеума (H_2SO_4 – 100%), отработанной кислоты (H_2O – 30%, H_2SO_4 – 70%).

Задача 1.19. Для производства стали определенной марки, в которую должны входить химические элементы A,B,C, нужна шихта трех видов I, II и III. Содержание легирующих элементов в 1 т шихты каждого вида и в выплавляемой стали приведены в таблице:

Химический элемент	*Содержание элемента в 1т шихты (кг)*		
	I	II	III
A	4	8	16
B	10	2	4
C	2	1	3

Необходимо увязать химические элементы A, B и C с необходимым объемом каждого вида шихт, если для производства стали необходимо шихты I вида 124 т, II вида – 76 т, II I вида – 28 т.

Задача 1.20. Даны три емкости с растворами соляной кислоты различной концентрации. Если смешать растворы в определенных соотношениях, то получиться кислота заданной концентрации. Найти неизвестные концентрации растворов соляной кислоты в трех емкостях.Исходные данные представлены в таблице:

Соотношение концентраций	*Конечная концентрация кислоты, %*
2:3:1	10
1:2:3	8
1:2:1	6

Задача 1.21. Химик установил, что при определенной постоянной температуре суммарное давление смесей паров пропанола, этана и этилена в однофазной системе равно значениям, представленным в таблице. Найти значения давления пара чистых компонентов, известно, что давление смеси, химически не взаимодействующих друг с другом газов, равно сумме давлений.

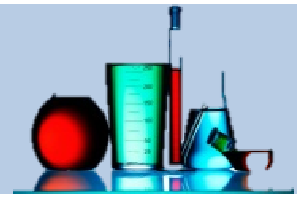
Состав смеси, мол.доли			*Давление Р, Па*
Пропанол	*Этан*	*Этилен*	
4	5	5	90
4	14	2	98
1	2	2	34

Задача 1.22. Экспериментатор установил, что при определенной постоянной температуре суммарное давление смесей паров бензола, дихлорэтана и хлорбензола в однофазной системе равно значениям, представленным в таблице. Найти значения давления пара чистых компонентов, известно, что давление смеси, химически не взаимодействующих друг с другом газов, равно сумме давлений.

Состав смеси, мол.доли			*Давление Р, Па*
Бензол	*Дихлорэтан*	*Хлорбензол*	
0,80	0,10	0,10	1840
0,20	0,70	0,10	1860
0,05	0,05	0,09	236

2. ВЕКТОРНАЯ АЛГЕБРА. АНАЛИТИЧЕСКАЯ ГЕОМЕТРИЯ

2.1 Векторная модель химической реакции



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 2.1. При сжигании в избытке кислорода 1,10 г смеси метанола и этанола образовалось 0,896 л оксида углерода (IV), измеренного при нормальных условиях. Определить количественный состав смеси.

Опорные знания по химии

Правило: Любой химической реакции отвечает симметричное (каноническое) уравнение прямой в пространстве с текущими координатами в виде количеств веществ (молей), масс или объемов веществ, участвующих в реакции.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Обозначим количественный состав смеси: масса смеси – m(смеси), масса метанола – $m(CH_3OH)$, масса этанола – $m(C_2H_5OH)$, масса спирта – m(спирта), масса кислорода – $m(O_2)$, объем оксида углерода – $V(CO_2)$, масса воды – $m(H_2O)$, радиус-вектор метанола – $\vec{r}(M)$, радиус-вектор этанола – $\vec{r}(Э)$.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Поскольку необходимо найти массу веществ, то значения $m(C_2H_5OH)$ и $m(CH_3OH)$ должны принадлежать множеству действительных положительных чисел.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Определить массу метанола $m(CH_3OH)$ и массу этанола $m(C_2H_5OH)$.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

Все прямые химических реакций проходят через начало координат. Любую прямую в пространстве нетрудно выразить векторами, но поскольку прямая химической реакции проходит через начало системы координат, то можно принять, что вектор прямой химической реакции находится на самой прямой и является радиус-вектором. Начало этого вектора совпадает с началом системы координат.

Поскольку реакции окисления метанола и этанола являются векторами, то реакция окисления смеси метанола и этанола является суммарным вектором:

$$\vec{r}(M) + \vec{r}(Э) = \vec{r},$$

конец которого (N) имеет координаты:

$$m(\text{смеси}) = 1{,}10,\ V(CO_2) = 0{,}896\ (\text{рис. } 2.1).$$

Чтобы найти координаты векторов реакций окисления метанола и этанола, необходимо воспользоваться правилом сложения векторов, то есть правилом параллелограмма.

Напишем уравнения реакций и прямых окисления метанола и этанола: $2CH_3OH + 3O_2 = 2CO_2 + 4H_2O$,

далее массу метанола будем обозначать m(спирта)

$$\frac{m(\text{спирта})}{2 \cdot 32} = \frac{m(O_2)}{2 \cdot 32} = \frac{V(CO_2)}{2 \cdot 22,4} = \frac{m(H_2O)}{4 \cdot 18};$$

$$C_2H_5OH + 3O_2 = 2CO_2 + 3H_2O,$$

далее массу этанола так же будем обозначать m(спирта)

$$\frac{m(\text{спирта})}{46} = \frac{m(O_2)}{2 \cdot 32} = \frac{V(CO_2)}{2 \cdot 22,4} = \frac{m(H_2O)}{3 \cdot 18};$$

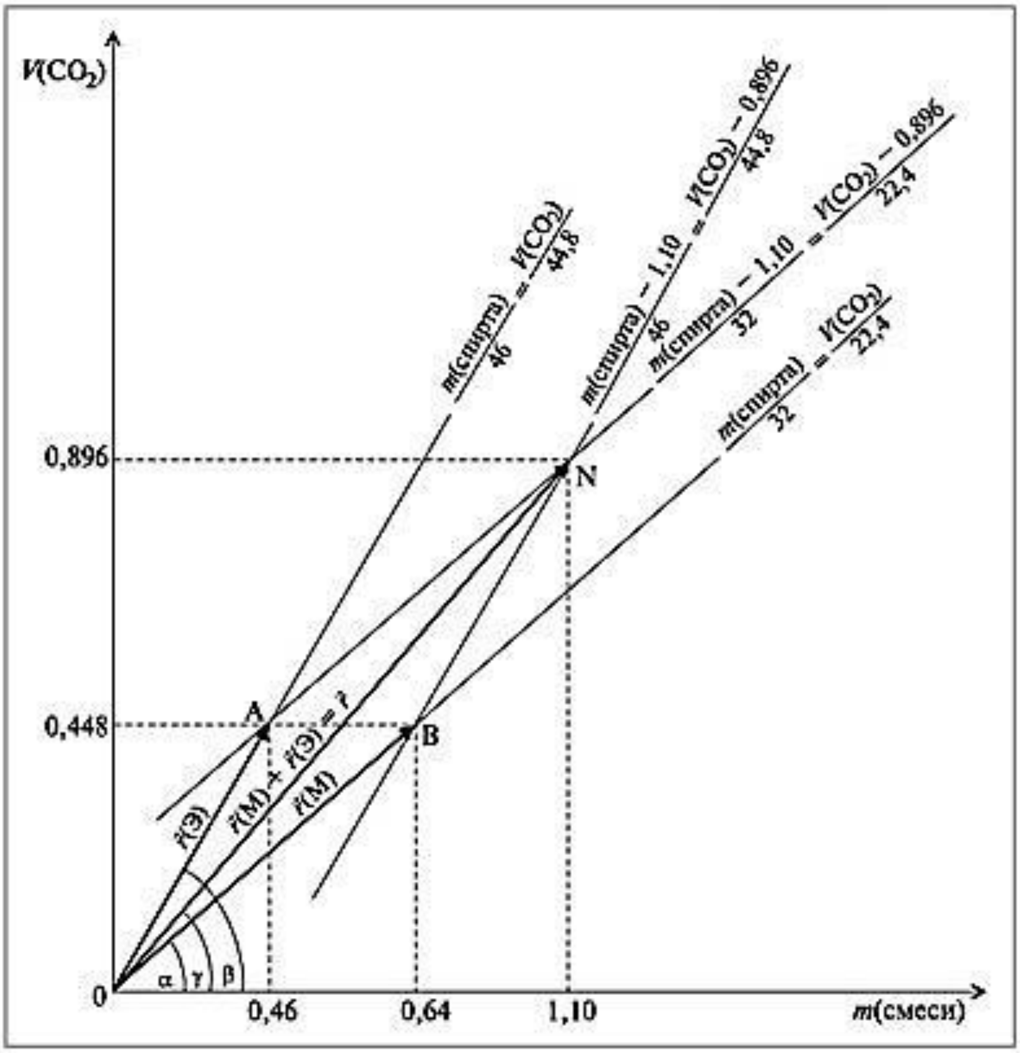
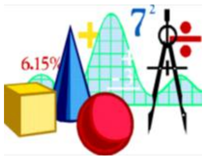


Рисунок 2.1 – Реакции окисления метанола и этанола

Прямые химических реакций представлены в четырехмерном пространстве (по числу компонентов в реакции). В числителях уравнений прямых стоят текущие координаты, а в знаменателях – направляющие коэффициенты.

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Найти координаты конца вектора реакции окисления этанола и метанола.



Опорные знания по математике

1. Операции над векторами.
2. Нахождение координат конца радиус-вектора точки.
3. Нахождение тангенса угла наклона прямой.

Выполняем математические действия

1. Для уравнений реакций окисления метанола и этанола выпишем уравнения прямых, в которых фигурируют переменные из условия задачи.

Прямая реакции окисления метанола:

$$\frac{m(\text{спирта})}{32}=\frac{V(CO_2)}{22{,}4}.$$

Радиус-вектор этой прямой (OB) с направляющими коэффициентами: $\vec{r}\,(M)=(32;\ 22{,}4)$.

Прямая реакции окисления этанола:

$$\frac{m(\text{спирта})}{46}=\frac{V(CO_2)}{44{,}8}.$$

Радиус-вектор этой прямой (OA) с направляющими коэффициентами: $\vec{r}\,(Э)=(46;44{,}8)$.

2. Определим направления радиус-векторов.

Для угла наклона радиус-вектора окисления метанола имеем: $\operatorname{tg}\alpha=\dfrac{22{,}4}{32}$, а окисления этанола: $\operatorname{tg}\beta=\dfrac{44{,}8}{46}$, для угла наклона суммарного радиус-вектора: $\operatorname{tg}\gamma=\dfrac{0{,}896}{1{,}10}$.

Из сравнения значений тангенсов видим, что $\angle\beta > \angle\gamma > \angle\alpha$.

3. Построим параллелограмм. Для этого необходимо через точку N провести две прямые (см. рис. 2.1), одна из которых будет параллельна прямой реакции окисления метанола:

$$\frac{m(\text{спирта}) - 1{,}10}{32} = \frac{V(CO_2) - 0{,}896}{22{,}4},$$

а другая – параллельна прямой реакции окисления этанола:

$$\frac{m(\text{спирта}) - 1{,}10}{46} = \frac{V(CO_2) - 0{,}896}{44{,}8}.$$

Точки А и В пересечения прямых (см. рис. 2.1) есть концы векторов реакций окисления метанола и этанола.

4. Координаты конца вектора реакции окисления метанола (точка В) найдем при совместном решении уравнений пересекающихся двух прямых:

$$\begin{cases} \dfrac{m(\text{спирта})}{32} = \dfrac{V(CO_2)}{22{,}4}, \\ \dfrac{m(\text{спирта}) - 1{,}10}{32} = \dfrac{V(CO_2) - 0{,}896}{22{,}4}. \end{cases}$$

Решив эту систему уравнений, находим:

$$m(\text{спирта}) = 0{,}64 \text{ г}, \; V(CO_2) = 0{,}448 \text{ л}.$$

5. Координаты конца вектора реакции окисления этанола (точка А) найдем при совместном решении уравнений соответствующих пересекающихся прямых:

$$\begin{cases} \dfrac{m(\text{спирта})}{46} = \dfrac{V(CO_2)}{44{,}8}, \\ \dfrac{m(\text{спирта}) - 1{,}10}{46} = \dfrac{V(CO_2) - 0{,}896}{44{,}8}. \end{cases}$$

Решив эту систему уравнений, находим:

$$m(\text{спирта}) = 0{,}46 \text{ г}, \; V(CO_2) = 0{,}448 \text{ л}.$$

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Количественный состав смеси:

$$m(\mathrm{CH_3OH}) = 0{,}64\ \text{г},\ m(\mathrm{C_2H_5OH}) = 0{,}46\ \text{г}.$$

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

При решении задачи 2.1 построение векторов, параллелограмма и других объектов можно реализовать с помощью программного обеспечения динамической математики *GeoGebra*.

Для этого необходимо выполнить следующие построения:

1) чтобы построить радиус-векторы $\vec{r}(M)$ и $\vec{r}(Э)$ необходимо сначала построить точки $O(0;\ 0)$, $A(46;\ 44{,}8)$, $B(64;\ 44{,}8)$. Для этого необходимо воспользоваться кнопкой , расположенной на панели инструментов;

2) по готовым точкамO, A, B строим векторы: выбираем в разделе «*Прямые линии*» панели инструментов кнопку «*Вектор по двум точкам*» и выбирая мышкой попарно точки, соответствующие точкам начала и конца радиус-векторов;

3) затем для построения параллелограмма можно воспользоваться возможностью программы, позволяющей отложить вектор от заданной точки. Для этого в разделе «*Прямые линии*» панели инструментов кнопку «*Отложить вектор*» и выбираем мышкой сначала точку (например, точку A), а затем вектор (например, вектор OB). В результате программа построит вектор AN, начало которого находится в точкеA, и является равным и параллельным вектору OB. Аналогично строим вектор BN. Результат построений можно увидеть на рисунке 2.2.

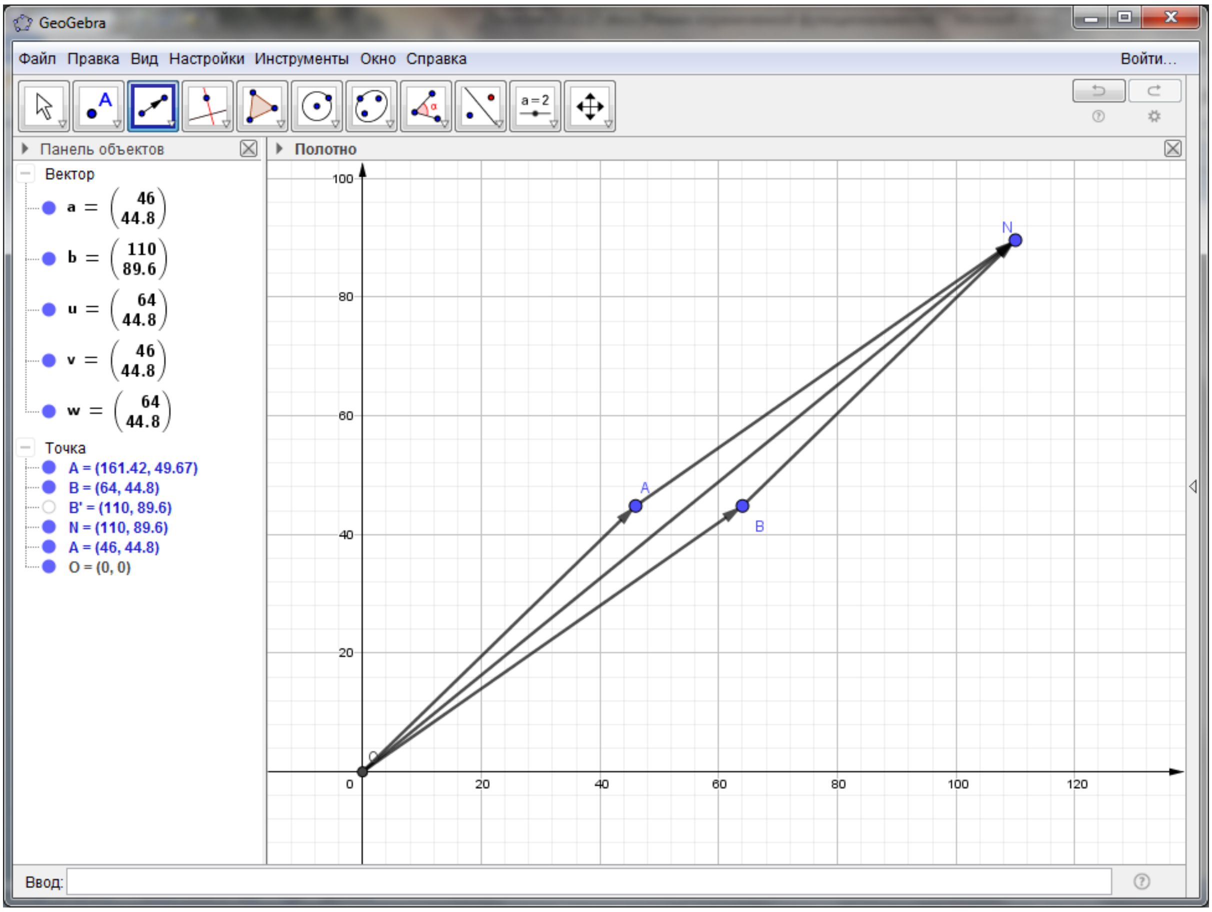


Рисунок 2.2 – Результат построений к задаче 2.1 с помощью программы *GeoGebra*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 2.1. В задачах на составление уравнений химической реакции вводят переменные, отражающие:

А:	качественный состав смеси
Б:	температуру смеси
В:	компонентный состав смеси
Г:	количественный состав смеси
Д:	давление смеси

Задание 2.2. Значения переменных в задачах на составление уравнений химических реакций должны принадлежать множеству:

А:	целых чисел
Б:	действительных положительных чисел
В:	натуральных чисел
Г:	действительных чисел
Д:	рациональных чисел

Задание 2.3. В задачах на составление уравнений химической реакции строятся:

А:	прямые химических реакций
Б:	кривые химических реакций
В:	параболы химических реакций
Г:	гиперболы химических реакций
Д:	окружности химических реакций

Задание 2.4. Химическую реакцию характеризуют:

А:	направляющим вектором
Б:	единичным вектором
В:	нулевым вектором
Г:	направляющим вектором
Д:	радиус-вектором

Задание 2.5. Реакция окисления смеси является суммарным вектором, который можно найти по правилу:

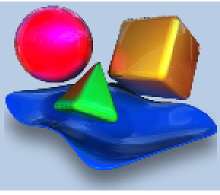
А:	вычитания векторов
Б:	треугольника сложения векторов
В:	параллелограмма сложения векторов
Г:	нормирования векторов
Д:	умножения векторов

Задание 2.6. Определите правильную последовательность действий по математическому моделированию, которые нужно выполнить для получения математической модели при составлении уравнения химической реакции:

1.	**А:**	Составить соотношения, связывающие введенные переменные
2.	**Б:**	Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные
3.	**В:**	Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача
4.	**Г:**	Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче
5.	**Д:**	Ввести переменные

Задание 2.7. Прямая, соответствующая химической реакции проходит…

А:	через точку пересечения прямых, перпендикулярных осям координат
Б:	перпендикулярно радиус вектору реакции
В:	параллельно одной из координатных осей
Г:	через начало системы координат
Д:	через начало системы координат

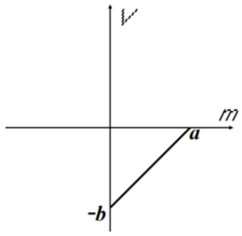
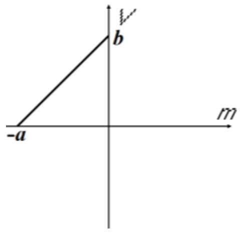
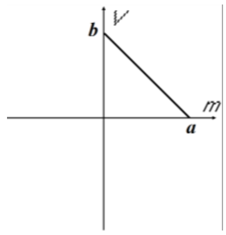
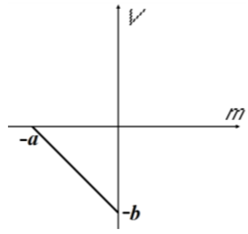
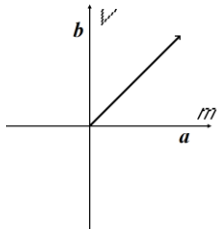


Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 2.8. Чему равен радиус-вектор прямой реакции окисления метанола, которая описывается уравнением $\frac{m(метанола)}{a}=\frac{V(CO_2)}{b}$?

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$\vec{r}(M)\left(\sqrt{a^2+b^2}\right)$	$\vec{r}(M)\left(\sqrt{a};\sqrt{b}\right)$	$\vec{r}(M)\left(\sqrt{a};b\right)$	$\vec{r}(M)\left(a;b\right)$	$\vec{r}(M)\left(a;\sqrt{b}\right)$

Задание 2.9. На каком рисунке изображена реакция окисления $\frac{m(метанола)}{a}=\frac{V(CO_2)}{b}$?

А	Б	В	Г	Д
				

Задание 2.10. Угол наклона радиус-вектора окисления этанола заданного уравнением $\frac{m(этанола)}{a} = \frac{V(CO_2)}{b}$ равен:

А	Б	В	Г	Д
$tg\beta = \frac{a}{b}$	$tg\beta = \frac{b}{a}$	$tg\beta = a \cdot b$	$tg\beta = \sqrt{a^2 + b^2}$	$tg\beta = a + b$

Задание 2.11. При нахождении суммы векторов реакций по правилу параллелограмма векторы слагаемые удовлетворяют условию

А	Б	В	Г	Д
имеют общий конец	выходят из общего начала	совпадают	пересекаются	один выходит из конца другого

Задание 2.12. Установите соответствие между реакцией окисления этанола $\frac{m(C_2H_5OH)}{a} = \frac{V(CO_2)}{b}$ и её радиус-вектором

1	$\frac{m(C_2H_5OH)}{1,2} = \frac{V(CO_2)}{2,8}$	**А**	$\vec{r}(Э) = (2,8;\ 1,2)$
2	$\frac{m(C_2H_5OH)}{28} = \frac{V(CO_2)}{32}$	**Б**	$\vec{r}(Э) = (28;\ 32)$
3	$\frac{m(C_2H_5OH)}{\sqrt{8}} = \frac{V(CO_2)}{3}$	**В**	$\vec{r}(Э) = (1,2;\ 2,8)$
4	$\frac{m(C_2H_5OH)}{32} = \frac{V(CO_2)}{28}$	**Г**	$\vec{r}(Э) = (32;\ 28)$
		Д	$\vec{r}(Э) = (\sqrt{8};\ 3)$

Решите задачи самостоятельно

Задача 2.2. При обработке соляной кислотой 9,92 г смеси карбидов кальция и алюминия образовалось 4,48 л смеси метана и ацетилена (н.у.). Определите количественный состав исходной смеси карбидов.

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$CaC_2 + 2HCl = CaCl_2 + C_2H_2\uparrow$;

$Al_4C_3 + 12HCl = 4AlCl_3 + 3CH_4\uparrow$

Задача 2.3. Смесь этилена с водородом объемом 4 л пропустили над нагретым никелем. После реакции остался неизрасходованным водород объемом 0,4 л. Вычислите состав исходной газовой смеси (в объемных долях). Объемы газов измерены при нормальных условиях.

Подсказка: Уравнения происходящей реакции

$C_2H_4 + H_2 = C_2H_6$.

Задача 2.4. При взаимодействии смеси этилового спирта и уксусной кислоты с металлическим натрием образовалось 2,24 л (н.у.) водорода. При действии на ту же массу исходной смеси раствором соды выделилось 0,224 л (н.у.) углекислого газа. Вычислите компонентный состав исходной смеси.

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$2CH_3COOH + Na_2CO_3 = 2CH_3COONa + CO_2\uparrow + H_2O$;

$2CH_3COO + 2Na = 2CH_3COONa + H_2\uparrow$;

$2C_2H_5OH + 2Na = 2C_2H_5ONa + H_2\uparrow$.

Задача 2.5. Для сжигания 40 м^3 смеси метана и пропана израсходовали 170 м^3 кислорода. Определите количественный состав смеси.

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$CH_4+2O_2=CO_2+2H_2O$;

$C_3H_8+5O_2=3CO_2+4H_2O$.

Задача 2.6. При последовательном пропускании смеси газов: азота, оксида углерода (II) и оксида углерода (IV) объемом 10 л (н. у.) через избыток известковой воды и затем над нагретым оксидом меди (II) выпадает 10 г осадка и образуется 6,35 г меди. Определите объемную долю каждого газа в смеси.

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$Ca(OH)_2+CO_2=CaCO_3+H_2O$;

$CuO+CO=Cu+CO_2$.

Задача 2.7. Если прокалить смесь гидрокарбонатов аммония, натрия и кальция массой 48,8 г до постоянной массы, то образуется твердый остаток массой 16,2 г. При обработке последнего раствором соляной кислоты выделяется газ объемом 2,24 л. Определите массы солей в исходной смеси.

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$NH_4HCO_3=NH_3+CO_2+H_2O$;

$2NaHCO_3=Na_2CO_3+CO_2+H_2O$;

$Ca(HCO_3)_2=CaCO_3+CO_2+H_2O$.

Задача 2.8. При сгорании смеси силана SiH_4 и метана CH_4выделяется газ и образуется твердый продукт реакции массой 6 г. Образовавшийся газ пропустили через избыток гидроксида натрия, при этом образовалось соединение массой 31,8 г. Определите объем силана и метана в исходной смеси и объем кислорода, израсходованный при горении газов.

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$CH_4+2O_2=CO_2+2H_2O$;

$SiH_4+2O_2=SiO_2=2H_2O$;

$2NaOH+CO_2=Na_2CO_3+H_2O$.

Задача 2.9. Амальгаму натрия и алюминия массой 5,48 г обработали избытком соляной кислоты. При этом выделилось 1,12 л водорода (н.у.). Нерастворенное вещество отделили от раствора и взвесили. Его масса составила 4,02 г. Определить массовый состав амальгамы (в процентах).

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$2Na + 2HCl = 2NaCl + H_2$;

$2Al + 6HCl = 2AlCl_3 + 3H_2$; Остаток ртуть Hg (4,02 г).

Задача 2.10. Смесь метана и ацетилена объемом 20 мл сожгли в избытке кислорода, при этом образовалось 32 мл CO_2. Определите состав исходной смеси в объемных долях.

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$CH_4 + 2O_2 = CO_2 + 2H_2O$;

$C_2H_2 + 2{,}5O_2 = 2CO_2 + H_2O$.

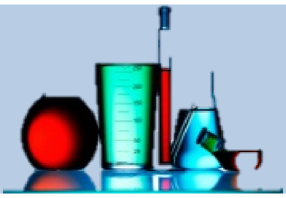
Задача 2.11. При окислении 38 г смеси бензола, стирола и изопропилбензола подкисленным раствором перманганата калия образовалось 24,4 г бензойной кислоты и выделилось 6,72 л углекислого газа. Определите количественный состав смеси.

Подсказка: Уравнения происходящих реакций

$C_6H_5CH{=}CH_2 \rightarrow C_6H_5COOH + CO_2$;

$C_6H_5CH(CH_3)_2 \rightarrow C_6H_5COOH + 2CO_2$.

2.2 Модель центра масс активированного комплекса



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 2.12. Конфигурация активированного комплекса реакции имеет вид $C_2H_4 + CI \rightarrow C_2H_4CI$. Найти координаты центра масс активированного комплекса, если известно, что координаты центра масс любой материальной системы, состоящей из n материальных точек, вычисляются по формулам:

$$x_{c_i} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n} m_j x_j^{(i)} \quad \left(i = 1,..,k\right), \tag{2.1}$$

где $x_j^{(i)}$ – i-я координата j-й точки, в которой сосредоточена масса m_j; $m ::= \sum_{j=1}^{n} m_j$.

Опорные знания по химии

Основная идея теории активированного комплекса (АК): в процессе любой химической реакции переход начальной конфигурации атомов в конечную обусловлен изменением межатомных расстояний. Превращение одного вещества в другое проходит через образование АК, представляющего собой как бы молекулу, отличающуюся по своему строению (углы и длины связей) от конечных и исходных веществ, и существующую на некотором интервале пространства.

Длины связей в активированном комплексе измеряются в единицах длины Å, называемых **ангстремом**: 1 Å $=10^{-8}$ см.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Обозначим x, y, z – координаты точки; x_c, y_c, z_c – координаты центра масс.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Поскольку x, y, z, x_c, y_c, z_c– координаты, то их значения могут принимать любые действительные значения.

Все атомы молекулы этилена лежат в плоскости Oxy.

На основании теории активированного комплекса сделаем следующие предположения:

1)связь C–C имеет длину 1,44 Å, среднюю между длиной связи C–C в этилене, равной 1,34 Å, и длиной связи C–C в образующемся свободном радикале C_2H_4CI, равной 1,54 Å; все связи C–H сохраняют постоянную длину 1,07 Å (модель этилена представлена на рис. 2.2);

2)углы при атоме C_1: $\angle H_1C_1C_2 = \angle H_2C_1C_2 = \angle H_1C_1H_2 = 115°$, т.е. равны среднему значению между 120^o в этилене и 109^o в свободном радикале C_2H_4CI; углы при C_2 сохраняют постоянное значение, равное 120^o;

3)атом Cl приближается к молекуле этилена в направлении, перпендикулярном плоскости этой молекулы. В активированном комплексе угол $\angle ClC_1C_2 = 100°$, т.е. среднему значению между прямым углом и углом 109^{o} в образующемся свободном радикале. Расстояние между Cl и C_1 примем равным 2,00 Å, т.е. несколько больше, чем C_2H_4Cl.

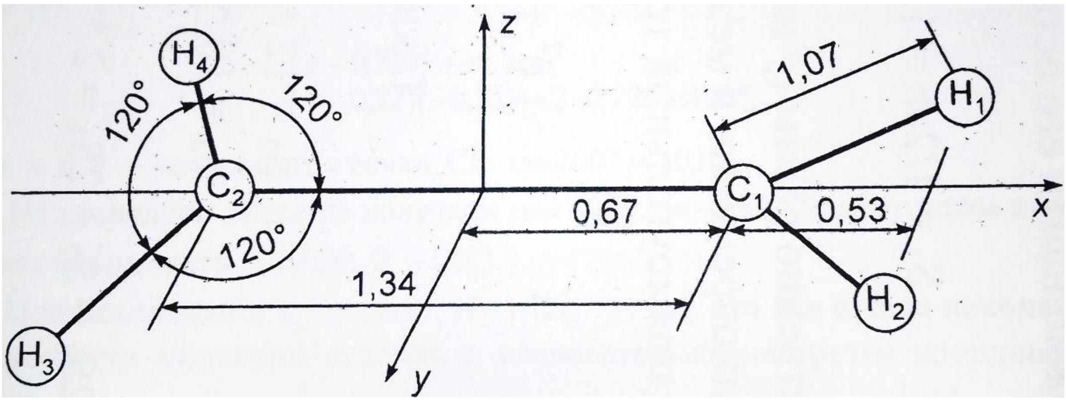


Рисунок 2.2 – Модель этилена

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Найти x_c, y_c, z_c – значения координат точки, являющейся центром масс активированного комплекса.

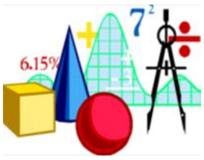
4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

Так как координаты центра масс любой материальной системы вычисляются по формуле (2.1), то координаты центра масс активированного комплекса найдем по формулам:

$$x_c = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n} m_j x_j, \quad y_c = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n} m_j y_j, \quad z_c = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n} m_j z_j, \quad m ::= \sum_{j=1}^{n} m_j. \qquad (2.2)$$

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

На множестве действительных чисел найти значения величин x_c, y_c, z_c по формулам (2.2).



Опорные знания по математике

1. Понятия: модуль вектора, скалярное произведение векторов, угол между векторами.
2. Формулы для вычисления модуля вектора и скалярного произведения векторов в случае, когда векторы заданы координатами.
3. Формула для вычисления скалярного произведения векторов в случае, когда векторы заданы модулями и углом между ними.

Выполняем математические действия

1. Найдем из периодической таблицы Д. И.Менделеева атомные массы атомов, входящих в конфигурацию активированного комплекса, изображенную на рис. 2.3:

$$M_H = 1{,}01;\ M_C=12{,}01;\ M_{Cl}= 35{,}45.$$

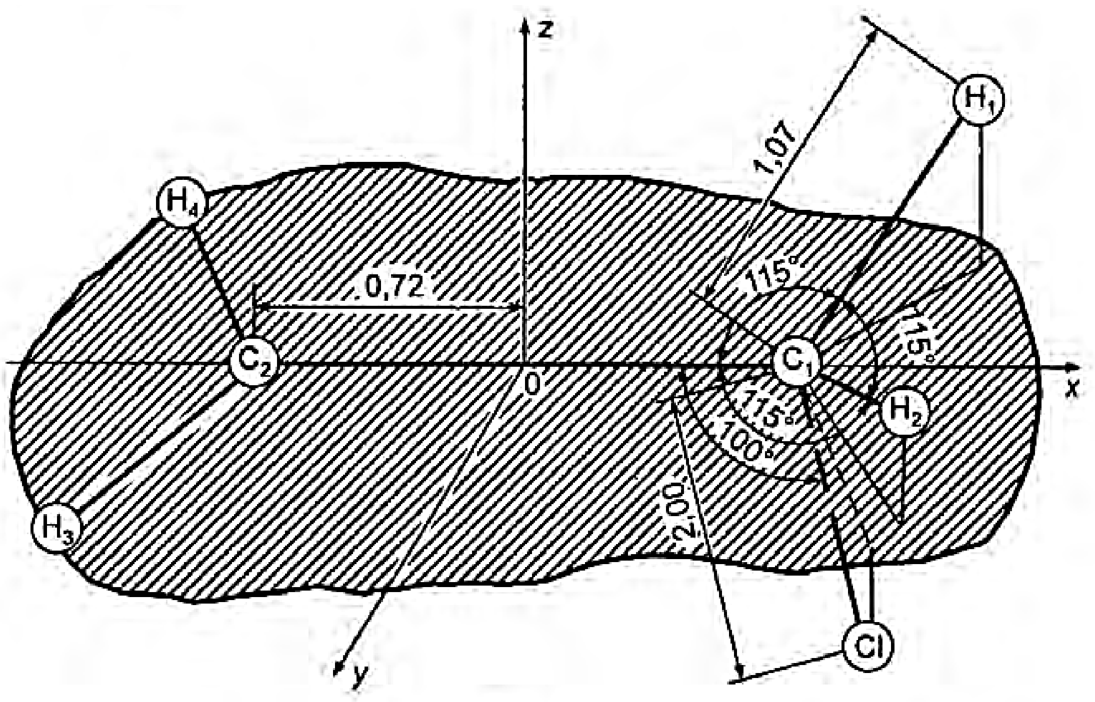


Рисунок 2.3 – Конфигурация активированного комплекса реакции $C_2H_4 + Cl \rightarrow C_2H_4Cl$

2. Найдем координаты атомов.

Так как связь С–С имеет длину 1,44 Å, то в силу того, что C_1 и C_2 находятся на оси Ox и симметричны началу координат, имеем: C_1(0,72; 0;0), C_2 (– 0,72; 0; 0).

3. Из предположения 1 следует, что первые и третьи координаты H_1 и H_2 равны, а вторые – противоположны по знаку. Поэтому достаточно найти, например, координаты H_1, обозначив их (x; y; z). Для этого определим длину вектора $\overrightarrow{C_1H_1}$ и скалярные произведения $\overrightarrow{C_1H_1}\cdot\overrightarrow{C_1H_2}$ и $\overrightarrow{C_1O}\cdot\overrightarrow{C_1H_1}$ через соответствующие координаты:

$$(x-0,72)^2+y^2+z^2=1,07^2;$$

$$(x-0,72)^2-y^2+z^2=1,07^2\cos 115^\circ;$$

$$(x-0,72)(-0,72)=1,07^2\cdot 0,72\cos 115^\circ,$$

где x, y, z – координаты точки H_1, а $\cos 115^\circ=-0,42$.

4. Решая эту систему, получаем координаты точек

H_1 (1,117; – 0,89; 0,41) и H_2 (1,117; 0,89; 0,41).

5. Так как атом Cl находится в плоскости Oxz, то вторая координата его равна нулю. Для нахождения же координат x и z вычислим $\overrightarrow{C_1Cl}$, скалярное произведение $\overrightarrow{C_1O}\cdot\overrightarrow{C_1Cl}$ и учтем предположение 3: $(x-0,72)^2+z^2=4;$

$$(x-0,72)(-0,72)=2\cdot 0,72\cos 100^\circ,$$

где x, и z – координаты точки Cl, а $\cos 100^\circ=-0,17$.

6. Из последней системы получаем x = 1,06, z = –1,97. Значит, атом хлора имеет координаты Cl (1,06; 0; –1,97).

При нахождении координат H_3 и H_4 учтем, что эти атомы находятся в плоскости молекулы этилена и, следовательно, их третьи координаты равны нулю. Далее, учитывая предположения 1 и 2, находим $\left|\overrightarrow{C_2H_4}\right|$ и скалярное произведение $\overrightarrow{C_2H_4}\cdot\overrightarrow{C_2O}$:

$$(x+0,72)^2+y^2=1,07;$$

$$(x+0,72)\cdot 0,72=0,72\cdot 1,07\cos 120^\circ,$$

где x и y – координаты точки H_4.

7. Из последней системы находим, что $x = -1{,}25$, а $y = -0{,}93$. Значит, H_4 (–1,25;–0,93;0).

8. Так как атомы H_3 и H_4 располагаются симметрично относительно оси Ox, то H_3(–1,25;0,93;0).

9. Полученные результаты запишем в таблицу:

Координаты, A	Атомы							
	C_1	**C_2**	**H_1**	**H_2**	**H_3**	**H_4**	**Cl**	**Сумма масс**
x_i	0,72	-0,72	1,17	1,17	-1,25	-1,25	1,06	–
y_i	0	0	-0,89	0,89	0,93	-0,93	0	–
z_i	0	0	0,41	0,41	0	0	-1,97	–
Атомная масса M_i	12,01	12,01	1,01	1,01	1,01	1,01	35,45	$\sum_i M_i = 63{,}51$

10. Зная координаты всех атомов активированного комплекса и их массы, можно найти координаты центра масс:

$$x_c = \frac{1}{63{,}51}\left(-0{,}72 \cdot 12{,}01 + 0{,}72 \cdot 12{,}01 + 2 \cdot 1{,}17 \cdot 1{,}01 - 2 \cdot 1{,}25 \cdot 1{,}01 + 1{,}06 \cdot 35{,}45\right) =$$
$$= 0{,}59;$$
$$y_c = \frac{1}{63{,}51}\left(-0{,}89 \cdot 1{,}01 + 0{,}89 \cdot 1{,}01 + 0{,}93 \cdot 1{,}01 - 0{,}93 \cdot 1{,}01\right) = 0;$$

$$z_c = \frac{1}{63{,}51}\left(0{,}41 \cdot 1{,}01 + 0{,}41 \cdot 1{,}01 - 1{,}97 \cdot 35{,}45\right) = -1{,}04.$$

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Центр масс активированного комплекса реакции $Cl \rightarrow C_2H_4Cl$ имеет координаты (0,59; 0;–1,04).

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Для помощи в вычислениях в задаче 2.2 можно воспользоваться различными средствами ИКТ. Например, решение систем (2.1), (2.2), (2.3) осуществим с помощью системы *Wolfram|Alpha*.

Для этого на сайте *Wolfram|Alpha* переходим по разделам *Examples> Mathematics> Algebra* и в разделе *EQUATIONSOLVING* выбираем пункт *solve a system of polynomial equations*.

Затем в поле ввода вводим через запятую уравнения системы (2.1) и нажимаем клавишу *Enter*. После чего программа выведет на экран решение системы (рис. 2.5).

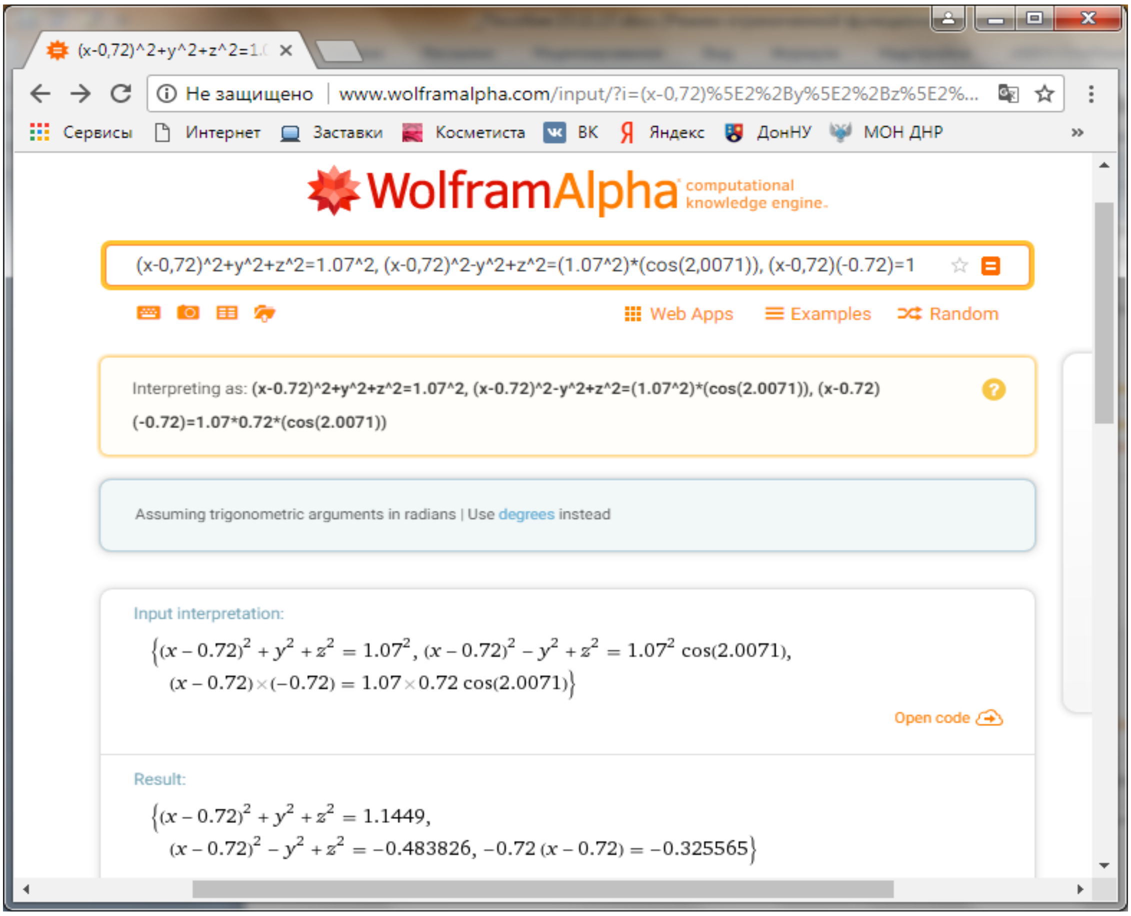


Рисунок 2.5 – Решение системы уравнений (2.1) с помощью системы *Wolfram|Alpha*

Вычисление координат центра масс (см. пункт 11) можно реализовать с помощью приложения *MicrosoftMathematics*. Для этого в поле ввода следует ввести соответствующие числовые выражения и нажать клавишу *Ввод*. Результат вычислений показан на рисунке 2.6.

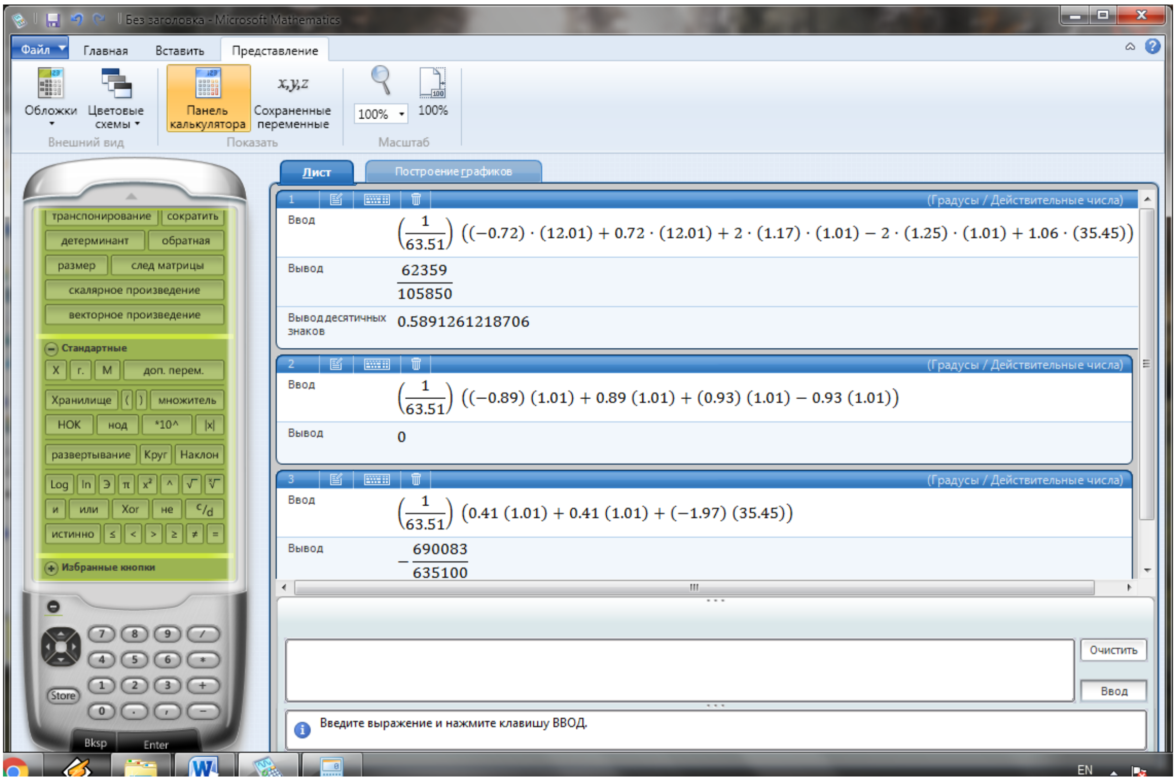


Рисунок 2.6 – Результат вычислений с помощью приложения *MicrosoftMathematics*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 2.13. Рассматривается реакция двухатомной молекулы XY с атомом Z. Запишите схематично уравнение этой реакции:

А:	XY+Z=Y+XZ
Б:	XY+Z=X+Y+Z
В:	XY+Z=Z+XY
Г:	XY+Z=X+YZ
Д:	XY+Z=XZ+YZ

Задание 2.14. В ходе химической реакции в молекуле изменяются…

А:	Состав молекулы
Б:	Вес молекулы
В:	Расстояния между атомами
Г:	Масса атомов
Д:	Валентность молекулы

Задание 2.15. Чтобы найти координаты центра масс активированного комплекса надо знать атомные веса и …

А:	количество атомов
Б:	размеры атомов
В:	диаметр атомов
Г:	координаты атомов
Д:	атомные орбитали

Задание 2.16. Центром масс системы называют точку …

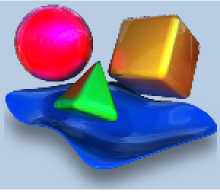
А:	расстояние до которой от всех элементов системы равны
Б:	относительно которой суммарный момент силтяжести (действующих на систему) равен нулю.
В:	вкоторой массы всех элементов системы равны
Г:	которая обладает тем свойством, что ее статистический момент относительно любой оси (или точки) равен статистическому моменту системы относительно той же оси (или точки).
Д:	относительно которой равнодействующая всех сил, действующих на систему, равна нулю.

Задание 2.17. Длины связей в активированном комплексе измеряются в единицах длины А, называемых ангстремом.

А:	1 Å =10^{-8} м.
Б:	1 Å =10^{-6} м.
В:	1 Å =10^{-5} м.
Г:	1 Å =10^{-12} м.
Д:	1Å А=10^{-10} м.

Задание 2.18. Определите правильную последовательность действий по математическому моделированию, которые нужно выполнить для получения математической модели при составлении баланса уравнения химической реакции:

1.	**А:**	Составить соотношения, связывающие введенные переменные
2.	**Б:**	Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные
3.	**В:**	Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача
4.	**Г:**	Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче
5.	**Д:**	Ввести переменные



Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 2.19. Известно, что атомы X и Y лежат на оси Ox декартовой системы координат симметрично началу координат и расстояние между ними равно $2a$. Какие координаты будут иметь эти атомы?

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$X(0;0;-a)$, $Y(0;0;a)$	$X(0;0;-a)$, $Y(a;0;0)$	$X(-a;\,0;\,0)$, $Y(a;0;0)$	$X(0;-a;\,0)$, $Y(a;0;0)$	$X(0;-a;\,0)$, $Y(0;\,a;\,0)$

Задание 2.20. Известно, что атомы X и Y лежат в плоскости xOy декартовой системы координат симметрично оси Ox. Известно также, что расстояние между ними равно $2b$, а координата по оси Ox равна a. Какие координаты будут иметь эти атомы?

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$X(-a;-b;\,0)$, $Y(a;b;0)$	$X(a;-b;\,0)$, $Y(a;b;0)$	$X(-a;-b;\,0)$, $Y(a;b;0)$	$X(0;a;-b)$, $Y(0;a;b)$	$X(a;0;-b)$, $Y(a;0;b)$

Задание 2.21. Известно, что атомы X и Y имеют координаты: $X(x; y; z)$, $Y(a;b;c)$. Чему равны координаты вектора $\overline{XY}$?

А	Б	В	Г	Д
$(x-a; y-b; z-c)$	$(x+a; y+b; z+c)$	$(a-x; b-y; c-z)$	$\left((x-a)^2; (y-b)^2; (z-c)^2\right)$	$\left(\frac{a}{x}; \frac{b}{y}; \frac{c}{z}\right)$

Задание 2.22. Известно, что атомы X и Y имеют координаты: $X(x; y; z)$, $Y(a;b;c)$. Чему равен модуль вектора $\overline{YX}$?

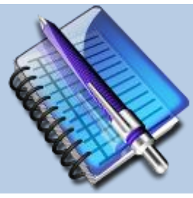
А	Б	В	Г	Д
$\sqrt{(x-a)^2+(y-b)^2+(z-c)^2}$	$\sqrt{a^2+b^2+c^2}$	$\sqrt{x^2+y^2+z^2}$	$\sqrt{(x+a)^2+(y+b)^2+(z+c)^2}$	0

Задание 2.23. Известно, что атомы X_1, X_2 и Y_1, Y_2 имеют координаты: $X_1(x_1; y_1; z_1)$, $X_2(x_2; y_2; z_2)$, $Y_1(a_1; b_1; c_1)$, $Y_2(a_2; b_2; c_2)$. Найти скалярное произведение векторов $\overline{X_1X_2} \cdot \overline{Y_1Y_2}$.

А	Б	В	Г	Д
0	$(x_2-x_1)\cdot(a_2+a_1)+$ $(y_2-y_1)\cdot(b_2+b_1)+$ $(z_2-z_1)\cdot(c_2+c_1)$	$(x_2+x_1)\cdot(a_2-a_1)+$ $(y_2+y_1)\cdot(b_2-b_1)+$ $(z_2+z_1)\cdot(c_2-c_1)$	$(x_2+x_1)\cdot(a_2+a_1)+$ $(y_2+y_1)\cdot(b_2+b_1)+$ $(z_2+z_1)\cdot(c_2+c_1)$	$(x_2-x_1)\cdot(a_2-a_1)+$ $(y_2-y_1)\cdot(b_2-b_1)+$ $(z_2-z_1)\cdot(c_2-c_1)$

Задание 2.24. Установите соответствие между формулами, по которым вычисляются координаты центра масс активированного комплекса в декартовой системе координат и названиями вычисляемых величин.

1	$x_c = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n} m_j x_j$	**А**	координата по оси импликат
2	$y_c = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n} m_j y_j$	**Б**	масса системы
3	$z_c = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n} m_j z_j$	**В**	координата по оси абсцисс
4	$m ::= \sum_{j=1}^{n} m_j.$	**Г**	радиус вектор центра масс
		Д	координата по оси ординат



Решите задачи самостоятельно

Задача 2.13. Связь Y_1–Y_2 имеет длину 4 Å и атомы Y_1 и Y_2 находятся на осиOx и симметричны началу координат. Найти координаты атомов Y_1 и Y_2, а также координаты атома X, еслиизвестночто он лежит в плоскостиxOz, уголмежду векторами $\overline{Y_1X}$ *и* $\overline{Y_2O}$равен60°, а модуль вектора $\overline{Y_1X}$ равен 5 А, точка $O(0; 0; 0)$ –начало координат. Постройте точки, соответствующие всем атомам, в декартовойсистеме координат.

Задача 2.14. Связь Y_1–Y_2 имеет длину 6 Å и атомы Y_1 и Y_2 находятся на оси Oyи симметричны началу координат. Найти координаты атомов Y_1 и Y_2, а также координаты атома X, еслиизвестночто он лежит в плоскостиyOz, уголмежду векторами $\overline{Y_1X}$ *и* $\overline{Y_2O}$равен 120°, а модуль вектора $\overline{Y_1X}$ равен 4 А, точка $O(0; 0; 0)$ –начало координат. Постройте точки, соответствующие всем атомам, в декартовойсистеме координат.

Задача 2.15. Связь Y_1–Y_2 имеет длину 2 Å и атомы Y_1 и Y_2 находятся на оси Ozи симметричны началу координат. Найти координаты атомов Y_1 и Y_2, а также координаты атома X, еслиизвестночто он лежит в плоскостиxOz, уголмежду векторами $\overline{Y_1X}$ *и* $\overline{Y_2O}$равен 45°, а модуль вектора $\overline{Y_1X}$ равен 7 А, точка $O(0; 0; 0)$ –начало координат. Постройте точки, соответствующие всем атомам, в декартовойсистеме координат.

Задача 2.16. Атомы Y_1 и Y_2 находятся в плоскости yOzдекартовой системы координат симметрично оси Oy . Известно также, что связь Y_1–Y_2 имеет длину 8 Å, а координата по оси Ozравна3 *А*. Найдите координаты атома X, еслиизвестночто он лежитв плоскости xOy, уголмежду векторами $\overline{Y_1X}$ *и* $\overline{Y_2O}$равен 60°, а модуль вектора $\overline{Y_1X}$ равен5А, точка $O(0; 0; 0)$ –начало координат. Постройте точки, соответствующие всем атомам, в декартовойсистеме координат.

Задача 2.17. Атомы Y_1 и Y_2 находятся в плоскости yOzдекартовой системы координат симметрично оси Oy . Известно также, что связь Y_1–Y_2 имеет длину 6 Å, а координата по оси Oyравна4 A. Найдите координаты атома X, еслиизвестночто он лежитв плоскости xOz, уголмежду векторами $\overline{Y_1X}$ и $\overline{Y_2O}$равен60°, а модуль вектора $\overline{Y_1X}$ равен5А, точка O(0; 0; 0) –начало координат. Постройте точки, соответствующие всем атомам, в декартовой системе координат.

Задача 2.18. Атомы Y_1 и Y_2 находятся в плоскости xOzдекартовой системы координат симметрично оси Oz . Известно также, что связь Y_1–Y_2 имеет длину 6Å, а координата по оси Oxравна4A. Найдите координаты атома X, еслиизвестночто он лежитв плоскости xOy, уголмежду векторами $\overline{Y_1X}$ и $\overline{Y_2O}$ равен60°, а модуль вектора $\overline{Y_1X}$ равен7А, точкаO(0; 0; 0) –начало координат. Постройте точки, соответствующие всем атомам, в декартовой системе координат.

Задача 2.19. Предположим, что в таблице заданы координаты всех атомов активированного комплекса реакции $2AgCl+Na_2S\rightarrow Ag_2S+2NaCl$. Найдите координаты центра масс.

Координаты, А	**Атомы**							**Сумма масс**
	Ag_1	Ag_2	Na_1	Na_1	Cl_1	Cl_2	S	
x_i y_i z_i	0,12 0 0	-0,12 0 0	1,27 -0,69 0,41	1,27 0,69 0,41	-1,45 0,73 0	-1,45 -0,73 0	1,06 0 -1,37	– – –
Атомная масса M_i								

Задача 2.20. Предположим, что в таблице заданы координаты всех атомов активированного комплекса реакции $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$. Найдите координаты центра масс.

Координаты, А	**Атомы**						**Сумма масс**
	H_1	H_2	H_3	H_4	O_1	O_2	
x_i y_i z_i	0,12 0 0	-0,12 0 0	1,27 -0,69 0,41	1,27 0,69 0,41	-1,45 0,73 0	-1,45 -0,73 0	– – –
Атомная масса M_i							

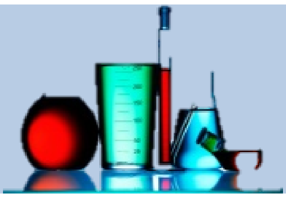
3. ФУНКЦИЯ ОДНОЙ НЕЗАВИСИМОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

Графические способы химических расчетов широко используются на предприятиях химической промышленности при контроле технологического процесса и анализе готового продукта в химических лабораториях. При химическом анализе сырья и готового продукта используют графики функциональной зависимости для определенной химической реакции.

Например, можно строить графики растворимости по данным проведенного эксперимента; применять кривые растворимости при нахождении массы растворенного вещества или массы растворителя и при решении других задач.

Графический способ решения задач оказывается более рациональным при решении задач на смеси, смешивание растворов и др.

3.1 Графическая модель химической реакции



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 3.1. Вычислить массу сульфита натрия, необходимого для реакции с серной кислотой, чтобы получить 16 г оксида серы.

Опорные знания по химии

Сульфит натрия взаимодействует с серной кислотой, при этом получается оксид серы:

$Na_2SO_3+H_2SO_4\rightarrow Na_2SO_4+H_2O+SO_2\uparrow$. При взаимодействии соли с кислотой получается новая соль Na_2SO_4 и сернистая кислота, которая легко разлагается на воду и SO_2.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Обозначим $m(SO_2)$ – масса оксида серы, $m(Na_2SO_3)$ – масса сульфита натрия.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Масса оксида серы $m(SO_2)=16$ г.

Искомая масса сульфита натрия не может принимать отрицательные значения.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Определить массу сульфита натрия $m(Na_2SO_3)$, зная массу оксида серы $m(SO_2)$.

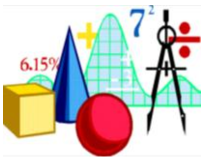
4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

В данной задаче зависимость переменной $m(Na_2SO_3)$ от переменной $m(SO_2)$ является функцией, так как каждому значению $m(SO_2)$ соответствует единственное значение $m(Na_2SO_3)$.

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Найти функциональную зависимость переменной $m(Na_2SO_3)$ от переменной $m(SO_2)$.

Найти значение ординаты, при котором значение абсциссы равно 16.



Опорные знания по математике

1. Пропорциональная зависимость между известными величинами и искомыми.
2. Линейная функция, её график.

Выполняем математические действия

1. Зависимость между прямо пропорциональными переменными выражается формулой *y=kx* линейной функции. Для задачи 3.1 это $m(Na_2SO_3)=k \cdot m(SO_2)$.

2. Коэффициент пропорциональности – отношение величины молярной массы Na_2SO_3 к величине молярной массы SO_2, то есть k = 126 : 64 = 1,97. Для построения графика прямой пропорциональности составляем таблицу значений функции $m(Na_2SO_3)=k \cdot m(SO_2)$.

3. Изобразим зависимость $m(Na_2SO_3)$ от $m(SO_2)$ графически (рис. 3.1).

$m(Na_2SO_3)=km(SO_2)$

$m(SO_2)$	0	64
$m(Na_2SO_3)$	0	126

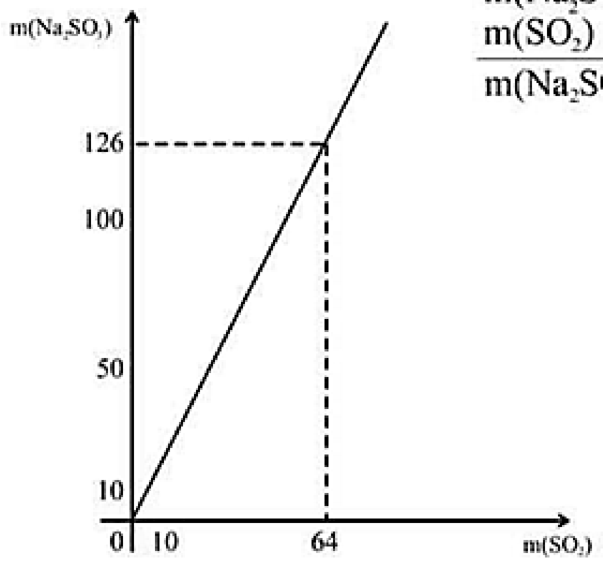


Рисунок 3.1 – Иллюстрация 1 к задаче 3.1

4. По уравнению реакции:

$m(SO_2)$= 1 моль·64 г/моль=64 г,

$m(Na_2SO_3)$=1 моль·126 г/моль=126 г.

5. Для решения задачи на оси абсцисс отмечаем точку, соответствующую числу 16 (рис. 3.2), проводим прямую, параллельную оси ординат, до пересечения с графиком прямой пропорциональности. Из точки пересечения проводим перпендикуляр к оси ординат и получаем точку 31,5.

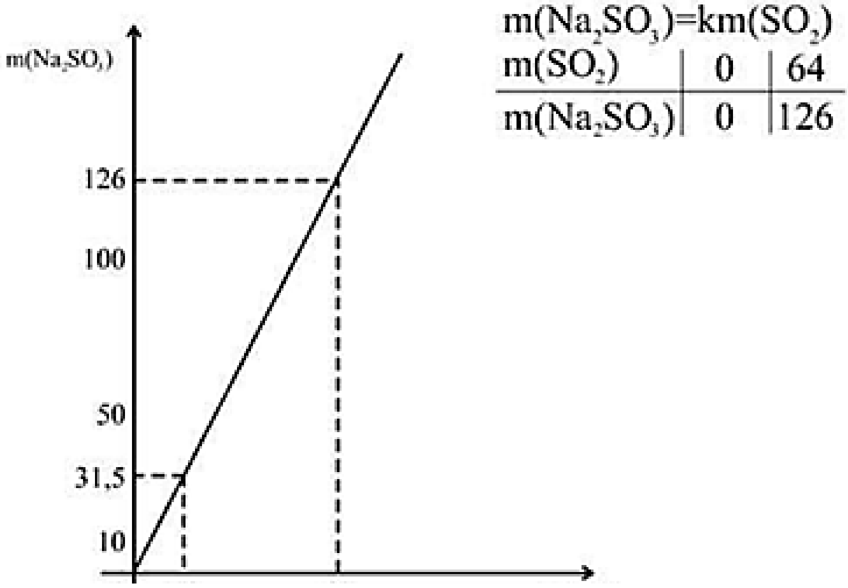


Рисунок 3.2 – Иллюстрация 2 к задаче 3.1

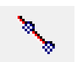
6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

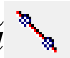
Масса сульфита натрия $m(Na_2SO_3)$ равна 31,5 г.

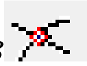
Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Построение и исследование графика функции в задаче 3.1 можно осуществить с помощью педагогического программного средства *Gran-2D*.

Прежде чем построить график функциональной зависимости переменной *m(Na*$_2$*SO*$_3$*)* от переменной *m(SO*$_2$*)* отметим на плоскости две точки, принадлежащие графику: $A(0;\ 0)$ и $B(64;\ 126)$. Для этого в пункте *Объект* главного меню программы выбираем пункты *Создание* → *Аналитическая точка*, в появившемся окне вводим координаты точки *A* и нажимаем *ОК*. Аналогичные действия выполняем и для построения точки *B*.

Затем на панели инструментов выбираем кнопку *Создание луча*  и, пользуясь подсказками, отмечаем на экране точки *A* и *B* (рис. 3.3).

Чтобы найти решение задачи (значение ординаты точки, абсцисса которой равна 16) построим прямую параллельную оси *Oy* и проходящую через точку $x = 16$. Для этого сначала строим две точки, лежащие на этой прямой, например, $C(16;\,0)$ и $B(16;\,100)$, а затем на панели инструментов выбираем кнопку *Создание прямой*  и отмечаем на экране точки *C* и *D*(рис. 3.3).

Далее с помощью копки *Создание точки пересечения объектов*  панели инструментов выбираем по очереди построенные луч и прямую. В результате программой будет построена их точка пересечения *E*. По двойному нажатию на этой точке откроется окно *Точка пересечения объектов. Изменение*, в котором указаны ее координаты. Таким образом масса сульфита натрия соответствует координате по оси *Oy* точки *E*, равной 31,5 (рис. 3.3).

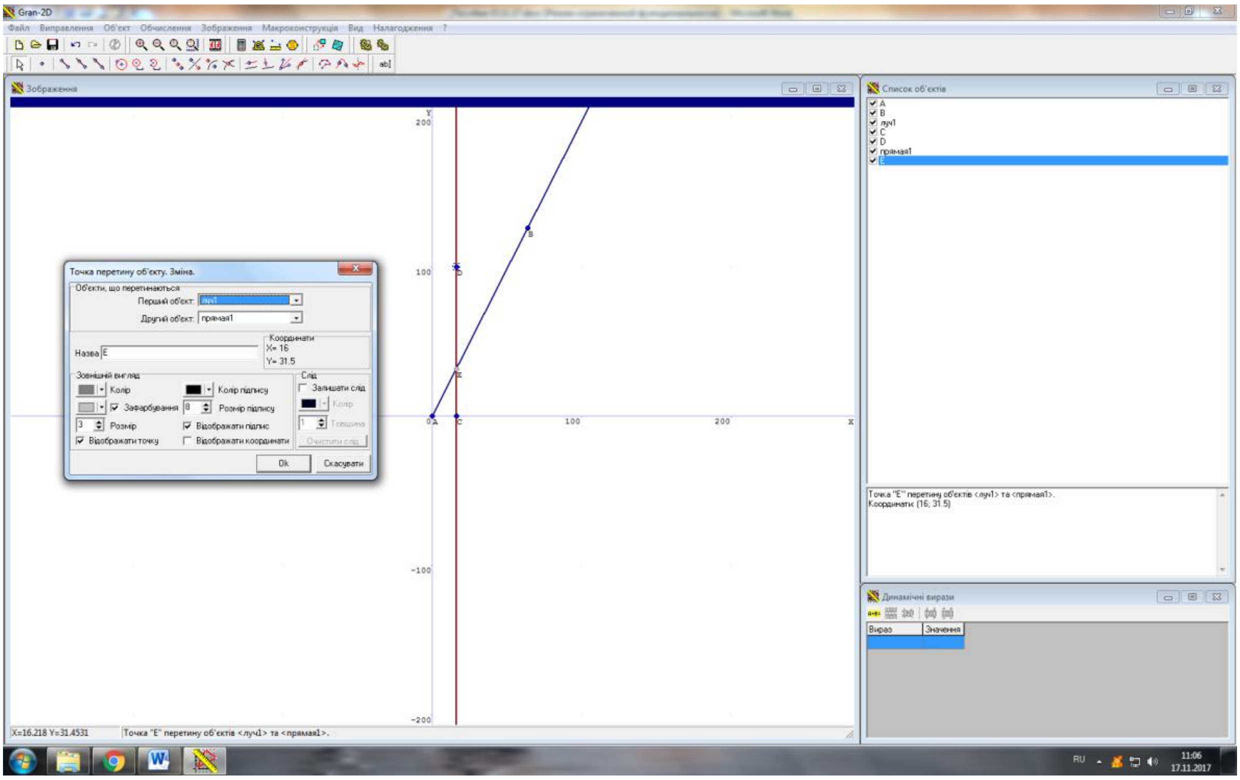


Рисунок 3.3 – Результат исследования задачи 3.1 с помощью программы *Gran-2D*

<u>Задача 3.2</u>. Наиболее распространенный в природе фтороапатит содержит 42,23% оксида фосфора, 50,03% оксида кальция и 7,74% фторида кальция. Напишите состав этого минерала в виде формул двух солей.

Опорные знания по химии

Формулы минералов – обозначения состава и частично структуры минералов, аналогичные формулам химических соединений, с некоторыми добавлениями, отражающими явления изоморфизма.

Массовая доля – способ выражения концентрации растворов, определяемый как отношение массы растворенного вещества к массе раствора.

Относительные молекулярные массы сложных молекул можно определить, просто складывая относительные атомные массы входящих в них элементов.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Обозначим $\omega(P_2O_5) = 42{,}23\%$, – массовая доля оксида фосфора, $\omega(CaO) = 50{,}03\%$ – массовая доля оксида кальция, $\omega(CaF_2) = 7{,}74\%$ – массовая доля фторида кальция.

Обозначим количество молекул каждого вещества через:

$CaF_2 – x$, $P_2O_5 – y$, $CaO – z$.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Поскольку *x, y, z*– это количество молекул, то они должны принимать значения из множества натуральных чисел.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

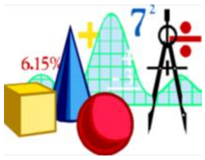
Найти такие значения *x, y, z*, которые бы удовлетворяли условиям $\omega(P_2O_5) = 42{,}23\%$, $\omega(CaO) = 50{,}03\%$, $\omega(CaF_2) = 7{,}74\%$.

4) *Составить соотношения, связывающие введенные переменные.*

Формула минерала имеет вид: $x\ CaF_2 \cdot yP_2O_5 \cdot zCaO$.

5) *Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.*

Найти функциональные зависимости, выражающие соотношение между величинами относительных молекулярных масс и массовыми долями веществ, входящих в состав минерала



Опорные знания по математике

1. Линейная функция, её график.

Выполняем математические действия

1. Найдем относительные молекулярные массы: $M_r(P_2O_5) = 142$; $M_r(CaO) = 56$; $M_r(CaF_2) = 78$.
2. В одной системе координат построим три графика, выражающие соотношение между величинами относительных молекулярных масс и массовыми долями веществ, входящих в состав минерала (рис. 3.3).

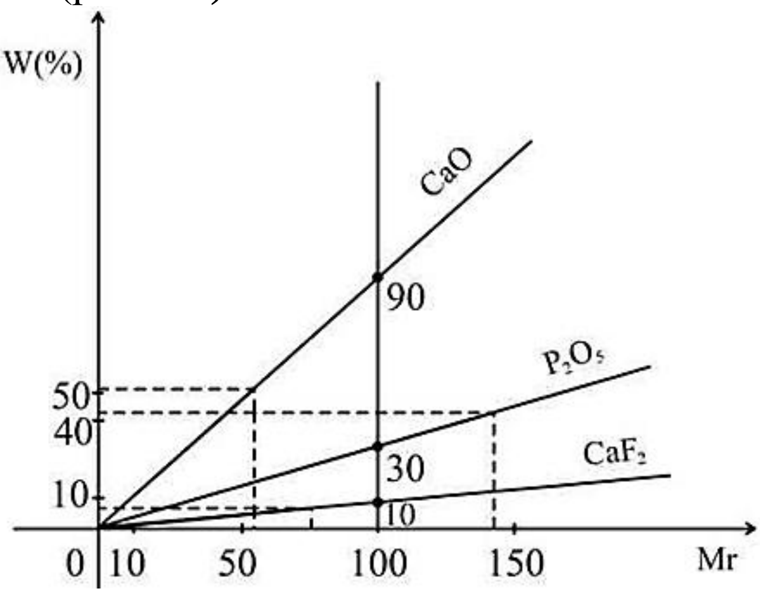


Рисунок 3.3 – Иллюстрация к задаче 3.2

3. Пересечем все три функциональные прямые произвольной прямой линией, параллельной оси ординат (рис. 3.3). По отношению точек пересечения этой прямой и определяют индексы элементов в минерале.

4. Найдем отношение точек пересечений этой прямой с функциональными прямыми:

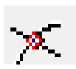
10:30:90 (CaF_2; P_2O_5;CaO) или 1:3:9 (CaF_2; P_2O_5;CaO).

6) *Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.*

Формула минерала $CaF_2 \cdot 3P_2O_5 \cdot 9CaO$.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Рассмотрим решение задачи 3.2 с помощью педагогического программного средства *Gran-2D*. Строим три графика, выражающие соотношение между величинами относительных молекулярных масс и массовыми долями тех веществ, входящих в состав минерала (аналогично построениям, подробно описанным в разделе «*Применение ИКТ для анализа решения задачи*» для задачи 3.1). Для построения каждой прямой предварительно отмечаем на плоскости точки: $(0;\ 0)$ и для P_2O_5 – $(142;\ 42{,}23)$, для CaO – $(56;\ 50{,}03)$, для CaF_2 – $(78;\ 7{,}74)$.

Затем строим прямую, параллельную оси Oy и проходящую через точку $x = 100$ (предварительно построив точки с координатами, например, $(100;\ 0)$ и $(100;\ 100)$). Также аналогично отмечем точки пересечения этих графиков с помощью копки *Создание точки пересечения объектов* , находящейся на панели инструментов программы. По двойному нажатию на каждой из этих точек смотрим в появившемся окне значения ординат. Для функциональной зависимости, соответствующей CaF_2 это 10, P_2O_5 – 30 и CaO– 90. То есть отношение точек пересечений прямой с функциональными прямыми 1:3:9 (CaF_2; P_2O_5; CaO).

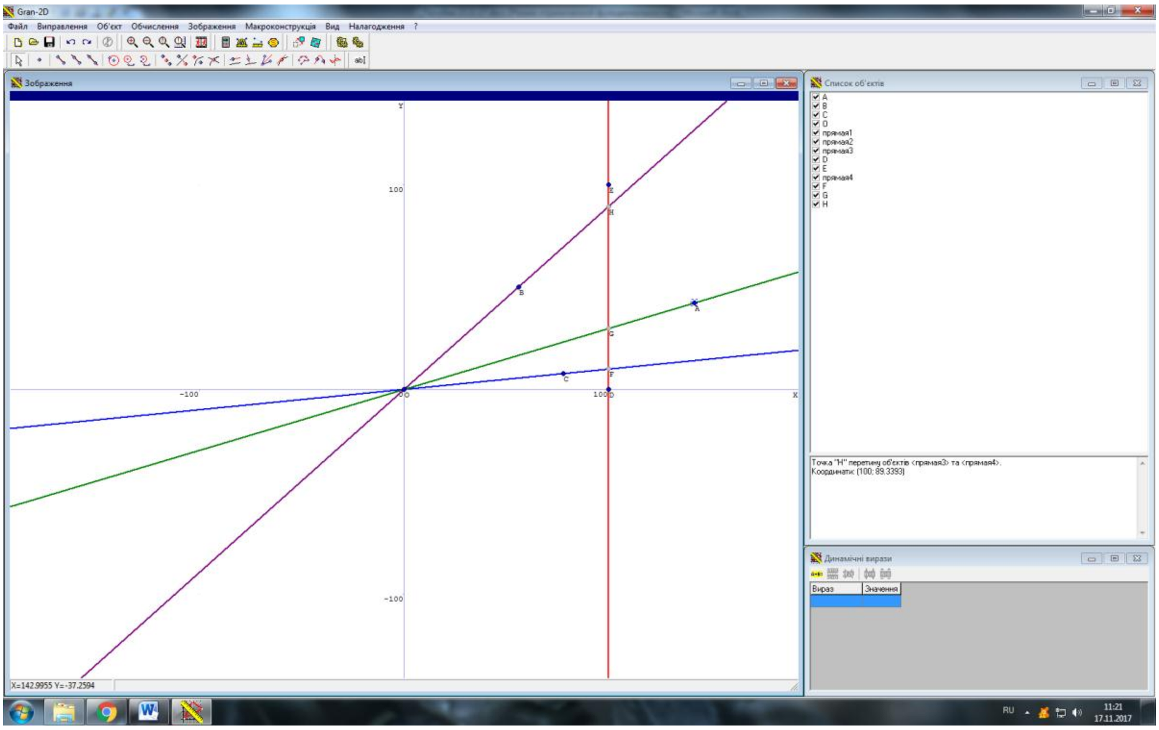


Рисунок 3.5 – Результат исследования задачи 3.2
с помощью программы *Gran-2D*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 3.1. Математической основой графического способа химических расчетов является …

А:	квадратическая зависимость между известными величинами и искомыми.
Б:	статистическая зависимость между известными величинами и искомыми.
В:	вероятностнаязависимость между известными величинами и искомыми.
Г:	пропорциональная зависимость между известными величинами и искомыми.
Д:	логарифмическая зависимость между известными величинами и искомыми.

Задание 3.2. Линейная зависимость между пропорциональными переменными выражается формулой …

А:	$y=kx^2$
Б:	$y=k/x^2$
В:	$y=kx$
Г:	$y=k/x$
Д:	$y=kx^3$

Задание 3.3. Для графического способа химических расчетов получают функциональные зависимости между…

А:	количеством веществ и массовыми долями элементов, входящих в состав вещества
Б:	величинами относительных молекулярных масс и количеством элементов, входящих в состав вещества
В:	величинами относительных молекулярных масс и валентностью элементов, входящих в состав вещества
Г:	величинами относительных молекулярных масс и массовыми долями элементов, входящих в состав вещества
Д:	величинами относительных молекулярных масс и температурой элементов, входящих в состав вещества

Задание 3.4. В графическом способе химических расчетов переменные, выражающие массовые доли элементов могут принимать значения…

А:	целые
Б:	натуральные
В:	иррациональные
Г:	действительные неотрицательные
Д:	целые неотрицательные

Задание 3.5. В графическом способе химических расчетов переменные, выражающие количество молекул могут принимать значения…

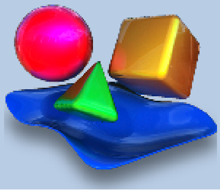
А:	целые неотрицательные
Б:	действительные неотрицательные
В:	иррациональные
Г:	целые
Д:	натуральные

Задание 3.6. Массовая **доля** вещества в растворе определяется как

А:	отношение массы растворенного вещества к массе раствора
Б:	отношение массы раствора к массе растворенного вещества
В:	отношение молекулярной массы растворенного вещества кмассе раствора
Г:	отношение молярной массы растворенного вещества к массе раствора
Д:	отношение атомной массы растворенного вещества к массе раствора

Задание 3.7. Определите правильную последовательность действий по математическому моделированию, которые нужно выполнить для получения математической модели при графическом расчете химической реакции:

1. А:	Составить соотношения, связывающие введенные переменные
2. Б:	Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные
3. В:	Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача
4. Г:	Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче
5. Д:	Ввести переменные



Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 3.8. К 150 г 20%-ного раствора соли добавили 30 г соли. Определите коэффициент пропорциональности линейной зависимости $y=kx$ между массой соли в первоначальном растворе (x) и массой первоначального раствора (y).

А	Б	В	Г	Д
$k=1/3$	$k=3$	$k=5$	$k=1/5$	1

Задание 3.9. К 150 г 20%-ного раствора соли добавили 30 г соли. Определите коэффициент пропорциональности линейной зависимости $y=kx$ между массой соли в полученном растворе (x) и массой полученного раствора (y).

А	Б	В	Г	Д
$k=1/3$	$k=3$	$k=5$	$k=1/5$	1

Задание 3.10. Какая функция $y=kx$ описывает зависимость массы растворённого вещества от массы растворителя, которые необходимо взять для приготовления 150 г 20%-го раствора.

А	Б	В	Г	Д
$y=0,25x$	$y=0,5x$	$y=x$	$y=2x$	$y=4x$

Задание 3.11. Определите зависимость массы раствора от массы растворённого в нем вещества, если раствор получен в результате сливания 120 г 16%-ного раствора с 60 г 20%-ного раствора.

А	Б	В	Г	Д
$y=0,17x$	$y=5,77x$	$y=0,16x$	$y=0,2x$	$y=0,36x$

Задание 3.12. Установите соответствие между таблицей значений зависимости массы вещества в растворе В (*г*) от массы растрорителя А (*г*) (1-4) и линейной функцией, которая эту зависимость описывает (А-Д).

1	А 0 50 В 0 180	**А**	$y=4x$
2	А 0 50 В 0 20	**Б**	$y=2,4x$
3	А 0 50 В 0 200	**В**	$y=3,6x$
4	А 0 50 В 0 120	**Г**	$y=2,5x$
		Д	$y=0,4x$

Решите задачи самостоятельно

Задача 3.3. При растворении в кислоте 2,33 г смеси железа и цинка было получено 896 мл водорода (при н.у.). Вычислите (используя графический метод решения) массу каждого из металлов, содержащихся в смеси.

Задача 3.4. Рассчитайте (используя графический метод решения) массы растворённого вещества и растворителя, которые необходимо взять для приготовления 150 г 20%-ного раствора.

Задача 3.5. К 150 г 20%-ного раствора соли добавили 30 г соли. Определите (используя графический метод решения) массовую долю соли в полученном растворе.

Задача 3.6. Из 170 г 9%-ного раствора выпарили 50 г растворителя. Определите (используя графический метод решения) массовую долю соли в полученном растворе.

Задача 3.7. Насыщенный при 70 °С раствор имеет массу 300 г и массовую долю растворённого вещества 30%. При его охлаждении до 20 °С выпал осадок массой 30 г. Определите массовую долю соли из полученном растворе.

Задача 3.8. Определите массовую долю вещества в растворе, полученном в результате сливания 120 г 16%-ного раствора с 60 г 20%-ного раствора.

Задача 3.9. Смесь карбонатов калия и натрия массой 7 г обработали серной кислотой, взятой в избытке. При этом выделившийся газ занял объем 1,344 л (н.у.). Определить массовые доли карбонатов в исходной смеси.

Задача 3.10. Смесь карбонатов калия и натрия массой 10 г растворили в воде и добавили избыток соляной кислоты.

Выделившийся газ пропустили через трубку с пероксидом натрия. Образовавшегося кислорода хватило, чтобы сжечь 1,9 л водорода (н.у.). Напишите уравнения реакций и рассчитайте состав смеси.

Задача 3.11. Смесь железа и цинка массой 12,1 г обработали избытком раствора серной кислоты. Для сжигания полученного водорода необходимо 2,24л кислорода (давление 135,6 кПа, температура – 364К). Найдите массовую долю железа в смеси.

Задача 3.12. Смесь метиловых эфиров уксусной кислоты и пропионовой кислоты массой 47,2г обработали 83,4мл раствора гидроксида натрия с массовой долей 40% (плотность 1,2г/мл). Определите массовые доли эфиров (в %) в смеси, если известно, что гидроксид натрия, оставшийся после гидролиза эфиров, может поглотить максимально 8,96л оксида углерода (IV).

Задача 3.13. Какая минимальная масса воды требуется для растворения 7,5 г сульфата калия при 45° С?

Задача 3.14. Смешаны 200 г 20%-го раствора и 60 32%-го раствора некоторого вещества. Какова массовая доля растворенного вещества в полученном растворе?

Задача 3.15. Требуется приготовить 1 кг 15%-го раствора аммиака из 25%-го раствора. Определите массы 25%-го раствора и воды, которые необходимо для этого взять.

4. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ ИСЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

Методы дифференциального исчисления применяются для математического моделирования химических процессов, в которых состояния тел и их свойства непрерывно изменяются.

Значительное число встречающихся на практике химических задач, требующих применения методов дифференциального исчисления, связано со скоростью превращений или изменений с течением времени, как это происходит в периодических процессах. Часто переменной является скорость изменения какой-либо величины не относительно времени, а относительно положения массы в пространстве, концентрации и т. д.

При изучении зависимостей, описывающих различные процессы в химии, возникает вопрос о нахождении скорости протекания этих процессов, которая моделируется с помощью производной:

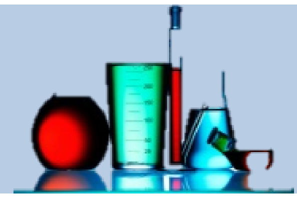
Скоростью химической реакции *называется изменение концентрации реагирующих веществ в единицу времени.*

В таблице представлены некоторые примеры функций от различных переменных и их производных, используемых для моделирования в химии:

№	*Переменная*	*Функция*	*Производная*
1.	$t-$время	$C(t)-$количество вещества, возникшего в результате некоторой реакции к моменту времени t.	$v(t)=\lim\limits_{\Delta t\to 0}\dfrac{\Delta C}{\Delta t}=$ $=\dfrac{dC}{dt}=C'(t)-$ скорость протекания реакции

2.	t – время	$v(t)$ – скорость протекания реакции некоторой реакции в момент времени t.	$a(t)=\lim\limits_{\Delta t\to 0}\dfrac{\Delta v}{\Delta t}=$ $=\dfrac{dv}{dt}v'(t)$ – ускорение протекания реакции
3.	t – время	$Q(t)$ – количество электричества, протекающего через сечение проводника в момент времени t.	$Q'=\lim\limits_{\Delta t\to 0}\dfrac{\Delta Q}{\Delta t}=\dfrac{dQ}{dt}$ – сила тока, выражающая заряд, который проходит за единицу времени через проводник
4.	t – время	$T(t)$ – температура, нагревающегося тела в момент времени t.	$T'=\lim\limits_{\Delta t\to 0}\dfrac{\Delta T}{\Delta t}=\dfrac{dT}{dt}$ – скорость нагревания тела

Рассмотрим задачи, в которых необходимо с помощью производной исследовать математические модели химических процессов.



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 4.1. Найти скорость химической реакции в момент времени $t = 10$ сек, если концентрация исходного продукта меняется по закону $C(t) = -50e^{-0,2t}$.

Опорные знания по химии

Скорость химической реакции – это величина, показывающая как изменяются концентрации исходных веществ или продуктов реакции за единицу времени.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Пусть закон изменения концентрация вещества, вступившего в химическую реакцию, – $C(t)$, скорость химической реакции – $v(t)$, где t – время протекания реакции.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Закон изменения концентрация вещества задается соотношением $C(t) = -50e^{-0{,}2t}$.

Переменная t (время) и скорость реакции в каждый момент времени не могут принимать отрицательные значения.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

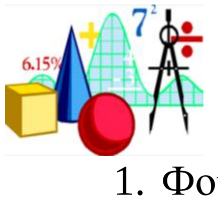
Найти скорость химической реакции $v(t)$ при $t = 10$.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

Так как скорость химической реакции – это производная концентрации реагирующих веществ по времени, то $v(t) = C'(t)$.

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Вычислить значение производной функции $v(t) = C'(t)$ в точке $t = 10$.



Опорные знания по математике

1. Формулы для нахождения производных основных элементарных функций.
2. Правила дифференцирования.

Выполняем математические действия

1. Найдем производную функции $C(t)=-50e^{-0,2t}$. Используем формулу производной сложной показательной функции:

$$\left(e^{u}\right)'=e^{u}\cdot u',\ \text{где}\ u=u(t).$$

Получим:

$$v(t)=C'(t)=-50e^{-0,2t}\cdot(-0,2t)=-50\cdot(-0,2)\cdot e^{-0,2t}=10e^{-0,2t}.$$

2. Вычислим значение функции $v(t)=C'(t)$ при $t=10$:

$$v(10)=10e^{-0,2\cdot 10}=10e^{-2}=\frac{10}{e^{2}}=1,35.$$

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Скорость протекания химической реакции на 10 секунде равна 1,35 моль/с.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Нахождение производной и вычисление ее значение в заданной точке можно осуществить с помощью приложения *MicrosoftMathematics*.

Найдем производную функции $C(t)=-50e^{-0,2t}$. Для этого на *Панели калькулятора* в группе «*Вычисления*» нажимаем кнопку «*Производная функции*»  и вводим выражение $deriv\left(-50\cdot e\wedge(-0.2\cdot x),x\right)$. Затем после нажатия на кнопку «*Ввод*» на вкладке *Лист* появляется результат (см рис. 4.1).

Чтобы найти значение полученной производной, в поле ввода вводим выражение $10\cdot e\wedge(-0.2\cdot 10)$ и нажимаем кнопку «*Ввод*». Результат вычисления показан на рисунке 4.1.

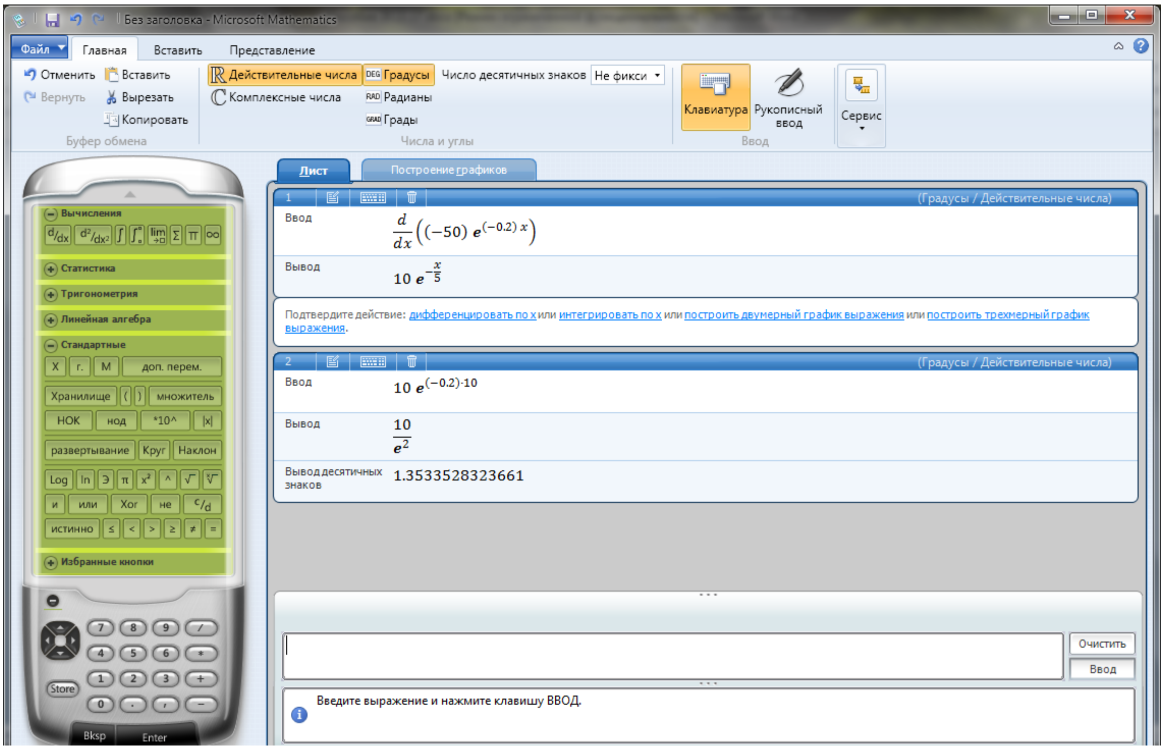


Рисунок 4.1 – Результат нахождения производной
и вычисление ее значение в заданной точке
с помощью приложения *MicrosoftMathematics*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 4.1. Скорость химической реакции как функция зависит от:

А:	времени
Б:	массы
В:	концентрации
Г:	количества реагентов
Д:	является постоянной величиной

Задание 4.2. Скорость реакции в каждый момент времени принимает значения из множества:

А:	натуральных чисел
Б:	целых положительных чисел
В:	целых чисел
Г:	вещественных чисел
Д:	вещественных положительных чисел

Задание 4.3. Математической моделью скорости химической реакции является:

А:	алгебраическое уравнение
Б:	система линейных алгебраических уравнений
В:	производная концентрации реагирующих веществ по времени
Г:	вторая производная концентрации реагирующих веществ по времени
Д:	интеграл концентрации реагирующих веществ по времени

Задание 4.4. Если $C(t)$– концентрация некоторого вещества, $v(t)$– скорости химической реакции, t – время ее протекания, то данные переменные связаны соотношением:

А:	$C(t)=v'(t)$
Б:	$v(t)=C'(t)$
В:	$C(t)=\frac{v(t)}{t}$
Г:	$v(t)=\frac{C(t)}{t}$
Д:	$v(t)=\sqrt{C(t)}$

Задание 4.5. Чтобы найти скорость химической реакции в момент времени $t=a$ $(a=const)$, необходимо:

А:	решить уравнение $C(t)=a$
Б:	найти значение $C(a)$
В:	найти значение $C'(a)$
Г:	найти значение $\int_0^a C(t)dt$
Д:	найти значение $C(a)-C'(a)$

Задание 4.6. Концентрация сахарозы в момент времени t задается формулой $f(t)=e^{-0,035t}$. Тогда скорость изменения концентрации сахарозы равна:

А	Б	В	Г	Д
$v(t)=0,035e^{-0,035t}$	$v(t)=-0,035e^{-0,035t}$	$v(t)=-te^{-0,035t}$	$v(t)=-e^{-0,035t}$	$v(t)=e^{-0,035t}$

Задание 4.7. Пусть количество вещества, вступившего, в химическую реакцию задается зависимостью $p(t)=\frac{t^2}{2}+3t-3$, где t – время. Скорость реакции через 3 секунды после ее начала равна:

А	Б	В	Г	Д
3 моль/с	6 моль/с	9 моль/с	10,5 моль/с	12 моль/с

Задание 4.8. Дрожжи растут в сахарном растворе так, что их масса увеличивается и задается формулой $m(t)=1{,}03^t$. Скорость изменения массы при $t=1$ час:

А	Б	В	Г	Д
1,0304 г/час	1,03 г/час	0,304 г/час	0,0304 г/час	0,00304 г/час

Задание 4.9. Разложение некоторого химического вещества происходит по закону $m(t)=m_0e^{-kt}$, где $m(t)$ – масса вещества (в г) в момент времени t (в с), m_0 – начальная масса, k – некоторая постоянная. Найдите скорость распада в момент $t=8$с равна:

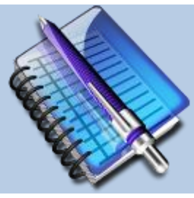
А	Б	В	Г	Д
$v=-km_0e^{-8k}$	$v=km_0e^{-8k}$	$v=-m_0e^{-8k}$	$v=m_0e^{-8k}$	$v=-ke^{-8k}$

Задание 4.10. Установите соответствие между концентрациями веществ, вступивших в химические реакции, и скоростью их протекания:

1	$C(t)=10e^{-2t}$	**А**	$v(t)=0,02e^{-0,004t}$
2	$C(t)=5\left(2-e^{-0,004t}\right)$	**Б**	$v(t)=-20e^{-2t}$
3	$C(t)=t^2-3t-4$	**В**	$v(t)=2t-3$
4	$C(t)=5(0,5)^{0,1t}$	**Г**	$v(t)=\ln\sqrt{0,5}\cdot 0,5^{0,1t}$
		Д	$v(t)=\ln\sqrt{0,5}\cdot 0,5^{0,1t+1}$

Задание 4.11. Масса вещества $m(t)$, образованного при некоторой химической реакции за время t, определяется формулой $m(t)=2\left(7-3e^{-0,001t}\right)$. Установите соответствие между временем протекания химической реакции и скоростью изменения массы в данный момент времени:

1	$t=1$ с	**А**	0,005982 г/с
2	$t=2$ с	**Б**	0,005988 г/с
3	$t=3$ с	**В**	0,00594 г/с
4	$t=4$ с	**Г**	0,00597606 г/с
		Д	0,00597006 г/с



Решите задачи самостоятельно

Задача 4.2. Масса вещества $m(t)$, образованного при некоторой химической реакции за время t, определяется формулой $m(t)=a\left(1+be^{-kt}\right)$, где a, b, k – некоторые постоянные. Определите скорость реакции и выразите ее как функцию массы m.

Задача 4.3. Найти скорость химической реакции в момент времени t = 7 сек, если концентрация исходного продукта меняется по закону $C(t) = -1{,}2e^{-0{,}005t}$.

Задача 4.4. Дрожжи растут в сахарном растворе так, что их масса увеличивается на 3% каждый час. Определите массу дрожжей через t часов, если ее начальное значение равно 1 г. Найдите скорость изменения массы при: а) $t = 1$ час; б) $t = 2$ часа; в) $t = 5$ часов.

Задача 4.5. Дрожжи растут в сахарном растворе так, что их масса увеличивается на 3% каждый час. Найдите скорость изменения массы при: $t = 5$ часов.

Задача 4.6. Закон изменения объема азота в сосуде в зависимости от времени описывается формулой $x = 10\left(4 - e^{-0{,}05t}\right)$, где x – объем азота (в литрах), t – время (в секундах). Найдите скорость изменения объема в каждый момент времени t, в момент $t = 10$ с.

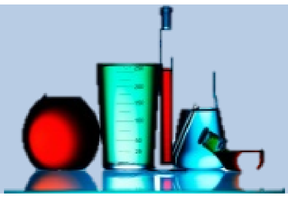
Задача 4.7. Закон изменения объема азота в сосуде в зависимости от времени описывается формулой $x = 10\left(4 - e^{-0{,}05t}\right)$, где x – объем азота (в литрах), t – время (в секундах). Какой была начальная скорость изменения объема азота в сосуде?

Задача 4.8. Закон изменения объема азота в сосуде в зависимости от времени описывается формулой $x = 10\left(4 - e^{-0{,}05t}\right)$, где x – объем азота (в литрах), t – время (в секундах). Через сколько секунд скорость изменения объема будет равняться $\dfrac{1}{2e^2}$ л/с?

Задача 4.9. Концентрация сахарозы (выраженная в моль/л) в момент времени t (в минутах) задается формулой $f(t) = e^{-0{,}0035t}$, где $t \geq 0$. Исследуйте функцию $f(t)$ и постройте ее график в прямоугольной системе координат, выбрав следующие единицы измерения: 1 см для 20 мин на оси абсцисс, 1 см для 0,1 моль/л на оси ординат. Определите время, необходимое для того, чтобы концентрация достигла половины своего начального значения. Подтвердите результат графически.

Задача 4.10. Дрожжи растут в сахарном растворе так, что их масса увеличивается на 3% каждый час. Определите приближенное значение массы дрожжей через 10 минут, если ее начальное значение равно 1 г.

Задача 4.11. Зависимость между количеством x вещества, получаемого в некоторой химической реакции, и временем t выражается уравнением $x = A\left(1 + e^{-kt}\right)$. Определите скорость реакции в момент времени t.



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 4.12. Газовая смесь состоит из окиси азота (NO) и кислорода (O_2). Найти концентрацию O_2, при которой содержащаяся в смеси окись азота окисляется с наибольшей скоростью.

Опорные знания по химии

Скорость химической реакции – это величина, показывающая как изменяются концентрации исходных веществ или продуктов реакции за единицу времени.

Для реакции вида $a\mathrm{A} + b\mathrm{B} \rightarrow m\mathrm{M} + n\mathrm{N}$ математическое выражение **закона действующих масс** имеет вид:

$$v = k \cdot x^a \cdot y^b,$$

где v – скорость реакции; k – коэффициент пропорциональности, называемый константой скорости химической реакции; x и y – концентрации реагентов А и В; a и b – стехиометрические коэффициенты в уравнении реакции.

Реакция соединения NO с O_2 ведет к образованию двуокиси азота по уравнению: $2NO + O_2 = 2NO_2$.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Пусть x % – концентрация NOв любой момент времени, y % – концентрация O_2в любой момент времени; v– скорость химической реакции.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Так как по условию $x + y = 100\%$, то $y = 100 - x$.

Поскольку x и y – концентрации веществ в объемных процентах, то они могут принимать значения от 0 до 100.

Скорость реакции $2NO + O_2 = 2NO_2$ выражается формулой $v = k \cdot x^2 \cdot y$, где x – концентрация окиси азота, y – концентрация кислорода, а k – константа, зависящая от температуры.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Найти концентрацию кислорода x, при которой скорость химической реакции максимальна.

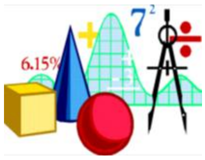
4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

Так как скорость химической реакции $2NO + O_2 = 2NO_2$ выражается формулой $v = k \cdot x^2 \cdot y$, то, подставив в нее введенные переменные, получим:

$$v(x) = k \cdot x^2 \cdot (100 - x) = k \cdot (100x^2 - x^3). \qquad (4.1)$$

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Найти значение x при котором функция $v(x) = k(100x^2 - x^3)$ принимает максимальное значение.



Опорные знания по математике

1. Формулы для нахождение производной степенной функции.
2. Необходимое и достаточное условие экстремума функции одной переменной.
3. Алгоритм исследования функции на экстремум.

Выполняем математические действия

1. Найдем производную функции (4.1):

$$v'(x) = k \cdot (200x - 3x^2) = k \cdot x \cdot (200 - 3x).$$

2. Приравнивая нулю найденную производную, получаем уравнение:

$$k \cdot x \cdot (200 - 3x) = 0,$$

из которого находим критические точки $x_1 = 0$ и $x_2 = \dfrac{200}{3} \approx 66{,}7$.

3. Воспользуемся первым достаточным условием: при переходе через критическую точку $x = 66{,}7$ слева направо производная функции $v'(x)$ изменила знак с "+" на "–". Значит в точке $x = 66{,}7$ функция $v(x)$ достигает своего максимального значения (см рис. 4.2).

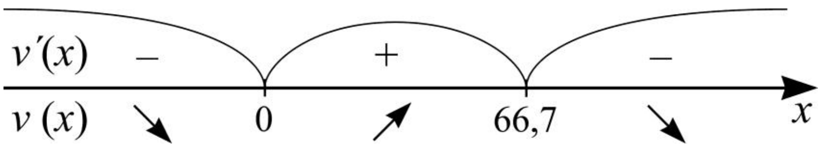


Рисунок 4.2 – Исследование функции $v(x)$ на экстремум

4. Так как $x = 66{,}7$, то $y = 100 - 66{,}7 = 33{,}3$.

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Концентрация кислорода в смеси, при которой окись азота окисляется с наибольшей скоростью, составляет $33{,}3\%$.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Графическое исследование задачи 4.2 можно реализовать с помощью педагогического программного средства *Gran-1*. Данная программа позволяет строить графики функции с параметром.

В окне программы в пункте *Объект* главного меню выбираем опцию *Создать*. В появившемся окне в поле ввода записываем P1*(100*x^2-x^3), где P1 – параметр, значение которого можно вводить (подбирать) отдельно. Также в этом окне вводим граничные значения, которые может принимать переменная *x* (A = 0, B = 100) и нажимаем кнопку *OK*.

Затем в пункте главного меню *График* выбираем команду *Построить*. В результате чего на рабочей области появится график исследуемой функции (если график не виден, то следует подобрать необходимый масштаб с помощью кнопок его увеличения и уменьшения).

В окне *Список объектов* в поле ввода рядом с параметром P1 можно задавать любые значения, например, 0,9; 1; 5 и т.д. В зависимости от введенных значений параметра P1 график функции будет меняться.

Чтобы определить при каких значениях ординаты построенный график достигает своего наибольшего значения, следует навести мышью на его максимальную вершину и в верхнем левом углу увидеть ее координаты (рис. 4.3).

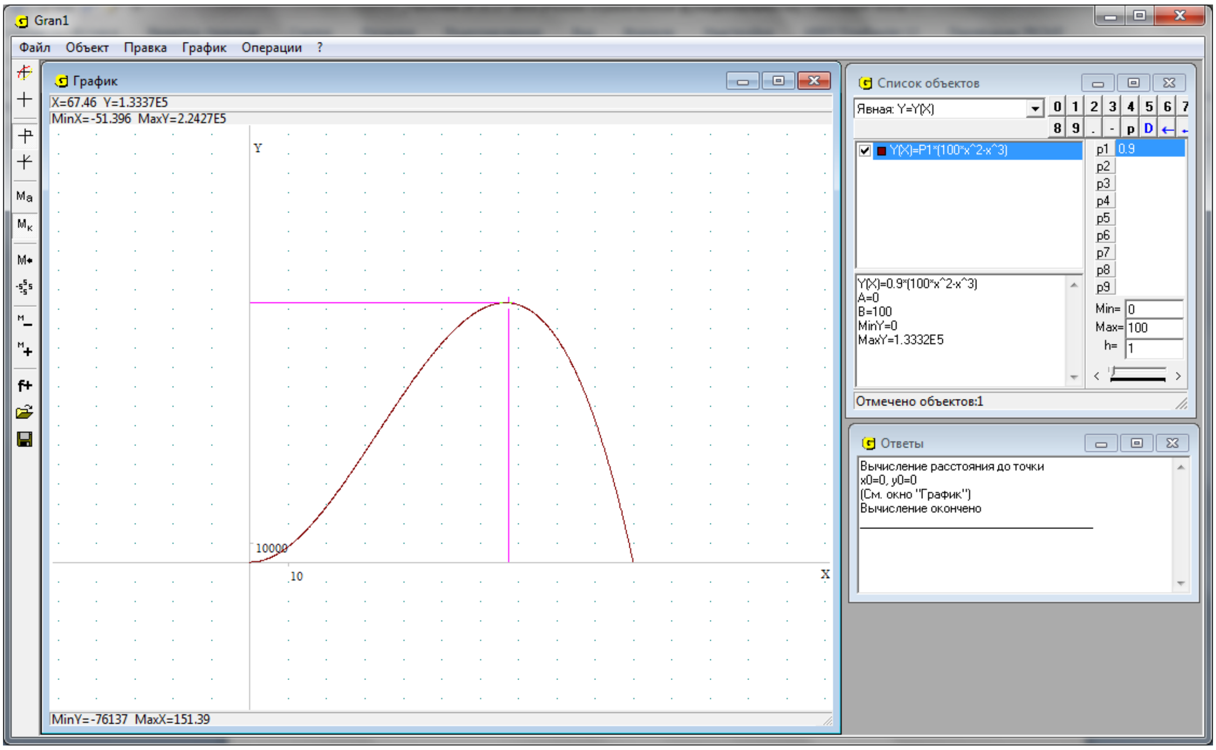


Рисунок 4.3 – Результат построения и исследования функции с помощью педагогического программного средства *Gran-1*

Следует отметить, что рассмотренное исследование функции дает не точный результат. Численное решение задачи 4.2 можно выполнить с помощью программы *MicrosoftMathematics*.

Для этого нажимаем кнопку *Производная функции*, расположенной на *Панели калькулятора* в группе *Вычисления* и в поле ввода набираем: $deriv\left(k\left(100x^2 - x^3\right), x\right)$. Нажимаем кнопку *Ввод*.

Чтобы найти значение полученной производной, в поле ввода набираем выражение $k\left(200x - 3x^2\right) = 0$ и нажимаем кнопку *Ввод*. В результате на *Листе* появится решение этого уравнения. Причем, при нажатии на «+», стоящий рядом с надписями «*Шаги решения с использованием формулы квадратного уравнения*» или «*Шаги решения для дополнения до полного квадрата*», можно ознакомиться с подробным пошаговым решение уравнения (рис. 4.4).

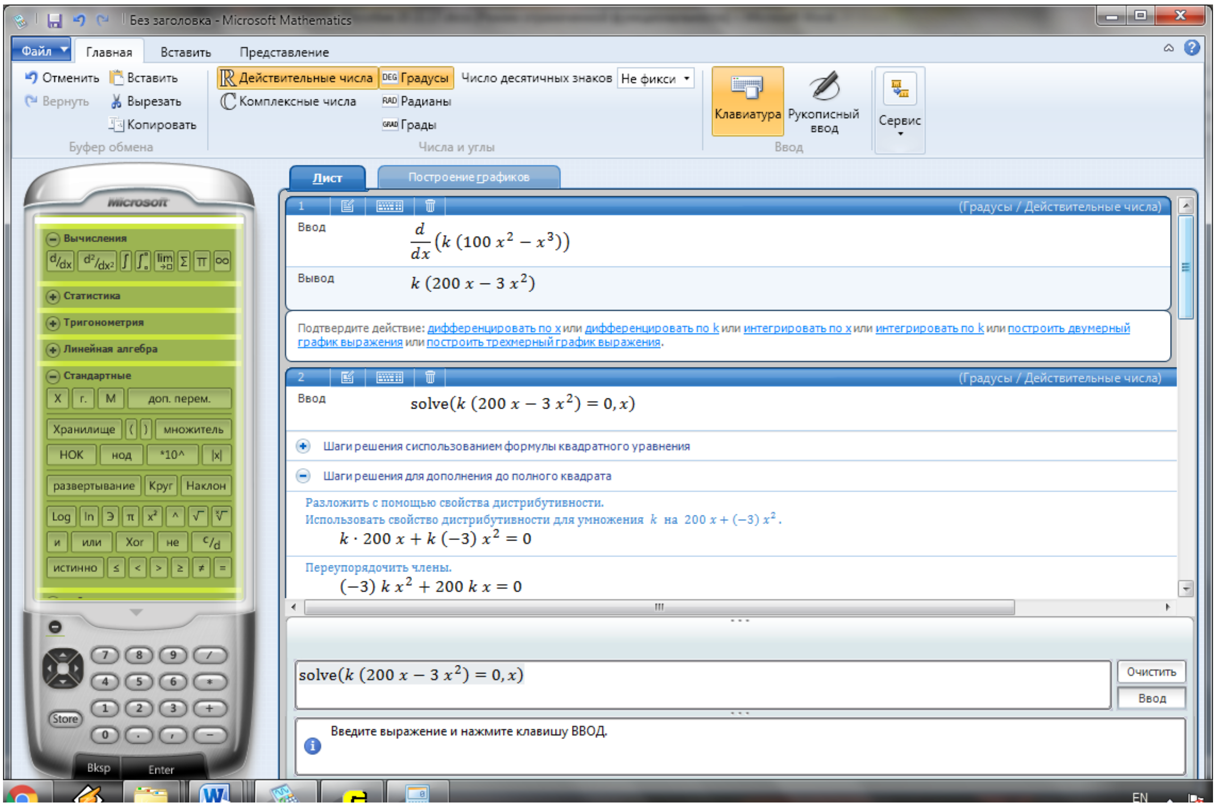


Рисунок 4.4 – Результат нахождения производной и вычисление ее значение в заданной точке с помощью приложения *MicrosoftMathematics*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 4.12. Если v – скорость реакции; k – константа скорости химической реакции; x и y – концентрации реагентов А и В; a и b – стехиометрические коэффициенты в уравнении реакции, то для реакции вида $a\text{A} + b\text{B} \to m\text{M} + n\text{N}$ математическое выражение закона действующих масс имеет вид:

А:	$v = k \cdot a^x \cdot b^y$
Б:	$v = k \cdot x^a \cdot y^b$
В:	$v = k \cdot x^b \cdot y^a$
Г:	$v = k \cdot \left(x^a + y^b\right)$
Д:	$v = k + x^a \cdot y^b$

Задание 4.13. Скоростью химической реакции называется:

А:	изменение концентрации реагирующих веществ в единицу времени
Б:	изменение количества молекул в единицу времени
В:	изменение температуры протекания реакции в единицу времени
Г:	изменение объема в единицу времени
Д:	изменение количества реагентов в единицу времени

Задание 4.14. Пусть в реакции участвуют два вещества с концентрациями в объемных процентах соответственно x и y. Тогда переменные x и y связаны соотношением:

А:	$x = y - 100$
Б:	$x = 100 \cdot y$
В:	$x = 100 + y$
Г:	$x = 100 - y$
Д:	$x = 100 : y$

Задание 4.15. Критические точки функции – это точки, в которых

А:	функция равна нулю
Б:	функция не существует
В:	производная функции не равна нулю
Г:	производная функции существует
Д:	производная функции равна нулю или не существует

Задание 4.16. Пусть функция $f(x)$ определена и дифференцируема в некоторой окрестности точки x_0, кроме, быть может, самой точки x_0 и непрерывна в этой точке и x_0 - критическая точка функции. Тогда, если производная $f'(x)$ меняет знак с «+» на «–» при переходе слева на право через точку x_0, то x_0 – это:

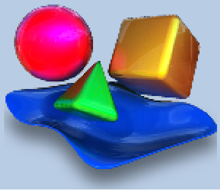
А:	точка минимума функции $f(x)$
Б:	точка максимума функции $f(x)$
В:	точка выпуклости функции $f(x)$
Г:	точка вогнутости функции $f(x)$
Д:	ноль функции $f(x)$

Задание 4.17. Установите соответствие между функциями и их критическими точками:

1	$y=x^5-5x$	**А**	– 1
2	$y=x^2+\dfrac{2}{x}$	**Б**	– 1; 1
3	$y=e^{x^2+2x}$	**В**	– 1; 0; 1
4	$y=\sqrt{1-x^2}$	**Г**	0; 1
		Д	0; 2

Задание 4.18. Установите соответствие между производными функций и точками максимума соответствующих им функций:

1	$y'=x(x+2)(x-4)$	**А**	– 1
2	$y'=x(x+2)(4-x)$	**Б**	0
3	$y'=(1-x)(x+1)^2$	**В**	1
4	$y=(x^2-1)e^{x^2-2x+3}$	**Г**	– 2; 4
		Д	– 1; 1



Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 4.19. Укажите количество переменных, которые нужно ввести, для составления кинетического уравнения реакции N_2+$3H_2$= $2NH_3$:

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
ноль	одну	две	три	четыре

Задание 4.20. Запишите кинетическое уравнение для химической реакции $2SO_2 + O_2 = 2SO_3$:

А:	$v = k[SO_2]^2 \cdot [O_2]$
Б:	$v = k[SO_2] \cdot [O_2]$
В:	$v = k[SO_2] \cdot [O_2]^2$
Г:	$v = [SO_2]^2 \cdot [O_2]$
Д:	$v = [SO_2] \cdot [O_2]$

Задание 4.21. Химическая реакция протекает согласно уравнению $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$. Концентрации веществ ровны [N2] = 0,015 моль/л; [H2] = 0,025 моль/л. Во сколько раз возрастет скорость реакции, если концентрации веществ возрастут до [N2] = 0,03 моль/л; [H2] = 0,05 моль/л?

А	Б	В	Г	Д
в 0,0946 раз	в 0,5436 раз	в 3,946 раза	в 0,3946 раз	в 0,03946 раз

Задание 4.22. Химическая реакция протекает согласно уравнению $2CO + O_2 = 2CO_2$. Укажите концентрацию кислорода, при которой содержащаяся в смеси окись углерода окисляется с наибольшей скоростью:

А	Б	В	Г	Д
33,3	66,4	44,4	55,6	50

Задание 4.23. Установите соответствие между химическими реакциями и их кинетическими уравнениями, если *x* – концентрация первого реагента, *y* – второго:

1	$2NO + Br_2 = 2NOBr_2$	**А**	$v = kxy$
2	$3A + B = 2C$	**Б**	$v = kx$
3	$H_2 + J_2 = 2HJ$	**В**	$v = kx^2y^2$
4	$2HI = H_2 + I_2$	**Г**	$v = kx^2y$
		Д	$v = kx^3y$

Решите задачи самостоятельно

Задача 4.13. При автокаталнтнческой реакции скорость образования некоторого вещества пропорциональна произведению концентраций исходного вещества A и продукта реакции B. При каком количестве исходного вещества A скорость образования продукта реакции начинает убывать?

Задача 4.14. В химической реакции участвуют два вещества с концентрациями xиy(в объёмных процентах). Скорость реакции (в любой момент времени) выражается по закону $v = 7xy^4$. Найдите концентрации xиy этих веществ, при которых скорость этой химической реакции будет наибольшей.

Задача 4.15. Газ, содержащий окись азота, смешивается с воздухом. Определите, при каком содержании кислорода (в %) в полученной смеси скорость окисления азота максимальна и какой объем добавляемого к газу воздуха обеспечивает это количество кислорода в смеси.

Задача 4.16. Пусть газ, состоящий из оксида азота и инертного газа, смешивается с воздухом, концентрация кислорода в котором составляет 20,8%. Определите какой объем воздуха необходимо добавить к объему оксида азота, чтобы обеспечить максимальную скорость окисления последнего.

Задача 4.17. Пусть в газовой смеси, помимо оксида азота и кислорода, содержатся и другие компоненты, не принимающие участия в химической реакции (инертные вещества). Определите, при каком стехиометрическом отношении x : y скорость окисления, протекающего по формуле $v = k\left(100x^2 - x^3\right)$ будет максимальной.

Задача 4.18. При какой кислотности сумма гидроген-ионов H^+ и гидроксид-ионов OH^- в единице объема воды будет наименьшей?

Задача 4.19. Требуется изготовить прямоугольный сосуд из прямоугольника, вырезав его углы и загнув края, причем объем сосуда должен быть максимальным. Какой должна быть высота загнутого края, если a и b – стороны прямоугольника?

Задача 4.20. Требуется вырезать из круга радиуса 1 см сектор так, чтобы из него можно было сделать конусообразный фильтр с максимальным объемом. Каким должен быть центральный угол такого сектора?

5. ИНТЕГРАЛЬНОЕ ИСЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

В химии и химической технологии иногда возникают задачи, когда необходимо найти функциональную зависимость между двумя величинами, для которых бесконечно малые изменения одной из них приводят к бесконечно малым изменениям другой. Именно для решения таких задач и используется интегральное исчисление.

Также интегральное исчисление применяется при решении кинетических уравнений, при расчете изменений термодинамических функций, например, теплового эффекта при нагревании, при расчете средних значений физических величин в квантовой химии и др.

Приведем примеры некоторых формул и законов, применяемых в химии, содержащие интегралы:

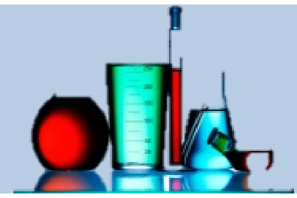
1)*средняя теплоемкость* в интервале температур от T_1 до T_2: $\bar{C}_p = \frac{1}{T_2 - T_1} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C(T)dT$, где C– истинная теплоемкость;

2)*тепло, расходуемое на нагревание тела* от T_1 до T_2: $q = \int_{T_1}^{T_2} C(T)dT$, где $C(T)$ – истинная теплоемкость;

3)*изменение энтропии* $\Delta S = n\int_{T_1}^{T_2} C_p \frac{dT}{T}$, где n – число молей нагреваемого тела от T_1 до T_2;

4)*изменение энергии Гиббса*: $\Delta G = \int_{P_1}^{P_2} V(P)dP$ и др.

Рассмотрим некоторые примеры применения интегрального исчисления функции одной переменной при решении профессионально ориентированных задач по химии.



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 5.1. Определите количество тепла, необходимое для нагревания железного котла массой 20 кг от 20 до 100 °С, если теплоемкость железа в этом температурном интервале определяется формулой $C = 0,441207 + 0,00059498T$.

Опорные знания по химии

Теплоемкость – это производная от количества тепла q, получаемого телом, по температуре: $C(T) = \frac{dq}{dT}$.

Количество теплоты, необходимое для нагревания тела, выражается формулой $q = \int_{T_1}^{T_2} C(T)dT$, где T_1 и T_2 – температуры, $C(T)$ – истинная теплоемкость.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Обозначим q – количество теплоты; T_1 – начальная температура, T_2 – конечная температура плавления, $C(T)$ – истинная теплоемкость тела (функция от времени).

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Переменная q (количество теплоты) может принимать как положительные значения (например, при нагревании, плавлении, испарении), так и отрицательные значения (например, при охлаждении, кристаллизации, конденсации).

Температуры: $T_1 = 20^o C$, $T_2 = 100^o C$.

3) *Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.*

Найти значение количества теплоты, необходимое для нагревания железного котла, при заданных значениях начальной и конечной температур, веса котла и уравнении теплоемкости.

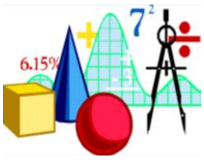
4) *Составить соотношения, связывающие введенные переменные.*

Поскольку теплоемкость является производной количества тепла qпо температуре, то количество тепла, необходимое для нагревания тела выражается формулой

$$q = \int_{T_1}^{T_2} C(T)dT = \int_{20}^{100} (0,441207 + 0,00059498T)dT\ .$$

5) *Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.*

Вычислить интеграл функции $C = 0,441207 + 0,00059498T$ в пределах интегрирования от 20 до 100.



Опорные знания по математике

1. Формула Ньютона-Лейбница.
2. Таблица первообразных.

Выполняем математические действия

С помощью формулы Ньютона-Лейбница вычислим интеграл:

$$q = \int_{20}^{100} (0,441207 + 0,00059498T)dT = \left(0,441207T + 0,00059498 \cdot \frac{1}{2} T^2\right)\Bigg|_{20}^{100} =$$

$$= \left(0,441207 \cdot 100 + 0,00059498 \cdot \frac{1}{2} \cdot 100^2\right) - \left(0,441207 \cdot 20 + 0,00059498 \cdot \frac{1}{2} \cdot 20^2\right) =$$

$$= (47,1207 + 2,9749) - (8,82414 + 0,118996) = 47,0956 - 8,943136 =$$

$$= 38,152464\,.$$

То есть для нагревания 1 кг железа в интервале температур от 20 до 100 ^{o}C необходимо затратить 38,152464 кДж.

Тогда для нагревания 20 кг железа необходимо затратить:

$$20\cdot 38{,}152464=763{,}04928 \text{ кДж.}$$

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Итак, для нагревания железного котла необходимо приблизительно 763 кДж.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Для вычисления интеграла в задаче 5.1 с помощью средств ИКТ воспользуемся программой *Калькулятор OpenedSourceAlgorithms* (*OSA Beta*).

Для этого следует во вкладке *Вычисление* главного меню программы выбрать пункт *Численное интегрирование*. Затем в верхней части экрана в поля ввода необходимо ввести следующие данные:

1) в поле *Задайте функцию* $F(x)$ вводим 20*(0.441207+0.00059498*x);
2) *Пределы интегрирования* А и В задаем 20 и 100 соответственно;
3) выбрать метод интегрирования, например, *Метод Симпсона*.

После нажатия кнопки *Вычислить*, программы выведен на экран результат интегрирования с промежуточными вычислениями (рис. 5.1).

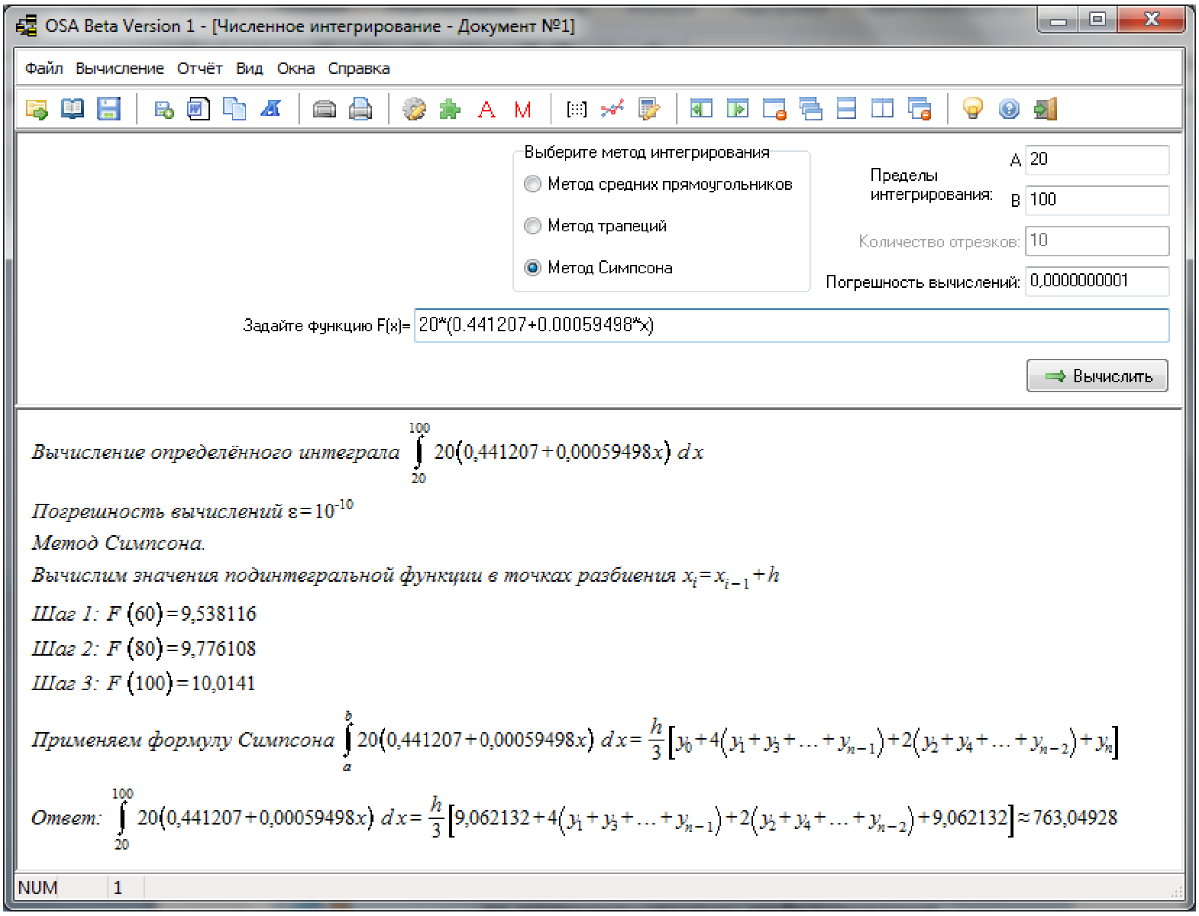


Рисунок 5.1 – Вычисление интеграла для задачи 5.1
с помощью программы *OSA Beta*

Задача 5.2. Определите значение средней молярной теплоемкости аммиака в интервале температур от 250 до 350 К, если истинная теплоемкость выражается уравнением: $C = 24{,}78 + 37{,}52 \cdot 10^{-3} T - 7{,}38 \cdot 10^{-6} T^2$ Дж/(моль·К).

Опорные знания по химии

Средняя теплоемкость $\overline{C}$ выражается уравнением $\overline{C} = \dfrac{1}{T_1 - T_2}\displaystyle\int_{T_1}^{T_2} C dT$, где C– истинная теплоемкость, T_1 и T_2– интервал температур.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Введем обозначения: T_1 – начальная температура, T_2 – конечная температура, C – истинная теплоемкость, $\overline{C}$ – средняя теплоемкость.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Значения C и $\overline{C}$ могут принимать как положительные значения (например, при нагревании), так и отрицательные значения (например, при охлаждении системы).

Температуры принимают значения $T_1 = 250$ К и $T_2 = 350$ К.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Найти значение средней теплоемкости при заданных значениях начальной и конечной температур и уравнении истинной теплоемкости.

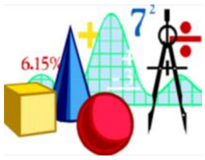
4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

Так как средняя теплоемкость задается формулой $\overline{C} = \frac{1}{T_1 - T_2}\int_{T_1}^{T_2} CdT$, то в условиях задачи получим:

$$\overline{C} = \frac{1}{350-250}\int_{250}^{350}\left(24,78 + 37,52\cdot 10^{-3}T - 7,38\cdot 10^{-6}T^2\right)dT \qquad (5.1)$$

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Вычислить значение переменной $\overline{C}$, заданной формулой (5.1).



Опорные знания по математике

1. Формула Ньютона-Лейбница.
2. Таблица первообразных.

Выполняем математические действия

С помощью формулы Ньютона-Лейбница вычислим интеграл (5.1):

$$\overline{C}_p = \frac{1}{350-250}\int\limits_{250}^{350}\left(24,78+37,52\cdot 10^{-3}T-7,38\cdot 10^{-6}T^2\right)dT =$$

$$\frac{1}{350-250}\left[4,78(350-250)+\frac{37,52\cdot 10^{-3}}{2}\left(350^2-250^2\right)-\right.$$

$$\left.-2\frac{7,38\cdot 10^{-6}}{3}\left(350^3-250^3\right)\right]=$$

$$=24,78+18,76\cdot 10^{-3}(350-250)-2,46\cdot 10^{-6}\left(350^2+350\cdot 250+250^2\right)=$$

$$=35,37.$$

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Таки образом, средняя молярная теплоемкость аммиака (с заданными условиями) равна $35,37$ Дж/(моль·К).

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Педагогическое программное средство *Gran-2D* также позволяет выполнять вычисление определенных интегралов.

В пункте *Вычисления* главного меню программы выбираем опцию *Интеграл*. Появится окно вычислений, состоящее из трех вкладок: *Значение выражения*, *Интеграл*, *Производная*. На вкладке *Интеграл* в поле ввода набираем значение:

24.78+37.52*10^(-3)*x-7.38*10^(-6)*x^2

и пределы интегрирования:

$$a = 250 \text{ и } b = 350.$$

Нажимаем кнопку *Вычислить*, в результате чего в поле *Результат вычислений* появится значение *3536.565* (рис 5.2).

Чтобы найти среднюю теплоемкость аммиака нужно найденное значение 3536,565 умножить на $\frac{1}{350-250} = \frac{1}{100}$. Получим 35,36565 или 35,37.

Также для этих вычислений можно воспользоваться программой *Gran-2D*. Для этого в пункте *Вычисления* главного меню программы выбираем опцию *Значение выражения* и в поле ввода набираем выражение:

3536.565*1/(350-250).

После нажатия на кнопку *Вычислить* программа выведет на экран результат *35.36565* (рис 5.2).

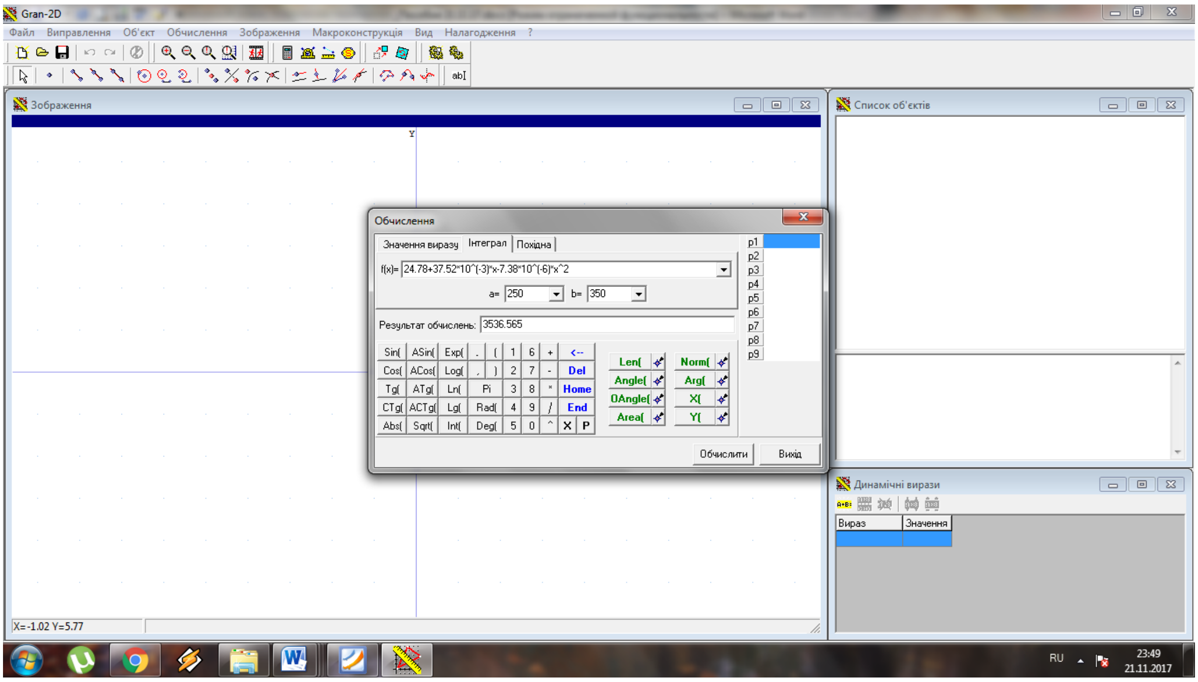


Рисунок 5.2 – Вычисление интеграла для задачи 5.2
с помощью педагогического программного средства *Gran-2D*

Задача 5.3. Вычислите изменение энергии Гиббса, сопровождающее сжатие 7 г азота при 300 К от 50660 Па до 303975 Па.

Опорные знания по химии

Изменение энергии Гиббса определяется формулой $\Delta G = \int\limits_{P_1}^{P_2} V(P)dP$, где P_1 и P_2 – интервал давлений, $V(P)$ – объем.

Для идеального газа имеет место **уравнение Клапейрона-Менделеева** $PV = nRT$, где P – давление, V – молярный объем, T – температура, R – универсальная газовая постоянная (R= 8,314 Дж/моль·К), n – количество моль газа.

Число моль вещества вычисляется по формуле $n = \frac{m}{M}$, где m – масса вещества, M – молярная масса вещества.

Молярная масса– это масса, приходящаяся на один моль данного вещества.

Молярная масса азота равна $M(N) = 14$ г/моль.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Обозначим m – масса азота, P_1 – начальное давление, P_2 – конечное давление, ΔG – изменение энергии Гиббса, T – температура.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Переменные m, T, P_1 и P_2 принимают числовые значения: $m = 7$, $T = 300$, $P_1 = 50660$, P_2=303975.

Переменная ΔG может принимать значения из множества действительных чисел (энергия Гиббса может быть положительной, отрицательной и равной нулю).

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Найти значение изменения энергии Гиббса при заданных значениях начального и конечного давлений, температуры и массы вещества.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

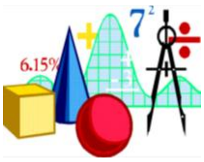
Так как изменение энергии Гиббса задается формулой $\Delta G = \int\limits_{P_1}^{P_2} V(P)dP$, то согласно условию задачи получим:

$$\Delta G = \int\limits_{50660}^{303975} V(P)dP, \tag{5.2}$$

где $V(P)$ – функция изменения объема.

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Вычислить интеграл функции $V(P)$ в пределах интегрирования от 20660 до 303975.



Опорные знания по математике

1. Формула Ньютона-Лейбница.
2. Таблица первообразных.

Выполняем математические действия

1. Определим функцию $V(P)$: принимая, что азот – идеальный газ, то согласно уравнению Клапейрона-Менделеева имеем:

$$V = \frac{nRT}{P}.$$

Так как температура T постоянна ($T = 300$), R – газовая постоянная (R = 8,314), n – число моль газа, то функция V зависит только от объема P.

2. Количество моль азота найдем по формуле $n = \frac{m}{M}$, где m – масса вещества ($m = 7$), M – молярная масса вещества $M(N) = 14$. Таким образом:

$$n = \frac{7}{14} = \frac{1}{2}\text{ моль.}$$

3. Подставив все значения в интеграл (5.2) получим:

$$\Delta G = nRT\int_{50660}^{303975}\frac{dP}{P} = \frac{1}{2}\cdot 8{,}314\cdot 300\cdot \ln P\Big|_{50660}^{303975} =$$

$$= 1247{,}1\cdot \ln\frac{303975}{50660} \approx 2234{,}56.$$

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Таки образом, изменение энергии Гиббса равно 2234,56 Дж.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Исследование и анализ задачи 5.3 можно произвести с помощью программы *Advanced Grapher*.

Прежде чем вычислить интеграл необходимо построить график интегрируемой функции. Для этого на панели инструментов нажимаем кнопку *Добавить график* и в появившемся окне вводим следующие данные:

1) на вкладке *Свойства* в графе *Формула* набираем *(0.5*8.314*300)/x*;

2) на вкладке *Свойства* также можно выбрать графическое оформление графика (толщина, цвет, стиль и т.п.);
3) на вкладке *Доп.свойства* ставим галочку возле пункта *Интервал* и, в появившихся доступными для редактирования полях *Минимум X* и *Максимум X*, вводим 50660 и 303975 соответственно.

По нажатию кнопки *ОК* программа построит график функции (рис 5.3).

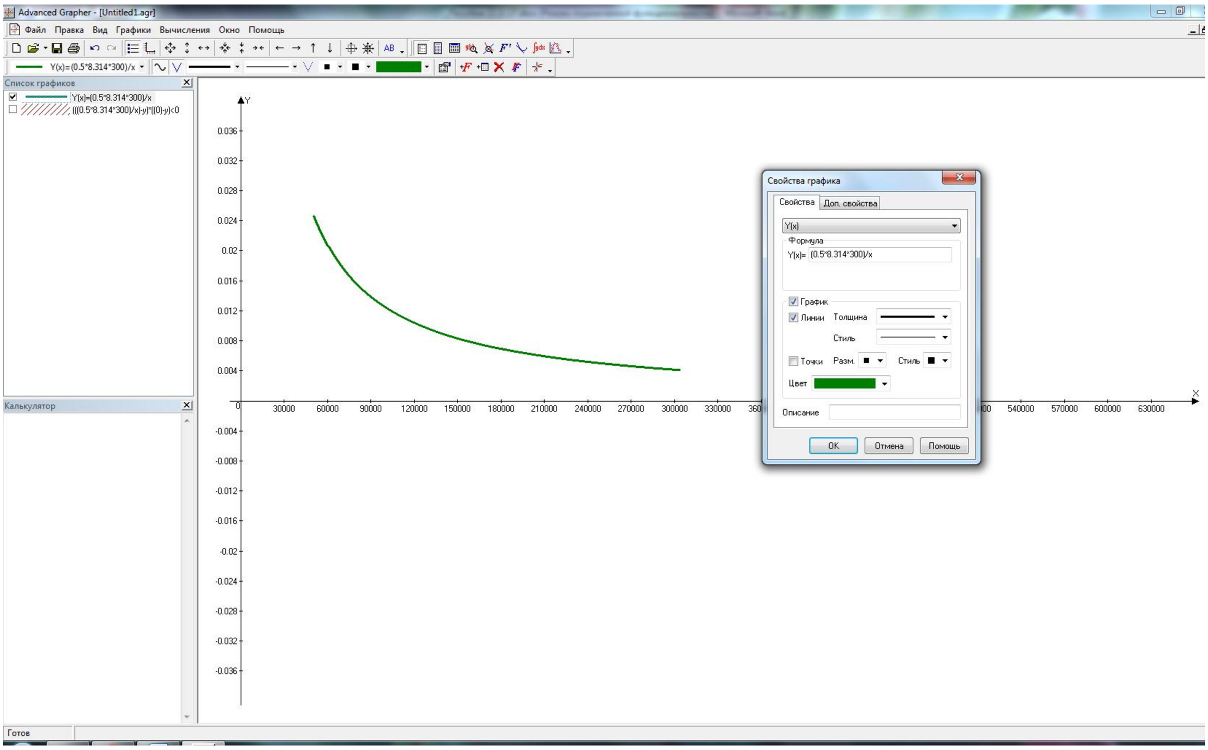


Рисунок 5.3 – Построение графика с помощью программы *Advanced Grapher*

Следует заметить, что при стандартных настройках программы, график на экране сначала не виден. Но с помощью кнопок изменения масштаба главного меню  можно настроить корректное расположение графика функции на экране.

Программа *Advanced Grapher* также позволяет производить целочисленное интегрирование и строить результата. В главном меню программы в пункте *Вычисления* выбираем подпункт *Интегрирование…*.

Затем в разделе *Параметры*:

- в качестве первого графика выбираем уже созданный и построенный график *(0.5*8.314*300)/x*;
- в качестве второго графика выбираем *0*;
- вводим пределы интегрирования для *Минимум X* и *Максимум X* – 50660 и 303975 соответственно.

По нажатию на кнопку *ОК* программа выдает результат (рис. 5.4).

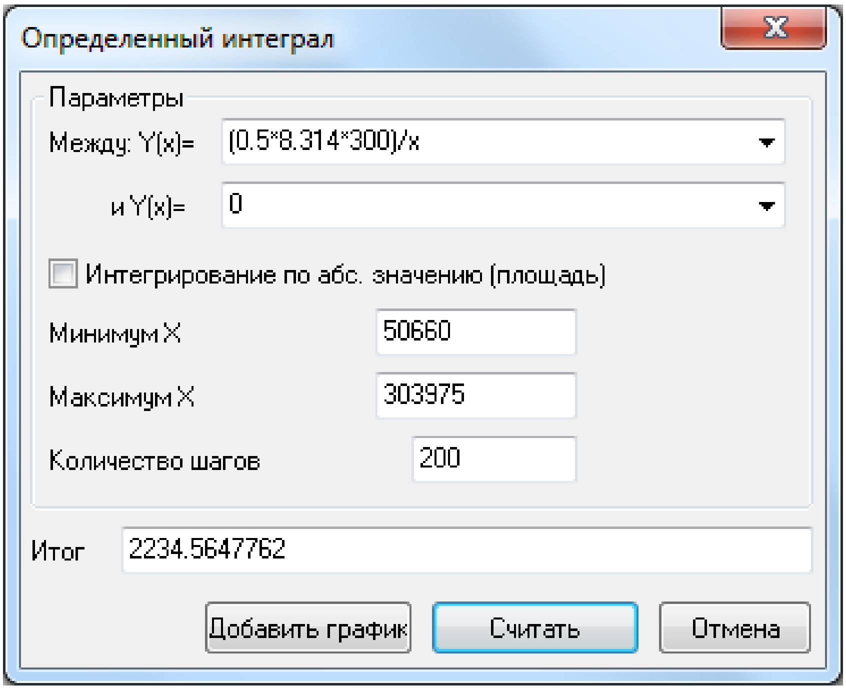


Рисунок 5.3 – Вычисление интеграла
с помощью программы *Advanced Grapher*

Для графической интерпретации рассмотренных выше вычислений можно воспользоваться кнопкой *Добавить график*, находящейся в окне вычисления интеграла *Определенный интеграл* (рис. 5.3). По нажатию на эту кнопку в появившемся окне *Добавить график* ввести параметры и выбрать свойства графика (рассмотрено выше). В результате программа (по нажатию на кнопку ОК) построит график, отображающий площадь криволинейной трапеции (рис 5.4).

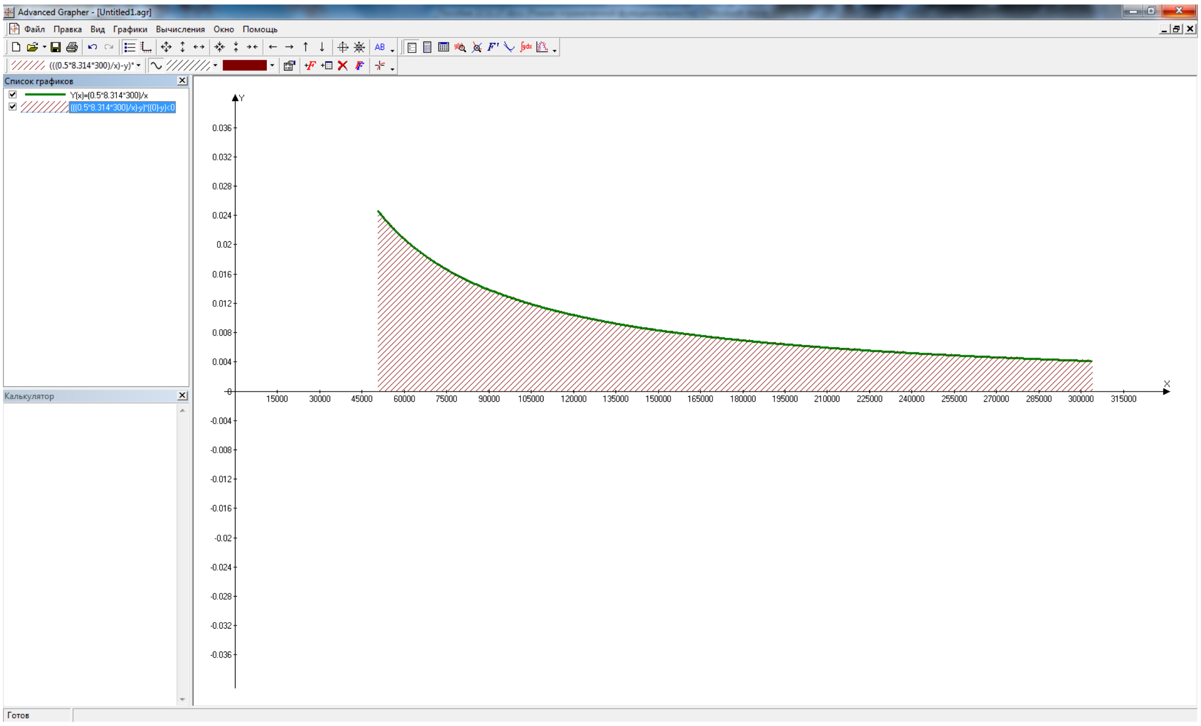


Рисунок 5.3 – Вычисление интеграла
с помощью программы *Advanced Grapher*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 5.1. Функцией в формуле $q = \int_{T_1}^{T_2} CdT$, где q – количество теплоты, T_1 и T_2 – температуры, C – истинная теплоемкость, является:

А:	q
Б:	T_1
В:	T_2
Г:	C
Д:	все переменные не являютя функциями

Задание 5.2. Переменная q, обозначающая количество теплоты, может принимать значения из множества:

А:	действительных чисел
Б:	положительных действительных чисел
В:	рациональных чисел
Г:	положительных рациональных чисел
Д:	натуральных чисел

Задание 5.3. Переменная C, обозначающая теплоемкость тела (вещества), может принимать значения:

А:	только положительные
Б:	только отрицательные
В:	и положительные и отрицательные
Г:	любые действительные
Д:	натуральные

Задание 5.4. Математическая модель связи средней теплоемкости $\bar{C}$ и истинной теплоемкости C в интервале температур от T_1 до T_2 представляет собой:

А:	$C = \frac{1}{T_2 - T_1} \cdot \int_{T_1}^{T_2} \bar{C}(T) dT$
Б:	$C = \int_{T_1}^{T_2} \bar{C}(T) dT$
В:	$\bar{C} = \frac{1}{T_2 - T_1} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C(T) dT$
Г:	$\bar{C} = \int_{T_1}^{T_2} C(T) dT$
Д:	$\bar{C} = \frac{1}{T_1 + T_2} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C(T) dT$

Задание 5.5. Математическая модель связи энтропии ΔS и истинной теплоемкости C 1 моль вещества в интервале температур от T_1 до T_2 представляет собой:

А:	$C = \int_{T_1}^{T_2} \Delta S \frac{dT}{T}$
Б:	$C = \int_{T_1}^{T_2} \Delta S dT$
В:	$\Delta S = \int_{T_1}^{T_2} C\, dC$
Г:	$\Delta S = \int_{T_1}^{T_2} C dT$
Д:	$\Delta S = \int_{T_1}^{T_2} C \frac{dT}{T}$

Задание 5.6. Математическая модель связи количества теплоты q и истинной теплоемкости C в интервале температур от T_1 до T_2 представляет собой соотношение:

А:	$q = \int_{T_1}^{T_2} C dT$
Б:	$q = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} C dT$
В:	$q = \frac{1}{T_1 + T_2} \int_{T_1}^{T_2} C dT$
Г:	$q = -\int_{T_1}^{T_2} C dT$
Д:	$q = \int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{C}$

Задание 5.7. Пусть функция $y = f(x)$ непрерывна на отрезке [a; b] и $F(x)$ – одна из первообразных функции на этом отрезке, тогда справедлива формула Ньютона-Лейбница:

А:	$\int_a^b f(x)dx = F(a) - F(b)$
Б:	$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$
В:	$\int_a^b f(x)dx = F(a) + F(b)$
Г:	$\int_a^b f(x)dx = f(a) - f(b)$
Д:	$\int_a^b f(x)dx = f(b) - f(a)$

Задание 5.8. Установите соответствие между функциями $f(x)$ и их первообразными $F(x)$:

1	$f(x) = x^2 - x + 2$	**А**	$F(x) = \frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} + 2x + C$
2	$f(x) = \frac{1}{x} - x + 2$	**Б**	$F(x) = -\frac{1}{x} - \frac{x^2}{2} + 2x + C$
3	$f(x) = \frac{1}{x^2} - x + 2$	**В**	$F(x) = \frac{4}{3}x\sqrt{x} + x + C$
4	$f(x) = 2\sqrt{x} + 1$	**Г**	$F(x) = \frac{1}{x} - \frac{x^2}{2} + 2x + C$
		Д	$F(x) = \ln x - \frac{x^2}{2} + 2x + C$

Задание 5.9. Установите соответствие между определенными интегралами (1-4) и их значениями (А-Д):

1	$\int_0^1 \left(x^2 - 4x\right)dx$	**А**	2
2	$\int_0^4 \frac{dx}{\sqrt{2x+1}}$	**Б**	-1
3	$\int_0^2 e^{\frac{x}{2}}dx$	**В**	0
4	$\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \cos x dx$	**Г**	$2e - 2$
		Д	1

Задание 5.10. Истинная молярная теплоемкость серебра в интервале температур от 273 К до 1234 К выражается уравнением $C_p(T) = 23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3}T - 0{,}25 \cdot 10^{-5}T^{-2}$. Математической моделью средней молярной теплоемкости в интервале от 298 К до 700 К является выражение:

А:	$\bar{C} = \dfrac{1}{1234-273}\int\limits_{273}^{1234}\left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3}T - 0{,}25 \cdot 10^{-5}T^{-2}\right)dT$
Б:	$\bar{C} = \dfrac{1}{700-298}\int\limits_{298}^{700}\left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3}T - 0{,}25 \cdot 10^{-5}T^{-2}\right)dT$
В:	$\bar{C} = \int\limits_{273}^{1234}\left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3}T - 0{,}25 \cdot 10^{-5}T^{-2}\right)dT$
Г:	$\bar{C} = \int\limits_{298}^{700}\left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3}T - 0{,}25 \cdot 10^{-5}T^{-2}\right)dT$
Д:	$\bar{C} = \dfrac{1}{273+1234}\int\limits_{273}^{1234}\left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3}T - 0{,}25 \cdot 10^{-5}T^{-2}\right)dT$

Задание 5.11. Считая молярную теплоемкость C азота равной $\dfrac{7}{2}$ и постоянной, изменение энтропии при нагревании 10 г N_2 (молярная масса $M(N_2) = 28$ г/моль) от 0 до 100 ^{o}С при постоянном давлении выражается соотношением:

А:	$\Delta S = \dfrac{10}{28}\int\limits_{273}^{373}\dfrac{7}{2}R\dfrac{dT}{T}$
Б:	$\Delta S = \dfrac{28}{10}\int\limits_{273}^{373}\dfrac{7}{2}R\dfrac{dT}{T}$
В:	$\Delta S = \int\limits_{273}^{373}\dfrac{7}{2}R\dfrac{dT}{T}$
Г:	$\Delta S = \dfrac{10}{28}\int\limits_{273}^{373}\dfrac{7}{2}\dfrac{dT}{T}$
Д:	$\Delta S = \dfrac{10}{28}\int\limits_{273}^{373}\dfrac{dT}{T}$

Задание 5.12. Вычислите изменение энтропии при нагревании одного моля CdS от –120 до 0 °С, если зависимость мольной теплоемкости от температуры выражается уравнением $C_P = 54{,}0 + 3{,}8 \cdot 10^{-3}T$ Дж/(моль·К).

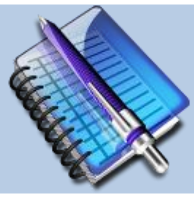
А:	4,97 Дж/(моль·К)
Б:	16,25 Дж/(моль·К)
В:	40,01 Дж/(моль·К)
Г:	24,97 Дж/(моль·К)
Д:	12,37 Дж/(моль·К)

Задание 5.13. Истинная удельная теплоемкость алюминия выражается уравнением: $C_p = 0{,}7657 + 4{,}586 \cdot 10^{-4}T$ Дж·г$^{-1}$·К$^{-1}$. Алюминий плавится при 658,5 ^{o}С, его удельная теплота плавления равна 386,6 Дж/г. Вычислите, сколько тепла требуется на расплавление 500 г алюминия, если начальная температура была равна 25 ^{o}С.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
25135 Дж	105727 Дж	663,67 Дж	341206 Дж	525135 Дж

Задание 5.14. Вычислите изменение энергии Гиббса для 1 моль водорода, рассматривая его как идеальный газ, при изотермическом сжатии от 101,325 Па до 10132,5 Па при 298 К..

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
11,41 Дж	24,31 Дж	11,41 кДж	24,31 кДж	8,86 кДж



Решите задачи самостоятельно

Задача 5.4. Зависимость истинной молярной теплоемкости от температуры для сульфида серебра в интервале температур от 298 до 452 К можно выразить уравнением $C_p = 42{,}38 + 110{,}46 \cdot 10^{-3}T$ Дж/(моль·К). Рассчитайте среднюю молярную теплоемкость в указанном интервале температур.

Задача 5.5. Определите значение средней молярной теплоемкости аммиака в интервале температур от 250 до 350 К, если истинная теплоемкость выражается уравнением $C = 24,78 + 37,52 \cdot 10^{-3}T - 7,38 \cdot 10^{-6}T^2$ Дж/(моль·К).

Задача 5.6. Вычислите среднюю теплоемкость аммиака в интервале температур от 298 до 1000 К, если истинная теплоемкость аммиака выражается уравнением:

$$C_p(\mathrm{T}) = 29,80 + 25,48 \cdot 10^{-3}T - \frac{1,67 \cdot 10^5}{T^2}.$$

Задача 5.7. Вычислите среднюю теплоемкость корунда в интервале температур от 298 до 1000 К, если истинная теплоемкость корунда от температуры выражается уравнением $C_p = 114,56 + 12,89 \cdot 10^{-3}T - 34,31 \cdot 10^5 T^{-2}$.

Задача 5.8. Истинная удельная теплоемкость свинца может быть рассчитана по уравнению

$$C = 0,1068 + 5,656 \cdot 10^{-4}T + 463,32T^{-2} \text{ Дж/(г·К)}.$$

Температура плавления свинца равна 599 К. Какое количество теплоты необходимо подвести, чтобы расплавить 1 кг металла, взятого при 290 К?

Задача 5.9. Истинная атомная теплоемкость меди выражается уравнением $C = 22,64 + 6,28 \cdot 10^{-3}T$ Дж/(моль·К). Удельная теплота правления меди равна 179,9 Дж/г. Какое количество теплоты выделится при затвердевании 1 кг расплавленной меди и охлаждении ее от температуры плавления 1065 до 15 $^{\circ}$С?

Задача 5.10. Истинная удельная теплоемкость алюминия выражается уравнением $C_p = 0,1830 + 1,096 \cdot 10^{-4}T$. Алюминий плавится при 658,5 $^{\circ}$С, его скрытая удельная теплота плавления равна 92,4 кал/г. Вычислите, сколько тепла потребуется на расплавление 500 г алюминия, если его начальная температура была 25 $^{\circ}$С.

Задача 5.11. Вычислите изменение энергии Гиббса, сопровождающее изотермическое сжатие 0,005 м^3 кислорода, взятого при 273 К и 10133 Па, до 101330 Па.

Задача 5.12. Считая $C_p(CO_2)$ равным $\frac{7}{2}R$ и приняв CO_2 за идеальный газ, вычислите изменение энтропии 0,5 моль CO_2 при его переходе от стандартных условий до температуры 100 ^{o}С и давления 3 ат.

Задача 5.13. Определите изменение энтропии при нагревании 1 г-атом серебра от 25 до 225 ^{o}С. Атомная теплоемкость серебра выражается уравнением

$$C_p = 5{,}593 + 1{,}49 \cdot 10^{-3} T.$$

Задача 5.14. Зависимость молярной теплоемкости фосфата кальция от температуры выражается уравнением $C = 203{,}3 + 170{,}1 \cdot 10^{-3} T - 26{,}11 \cdot 10^{5} T^{-2}$ Дж/(моль·К) в интервале температур от 273 до 1373 К. Найдите изменение энтальпии при нагревании этого вещества от 600 до 900 К.

6. ОБЫКНОВЕННЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Многочисленные задачи естествознания, техники и механики, химии и биологии, медицины и других отраслей научных знаний сводятся к математическому моделированию процессов в виде формулы, то есть в виде функциональной зависимости. Так, например, кинетика химических реакций, динамика биологических популяций, модели экономического развития и многие другие исследуются с помощью дифференциальных уравнений.

Изучая химические явления и решая многие задачи по химии, не всегда можно найти непосредственную зависимость между величинами, которые описывают определенный процесс. Однако можно установить связь между определенными величинами (назовем их функциями) и скоростями их изменения (производными этих функций) относительно других переменных величин (будем считать их независимыми). Таким образом, можно построить уравнение, в котором функции входят под знаком производной. Такие уравнения являются дифференциальными.

Рассмотрим некоторые математические модели химических процессов, описываемые дифференциальными уравнениями:

1)*модель распада радиоактивного вещества*: $\frac{dN}{dt}=-\lambda N$, где N – число нераспавшихся в данный момент ядер атомов; t – время; λ – постоянная распада;

2)*модель среднего времени жизни возбужденного состояния молекулы*: $\frac{dN}{dt}=-kN$, где N – возбужденные молекулы в момент времени t; k– константа скорости;

3)*модель реакции первого порядка*: $v=\frac{dc}{dt}=-kc$, где v – скорость реакции, t – время, c – концентрация веществ;

4)*модель необратимой реакции первого порядка*:

$\frac{dx}{dt}=k\left(\left[A\right]_0-x\right)$, где $\left[A\right]_0$ – начальная концентрация вещества A; k – константа скорости реакции, x – концентрация вещества в момент времени t;

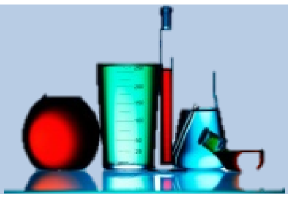
5)*модель изменения скорости концентрации соединения в последовательной реакции*: $\frac{d\left[B\right]}{dt}=k_1\left[A_0\right]e^{-k_1t}-k_2\left[B\right]$, где k_1 – константа скорости первой реакции, $\left[A_0\right]$ – исходная концентрация вещества *A*, k_2 – константа скорости второй последовательной реакции, $\left[B\right]$ – концентрация вещества *B* в момент времени *t* от начала реакции;

6)*модель ионизации газа*: $\frac{dn}{dt}=q-kn^2$, n – количество ионов, *t* – время, *q* – количество положительных и *q* отрицательных ионов в данном объеме газа, образующееся за 1 секунду;

7)*модель изменения газовой смеси*: *da* = (100 – *a*)*dx*, *x* – количество литров газа, прошедшего через сосуд, *a* – процентное содержание кислорода в *x* литрах газа;

8)*модель выхода вещества в химической реакции*: $S'(t)=r-cS(t)$, где *r* молей – выход вещества *S* за минуту, *c* молей за минуту – скорость расходования вещества *S*, *t* – время.

6.1. Модель концентрации растворов



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 6.1. В резервуаре находится 10 м^3 раствора кислоты, концентрация которой равна 14 кг/м^3. Этот раствор выливается из резервуара со скоростью 0,5 м^3/с и с такой же скоростью в резервуар подается чистая вода, которая сразу же смешивается с раствором так, что концентрация раствора уменьшается. Через какое время концентрация будет равна 7 кг/м^3?

Опорные знания по химии

Концентрация – это количественный состав растворенного вещества (в конкретных единицах) в единице объема или массы.

Массовая доля растворенного вещества: отношение массы растворенного вещества к общей массе раствора.

Скорость химической реакции: изменение концентрации c одного из реагирующих веществ в единицу времени tпри постоянном объёме: $v = \dfrac{\Delta c}{\Delta t}$.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Момент начала процесса возьмем за начало отсчета времени t.

Пусть $y(t)$ – функция, значение которой в каждый момент времени t равно концентрации раствора (количество кислоты в единице объема).

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Так как переменная t – это время, то она может принимать любые значения из множества неотрицательных действительных чисел.

По условию задачи первоначально в резервуаре находится 10 м^3 раствора кислоты, концентрация которой равна 14 кг/м^3, то есть $y(0)=14$.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Найти момент времени $t=t_0$, при котором $y(t)=7$ кг/м^3.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

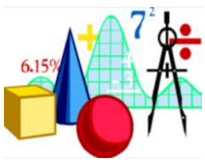
Концентрация раствора непрерывно изменяется. Рассмотрим изменения, которые происходят в резервуаре за очень маленький промежуток времени $[t;\, t+\Delta t]$, где t – некоторый фиксированный момент времени.

В течение указанного промежутка времени из резервуара вытечет $0{,}5\cdot\Delta t$ м^3 раствора, при этом количество кислоты в растворе уменьшится на $\Delta y = -y\dfrac{0{,}5\Delta t}{10}$ (кг). Отсюда $\dfrac{\Delta y}{\Delta t} = -0{,}05y$.

Переходя в последнем равенстве к пределу при $\Delta t \to 0$, получим дифференциальное уравнение $y' = -0{,}05y(t)$, которое моделирует процесс опреснения раствора в резервуаре.

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Найти на множестве действительных чисел такое значение переменной *t*, при котором решение дифференциального уравнения $y' = -0{,}05y(t)$ будет удовлетворять условию $y(0) = 14$.



Опорные знания по математике

1. Дифференциальные уравнения с разделяющимися переменными.
2. Частное решение дифференциальных уравнений.
3. Интегрирование основных элементарных функций.
4. Логарифмирование и потенцирование.
5. Свойства логарифмических и показательных функций.

Выполняем математические действия

1. Найдем решение полученного дифференциального уравнения $y' = -0{,}05y$. Данное уравнение является дифференциальным уравнением с разделяющимися переменными. Название этого вида дифференциальных

уравнений достаточно показательно: выражения, содержащие переменные *y* и *t*, можно разделить знаком равенства, то есть, они находятся по разные стороны от него. То есть $\frac{1}{y}y' = -0,05$.

2. Воспользуемся соотношением $y' = \frac{dy}{dt}$, так как *y* является функцией аргумента *t*:

$$\frac{1}{y}\frac{dy}{dt} = -0,05.$$

Или:

$$\frac{1}{y}dy = -0,05dt.$$

3. Проинтегрируем данное уравнение с разделяющимися переменными:

$$\int \frac{1}{y}dy = \int -0,05dt.$$

Так как $\int \frac{1}{y}dy = \ln|y| + C_1$ и $\int -0,05dt = -0,05t + C_2$ (где C_1 и C_2 – произвольные постоянные), то получим:

$$\ln|y| + C_1 = -0,05t + C_2.$$

Или, введя обозначение $C_3 = C_2 - C_1$, имеем:

$$\ln|y| = -0,05t + C_3.$$

4. Воспользуемся определением логарифма: логарифмом числа *b* по основанию *a* называется такой показатель степени, в которую нужно возвести *a*, чтобы получить *b*, то есть $\log_a b = x \quad \Rightarrow \quad x = a^b$:

$$y = e^{-0,05t + C_3}.$$

5. Используя свойство степеней, перепишем функцию следующим образом:

$$y = e^{C_3} \cdot e^{-0,05t}.$$

Если C_3 – это константа, то e^{C_3} – также некоторая константа, обозначим ее буквой *C*, то есть $C = e^{C_3}$:

$$y = Ce^{-0,05t}.$$

Таким образом, общим решением уравнения $y' = -0,05y$

является множество функций $y = Ce^{-0,05t}$, где C – произвольное число.

6. Чтобы из этого множества функций выделить ту, которая описывает данный процесс, воспользуемся начальным условием $y(0) = 14$:

$$14 = Ce^{-0,05 \cdot 0}.$$

Откуда $C = 14$.

Окончательно получим, концентрация раствора описывается функцией:

$$y(t) = 14e^{-0,05t}.$$

Для нахождения времени, через которое концентрация раствора будет равна 7 кг/м^3, необходимо решить уравнение $14e^{-0,05t} = 7$. Отсюда:

$$e^{-0,05t} = 2.$$

Прологарифмировав обе части последнего уравнения, получим:

$$t = \frac{\ln 2}{0,05} = 20 \ln 2 \approx 13,9.$$

6) *Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.*

Примерно через 13,9 с концентрация раствора будет равна 7 кг/м^3.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Графическое исследование решения обыкновенного дифференциального уравнения $y' = -0,05y(t)$, моделирующего процесс опреснения раствора в резервуаре в задаче 6.1 можно осуществить с помощью педагогического программного средства *Gran-1*. Как было уже рассмотрено ранее, эта программа позволяет строить и исследовать графики функции с параметром.

Решением этого дифференциального уравнения является множество функций $y = Ce^{-0,05t}$, где C – произвольное число.

В окне программы *Gran-1* в пункте *Объект* главного меню выбираем опцию *Создать*. В появившемся окне *Ввод выражения зависимости* в поле ввода записываем:

*P1*Exp(-0.05*x),*

где *P1* – параметр, значение которого нужно вводить (подбирать) отдельно, *Exp* – обозначение экспоненты.

По умолчанию программа *Gran-1* строит графики функций в пределах от А = –5 до В = 5. Поэтому, если нужно, в этом окне (*Ввод выражениязависимости*) можно ввести и другие граничные значения, которые может принимать переменная *x* (например, А = –50, В = 50). Нажимаем кнопку *ОК*.

Затем в пункте главного меню *График* выбираем команду *Построить*. В результате чего на рабочей области появится график исследуемой функции (рис. 6.1).

В окне *Список объектов* в поле ввода рядом с параметром Р1 можно задавать любые значения, например, 0,01; 1,5; 4 и т.д. В зависимости от введенных значений параметра *P1* график функции $y = Ce^{-0,05t}$ будет меняться. При подстановке значения 14 в качестве параметра *P1* получим функцию, которая описывает процесс задачи 6.1.

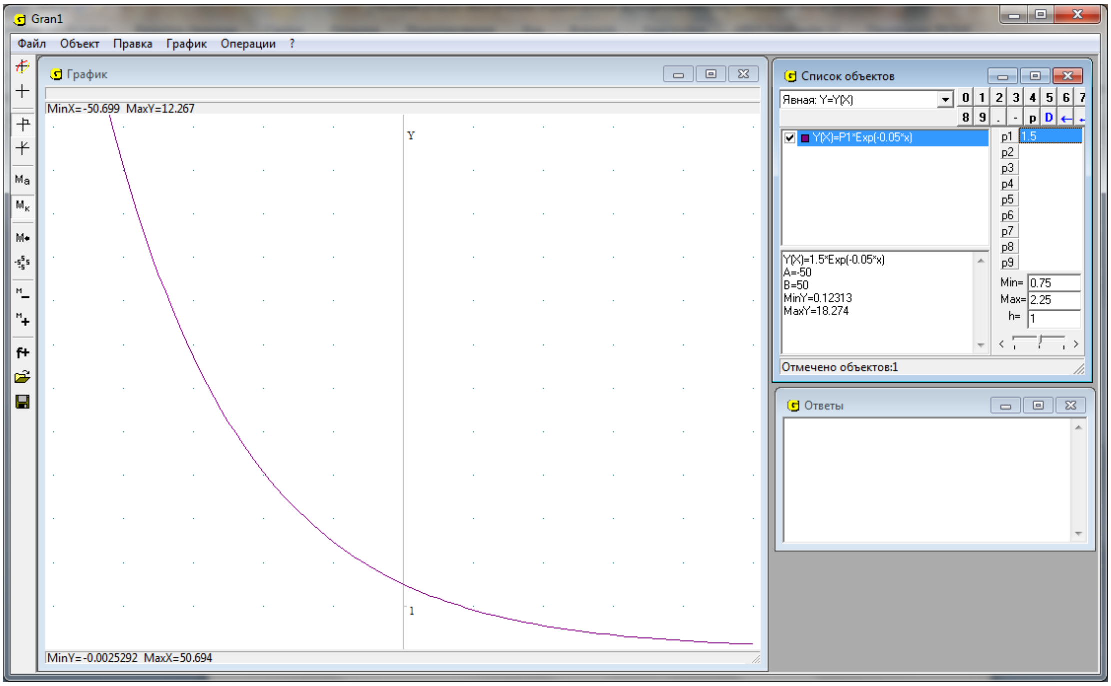


Рисунок 6.1 – Результат построения и исследования множества функций с помощью педагогического программного средства *Gran-1*

Для нахождения времени, через которое концентрация раствора кислоты будет равна 7 кг/м^3 (то есть для решения уравнения $14e^{-0,05t} = 7$) воспользуемся программой *OSABeta*, которая позволяет находить решения нелинейных уравнений различными методами.

В разделе главного меню программы *Вычисление* выбираем подменю *Нелинейные уравнения*. В поле *Задайте функцию F(x) =* вводим:

*7-14*e^(-0.05*x).*

Также задаем границы отрезка, на котором программа будет искать решение (например, –100 и 100); *Погрешность вычислений* (например, 0,0002), выбираем метод решения (например, *Метод хорд*) и нажимаем кнопку *Вычислить*. В результате программа *OSABeta* проведет и представит на экране подробное решение этого уравнения (рис. 6.2).

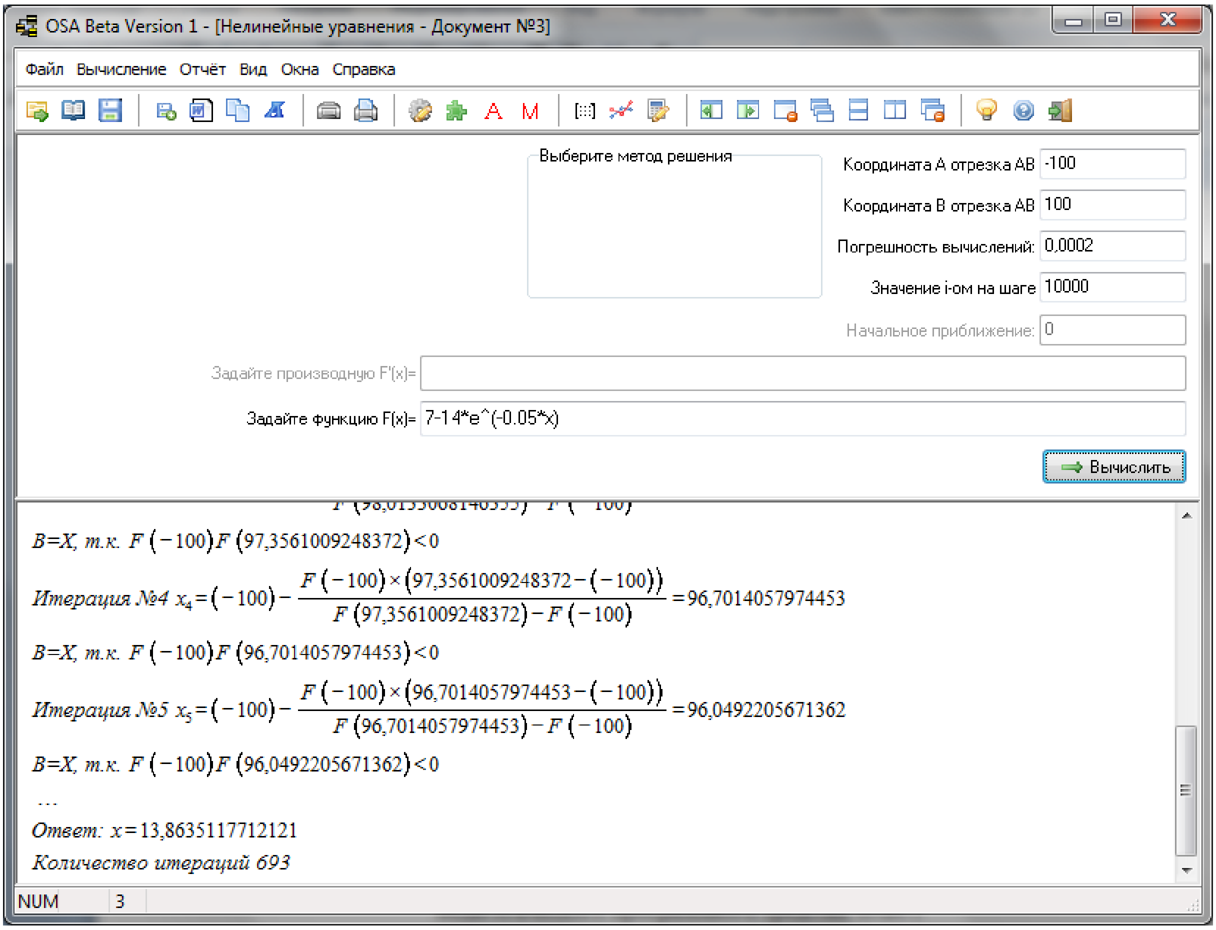


Рисунок 6.2 – Результат решения нелинейного уравнения
с помощью программы *OSABeta*

При выборе других методов решение уравнения будет отличаться с разной погрешностью. Например, при методе деления отрезка пополам – 13,8626098632813, при методе хорд – 13,8635117712121.

Задача 6.2. В резервуаре имеется 100 литров водного раствора, содержащего 10 кг растворенной соли. Каждую минуту 2 литра раствора вытекает из резервуара, а 3 литра пресной воды притекает в него. Перемешивание сохраняет одинаковую концентрацию соли по всему резервуару. Сколько соли останется в резервуаре через час?

Опорные знания по химии

Закон действия масс: скорость взаимодействия двух химических реагентов прямо пропорциональна их концентрациям в реакционной системе, а достижимое состояние химического равновесия зависит от скоростей прямой и обратной реакции.

Массовая доля растворенного вещества – это отношение массы растворённого вещества к общей массе раствора:

$$w(\text{вещества}) = \frac{m(\text{вещества})}{m(\text{раствора})}.$$

Концентрация – это содержание растворенного вещества в определенном количестве или объеме раствора.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) Ввести переменные.

Обозначим через t – время (мин.); $x(t)$ – количество соли в резервуаре в момент времени t(кг); $-\Delta x$ – количество соли, выходящее из резервуара за время Δt (знак минус обусловлен тем, что x – убывающая функция времени).

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Поскольку переменная *t*обозначает время, то ее значение не может принимать значения из множества отрицательных действительных чисел.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Найти количество соли *x(t)*при *t* = 60мин.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

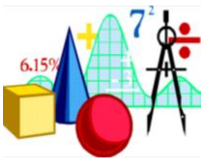
В момент *t* в резервуаре находится $(100+t)$ литров жидкости (притекло 3*t* литров и утекло 2*t*), в ней растворено *x* кг соли. Значит, в одном литре раствора содержится $\frac{x}{100+t}$ кг соли. За время Δt из резервуара вытекает $2\Delta t$ литра раствора, значит, количество соли уменьшится на $\frac{x}{100+t}2\Delta t$ кг.

Отсюда $-\Delta x = \frac{x}{100+t}\cdot 2\Delta t$.

Выполнив необходимые преобразования и перейдя к пределу при $\Delta t \to 0$, получим дифференциальное уравнение $x' = -\frac{2}{100+t}\cdot x(t)$.

5) Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.

Решить обыкновенное дифференциальное уравнение $x' = -\frac{2}{100+t}\cdot x(t)$ (с разделяющимися переменными).



Опорные знания по математике

1. Алгоритм решения обыкновенных дифференциальных уравнений.
2. Свойства логарифмов.

Выполняем математические действия

1. Поделив обе части уравнение $x' = -\frac{2}{100+t} \cdot x(t)$ на $x(t)$, получим:

$$\frac{x'}{x(t)} = -\frac{2}{100+t}.$$

2. Выяснив, от каких функций взята производная, чтобы получить левую и правую части уравнения, получим равенство $\ln(x(t))' = (-2\ln(100+t))'$. Поскольку производные этих двух функций равны, то функции отличаются на постоянное слагаемое: $\ln x(t) = -2\ln(100+t) + \ln C.$ На основании свойств логарифмов получим:

$$\ln\frac{x(t)}{C} = \ln\frac{1}{(100+t)^2}.$$

Отсюда:

$$x(t) = \frac{C}{(100+t)^2}.$$

3. Используя начальное условие $x(0) = 10,$ находим $C = 100000.$ Итак, через t минут в резервуаре останется $x(t) = \frac{100000}{(100+t)^2}$ кг соли.

4. Подставляя t =60 минут в последнее равенство, найдем искомое количество соли $x(t) = \frac{100000}{(100+60)^2} = 3{,}90625$.

6) Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.

Таким образом, примерно 3,91 кг соли останется в резервуаре через час.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Рассмотрим исследование задачи 6.2. с помощью программы *Advanced Grapher*. Эта программа позволяет строить поле направлений дифференциального уравнения – множество касательных в каждой точке допустимой области решения.

На панели инструментов нажимаем кнопку *Добавить график* +*F* и в появившемся окне (из предложенного списка различных видов функций) выбираем *dy/dx или dx/dy – поле направлений*. Затем вводим формулу: *(2*x)/(100+y)*, которая соответствует дифференциальному уравнению $x' = -\dfrac{2}{100+t}\cdot x(t)$. Также в этом окне задаем графическое оформление графика: толщина, цвет, стиль и т.п. Нажимаем *ОК*. В результате программа построит поле направлений дифференциального уравнения (рис 6.3).

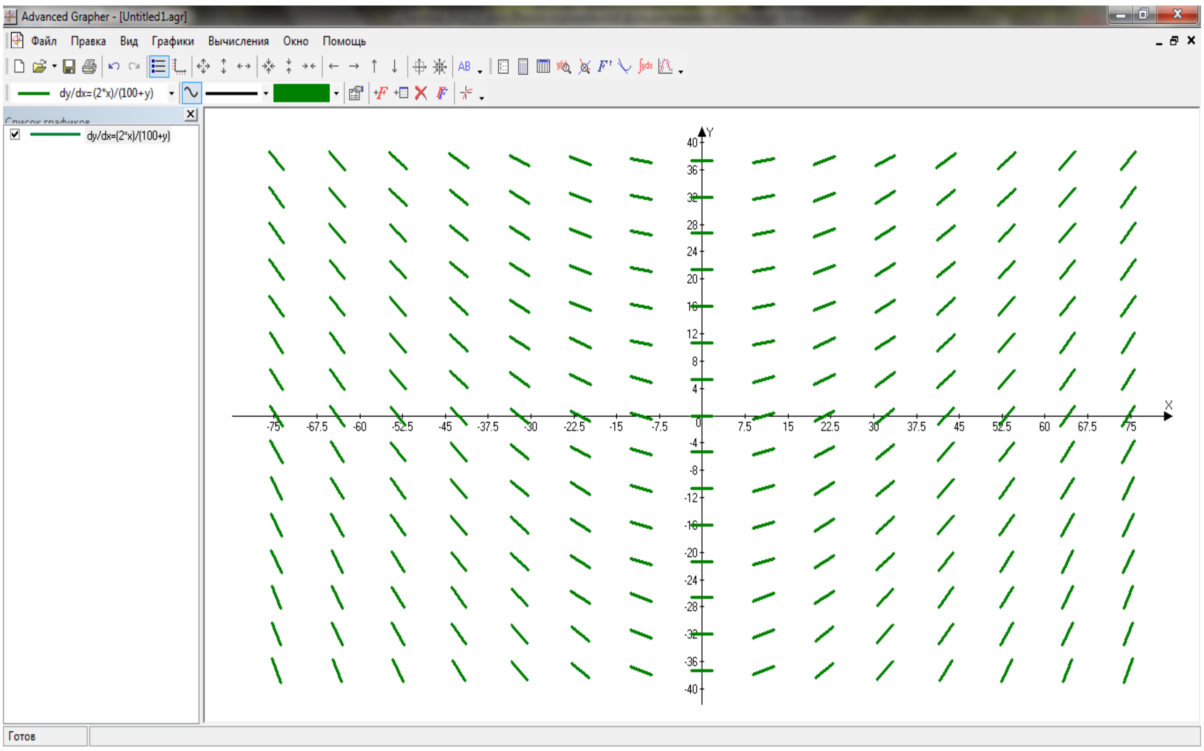


Рисунок 6.3 – Построение поля направлений дифференциального уравнения с помощью программы *Advanced Grapher*

Также с помощью программы *Advanced Grapher* можно осуществить построение и исследование решения дифференциального уравнения $x' = -\frac{2}{100+t} \cdot x(t)$.

Функция $x(t) = \frac{100000}{(100+t)^2}$ соответствует изменению количества соли в водном растворе в течении времени *t*. Построим график этой функции: на панели инструментов нажимаем кнопку *Добавить график* и в появившемся окне для зависимости *Y(x)* вводим формулу:

*100000/(100*x)^2,*

Задаем параметры графика и нажимаем *ОК*. В результате получим график функции (рис. 6.4).

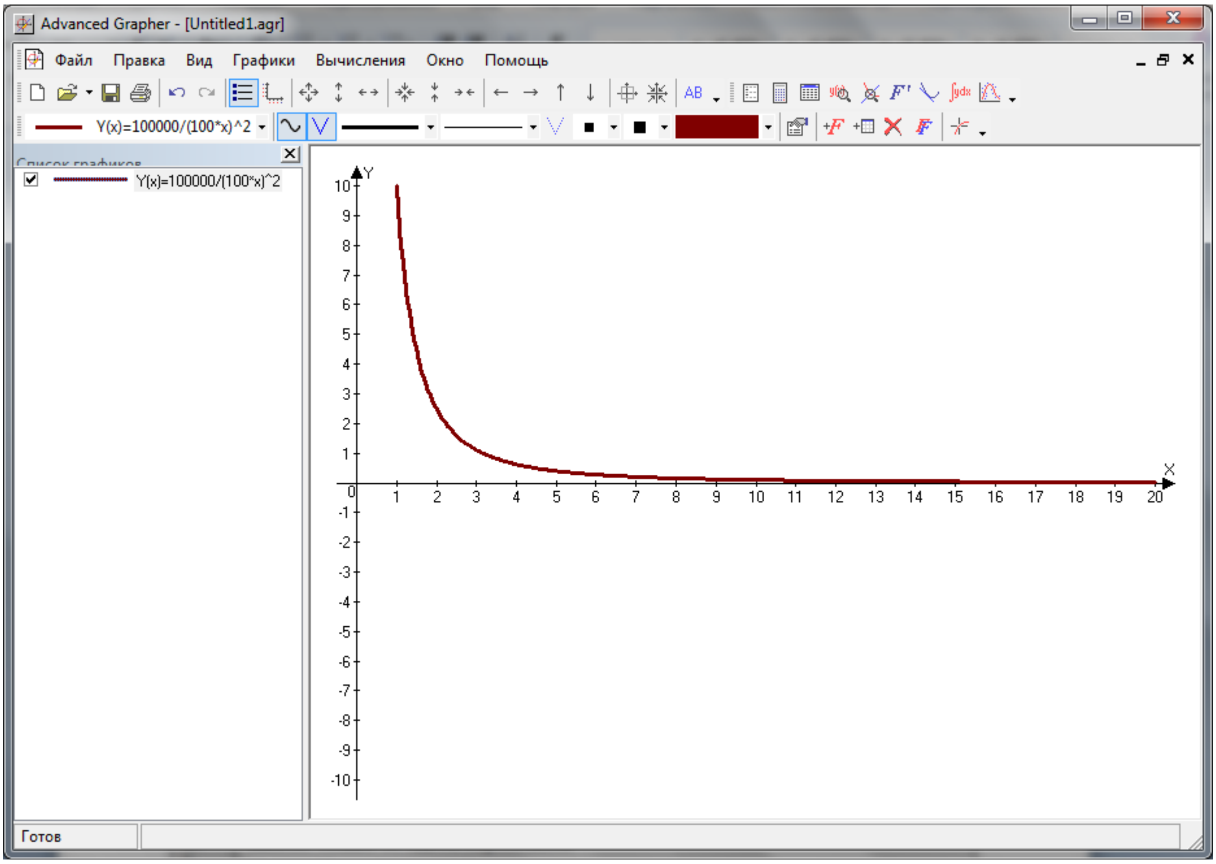


Рисунок 6.4 – Построение графика функции с помощью программы *Advanced Grapher*

Для нахождения количества соли в водном растворе через час, то есть для вычисления значения функции $x(t) = \frac{100000}{(100+t)^2}$ при

$t = 60$ (мин.), воспользуемся программы *Advanced Grapher* нахождения значения функции в точке. В главном меню программы выбираем пункт *Вычисления*, а в нем *Вычисление функций…*. В появившемся окне в поле *Формула* вводим:

100000/((100+x)^2)

и задаем значение переменной – 60.

По нажатию на кнопку *Считать* программа выдаст результат (рис. 6.5).

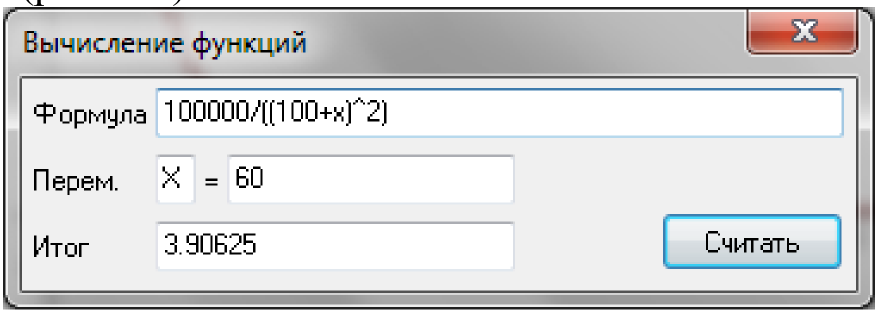


Рисунок 6.4 – Вычисление значения функции в точке
с помощью программы *Advanced Grapher*

Задача 6.3. Сосуд емкостью 1 л снабжен 2 трубками и заполнен воздухом, содержащим 21% кислорода по объему. Через одну трубку в сосуд медленно поступает чистый кислород, через другую вытекает смесь воздуха с кислородом. Сколько процентов кислорода будет содержать сосуд после пропуска 10 л газа?

Опорные знания по химии

Закон сохранения массы: масса веществ, вступающих в химическую реакцию, равна массе веществ, образующихся в результате реакции.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) Ввести переменные.

Так как смесь кислорода с воздухом вытекает, то в некоторый момент времени, когда через сосуд прошло x л газа, в сосуде содержится $\frac{a}{100}$ л кислорода. Причем когда через сосуд проходит dxл газа, это означает, что в сосуд входит dxл кислорода и выходит $\frac{a}{100}dx$ л кислорода.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Поскольку переменные x и a обозначает объем газов, то их значение не может принимать значения из множества отрицательных действительных чисел.

Также, согласно условию задачи, в начальный момент времени в сосуде было $\frac{21}{100} = 0,21$ л кислорода.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Найти значение переменной a (в процентах), при котором $x = 10$.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

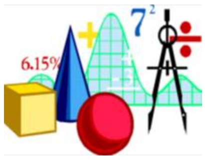
Содержание кислорода в сосуде можно выразить математически следующим образом:

$$\frac{a}{100} + \left(dx - \frac{a}{100}dx \right) = \frac{a + \left(100 - a\right)dx}{100} \text{ л.}$$

Значит, процент кислорода увеличился на величину $(100 - a)dx$, то есть $da = (100 - a)dx$.Это дифференциальное уравнение процесса.

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Найти решение обыкновенного дифференциального уравнения $da = (100 - a)dx$ (с разделяющимися переменными), при условии что при $x = 0$ значение $a = 21$.



Опорные знания по математике

1. Алгоритм решения обыкновенных дифференциальных уравнений с разделяющимися переменными.
2. Свойства логарифмов.

Выполняем математические действия

1. Полученное уравнение является дифференциальным уравнением с разделяющимися переменными:

$$da = (100 - a)dx.$$

Разделим переменные и проинтегрируем:

$$\frac{da}{100-a} = dx; \quad \int \frac{da}{100-a} = \int dx;$$

$$-\ln|100-a| = x - \ln C;$$

$$-x = \ln|100-a| - \ln C;$$

$$-x = \ln\frac{|100-a|}{C};$$

$$e^{-x} = \frac{|100-a|}{C}.$$

Отсюда:

$$100 - a = Ce^{-x};$$

$$a = 100 - Ce^{-x}.$$

2. Используем начальные условия, что в начальный момент времени $(x=0)$ a = 21:

$$21 = 100 - Ce^{0};$$

$$C = 79.$$

Значит, зависимость процентного содержания кислорода от времени задается формулой $a = 100 - 79e^{-x}$.

3. Тогда при x = 10 имеем:

$$a = 100 - 79e^{-10} \approx 99{,}996,$$

или a = 99.996 %.

6) Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.

Таким образом, в сосуде при прохождении 10 л газа процентное содержание кислорода будет 99,996 %.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Построение и исследование зависимости процентного содержания кислорода в сосуде от времени можно реализовать с помощью приложения *Microsoft Mathematics*.

Для этого на вкладке *Построение графиков* в разделе *Уравнения и графики* нажимаем на поле ввода 1 и вводим:

$$100-79*e^{\wedge x}.$$

Затем нажимаем кнопку *Ввод* и *График*. В результате программа построит график данной функции (рис 6.5).

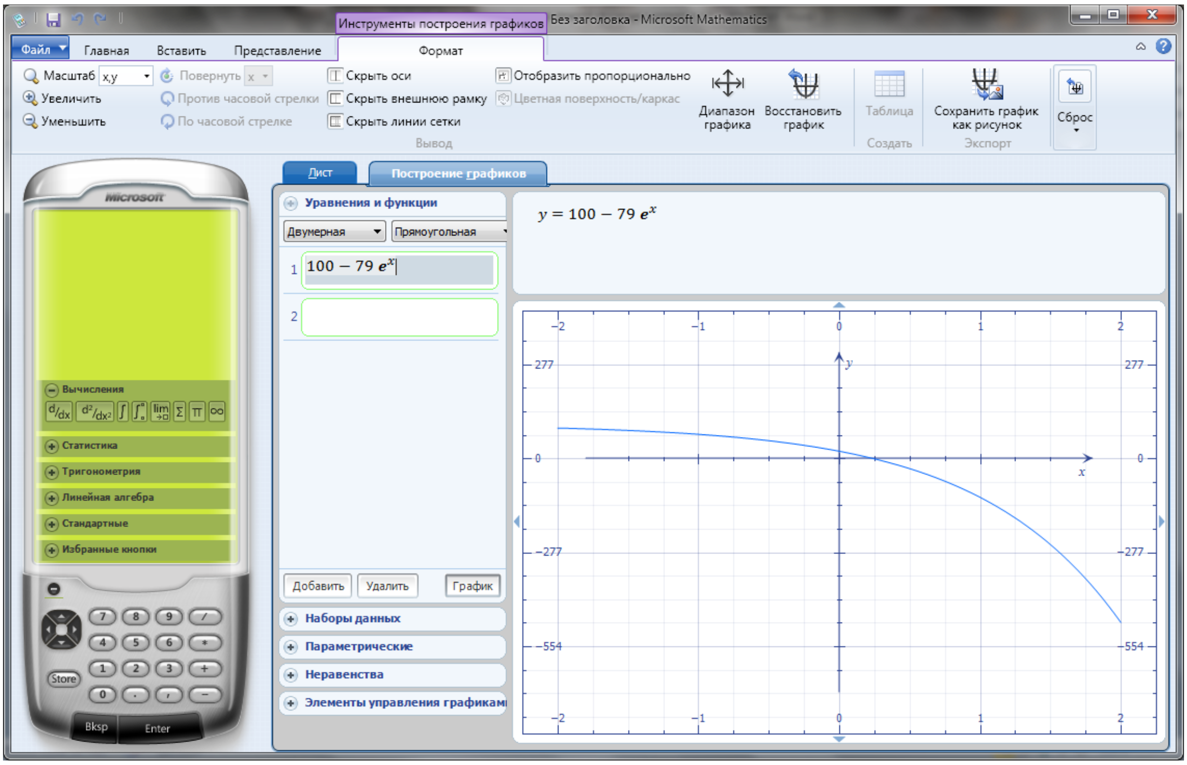


Рисунок 6.5 – Результат построения графика функции с помощью приложения *Microsoft Mathematics*

Следует отметить, что программа *Microsoft Mathematics* позволяет менять масштаб графика используя соответствующие кнопки панели инструментов  и , или с помощью кнопки *Диапазон графика* , позволяющей вручную вводить значения для каждой переменной.

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 6.1. Характерной особенностью обыкновенных дифференциальных уравнений является то, что функции в этих уравнениях:

А:	зависят только от трех переменных
Б:	зависят только от двух переменных
В:	зависят только от одной переменной
Г:	не зависят от переменных
Д:	зависят от двух и более переменных

Задание 6.2. При решении линейного дифференциального уравнения первого порядка не применяется:

А:	метод неопределенных коэффициентов
Б:	замена переменной
В:	метод вариации произвольной постоянной
Г:	интегрирование по частям
Д:	метод Бернули

Задание 6.3. Из тождества, возможного при равенстве коэффициентов при одинаковых степенях x, получают:

А:	корни характеристического уравнения
Б:	решение однородного уравнения
В:	дифференциальное уравнение более низкого порядка
Г:	систему уравнений
Д:	дифференциальное уравнение более высокого порядка

Задание 6.4. Отношение двух однородных функций одинаковых степеней есть однородная функция:

А:	нулевой степени
Б:	первой степени
В:	второй степени
Г:	третей степени
Д:	степени на одну ниже степеней исходных функций

Задание 6.5. Решением какого уравнения будет функция, выраженная через значение интеграла от правой части уравнения?

А:	$9ydy = \frac{dx}{cos^2 x}$
Б:	$y' = x + \sin x$
В:	$2ydy = \ln xdx$
Г:	$(1+x)dy = 2ydx$
Д:	$\sin xdy = \cos ydx$

Задание 6.6. Общим решением дифференциального уравнения *n*-го порядка называется:

А:	решение, в котором произвольным постоянным придаются конкретные числовые значения
Б:	решение, в котором переменная входит в *n*-ой степени
В:	решение, выраженное относительно независимой переменной
Г:	решение, полученное без интегрирования
Д:	решение, содержащее *n* независимых произвольных постоянных

Задание 6.7. Дифференциальное уравнение с разделяющимися переменными – это уравнение вида:

А:	$s(t)y' + p(x)y + q(x)y^n = 0;$
Б:	$s(t)y' + p(x)y^2 + q(x)y + r(x) = 0;$
В:	$p(x)q(y)y' + r(x)s(y) = 0;$
Г:	$s(t)f(y)y' + p(x)f(y) + q(x) = 0.$
Д:	$s(t)y' + p(x)y'' + q(x)y''' = 0;$

Задание 6.8. Если C – концентрация вещества, t – время, v – скорость протекания реакции, то эти переменные связаны соотношением:

А:	$C = \dfrac{\Delta v}{\Delta t}$
Б:	$v = \dfrac{\Delta C}{\Delta t}$
В:	$t = \dfrac{\Delta v}{\Delta C}$
Г:	$v = \int C dt$
Д:	$C = \int v dt$

Задание 6.9. Изменение концентрации раствора в каждый момент времени выражается:

А:	действительным числом
Б:	натуральным логарифмом
В:	функцией
Г:	арифметической прогрессией
Д:	вектором

Задание 6.10. Время изменения концентрации раствора принимает значения из множества:

А:	натуральных чисел
Б:	целых чисел
В:	рациональных чисел
Г:	иррациональных чисел
Д:	действительных чисел

Задание 6.11. Математическая модель изменения концентрации раствора представляет собой:

А:	линейное алгебраическое уравнение
Б:	дробно-рациональное уравнение
В:	дифференциальное уравнение
Г:	логарифмическое уравнение
Д:	функциональное уравнение

Задание 6.12. Чтобы из множества функций решения дифференциального уравнения, выделить ту, которая описывает данный процесс, необходимо воспользоваться:

А:	начальными условиями задачи
Б:	таблицей производных
В:	таблицей интегралов
Г:	свойствами показательных функций
Д:	свойствами логарифмических функций

Задание 6.13. Процесс опреснения раствора в резервуаре происходит по:

А:	экспоненциальному закону
Б:	гиперболическому закону
В:	степенному закону
Г:	квадратичному закону
Д:	линейному закону

Задание 6.14. Некоторое вещество преобразовывается в другое со скоростью, пропорциональной количеству непреобразованного вещества. Если первоначально было x_0 вещества, то зависимость количества непреобразованного вещества x от времени t выражается соотношением:

А:	$x(t) = e^{-kt}$
Б:	$x(t) = x_0 e^{-kt}$
В:	$x(t) = x_0^{-kt}$
Г:	$x(t) = x_0 e^{t}$
Д:	$x(t) = e^{-t}$

Задание 6.15. Определите правильную последовательность действий по математическому моделированию, которые нужно выполнить для получения математической модели при определении концентрации равстворов:

1.	**А:**	составить соотношения, связывающие введенные переменные
2.	**Б:**	определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные
3.	**В:**	интерпретировать полученные результаты в терминах исходной задачи
4.	**Г:**	сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача
5.	**Д:**	определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче
6.	**Е:**	ввести переменные

Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 6.16. В основе теории растворения лежит гипотеза о том, что если температура T насыщенного любой солью растворителя получит приращение ΔT, то растворитель приобретет способность растворять еще некоторое количество соли ΔS, пропорциональное ΔT, и то количество S соли, которое может раствориться при температуре T. Учитывая это, определите зависимость между S и T:

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$\Delta S = kS + \Delta T$	$\Delta S = kS - \Delta T$	$\Delta S = kS \cdot \Delta T$	$\Delta T = kS \cdot \Delta S$	$\Delta T = kS + \Delta S$

Задание 6.17. Через сосуд емкостью a литров, который наполнен водным раствором некоторой соли, непрерывно протекает жидкость, причем за единицу времени вливается b литров чистой воды и вытекает такое же количество раствора. Укажите закон, по которому изменяется содержание соли в сосуде в зависимости от времени протекания воды через сосуд:

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$x(t) = x_0^{\frac{b}{a}}$	$x(t) = \frac{a}{b} x_0^{-t}$	$x(t) = \frac{b}{a} x_0^{-t}$	$x(t) = x_0^{-\frac{a}{b}t}$	$x(t) = x_0^{-\frac{b}{a}t}$

Задание 6.18. В сосуде находится 60 л раствора, содержащего 5 моль растворенной соли. В каждую минуту в него вливается 3 л воды и вытекает 2 л раствора, причем концентрация соли поддерживается постоянной. Какое количество соли остается в сосуде через 40 минут?

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
1,8 моль	18 моль	0,18 моль	1,08 моль	0,08 моль

Задание 6.19. Сосуд емкостью 1 л снабжен 2 трубками и заполнен воздухом, содержащим 32% кислорода по объему. Через одну трубку в сосуд медленно поступает чистый кислород, через другую вытекает смесь воздуха с кислородом. Определите, сколько процентов кислорода будет содержать сосуд после пропуска 15 л газа:

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
55.558%	99.995%	88.884%	77.991%	66.665%

Задание 6.20. Установите соответствие между моделями химических процессов и их математической интерпретацией:

1	модель распада радиоактивного вещества	**А**	$\frac{dn}{dt}=q-kn^2,$
2	модель реакции первого порядка	**Б**	$\frac{\mathrm{dN}}{\mathrm{dt}}=-\lambda\mathrm{N}$
3	модель ионизации газа	**В**	$S'(t)=r-cS(t)$
4	модель выхода вещества в химической реакции	**Г**	$da=(100-a)dx$
		Д	$v=\frac{dc}{dt}=-kc,$

Решите задачи самостоятельно

Задача 6.4. В резервуаре находится 50 $м^3$ раствора бензойной кислоты, концентрация которой равна 20 $кг/м^3$. Этот раствор выливается из резервуара со скоростью 0,2 $м^3/с$ и с такой же скоростью в резервуар подается чистая вода, которая сразу же смешивается с раствором так, что концентрация раствора уменьшается. Через какое время концентрация будет равна 10 $кг/м^3$?

Задача 6.5. В баке находится 60 л раствора, содержащего 5 кг кислоты. В бак непрерывно подается вода со скоростью 3 л в минуту, которая перемешивается с имеющимся раствором. Смесь вытекает с той эе скоростью. Сколько соли останется в баке через час?

Задача 6.6. В резервуаре имеется 100 л раствора, содержащего 5 кг растворенного вещества (соли). В него поступает чистая вода со скоростью 30 л/мин. Одновременно из этого резервуара с той же скоростью удаляется раствор. Перемешивание обеспечивает одинаковую концентрацию соли во всем резервуаре. Сколько соли останется в резервуаре к моменту времени t?

Задача 6.7. В резервуар, который содержит 10 кг соли на 100 л раствора, каждую минуту поступает 30 л воды и вытекает 20 л раствора. Определите, какое количество соли останется в резервуаре через t минут, считая, что соль мгновенно растворяется.

Задача 6.8. Сосуд объемом 40 л содержит 80% азота и 20% кислорода. В сосуд каждую секунду втекает 0,2 л азота и вытекает столько же смеси. Через сколько времени в сосуде будет 99% азота?

Задача 6.9. В сосуд, наполненный 5 л раствора, содержащего 1,5 кг растворенного сахара, каждый час поступает 1 л воды. Также из сосуда каждый час вытекает 0,5 л раствора (концентрация сахара поддерживается постоянной). Найти массу сахара, которая будет содержаться в сосуде через 12 часов.

Задача 6.10. Резервуар наполнен 75 л воды, содержащей 3 кг растворенного вещества. Приток воды в резервуар составляет 4 л в минуту, а расход смеси из резервуара 2 л в минуту. Концентрация поддерживается постоянной посредством перемешивания. Найти массу вещества, которая будет содержаться в резервуаре через 25 минут.

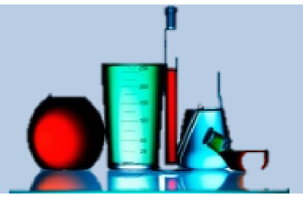
Задача 6.11. Скорость растворения вещества пропорциональная наличной концентрации x нерасторенного вещества и разности концентрации насыщенного раствора и концентрации рапствора в данный момент. Подвергая 10 моль соли действия 90 л воды, обнаружили, что в течение часа растворилась половина этого количесвта. Считая концентрацию насыщенного раствора соли равной ⅓, найти количесвто растворенной соли в течение часа, если за это время вылито 180 л воды.

Задача 6.12. Сосуд емкостью 100 л наполнен раствором, содержащим 10 кг растворенной соли. В одну минуту в него втекает 3 л воды и столько же смеси перекачивается в другой сосуд той же емкости, первоначально наполненный водой, из которой избыток жидкости выливается. В какой момент времени количсетво соли в обоих сосудах будет одинаково?

Задача 6.13. Через сосуд емкостью a л, наполненный водным раствором некоторой соли, непрерывно протекает жидкость. В единицу времени втекает b л воды и вытекает такое же количество раствора. Найти закон изменения содержания соли в сосуде в зависимости от времени протекания жидкости через сосуд.

Задача 6.14. В воде растворяется бензойная кислота. Спустя 10мин после начала растворения концентрация раствора составляет 6%. Найти концентрацию раствора спустя 30мин, считая скорость растворения пропорциональной разности концентраций насыщенного и существующего в данный момент растворов.

<u>*6.2. Математические модели химических реакций*</u>



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 6.15. Рассматривается реакция инверсии сахара. Известно, что количество сахара, инвертирующегося в единицу времени, пропорционально его количеству. Найти закон инверсии сахара и по известному начальному количеству найти количество сахара в растворе по истечении времени t.

Опорные знания по химии

Задача инверсии сахара – это пример **реакции первого порядка**.

Порядок химической реакции равен сумме степеней концентраций, ходящих в кинетическое уравнение.

Скорость такой реакции – это скорость, которой изменяются концентрации веществ, участвующих в реакции.

Концентрация или действующая масса реагирующего вещества – это количество моль этого вещества в единице объема.

По закону действующих масс **скорость реакции пропорциональна действующим массам в данный момент**.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Пусть a – начальное количество сахара в растворе, x – количество сахара, которое инвертируется к моменту времени t.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Поскольку введенные переменные определяют количество и время, то их значения не могут быть отрицательными.

В начальный момент времени, количество инвертированного сахара равно нулю, то есть при $t = 0$ значение $x = 0$.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Составить закон (формулу), по которой инвертируется x сахара в растворе в течение времени t, если первоначально было a сахара.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

Зафиксируем некоторый момент времени t и дадим ему приращение Δt. За это время инвертируется Δx сахара.

Тогда по свойству инверсии сахара (количество сахара, инвертирующегося в единицу времени, пропорционально его количеству), имеем:

$$\Delta x = k(a - x)\Delta t,$$

где k – константа скорости реакции.

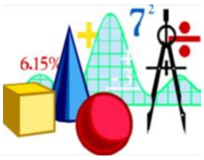
Или

$$dx = k(a - x)dt.$$

Это выражение – искомый дифференциальный закон инверсии сахара.

5) *Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.*

Найти решение дифференциального уравнения $dx = k(a - x)dt$.



Опорные знания по математике

1. Решение обыкновенного дифференциального уравнения с разделяющимися переменными.
2. Нахождение частного решения обыкновенного дифференциального уравнения.

Выполняем математические действия

1. Решим дифференциальное уравнение $dx = k(a - x)dt$ (обыкновенное дифференциальное уравнение с разделяющимися переменными):

$$\frac{dx}{a - x} = kdt; \qquad \int \frac{dx}{a - x} = k\int dt;$$

$$-\ln|a - x| = kt - \ln c;$$

$$\ln|a - x| - \ln c = kt;$$

$$ln\frac{|a - x|}{c} = -kt;$$

$$\frac{a - x}{c} = e^{-kt};$$

$$x = a - ce^{-kt}.$$

Таким образом, общим решением дифференциального уравнения $dx = k(a - x)dt$ является множество функций $x = a - ce^{-kt}$.

2. Найдем из множества решений дифференциального уравнения то, которое удовлетворяет условию задачи (при $t = 0$ значение $x = 0$):

$$0 = a - ce^{0}.$$

Откуда

$$c = a.$$

То есть решение дифференциального уравнения является функция $x = a - ae^{-kt}$ или $x = a\left(1 - e^{-kt}\right)$.

6) *Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.*

Таким образом, количество сахара в растворе по истечении времени t равно: $x = a\left(1 - e^{-kt}\right)$.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Для исследования инверсии сахара в растворе воспользуемся программой *Gran-1*.

Выше было рассмотрено, как с помощью этой программой строить и исследовать графики функций, содержащие параметры.

Построим (аналогично примерам, подробно рассмотренным ранее)график функции $x = a\left(1 - e^{-kt}\right)$, определяя a как параметр $P1$, а k (константа скорости реакции) – как параметр $P2$ (рис. 6.6).

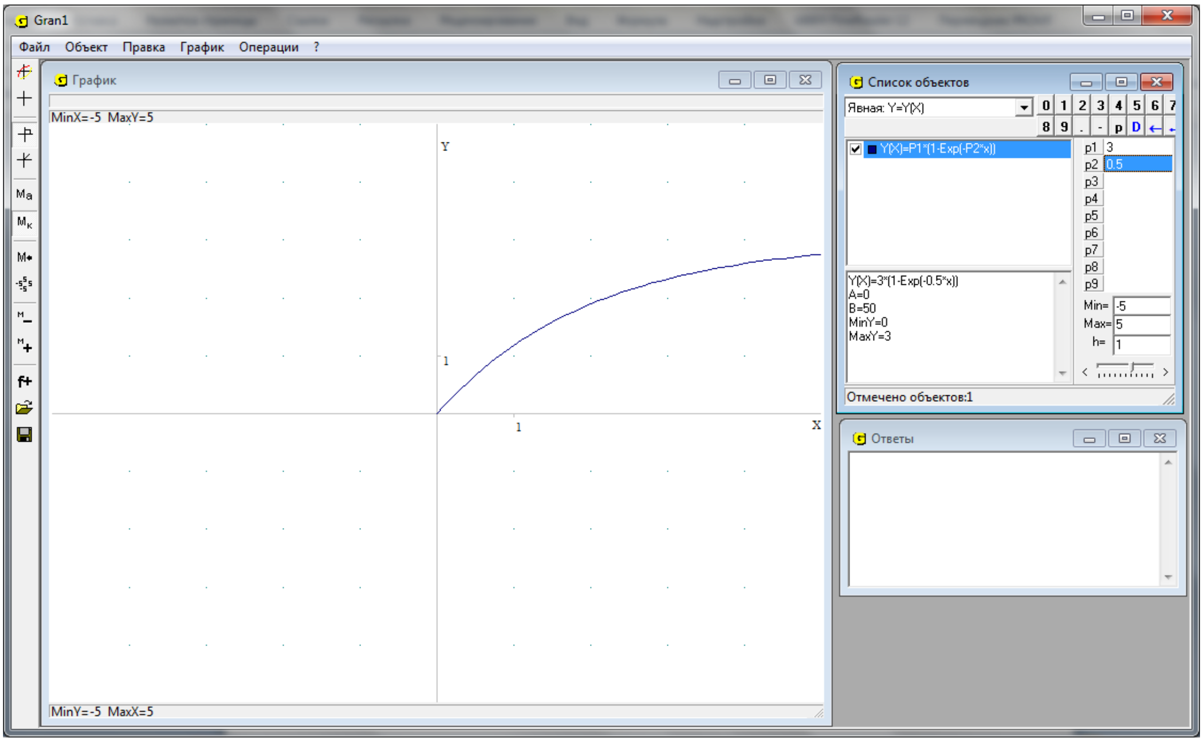


Рисунок 6.6 – Результат построения и исследования графика функции с помощью программы *Advanced Grapher*

Задача 6.16. Скорость размножения бактерий пропорциональна их количеству. В начальный момент имелось 100 бактерий, а в течение 3 ч их число удвоилось. Найти зависимость количества бактерий от времени. Во сколько раз увеличится количество бактерий в течение 9 ч?

Опорные знания по химии

Закон размножения бактерий с течением времени: скорость размножения некоторых бактерий пропорциональна количеству бактерий в данный момент.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Пусть x – количество бактерий, имеющихся в данный момент t . Тогда скорость их размножения: $\frac{dx}{dt}$.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.***

Переменные x (количество бактерий) и t (время) не могут принимать отрицательные значения.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

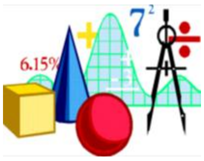
Найти закон размножения бактерий и во сколько раз изменится количество бактерий x через t = 9 часов.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

Согласно условию задачи (скорость размножения бактерий пропорциональна их количеству): $\frac{dx}{dt} = kx$, где k– коэффициент пропорциональности (константа скорости) между скоростью размножения бактерий и их числом.

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Найти решение дифференциального уравнения $\frac{dx}{dt} = kx$ и во сколько раз значение x при t = 9 больше или меньше 100.



Опорные знания по математике

1. Решение дифференциальных уравнений первого порядка с разделяющимися переменными.
2. Свойства степенных и показательных выражений.

Выполняем математические действия

1. Разделим переменные в полученном дифференциальном уравнении $\frac{dx}{dt} = kx$ и прологарифмируем:

$$\frac{dx}{x} = kdt;$$

$$\int \frac{dx}{x} = \int kdt;$$

$$\ln x = kt + \ln C;$$

$$\ln \frac{x}{C} = kt;$$

$$\frac{x}{C} = e^{kt}.$$

Откуда

$$x = Ce^{kt}.$$

2. Найдем значение константы C использую начальные условия: при $t = 0$ $x = 100$:

$$100 = Ce^0; \quad C = 100.$$

То есть $x = 100e^{kt}$.

3. Найдем коэффициент k. По условию задачи при $t = 3$ значение $x = 200$:

$$200 = 100e^{3k};$$

$$e^{3k} = 2;$$

$$3k = ln2;$$

$$k = \frac{ln2}{3}.$$

Значит $x = 100e^{\frac{ln2}{3}t} = 100 \cdot 2^{\frac{t}{3}}$.

4. Чтобы найти во сколько раз увеличилось количество бактерий в течение 9 часов, найдем значение x при $t=0$ и $t=9$:

$$x(0) = 100 \cdot 20 = 100,$$

$$x(9) = 100 \cdot 23 = 800.$$

Значит, $\frac{x(9)}{x(0)} = \frac{800}{100} = 8$.

6) *Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.*

Зависимость количества бактерий от времени выражается формулой $x = 100 \cdot 2^{\frac{t}{3}}$.

В течение 9 часов количество бактерий увеличилось в 8 раз.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Рассмотрим построение графика полученной зависимости количества бактерий от времени $x = 100 \cdot 2^{\frac{t}{3}}$ с помощью программы *OSABeta*.

В пункте главного меню *Вычисление* выбираем подпункт *Графики*. В поле задайте функцию $F(x)$ вводим выражение:

*100*2^(x/2),*

выбрать параметры и нажать кнопку *Вывести график функции*.

В программе *OSABeta* можно исследовать построенный график функции, например, при выборе параметра *Задать* *значение на отрезке* можно задать границы отрезка, в пределах которого программа будет выводить график функции, и изучать его поведения на нем. Например на отрезке от 0 до 10 график изменения количества бактерий в единицу времени выглядит следующим образом (рис. 6.7).

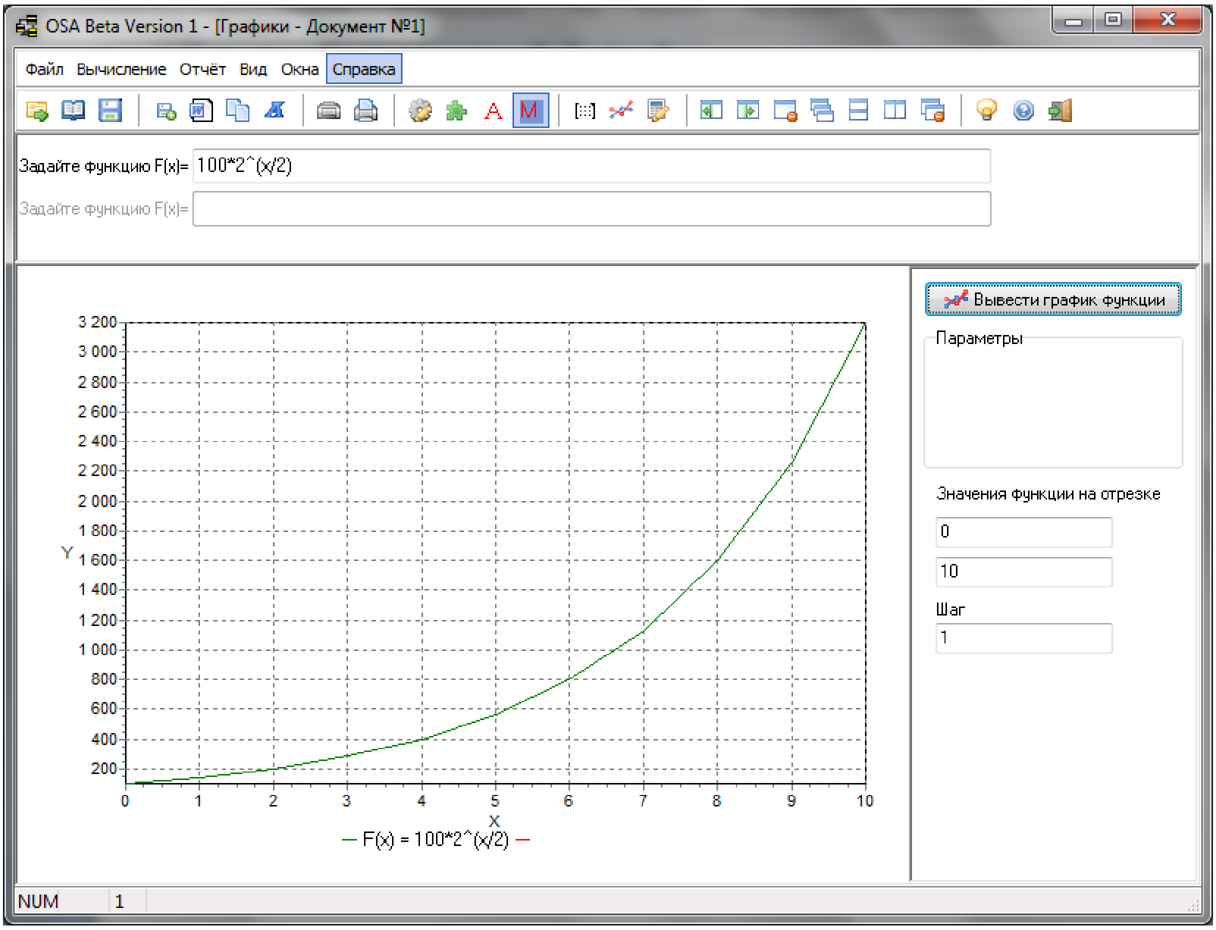


Рисунок 6.7 – Результат построения и исследования графика функции с помощью программы *OSABeta*

Задача 6.17. Реакция омыления уксусноэтилового эфира едким натром происходит по уравнению:

$CH_3COOC_2H_5$	+	$NaOH$	—	CH_3COONa	+	C_2H_5OH
Уксусноэтиловый эфир		*Гидроксид натрия*		*Ацетат натрия*		*Этиловый спирт*

Первоначальные концентрации указанных

уксусноэтилового эфира и едкого натра были: a = 0,01 и b = 0,002 соответственно. Спустя 23 минуты концентрация уксусноэтилового эфира уменьшилась на 10%. За какое время она уменьшится на 15%?

Опорные знания по химии

Порядок химической реакции равен общему числу молекул, входящих в левую часть химического уравнения. Например, $H_2O+SO_3 \rightarrow H_2SO_4$ – реакция второго порядка.

Моль данного вещества *A* – число граммов этого вещества, равное его молекулярному весу. Например, 1 моль воды равен 18 г.

Скорость реакции –та скорость, с которой система компонентов левой части превращается в систему компонентов правой части уравнения реакции.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) Ввести переменные.

Имеем химическую реакцию второго порядка (так как число молекул, входящих в левую часть химического уравнения, равно двум): $A_1 + A_2 \rightarrow$(конечные продукты реакции).

Пусть a и b – начальные концентрации веществ A_1 и A_2; x – число прореагировавших к моменту времени t молей вещества A_1, а следовательно и вещества A_2 (каждая моль A_1 соединяется с молью A_2, и поэтому число прореагировавших молей обоих веществ одинаково).

В момент времени t имеем скорость реакции, равную $\frac{dx}{dt}$.

2) Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.

Переменные a, b, x и tмогут принимать любые значения из множества действительных чисел (поскольку обозначают концентрации веществ, число молей и время соответственно). Причем, так как x – прореагировавшее количество вещества, то $x<a$, $x<b$.

Начальные условия: в начале реакции (при $t=0$) количество прореагировавшего вещества $x=0$.

Так как через 23 минуты от начала реакции концентрация уксусноэтилового эфира уменьшилась на 10%, то при $t=23$ минут $x=0{,}1$; $a=0{,}1\cdot 0{,}01=0{,}001$.

3) ***Определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче.***

Найти момент времени $t=t_0$, при котором $x=0{,}15$.

4) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные.***

Действующая масса (или концентрация реагирующего вещества) A_1, указывающая количество молей вещества в единице объема (1 литре), равна $a-x$ и $b-x$; она пропорциональная и их произведению. Поэтому закон действующих масс выразится дифференциальным уравнением химической реакции второго порядка:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t}=k(a-x)(b-x),$$

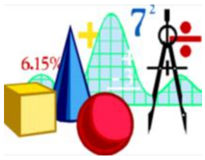
где k – константа скорости реакции.

Разделяя переменные, получим:

$$dt=\frac{dx}{k(a-x)(b-x)}.$$

5) ***Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.***

Найти на множестве действительных чисел такое значение переменной t, при котором решение дифференциального уравнения $dt=\dfrac{dx}{k(a-x)(b-x)}$ будет удовлетворять условию при $t=23$мин $x=0{,}1$; $a=0{,}001$.



Опорные знания по математике

1. Дифференциальные уравнения с разделяющимися переменными.
2. Частное решение дифференциальных уравнений.
3. Интегрирование рациональных функций.
4. Свойства логарифмических и показательных функций.

Выполняем математические действия

1. Для решения дифференциального уравнения $dt = \dfrac{dx}{k(a-x)(b-x)}$ применим метод интегрирования рациональных функций:

$$kdt = \frac{dx}{(a-x)(b-x)},$$

$$\int k\Delta t = \int \frac{dx}{(a-x)(b-x)},$$

$$\int k\Delta t = \frac{1}{b-a}\left(\int \frac{dx}{x-b} - \int \frac{dx}{x-a}\right),$$

$$kt + C = \frac{1}{b-a}\left(\ln|x-b| - \ln|x-a|\right),$$

$$kt + C = \frac{1}{b-a}\ln\frac{b-x}{a-x}.$$

Полученное уравнение является общим уравнением задачи.

2. Для определения величины C используем начальные условия: при $t = 0$ $x = 0$. Имеем:

$$C = \frac{1}{b-a}\ln\frac{b}{a}.$$

3. Подставляя C в общее решение, получим частное решение:

$$kt+\frac{1}{b-a}\ln\frac{b}{a}=\frac{1}{b-a}\ln\frac{b-x}{a-x},$$

$$kt=\frac{1}{b-a}\ln\frac{a(b-x)}{b(a-x)};$$

$$t=\frac{1}{k(a-b)}\ln\frac{b(a-x)}{a(b-x)}. \qquad (6.1)$$

Коэффициент пропорциональности k определяем из дополнительного условия: при $t=23$мин $x=0{,}1$; $a=0{,}001$.

Имеем:

$$23=\frac{1}{k(0{,}001-0{,}02)}\ln\frac{0{,}002(0{,}01-0{,}001)}{0{,}01(0{,}002-0{,}001)};$$

$$23=\frac{1000}{8k}\ln 1{,}8;$$

$$k=\frac{125}{23}\ln 1{,}8.$$

Подставляя полученное числовое значение в решение (6.1), определим t:

$$\frac{125\ln 1{,}8}{23}t=\frac{1}{0{,}002-0{,}01}\ln\frac{0{,}01(0{,}002-0{,}0015)}{0{,}002(0{,}01-0{,}0015)},$$

$$t=23\frac{\ln 3{,}4}{\ln 1{,}8}\approx 47{,}9.$$

6) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Таким образом, через за 48 минут количество уксусноэтилового эфира уменьшится на 15%.

Для построения графика воспользуемся программой *Microsoft Mathematics.*

Прежде чем строить график функции $t = \frac{1}{k(a-b)} \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)}$, подставим в него значение параметров $k = \frac{125}{23} \ln 1{,}8$; $a = 0{,}01$; $b = 0{,}002$ и упростим выражение. В результате получим:

$$0{,}026 * \ln\left(\frac{0.2(0.01-x)}{0.002-x}\right).$$

Затем на вкладке *Построение графиков* в разделе *Уравнения и графики* нажимаем на поле ввода 1 и вводим:

*0.026*ln(0.2*(0.01–x)/(0.002–x)).*

Затем нажимаем кнопку *Ввод* и *График*. В результате программа построит график данной функции (рис 6.8).

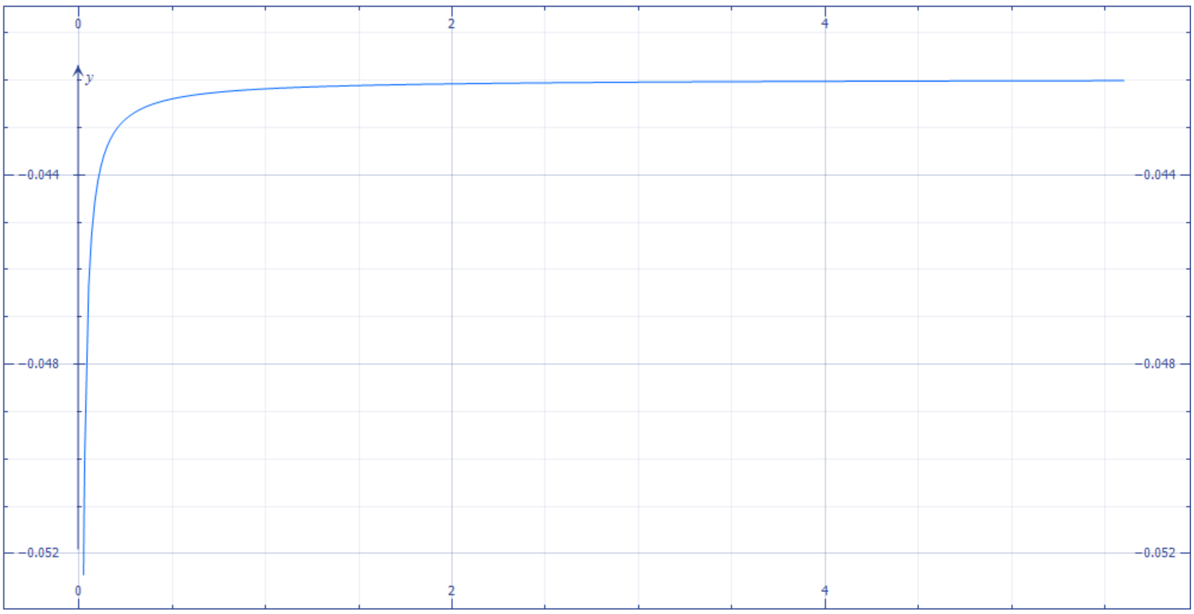


Рисунок 6.8 – Результат построения графика функции с помощью приложения *Microsoft Mathematics*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 6.21. Порядок химической реакции равен:

А:	общему числу молекул, входящих в правую часть химического уравнения
Б:	общему числу молекул, входящих в левую часть химического уравнения
В:	общему числу веществ, входящих в химическое уравнение
Г:	общему числу молей веществ, входящих в правую часть химического уравнения
Д:	общему числу молей веществ, входящих в левую часть химического уравнения

Задание 6.22. Концентрации веществ, вступающих в реакцию, могут принимать значения из множества:

А:	натуральных чисел
Б:	целых чисел
В:	рациональных чисел
Г:	иррациональных чисел
Д:	действительных чисел

Задание 6.23. Математическая модель изменения скорости концентраций веществ представляет собой:

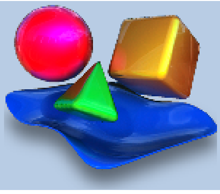
А:	линейное алгебраическое уравнение
Б:	дробно-рациональное уравнение
В:	логарифмическое уравнение
Г:	дифференциальное уравнение
Д:	функциональное уравнение

Задание 6.24. Укажите химическую реакцию второго порядка:

А:	$CH_3OCH_3 \rightarrow CH_4 + H_2 + CO$
Б:	$H_2 + I_2 \rightarrow 2HI$
В:	$C_2H_6 \rightarrow 2CH_3$
Г:	$2N_2O_5 \rightarrow 2N_2O_4 + O_2$
Д:	$CH_3N_2CH_3 \rightarrow CH_3CH_3 + N_2$

Задание 6.25. В дифференциальном уравнении $dt = \dfrac{dx}{k(a-x)(b-x)}$, которое описывает химическую реакцию второго порядка, переменная k обозначает:

А:	константу скорости реакции
Б:	концентрацию веществ, вступивших в реакцию
В:	температуру, при которой протекает реакция
Г:	время протекания реакции
Д:	количество молей веществ, вступивших в реакцию



Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 6.26. Математической моделью процесса инверсии сахара (если a – начальное количество сахара в растворе, x – количество сахара, которое инвертируется к моменту времени t) является:

А	Б	В	Г	Д
$dx = (a-x)dt$	$dx = k(a-x)dt$	$dx = k(x-a)dt$	$dx = (a+x)dt$	$dx = axdt$

Задание 6.27. По известному закону инверсии сахара и его начальному количеству a и коэффициенту скорости процесса k определите время, за которое количество сахара уменьшится вдвое:

А	Б	В	Г	Д
$t = 2k$	$t = \frac{k}{2}$	$t = \ln 2k$	$t = \frac{\ln 2}{k}$	$t = \sqrt{k}$

Задание 6.28. Математической моделью размножения бактерий, если известно, что скорость размножения бактерий пропорциональна их количеству, является выражение:

А	Б	В	Г	Д
$\frac{dx}{dt} = kx$	$\frac{dx}{dt} = k + x$	$\frac{dx}{dt} = k - x$	$\frac{dx}{dt} = \frac{k}{x}$	$\frac{dx}{dt} = \frac{x}{k}$

Задание 6.29. В начальный момент имелось 200 бактерий. В течение 5 часов их число увеличилось в 4 раза. Определите зависимость количества бактерий от времени:

А	Б	В	Г	Д
$x = 200 \cdot \frac{4t}{5}$	$x = 200 \cdot 5^{\frac{t}{4}}$	$x = 200 + 4^{\frac{t}{5}}$	$x = 200 - 4^{\frac{t}{5}}$	$x = 200 \cdot 4^{\frac{t}{5}}$

Задание 6.30. Реакция омыления уксусноэтилового эфира едким натром соответствует:

А	Б	В	Г	Д
химической реакции первого порядка	химической реакции второго порядка	химической реакции третьего порядка	химической реакции четвертого порядка	химической реакции пятого порядка

Задание 6.31. В культуре пивных дрожжей быстрота прироста действующего фермента пропорциональна наличному его количеству x. Первоначальное количество фермента a в течение часа удвоилось. Определите во сколько раз оно увеличится через 3 часа:

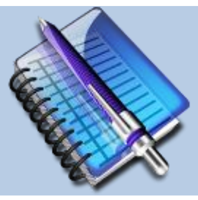
А	Б	В	Г	Д
в 2 раза	в 4 раза	в 8 раз	в 10 раз	в 12 раз

Задание 6.32. Выход вещества S в одной химической реакции составляет r молей за минуту. В то же время оно расходуется со скоростью c молей за минуту на каждый моль S. Определим $S(t)$ как число молей вещества, имеющегося в момент времени t. Составьте дифференциальное уравнение, которое удовлетворяет $S(t)$.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$S'(t)=r-cS(t)$	$S'(t)=r-c$	$S'(t)=rcS(t)$	$S'(t)=r+cS(t)$	$S'(t)=c-rS(t)$

Задание 6.33. Установите соответствие между химическими процессами и их математическими моделями (законами):

1	скорость размножения бактерий	**А**	$dt=\dfrac{dx}{k(a-x)(b-x)}$
2	реакция омыления уксусноэтилового эфира едким натром	**Б**	$\dfrac{dx}{dt}=k(a-x)$
3	инверсия сахара	**В**	$x=a\left(1-e^{-kt}\right)$
4	модель радиоактивного распада	**Г**	$x=Ce^{kt}$
		Д	$y'=\dfrac{dy}{dt}$



Решите задачи самостоятельно

Задача 6.18. В воде растворяется бензойная кислота. Спустя 10 минут после начала растворения концентрация раствора составляет 6 %. Найдите концентрацию раствора спустя 30 минут, считая скорость растворения пропорциональной разности концентраций насыщенного и существующего в данный момент растворов.

Задача 6.19. В воде с температурой 20° в течение 10 минут тело охлаждается от 100° до 60° С. Во сколько времени тело охладится до 30° С, если по закону Ньютона скорость охлаждения пропорциональна разности температур тела и охлаждающей среды?

Задача 6.20. Если при постоянной температуре скорость растворения твердого тела M в жидкости пропорциональна количеству этого вещества, еще могущего раствориться до полного насыщения жидкости, то какова зависимость количества x растворившегося вещества от времени t?

Задача 6.21. Определите константу скорости реакции второго порядка при различных концентрациях a и b веществ А и В.

Задача 6.22. Определите константу скорости реакции второго порядка при равных концентрациях веществ А и В.

Задача 6.23. Скорость распада радия пропорциональна его наличному количеству. Половина его первоначального количества распадается в течение 1600 лет. Какой процент данного количества a радия распадается в течение 100 лет?

Задача 6.24. ВеществоA превращается в вещество B. Спустя 1 час после начала реакции осталось 44,8 г вещества A, а после 3 часов – 11,2 г вещества. Определить первоначальное количество вещества A и время, когда останется половина этого вещества.

Задача 6.25. Известно, что реакция разложения N_2O_5 протекает как реакция первого порядка. При температуре 300 К константа скорости $k = 0{,}002$ мин$^{-1}$. Сколько процентов N_2O_5 разложится за 2 часа?

Задача 6.26. Некоторое вещество преобразовывается в другое со скоростью, пропорциональной количеству непреобразованного вещества. Количество непреобразованного вещества через час равно 31,4 г, через 3 часа – 9,7 г. Найдите зависимость количества непреобразованного вещества x от времени t.

Задача 6.27. Согласно закону действующих масс скорость реакции пропорциональна концентрациям реагирующих веществ в данный момент времени. Пусть a – начальная концентрация вещества A, $x(t)$ – количество молей на литр, которые прореагировали за время t от начала реакции, тогда концентрация на этот момент равна $a-x$. Опишите этот процесс дифференциальным уравнением. Определите концентрацию реагирующего вещества на время t от начала реакции, если $x(0)=0$.

Задача 6.28. Установлено, что реакция второго порядка с одним реагентом завершается на 75% за 92 мин при начальной концентрации реагента $C_0 = 2,4$ моль/л. Какое время потребуется, чтобы при тех же условиях концентрация реагента достигла 0,16 моль/л?

Задача 6.29. Реакция омыления уксусно-этилового эфира гидроксидом калия является реакцией второго порядка:

$$CH_3COOC_2H_5 + KOH = CH_3COOK + C_2H_5OH.$$

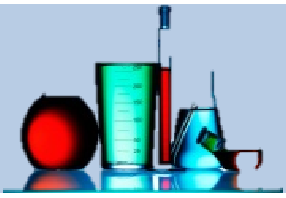
Через 10 мин после начала реакции концентрация KOH была равна 0,04 моль/л. Сколько времени необходимо, чтобы исходные вещества прореагировали на 75 %? Начальные концентрации исходных веществ одинаковы и равны 0,1 н.

Задача 6.30. Известно, что реакция омыления эфира

$$CH_3COOC_2H_5 + NaOH \rightarrow CH_3COONa + C_2H_5OH$$

протекает как реакция второго порядка. При T = 298 K константа скорости k = 5,4 кмоль/(м$^{3}\cdot$мин). Исходные концентрации щелочи и эфира (C_0) составляют 0,02 кмоль/м^3. Сколько процентов эфира прореагирует за 10 мин?

7. РЯДЫ



Учимся выполнять математические действия, решая профессионально ориентированные задачи

Задача 7.1. Пульпа содержит 60 кг воды, в которой на 1 кг воды приходится 0,2 кг соли. Осадок последовательно промывают водой для отмывания растворенной соли. При каждой промывке пульпа смешивается со 140 кг свежей воды. После этого вода сливается и в пульпе опять остается 60 кг воды. Сколько соли будет вымыто после третьей промывки?

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные***

Пусть первоначально в пульпе находилось a кг воды с концентрацией x_0 растворенной в ней соли; при каждой промывке в пульпу поступает b кг чистой воды концентрация раствора после n-й промывки равна x_n, y – общее количество растворенной соли, извлекаемой промывной водой.

2) ***Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные***

Введенные переменные не могут принимать отрицательные значения.

3) ***Составить соотношения, связывающие введенные переменные***

Для $n=1$ имеем:

$$ax_0 = ax_1 + bx_1 .$$

Откуда концентрация раствора после первой промывки:

$$x_1 = \left(\frac{a}{a+b}\right)x_0 .$$

Тогда концентрация раствора после n-й промывки:

$$x_n = \left(\frac{a}{a+b}\right)^n x_0 .$$

Общее количество растворенной соли, вымываемое свежей водой после n промывок, будет равно:

$$y = bx_1 + bx_2 + bx_3 + \ldots + bx_n + = \left(\frac{a}{a+b} + \left(\frac{a}{a+b}\right)^2 + \ldots + \left(\frac{a}{a+b}\right)^n\right)bx_0 .$$

С увеличением числа промывок, то есть при n, стремящимся к ∞, количество вымытой соли будет стремиться к ax_0, и в результате получим:

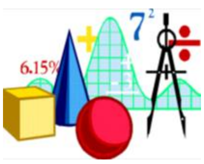
$$ax_0 = \left(\frac{a}{a+b} + \left(\frac{a}{a+b}\right)^2 + \left(\frac{a}{a+b}\right)^3 + \ldots\right)bx_0 = bx_0\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{a}{a+b}\right)^n . \qquad (7.1)$$

Правая часть полученного равенства представляет собой бесконечный ряд.

Так как в рассматриваемом примере a *и* b – положительные числа и, следовательно, $\frac{a}{a+b}$ является правильной дробью, то $\left(\frac{a}{a+b}\right)^n$ стремится к нулю с увеличением n. Сумма n членов ряда (7.1) стремится к определенному пределу, когда n стремится к бесконечности. Ряд (7.1) является *сходящимся*.

4) *Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача*

Найти значение выражения (7.1) при a= 60, b= 140, x_0 = 0,2 и n= 3.



Опорные знания по математике

1. Числовые ряды: определение, понятие n-ой суммы ряда.
2. Сходимость рядов числовых рядов: определение сходимости, необходимое условие сходимости

Выполняем математические действия

Согласно условию задачи первоначально количество соли в растворе составляло $ax_0 = 60 \cdot 0,2 = 12$ кг. Чтобы начти количество вымытой соли y после третьей промывки необходимо вычислить значение последнего соотношения в (7.1), учитывая, что сумма числового ряда будет вычисляться при $n = \overline{1,3}$:

$$y = bx_0 \sum_{n=1}^{3} \left(\frac{a}{a+b} \right)^n = 140 \cdot 0,2 \cdot \left(\frac{60}{60+140} + \left(\frac{60}{60+140} \right)^2 + \left(\frac{60}{60+140} \right)^3 \right) =$$

$$= 140 \cdot 0,2 \cdot \left(0,3 + 0,09 + 0,027 \right) = 11,676.$$

5) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Таким образом, после третьей промывки почти вся соль будет вымыта.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Для избегания громоздких вычислений воспользуемся программой *MicrosoftMathematics* (чтобы вычислить сумму).

В разделе *Вычисления* выбираем *Сумма ряда* и вводим выражение:

seriesSum((60/(60+140))^n,n,1,3).

По нажатию на кнопку *Ввод* программа выведет на экран результат суммирования (рис 7.1).

Затем остается полученный результат умножить на 140 и 0,2. Получим: 11,676 кг.

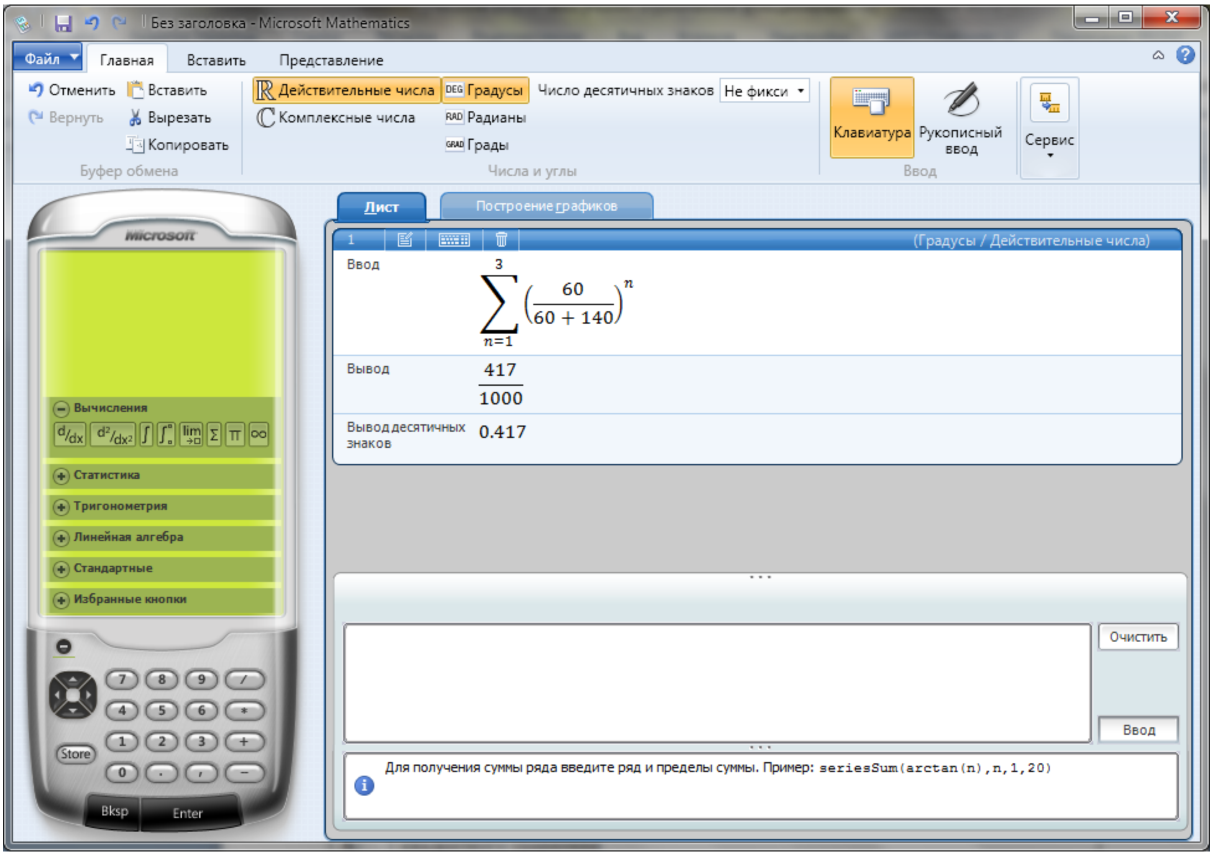


Рисунок 7.1 – Результат вычисления суммы
с помощью приложения *MicrosoftMathematics*

Задача 7.2. Полимер содержит 10 кг водорастворимой примеси с концентрацией 0,2 кг. Для ее извлечения измельченный полимер заливается 20 кг воды и интенсивно перемешивается в течение длительного времени. Затем вода сливается и процесс отмывки повторяется. Найти общее количество вещества, извлеченного из полимера после первых двух последовательных отмывок.

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) ***Ввести переменные.***

Пусть a – объем измельченного полимера, содержащего исходно примесь в концентрации c_0, и пусть b – объем воды, используемый на данной стадии отмывки.

2) *Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.*

Введенные переменные не могут принимать отрицательные значения.

3) *Составить соотношения, связывающие введенные переменные.*

Запишем уравнение математического баланса для k-й отмывки, когда концентрация примеси стала равной c_{k-1}:

$$ac_{k-1} = ac_k + bc_k, \quad k = 1,\ 2,\ \dots$$

Отсюда получаем рекуррентную формулу:

$$c_k = \frac{a}{a+b} c_{k-1},$$

из которой

$$c_k = \left(\frac{a}{a+b} \right)^k c_0.$$

Общее количество вещества, извлеченного из полимера после n последовательных отмывок, равно

$$bc_1 + bc_2 + \dots + bc_n = b \sum_{k=1}^{n} c_k.$$

Если этот процесс считать повторяющимся бесконечное число раз, то количество извлеченного вещества выразится рядом:

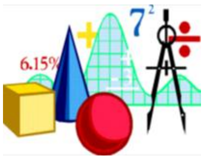
$$\sum bc_k = bc_0 \sum \left(\frac{a}{a+b} \right)^k, \tag{7.2}$$

который сходится как геометрический ряд со знаменателем $q ::= \dfrac{a}{a+b} < 1.$

Сумма его равна $S = bc_0 \dfrac{\frac{a}{a+b}}{1 - \frac{a}{a+b}} = ac_0.$

4) *Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.*

Вычислить сумму (7.2) при a= 10, b= 20, c = 0,2 и n= 2.



Опорные знания по математике

1. Числовые ряды: определение, понятие n-ой суммы ряда.
2. Сходимость рядов числовых рядов: определение сходимости, необходимое условие сходимости

Выполняем математические действия

По условию задачи первоначально количество примеси в полимере составляло $ac_0 = 10 \cdot 0,2 = 2$ кг. Найдем количество извлеченного вещества после второй промывки.

Количество вещества, извлеченного из полимера после первой отмывки:

$$bc_0 \sum_{k=1}^{1} \left(\frac{a}{a+b} \right)^k = 20 \cdot 0,2 \cdot \left(\frac{10}{10+20} \right) = 20 \cdot 0,2 \cdot 0,333 = 1,333.$$

Количество вещества, извлеченного из полимера после второй последовательной отмывки:

$$bc_0 \sum_{k=1}^{2} \left(\frac{a}{a+b} \right)^k = 20 \cdot 0,2 \cdot \left(\frac{10}{10+20} + \left(\frac{10}{10+20} \right)^2 \right) =$$

$$= 20 \cdot 0,2 \cdot 0,333 \cdot 0,111 = 1,778.$$

5) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Таким образом, после первой отмывки 1,333 кг вещества, извлечено из полимера; после второй – 1,778 кг.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Аналогично рассмотренному для задачи 7.1 алгоритму вычислим соответствующие суммы в задаче 7.2 (рис. 7.2).

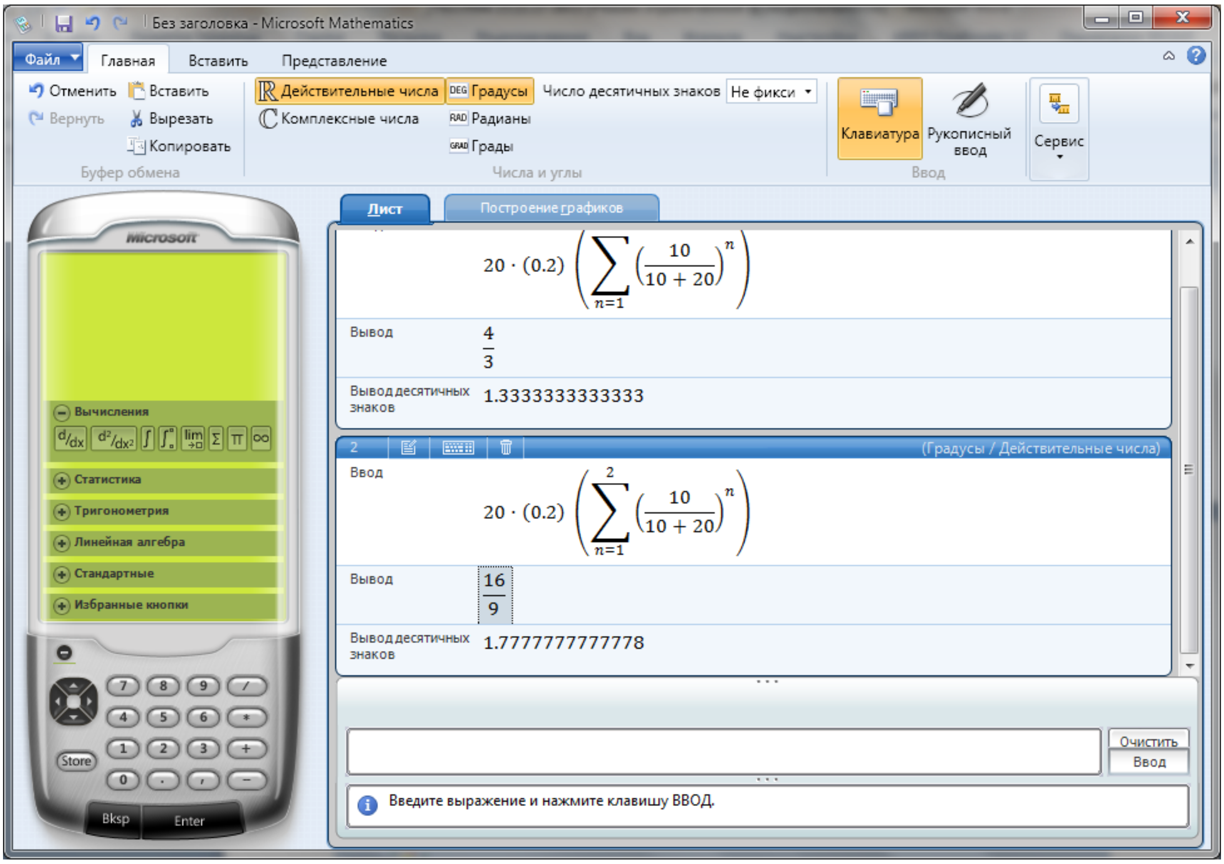


Рисунок 7.2 – Результат вычисления сумм
с помощью приложения *Microsoft Mathematics*

Задача 7.3. Раствор содержит 30 кг воды, в которой на 1 кг воды приходится 0,3 кг сахара. Осадок последовательно промывают свежей водой для отмывания растворенного сахара. При каждой промывке раствор подвергается интенсивному перемешиванию с 50 кг свежей воды. После перемешивания раствор отстаивается и сливается, а в растворе снова остается 30 кг воды. Сколько промывок нужно сделать, чтобы вымыть более 8,8 кг сахара?

Действия по математическому моделированию, которые необходимо выполнить

1) *Ввести переменные.*

Пусть a – количество растворенного сахара концентрации x_0, и пусть y – количество вымытого сахара после n-ой промывки.

2) *Определить условия, которым должны удовлетворять введенные переменные.*

Введенные переменные не могут принимать отрицательные значения.

3) *Составить соотношения, связывающие введенные переменные.*

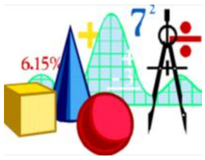
Согласно условию задачи первоначально количество сахара в растворе составляло $ax_0 = 30 \cdot 0,3 = 9$ кг.

Определим количество вымытого сахара y после первой n-ой промывки:

$$y = bx_0 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a}{a+b} \right)^n .$$

4) *Сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача.*

Найти значение n, при котором значение y больше 8,8.



Опорные знания по математике

1. Числовые ряды: определение, понятие n-ой суммы ряда.

Выполняем математические действия

Найдем значение y при n = 1:

$$y_1 = bx_0 \sum_{n=1}^{1} \left(\frac{a}{a+b} \right)^n = 50 \cdot 0,3 \cdot \left(\frac{30}{30+50} \right) = 50 \cdot 0,3 \cdot 0,375 = 5,625.$$

Найдем значение y при $n = 2$:

$$y_2 = bx_0 \sum_{n=1}^{2} \left(\frac{a}{a+b} \right)^n = 50 \cdot 0,3 \cdot \left(\frac{30}{30+50} + \left(\frac{30}{30+50} \right)^2 \right) =$$

$$= 50 \cdot 0,3 \cdot (0,375 + 0,141) = 7,74.$$

Найдем значениеy при $n = 3$:

$$y_3 = bx_0 \sum_{n=1}^{3} \left(\frac{a}{a+b} \right)^n = 50 \cdot 0,3 \cdot \left(\frac{30}{30+50} + \left(\frac{30}{30+50} \right)^2 + \left(\frac{30}{30+50} \right)^3 \right) =$$

$$= 50 \cdot 0,3 \cdot \left(0,375 + 0,141 + 0,053 \right) = 8,535.$$

Найдем значениеy при $n = 4$:

$$y_4 = bx_0 \sum_{n=1}^{4} \left(\frac{a}{a+b} \right)^n =$$

$$= 50 \cdot 0,3 \cdot \left(\frac{30}{30+50} + \left(\frac{30}{30+50} \right)^2 + \left(\frac{30}{30+50} \right)^3 + \left(\frac{30}{30+50} \right)^4 \right) =$$

$$= 50 \cdot 0,3 \cdot \left(0,375 + 0,141 + 0,053 + 0,02 \right) = 8,835.$$

5) ***Интерпретация полученных результатов в терминах исходной задачи.***

Таким образом, после четвертой промывки вымоется более 8,8 кг сахара.

Применение средств ИКТ для анализа и решения задачи

Рассмотрим графическую интерпретацию задачи 7.3 с помощью программы *AdvancedGrapher*.

Построим график по точкам, координаты которых соответствуют номеру промывки и количеству вымытого сахара. Выберем на панели инструментов кнопку*Добавить график таблицы* и введем значения:

	X *(номер промывки)*	**Y** *(количество вымытого сахара)*
1	0	0
2	1	5,625
3	2	7,74
4	3	8,535
5	4	8,835

Выбираем свойства графика и нажимаем *OK*.

Для более наглядного анализа можно отметить графически сколько всего в растворе было сахара: построить график функции $y = 9\ (30 \cdot 0{,}3 = 9)$.

Результат построений изображен на рисунке 7.3.

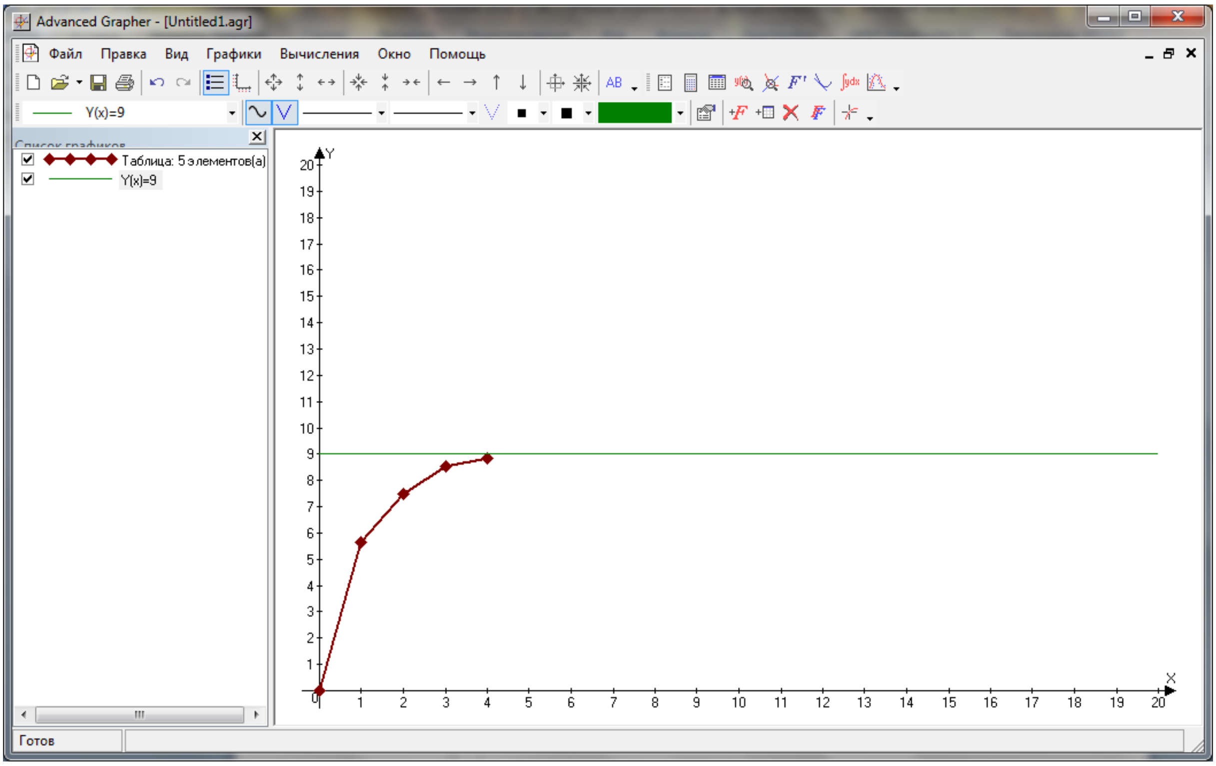


Рисунок 7.3 – Построение графиков с помощью программы *AdvancedGrapher*

Тестовые задания для освоения действий по математическому моделированию

Задание 7.1. Математическая модель для нахождения извлеченного вещества после отмывок представляется в виде:

А:	квадратного уравнения
Б:	числового ряда
В:	логарифма
Г:	дифференциального уравнения
Д:	неравенств

Задание 7.2. В задачах на нахождение извлеченного вещества после отмывок процесс промывки выполняется:

А:	не более ста раз
Б:	один и только один раз
В:	один или два раза
Г:	бесконечное число раз
Д:	не более десяти раз

Задание 7.3. Количество вымытого вещества из раствора с каждой промывкой:

А:	уменьшается
Б:	увеличивается
В:	останется неизменным
Г:	увеличивается в два раза
Д:	уменьшается в два раза

Задание 7.4. С каждой промывкой количество вещества в растворе:

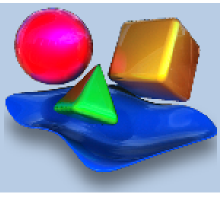
А:	уменьшается
Б:	увеличивается
В:	останется неизменным
Г:	увеличивается в два раза
Д:	уменьшается в два раза

Задание 7.5. Количеством воды в растворе и количеством поступающей воды для промывки являются:

А:	положительные и отрицательные числа
Б:	целые отрицательные числа
В:	отрицательные числа
Г:	положительные числа
Д:	четные положительные числа

Задание 7.6. Определите правильную последовательность действий по математическому моделированию, которые нужно выполнить для получения математической модели при нахождении извлеченного вещества после отмывок:

1.	**А:**	выразить искомую величину через введенные переменные
2.	**Б:**	описать зависимости между переменными.
3.	**В:**	сформулировать математическую задачу, к которой сводится исходная химическая задача
4.	**Г:**	определить в терминах введенных переменных, что нужно сделать в задаче
5.	**Д:**	ввести переменные



Тестовые задания по составлению математических моделей

Задание 7.7. Пусть первоначально в пульпе находилось а кг воды с концентрацией x_0 растворенной в ней соли; при каждой промывке в пульпу поступает b кг чистой воды концентрация раствора после n-й промывки равна x_n:

А:	$x_n = bx_0\left(\dfrac{a}{a+b}\right)$
Б:	$x_n = \left(\dfrac{a}{a+b}\right)x_0$
В:	$x_n = \left(\dfrac{a}{a+b}\right)^n x_0$
Г:	$x_n = n\left(\dfrac{a}{a+b}\right)x_0$
Д:	$x_n = \left(\left(\dfrac{a}{a+b}\right)x_0\right)^n$

Задание 7.8. Раствор содержит 20 кг воды, в которой на 1 кг воды приходится 0,4 кг соды. Укажите количество сахара в растворе:

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
8 г	8кг	50 г	50 кг	10, 1 кг

Задание 7.9. Известно, что после первой промывки количество вымытого вещества выражается формулой $y = 30 \cdot 0{,}4 \cdot \left(\dfrac{20}{20+30}\right)$. Найти количество вымытого вещества после второй промывки.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
6,72 кг	4,8 кг	67,2 кг	48 кг	25 кг

Задание 7.10. Известно, что после первой промывки количество вымытого вещества выражается формулой $y = bx_0 \sum\limits_{n=1}\left(\dfrac{a}{a+b}\right) = 30 \cdot 0{,}4 \cdot \left(\dfrac{20}{20+30}\right)$. Укажите формулу для нахождения вымытого вещества после третей промывки.

А:	$y = 12 \cdot \left(\frac{20}{50}\right)^3$
Б:	$y = \left(12 \cdot \left(\frac{20}{50}\right)\right)^3$
В:	$y = 21 \cdot \sum_{n=1}^{3} \left(\frac{20}{50}\right)^3$
Г:	$y = 12 \cdot \sum_{n=1}^{3} \left(\frac{20}{50}\right)^n$
Д:	$y = 12 \cdot \sum_{n=1}^{3} \left(\frac{20}{50}\right)^2$

Задание 7.11. Установите соответствие между формулой вычисления вещества *y*, извлеченного из раствора (1-4) и номером промывки (А-Д):

1	$y = bx_0 \left(\frac{a}{a+b} + \left(\frac{a}{a+b}\right)^2 + \left(\frac{a}{a+b}\right)^3\right)$	**А**	первая
2	$y = bx_0 \left(\frac{a}{a+b}\right)$	**Б**	вторая
3	$y = bx_0 \sum_{n=1}^{5} \left(\frac{a}{a+b}\right)^n$	**В**	третья
4	$y = bx_0 \left(\frac{a}{a+b} + \left(\frac{a}{a+b}\right)^2\right)$	**Г**	четвертая
		Д	пятая

Решите задачи самостоятельно

Задача 7.4. Смесь содержит 50 кг воды, в которой на 1 кг воды приходится 0,7 кг кислоты. Осадок последовательно промывают водой для отмывания растворенной кислоты. При каждой промывке жидкость смешивается со 120 кг свежей воды. После этого вода сливается и в смеси опять остается 50 кг воды. Сколько кислоты будет вымыто после пятой промывки?

Задача 7.5. Полимер содержит 10 кг водорастворимой примеси с концентрацией 0,2 кг. Для ее извлечения измельченный полимер заливается 20 кг воды и интенсивно перемешивается в течение длительного времени. Затем вода сливается и процесс отмывки повторяется. Найти общее количество вещества, извлеченного из полимера после 6 последовательных отмывок.

Задача 7.6. Пульпа содержит 40 кг воды, в которой на 1 кг воды приходится 0,4 кг щелочи. Осадок последовательно промывают холодной водой для отмывания растворенной щелочи. При каждой промывке пульпа смешивается со 110 кг чистой воды. После этого вода сливается и в пульпе опять остается 40 кг воды. Найти количество вымытой щелочи после третей промывки.

Задача 7.7. Раствор содержит 20 кг воды, в которой на 1 кг воды приходится 0,1 кг перманганата калия. Осадок последовательно промывают свежей водой для отмывания растворенного перманганата калия. При каждой промывке раствор подвергается интенсивному перемешиванию с 30 кг свежей воды. После перемешивания раствор отстаивается и сливается, а в растворе снова остается 20 кг воды. Какое количество перманганата калия будет извлечено после седьмой промывки?

8. ИТОГОВОЕ ТЕСТИРОВАНИЕ

Задание 8.1. Какое количество уравнений необходимо ввести для балансировки уравнения химической реакции

А:	равное количеству атомов в левой и правой части уравнения
Б:	равное количеству молекул в левой и правой части уравнения
В:	равное количеству элементов, участвующих в реакции
Г:	равное количеству веществ, участвующих в реакции
Д:	равное количеству молей каждого вещества, участвующего в реакции

Задание 8.2. Укажите соотношение, уравнивающее количество водорода (Н) в правой и левой части уравнения химической реакции $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$, если через *x, y, z* обозначены количества молекул H_2 , O_2 и H_2O соответственно.

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$2x = 2z$	$2y = 2z$	$2y = z$	$2x = z$	$x = 2z$

Задание 8.3. Материальный баланс представляет вещественное выражение закона сохранения массы применительно к химико-технологическому процессу…

А:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию не равна массе веществ, полученных в этой операции
Б:	концентрация веществ, поступивших на технологическую операцию равна концентрации веществ, полученных в этой операции
В:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию равна массе веществ, полученных в этой операции
Г:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию не больше массы веществ, полученных в этой операции
Д:	масса веществ, поступивших на технологическую операцию не меньше массы веществ, полученных в этой операции

Задание 8.4. Установите соответствие между названиями матриц, соответствующих системе уравнений, являющейся математической модельюматериального баланса:

$$\begin{cases} 5x_1 + 0x_2 + 30x_3 = 22; \\ 85x_1 + 0x_2 + 0x_3 = 16; \\ 10x_1 + 104x_2 + 70x_3 = 62. \end{cases}$$

1	главная матрица системы	**А**	$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 30 & 22 \\ 85 & 0 & 0 & 16 \\ 10 & 104 & 70 & 62 \end{pmatrix}$
2	матрица столбец переменных	**Б**	$\begin{pmatrix} 22 \\ 16 \\ 62 \end{pmatrix}$
3	матрица столбец правых частей уравнений	**В**	$(x_1;\, x_2;\, x_3)$
4	расширенная матрица системы	**Г**	$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$
		Д	$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 30 \\ 85 & 0 & 0 \\ 10 & 104 & 70 \end{pmatrix}$

Задание 8.5. Для графического способа химических расчетов получают функциональные зависимости между…

А:	количеством веществ и массовыми долями элементов, входящих в состав вещества
Б:	величинами относительных молекулярных масс и количеством элементов, входящих в состав вещества
В:	величинами относительных молекулярных масс и валентностью элементов, входящих в состав вещества
Г:	величинами относительных молекулярных масс и массовыми долями элементов, входящих в состав вещества
Д:	величинами относительных молекулярных масс и температурой элементов, входящих в состав вещества

Задание 8.6. Установите соответствие между таблицей значений зависимости массы вещества в растворе В (*г*) от массы растрорителя А (*г*) (1-4) и линейной функцией, которая эту зависимость описывает (А-Д).

1	А 0 50 В 0 180	**А**	$y=4x$
2	А 0 50 В 0 20	**Б**	$y=2,4x$
3	А 0 50 В 0 200	**В**	$y=3,6x$
4	А 0 50 В 0 120	**Г**	$y=2,5x$
		Д	$y=0,4x$

Задание 8.7. Скорость химической реакции как функция зависит от:

А:	времени
Б:	массы
В:	концентрации
Г:	количества реагентов
Д:	является постоянной величиной

Задание 8.8. Если $C(t)-$ концентрация некоторого вещества, $v(t)-$ скороcти химической реакции, t – время ее протекания, то данные переменные связаны соотношением:

А:	$C(t)=v'(t)$
Б:	$v(t)=C'(t)$
В:	$C(t)=\dfrac{v(t)}{t}$
Г:	$v(t)=\dfrac{C(t)}{t}$
Д:	$v(t)=\sqrt{C(t)}$

Задание 8.9. Разложение некоторого химического вещества происходит по закону $m(t) = m_0 e^{-kt}$, где $m(t)$ – масса вещества (в г) в момент времени t (в с), m_0 – начальная масса, k – некоторая постоянная. Найдите скорость распада в момент $t = 8$ с равна:

А	Б	В	Г	Д
$v = -km_0 e^{-8k}$	$v = km_0 e^{-8k}$	$v = -m_0 e^{-8k}$	$v = m_0 e^{-8k}$	$v = -ke^{-8k}$

Задание 8.10. Пусть в реакции участвуют два вещества с концентрациями в объемных процентах соответственно x и y. Тогда переменные x и y связаны соотношением:

А:	$x = y - 100$
Б:	$x = 100 \cdot y$
В:	$x = 100 + y$
Г:	$x = 100 - y$
Д:	$x = 100 : y$

Задание 8.11. Установите соответствие между химическими реакциями и их кинетическими уравнениями, если x – концентрация первого реагента, y – второго:

1	$2NO + Br_2 = 2NOBr_2$	**А**	$v = kxy$
2	3A + B =2C	**Б**	$v = kx$
3	$H_2 + J_2 = 2HJ$	**В**	$v = kx^2y^2$
4	$2HI = H_2 + I_2$	**Г**	$v = kx^2y$
		Д	$v = kx^3y$

Задание 8.12. Вычислите изменение энтропии при нагревании одного моля CdS от –120 до 0 °C, если зависимость мольной теплоемкости от температуры выражается уравнением $C_P = 54{,}0 + 3{,}8 \cdot 10^{-3} T$ Дж/(моль·К).

А	Б	В	Г	Д
4,97 Дж/(моль·К)	16,25 Дж/(моль·К)	40,01 Дж/(моль·К)	24,97 Дж/(моль·К)	12,37 Дж/(моль·К)

Задание 8.13. Математическая модель связи количества теплоты q и истинной теплоемкости C в интервале температур от T_1 до T_2 представляет собой соотношение:

А:	$q = \int_{T_1}^{T_2} C dT$
Б:	$q = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} C dT$
В:	$q = \frac{1}{T_1 + T_2} \int_{T_1}^{T_2} C dT$
Г:	$q = -\int_{T_1}^{T_2} C dT$
Д:	$q = \int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{C}$

Задание 8.14. Истинная молярная теплоемкость серебра в интервале температур от 273 К до 1234 К выражается уравнением $C_p(T) = 23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3} T - 0{,}25 \cdot 10^{-5} T^{-2}$. Математической моделью средней молярной теплоемкости в интервале от 298 К до 700 К является выражение:

А:	$\bar{C} = \frac{1}{1234 - 273} \int_{273}^{1234} \left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3} T - 0{,}25 \cdot 10^{-5} T^{-2}\right) dT$
Б:	$\bar{C} = \frac{1}{700 - 298} \int_{298}^{700} \left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3} T - 0{,}25 \cdot 10^{-5} T^{-2}\right) dT$
В:	$\bar{C} = \int_{273}^{1234} \left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3} T - 0{,}25 \cdot 10^{-5} T^{-2}\right) dT$
Г:	$\bar{C} = \int_{298}^{700} \left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3} T - 0{,}25 \cdot 10^{-5} T^{-2}\right) dT$
Д:	$\bar{C} = \frac{1}{273 + 1234} \int_{273}^{1234} \left(23{,}97 + 5{,}28 \cdot 10^{-3} T - 0{,}25 \cdot 10^{-5} T^{-2}\right) dT$

Задание 8.15. Если C – концентрация вещества, t – время, v – скорость реакции, то эти переменные связаны соотношением:

А:	$C = \frac{\Delta v}{\Delta t}$
Б:	$v = \frac{\Delta C}{\Delta t}$
В:	$t = \frac{\Delta v}{\Delta C}$
Г:	$v = \int C dt$
Д:	$C = \int v dt$

Задание 8.16. Некоторое вещество преобразовывается в другое со скоростью, пропорциональной количеству непреобразованного вещества. Если первоначально было x_0 вещества, то зависимость количества непреобразованного вещества x от времени t выражается соотношением:

А:	$x(t) = e^{-kt}$
Б:	$x(t) = x_0 e^{-kt}$
В:	$x(t) = x_0^{-kt}$
Г:	$x(t) = x_0 e^{t}$
Д:	$x(t) = e^{-t}$

Задание 8.17. Установите соответствие между моделями химических процессов и их математической интерпретацией:

1	модель распада радиоактивного вещества	**А**	$\frac{dn}{dt} = q - kn^2,$
2	модель реакции первого порядка	**Б**	$\frac{\mathrm{dN}}{\mathrm{dt}} = -\lambda \mathrm{N}$
3	модель ионизации газа	**В**	$S'(t) = r - cS(t)$
4	модель выхода вещества в химической реакции	**Г**	$da = (100 - a)dx$
		Д	$v = \frac{dc}{dt} = -kc,$

Задание 8.18. В дифференциальном уравнении $dt = \dfrac{dx}{k(a-x)(b-x)}$, которое описывает химическую реакцию второго порядка, переменная k обозначает:

А:	константу скорости реакции
Б:	концентрацию веществ, вступивших в реакцию
В:	температуру, при которой протекает реакция
Г:	время протекания реакции
Д:	количество молей веществ, вступивших в реакцию

Задание 8.19. Математической моделью процесса инверсии сахара (если a – начальное количество сахара в растворе, x – количество сахара, которое инвертируется к моменту времени t) *является:*

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$dx = (a-x)dt$	$dx = k(a-x)dt$	$dx = k(x-a)dt$	$dx = (a+x)dt$	$dx = axdt$

Задание 8.20. Установите соответствие между химическими процессами и их математическими моделями (законами):

1	скорость размножения бактерий	**А**	$dt = \dfrac{dx}{k(a-x)(b-x)}$
2	реакция омыления уксусноэтилового эфира едким натром	**Б**	$\dfrac{dx}{dt} = k(a-x)$
3	инверсия сахара	**В**	$x = a\left(1-e^{-kt}\right)$
4	модель радиоактивного распада	**Г**	$x = Ce^{kt}$
		Д	$y' = \dfrac{dy}{dt}$

Задание 8.21. Известно, что после первой промывки количество вымытого вещества выражается формулой $y = 30 \cdot 0{,}4 \cdot \left(\dfrac{20}{20+30}\right)$. Найти количество вымытого вещества после второй промывки.

А	Б	В	Г	Д
6,72 кг	4,8 кг	67,2 кг	48 кг	25 кг

Задание 8.22. Известно, что после первой промывки количество вымытого вещества выражается формулой $y = bx_0 \sum_{n=1} \left(\frac{a}{a+b} \right) = 30 \cdot 0,4 \cdot \left(\frac{20}{20+30} \right)$. Укажите формулу для нахождения вымытого вещества после третей промывки.

А:	$y = 12 \cdot \left(\frac{20}{50} \right)^3$
Б:	$y = \left(12 \cdot \left(\frac{20}{50} \right) \right)^3$
В:	$y = 21 \cdot \sum_{n=1}^{3} \left(\frac{20}{50} \right)^3$
Г:	$y = 12 \cdot \sum_{n=1}^{3} \left(\frac{20}{50} \right)^n$
Д:	$y = 12 \cdot \sum_{n=1}^{3} \left(\frac{20}{50} \right)^2$

Задание 8.23. Пусть функция *y = f(x)* непрерывна на отрезке [a; b] и *F(x)* – одна из первообразных функции на этом отрезке, тогда справедлива формула:

А:	$\int_a^b f(x)dx = F(a) - F(b)$
Б:	$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$
В:	$\int_a^b f(x)dx = F(a) + F(b)$
Г:	$\int_a^b f(x)dx = f(a) - f(b)$
Д:	$\int_a^b f(x)dx = f(b) - f(a)$

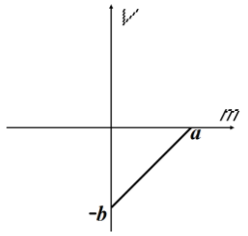
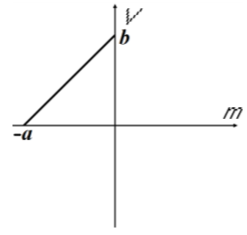
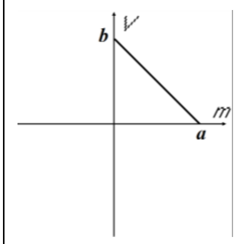
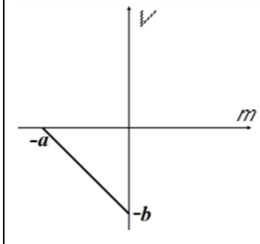
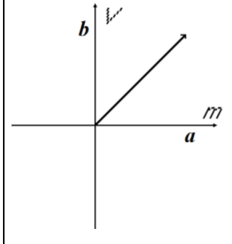
Задание 8.24. Считая молярную теплоемкость C азота равной $\frac{7}{2}$ и постоянной, изменение энтропии при нагревании 10 г N_2 (молярная масса $M(\mathrm{N_2}) = 28$ г/моль) от 0 до 100 ^{o}C при постоянном давлении выражается соотношением:

А:	$\Delta S = \frac{10}{28}\int_{273}^{373}\frac{7}{2}R\frac{dT}{T}$
Б:	$\Delta S = \frac{28}{10}\int_{273}^{373}\frac{7}{2}R\frac{dT}{T}$
В:	$\Delta S = \int_{273}^{373}\frac{7}{2}R\frac{dT}{T}$
Г:	$\Delta S = \frac{10}{28}\int_{273}^{373}\frac{7}{2}\frac{dT}{T}$
Д:	$\Delta S = \frac{10}{28}\int_{273}^{373}\frac{dT}{T}$

Задание 8.25. Истинная удельная теплоемкость алюминия выражается уравнением: $C_p = 0,7657 + 4,586\cdot10^{-4}T$ Дж·г$^{-1}$·К$^{-1}$. Алюминий плавится при 658,5 ^{o}C, его удельная теплота плавления равна 386,6 Дж/г. Вычислите, сколько тепла требуется на расплавление 500 г алюминия, если начальная температура была равна 25 ^{o}C.

А	Б	В	Г	Д
25135 Дж	105727 Дж	663,67 Дж	341206 Дж	525135 Дж

Задание 8.26. На каком рисунке изображена реакция окисления $\frac{m(метанола)}{a} = \frac{V(CO_2)}{b}$

А	Б	В	Г	Д
				

Задание 8.27. Центром масс системы называют точку …

А:	расстояние до которой от всех элементов системы равны
Б:	относительно которой суммарный момент силтяжести (действующих на систему) равен нулю.
В:	вкоторой массы всех элементов системы равны
Г:	которая обладает тем свойством, что ее статистический момент относительно любой оси (или точки) равен статистическому моменту системы относительно той же оси (или точки).
Д:	относительно которой равнодействующая всех сил, действующих на систему, равна нулю.

Задание 8.28. Установите соответствие между реакцией окисления этанола $\frac{m(C_2H_5OH)}{a} = \frac{V(CO_2)}{b}$ и её радиус-вектором

1	$\frac{m(C_2H_5OH)}{1{,}2} = \frac{V(CO_2)}{2{,}8}$	**А**	$\vec{r}(Э) = (2{,}8;\ 1{,}2)$
2	$\frac{m(C_2H_5OH)}{28} = \frac{V(CO_2)}{32}$	**Б**	$\vec{r}(Э) = (28;\ 32)$
3	$\frac{m(C_2H_5OH)}{\sqrt{8}} = \frac{V(CO_2)}{3}$	**В**	$\vec{r}(Э) = (1{,}2;\ 2{,}8)$
4	$\frac{m(C_2H_5OH)}{32} = \frac{V(CO_2)}{28}$	**Г**	$\vec{r}(Э) = (32;\ 28)$
		Д	$\vec{r}(Э) = (\sqrt{8};\ 3)$

Задание 8.29. Известно, что атомы X и Y лежат на оси Ox декартовой системы координат симметрично началу координат и расстояние между ними равно $2a$. Какие координаты будут иметь эти атомы?

А	**Б**	**В**	**Г**	**Д**
$X(0;0;-a)$, $Y(0;0;a)$	$X(0;0;-a)$, $Y(a;0;0)$	$X(-a;\ 0;\ 0)$, $Y(a;0;0)$	$X(0;-a;\ 0)$, $Y(a;0;0)$	$X(0;-a;\ 0)$, $Y(0;\ a;\ 0)$

Задание 8.30. Известно, что атомы X_1, X_2 и Y_1, Y_2 имеют координаты: $X_1(x_1; y_1; z_1)$, $X_2(x_2; y_2; z_2)$, $Y_1(a_1; b_1; c_1)$, $Y_2(a_2; b_2; c_2)$. Найти скалярное произведение векторов $\overline{X_1X_2} \cdot \overline{Y_1Y_2}$.

А:	0
Б:	$(x_2 - x_1)\cdot(a_2 + a_1) + (y_2 - y_1)\cdot(b_2 + b_1) + (z_2 - z_1)\cdot(c_2 + c_1)$
В:	$(x_2 + x_1)\cdot(a_2 - a_1) + (y_2 + y_1)\cdot(b_2 - b_1) + (z_2 + z_1)\cdot(c_2 - c_1)$
Г:	$(x_2 + x_1)\cdot(a_2 + a_1) + (y_2 + y_1)\cdot(b_2 + b_1) + (z_2 + z_1)\cdot(c_2 + c_1)$
Д:	$(x_2 - x_1)\cdot(a_2 - a_1) + (y_2 - y_1)\cdot(b_2 - b_1) + (z_2 - z_1)\cdot(c_2 - c_1)$.

ОТВЕТЫ

Ответы к теме «Линейная алгебра»

Ответ / *№ п/п*	А	Б	В	Г	Д	*№ п/п*	*Ответ*
Задание 1.1.				x		***Задача 1.2.***	$N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$
Задание 1.2.			x			***Задача 1.3.***	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$
Задание 1.3.				x		***Задача 1.4.***	$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$
Задание 1.4.				x		***Задача 1.5.***	$Na_2 + Cl_2 \rightarrow 2NaCl$
Задание 1.5.					x	***Задача 1.6.***	$2Al+3S \rightarrow Al_2S_3$
Задание 1.6.	x					***Задача 1.7.***	$2AgCl+Na_2S \rightarrow Ag_2S+2NaCl$
Задание 1.7.	4	2	5	3	1	***Задача 1.8.***	$3ZrCl_4 \rightarrow ZrCl_3+ZrCl_2+ZrCl+3Cl_2$
Задание 1.8.			x			***Задача 1.9.***	$12NaOH+5Cl_2+Br_2 \rightarrow 2NaBrO_3+10NaCl++6H_2O$
Задание 1.9.		x				***Задача 1.10.***	$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 4H_2O + 3CO_2$
Задание 1.10.	x					***Задача 1.11.***	$PCl_5 + 4H_2O \rightarrow H_3PO_4 + 5HCL$
Задание 1.11.		x				***Задача 1.12.***	$A=\frac{1159}{47}$, $B=\frac{1188}{47}$, $C=\frac{698}{47}$.
Задание 1.12.	3	4	1		2	***Задача 1.13.***	расход меланжа 800 (кг), олеума 467 (кг), отработанной кислоты 2983 (кг).
Задание 1.13.	x					***Задача 1.14.***	$x_1=1$, $x_2=7$, $x_3=4$.
Задание 1.14.				x		***Задача 1.15.***	кристаллическая сода 73,91 г, 10% раствор карбоната натрия 126,09 г
Задание 1.15.			x			***Задача 1.16.***	массовая доля карбоната натрия равна 60,57%, массовая доля карбоната калия равна 39,43%.

Задание 1.16.		x				***Задача 1.17.***	расход меланжа 800 (кг), олеума 466,7 (кг), отработанной кислоты 2983,3 (кг).
Задание 1.17.	x					***Задача 1.18.***	466,7; 800; 2983,3
Задание 1.18.		x				***Задача 1.19.***	A=5, B=3, C=5.
Задание 1.19.			x			***Задача 1.20.***	$x_1=3,\ x_2=1,\ x_3=1.$
Задание 1.20.	x					***Задача 1.21.***	$P_1=\frac{10}{3}$ Па, $P_2=\frac{9}{2}$ Па, $P_3=\frac{65}{6}$ Па.
Задание 1.21.		x				***Задача 1.22.***	$P_1\approx 2037$ Па, $P_2\approx 2070$ Па, $P_3\approx 34$ Па.
Задание 1.22.	4	3		2	1		

Ответы к теме «Векторная алгебра. Аналитическая геометрия»

Ответ / ***№ п/п***	**А**	**Б**	**В**	**Г**	**Д**	***№ п/п***	***Ответ***
Задание 2.1.				x		***Задача 2.2.***	$m_{(CaC_2)}=1{,}28$ г, $m_{(Al_4C_3)}=8{,}64$ г.
Задание 2.2.		x				***Задача 2.3.***	$\varphi_{(H_2)}=55\,\%$, $\varphi_{(C_2H_4)}=45\,\%$.
Задание 2.3.	x					***Задача 2.4.***	$m_{(CH_3COOH)}=1{,}2$ г.; $m_{(C_2H_5OH)}=8{,}28$ г.
Задание 2.4.					x	***Задача 2.5.***	$V_{(CH_4)}=10$ м^3, $V_{(C_3H_8)}=30$ м^3.
Задание 2.5.			x			***Задача 2.6.***	(22,4% CO; 55,2% N_2; 22,4% CO_2.)
Задание 2.6.	4	2	5	3	1	***Задача 2.7.***	(15,8 г NH_4HCO_3; 16,2 г $Ca(HCO_3)_2$; 16,8 г $NaHCO_3$.)
Задание 2.7.					x	***Задача 2.8.***	$V(CH_4)$=6,72л, $V(O_2)$= 13,44л, $V(SiH_4)$=0,1*22,4 $V(SiH_4)$=2,24л

Задание 2.8.				х		***Задача 2.9.***	(6,72 л CH_4; 2,24 л SiH_4; 17,92 л O_2.)
Задание 2.9.					х	***Задача 2.10.***	0,92 (г) Na, 0,54 (г) Al
Задание 2.10.		х				***Задача 2.11.***	ацетилена C_2H_2 – 12 мл, метана CH_4 – 8 мл, что составляет 60 и 40% соответственно.
Задание 2.11.		х				***Задача 2.12.***	10,4 г стирола C_8H_8, 12,0 г изопропилбензола $C_6H_5CH(CH_3)_2$, 15,6 г бензола C_6H_6.
Задание 2.12.		2	1	4	3	***Задача 2.13.***	$Y_1(-2;0;0)$, $Y_2(2;0;0)$, $X_1(-4,5;0;2,18)$, $X_2(-4,5;0;-2,18)$.
Задание 2.13.				х		***Задача 2.14.***	$Y_1(0;-3;0)$, $Y_2(0;3;0)$, $X_1(0;-1;3,46)$, $X_2(0;-1;-3,46)$.
Задание 2.14.			х			***Задача 2.15.***	$Y_1(0;0;-1)$, $Y_2(0;0;1)$, $X_1=(4,95;0;-5,95)$, $X_2(-4,45;0;-5,95)$.
Задание 2.15.				х		***Задача 2.16.***	$Y_1(0;-4;3)$, $Y_2(0;4;3)$, $X_1(3,9;-4,875;0)$, $X_2(-3,9;-4,875;0)$.
Задание 2.16.				х		***Задача 2.17.***	$Y_1(-3;4;0)$, $Y_4(3;4;0)$, $X_1(-4,17;0;2,58)$, $X_2(-4,17;0;-2,58)$.
Задание 2.17.					х	***Задача 2.18.***	$Y_1(4;0;-3)$, $Y_2(4;0;-3)$, $X_1(1,875;0;5,96)$, $X_2(1,875;0;-5,96)$.
Задание 2.18.	4	2	5	3	1	***Задача 2.19.***	$x_c=-0,29;\ y_c=0;\ z_c=-0,071.$
Задание 2.19.			х			***Задача 2.20.***	$x_c=-1,22;\ y_c=0;\ z_c=-0,022.$
Задание 2.20.		х					
Задание 2.21.			х				
Задание 2.22.	х						
Задание 2.23.					х		
Задание 2.24.	3	4	1		2		

Ответы к теме «Функция одной независимой переменной»

Ответ / ***№ п/п***	А	Б	В	Г	Д	***№ п/п***	***Ответ***
Задание 3.1.				х		***Задача 3.3.***	в смеси было 0,65 г Zn и 1,68 г Fe.
Задание 3.2.			х			***Задача 3.4.***	30 г.
Задание 3.3.				х		***Задача 3.5.***	33%.
Задание 3.4.				х		***Задача 3.6.***	13%.
Задание 3.5.					х	***Задача 3.7.***	22%.
Задание 3.6.	х					***Задача 3.8.***	17%.
Задание 3.7.	4	2	3	5	1	***Задача 3.9.***	60,57%.
Задание 3.8.			х			***Задача 3.10.***	массовая доля карбоната натрия равна 56,5%, массовая доля карбоната калия равна 43,5%
Задание 3.9.		х				***Задача 3.11.***	46,28%.
Задание 3.10.	х					***Задача 3.12.***	масса метилового эфира уксусной кислоты составляет 29.6г, а масса метилового эфира пропионовой кислоты составляет 17.6г
Задание 3.11.		х				***Задача 3.13.***	50г.
Задание 3.12.	3	4	1		2	***Задача 3.14.***	24%.
						Задача 3.15.	0,4 кг 25% раствора аммиака с 0,6 кг воды.

Ответы к теме «Дифференциальное исчисление функции одной переменной»

Ответ *№ п/п*	А	Б	В	Г	Д	*№ п/п*	*Ответ*
Задание 4.1.	х					***Задача 4.2.***	$v=k(a-m)$
Задание 4.2.					х	***Задача 4.3.***	≈0,006 моль/с
Задание 4.3.			х			***Задача 4.4.***	$m(t)=1{,}03^{t}$
Задание 4.4.		х				***Задача 4.5.***	0,0343 г/час
Задание 4.5.				х		***Задача 4.6.***	$x'(t)=0{,}5e^{-0{,}05t}$; $x'(10)=\frac{1}{2\sqrt{e}}\approx 0{,}3$ л/с
Задание 4.6.		х				***Задача 4.7.***	0,5 л/с
Задание 4.7.		х				***Задача 4.8.***	40 сек
Задание 4.8.				х		***Задача 4.9.***	1316 мин ≈ 21,9 ч
Задание 4.9.	х					***Задача 4.10.***	1,005 г.
Задание 4.10.	2	1	3		4	***Задача 4.11.***	$-Ake^{-kt}$
Задание 4.11.	3	2	1	4		***Задача 4.13.***	при $x>\frac{a_0-b_0}{2}$ скорость образования продукта реакции начинает убывать
Задание 4.12.		х				***Задача 4.14.***	20 %; 80 %
Задание 4.13.	х					***Задача 4.15.***	6,93 %
Задание 4.14.				х		***Задача 4.16.***	0,0693
Задание 4.15.					х	***Задача 4.17.***	при концентрации кислорода в смеси вдвое меньшей, чем концентрация оксида азота
Задание 4.16.		х				***Задача 4.18.***	при $x=y=\sqrt{k}$ (при нейтральной реакции)
Задание 4.17.	3	1	4	2		***Задача 4.19.***	$x=\frac{a+b-\sqrt{a^2-ab+b^2}}{6}$
Задание 4.18.	4	1	3	2		***Задача 4.20.***	$\approx 66^{\circ}$
Задание 4.19.			х				
Задание 4.20.	х						

Задание 4.21.				х			
Задание 4.22.	х						
Задание 4.23.	3	4		1	2		

Ответы к теме «Интегральное исчисление функции одной переменной»

Ответ / *№ п/п*	А	Б	В	Г	Д	*№ п/п*	*Ответ*
Задание 5.1.				х		*Задача 5.4.*	83,8 Дж/(моль·К)
Задание 5.2.	х					*Задача 5.5.*	35,37 Дж/(моль·К)
Задание 5.3.				х		*Задача 5.6.*	45,79 Дж/(моль·К)
Задание 5.4.			х			*Задача 5.7.*	107,574 Дж/моль
Задание 5.5.					х	*Задача 5.8.*	134,5 кДж
Задание 5.6.	х					*Задача 5.9.*	– 638,3 кДж
Задание 5.7.		х				*Задача 5.10.*	125510 кал
Задание 5.8.	1	3	4		2	*Задача 5.11.*	116,66 Дж
Задание 5.9.	2	4		3	1	*Задача 5.12.*	– 0,31 кал/град
Задание 5.10.		х				*Задача 5.13.*	3,166 кал/град·г·атом
Задание 5.11.	х					*Задача 5.14.*	97,8 кДж
Задание 5.12.				х			
Задание 5.13.					х		
Задание 5.14.			х				

Ответы к теме «Обыкновенные дифференциальные уравнения»

Ответ / *№ п/п*	А	Б	В	Г	Д	*№ п/п*	*Ответ*
Задание 6.1.			х			*Задача 6.4.*	173,3 с
Задание 6.2.	х					*Задача 6.5.*	0,625 кг
Задание 6.3.				х		*Задача 6.6.*	$x(t)=10e^{-0,05t}$
Задание 6.4.	х					*Задача 6.7.*	1,25 кг
Задание 6.5.		х				*Задача 6.8.*	599,1 с
Задание 6.6.					х	*Задача 6.9.*	0,68 кг

Задание 6.7.			х			***Задача 6.10.***	1,8 кг
Задание 6.8.		х				***Задача 6.11.***	5,2 моль
Задание 6.9.			х			***Задача 6.12.***	$33\frac{1}{3}$ с
Задание 6.10.					х	***Задача 6.13.***	$x(t)=Ce^{-\frac{b}{a}t}$
Задание 6.11.					х	***Задача 6.14.***	11,4 %
Задание 6.12.	х					***Задача 6.18.***	14,4 %
Задание 6.13.				х		***Задача 6.19.***	$\frac{dT}{dt}=k(T-20)$, при $T = 30^{o}t = 30$ минут
Задание 6.14.		х				***Задача 6.20.***	$x=M\left(1-e^{-kt}\right)$
Задание 6.15.						***Задача 6.21.***	$k=\frac{1}{t(a-b)}\ln\frac{b(a-x)}{a(b-x)}$
Задание 6.16.			х			***Задача 6.22.***	$k=\frac{1}{at}\ln\frac{x}{a-x}$
Задание 6.17.					х	***Задача 6.23.***	4 %
Задание 6.18.	х					***Задача 6.24.***	89,6 г; 1 час
Задание 6.19.		х				***Задача 6.25.***	21,38 %
Задание 6.20.	3	1	4		2	***Задача 6.26.***	$x(t)=x_0e^{-kt}$, $k=\ln\sqrt{\frac{31,4}{9,7}}$, $x(t)=x_0\cdot 0,31^{t}$
Задание 6.21.		х				***Задача 6.27.***	$x'(t)=k(a-x)$; $x(t)=a\left(1-e^{-kt}\right)$
Задание 6.22.					х	***Задача 6.28.***	15,3 мин
Задание 6.23.				х		***Задача 6.29.***	20 мин
Задание 6.24.		х				***Задача 6.30.***	52 %
Задание 6.25.	х						
Задание 6.26.		х					
Задание 6.27.				х			
Задание 6.28.	х						
Задание 6.29.					х		
Задание 6.30.		х					
Задание 6.31.			х				
Задание 6.32.	х						
Задание 6.33.	2	4	3	1			

Ответы к теме «Ряды»

Ответ / № п/п	А	Б	В	Г	Д	№ п/п	Ответ
Задание 7.1.		х				***Задача 7.4.***	34,57 кг
Задание 7.2.				х		***Задача 7.5.***	1,998 кг
Задание 7.3.		х				***Задача 7.6.***	15,47 кг
Задание 7.4.	х					***Задача 7.7.***	1,98 кг
Задание 7.5.				х			
Задание 7.6.	4	2		3	1		
Задание 7.7.			х				
Задание 7.8.		х					
Задание 7.9.	х						
Задание 7.10.				х			
Задание 7.11.	2	4	1		3		
Задание 7.12.							
Задание 7.13.							
Задание 7.14.							

Ответы к итоговому тестированию

Ответ / № п/п	А	Б	В	Г	Д	Ответ / № п/п	А	Б	В	Г	Д
Задание 8.1.			х			***Задание 8.2.***	х				
Задание 8.3.			х			***Задание 8.4.***	4	3		2	1
Задание 8.5.				х		***Задание 8.6.***	3	4	1		2
Задание 8.7.	х					***Задание 8.8.***		х			
Задание 8.9.	х					***Задание 8.10.***				х	
Задание 8.11.	3	4		1	2	***Задание 8.12.***				х	
Задание 8.13.	х					***Задание 8.14.***		х			
Задание 8.15.		х				***Задание 8.16.***		х			
Задание 8.17.	3	1	4		2	***Задание 8.18.***	х				
Задание 8.19.		х				***Задание 8.20.***	2	4	3	1	

Задание 8.21.	x					***Задание 8.22.***			x	
Задание 8.23.		x				***Задание 8.24.***	x			
Задание 8.25.					x	***Задание 8.26.***				x
Задание 8.27.				x		***Задание 8.28.***	2	1	4	3
Задание 8.29.	4	2	5	3	1	***Задание 8.30.***	x			

ЛИТЕРАТУРА

1. Батунер Л. М. Математические методы в химической технике / Л. М. Батунер, М. Е. Позин. – 6-е изд., испр.– Л.: Изд-во «Химия», 1971. – 824 с.

2. Волков А. И. Большой химический справочник / А. И. Волков, И. М. Жарский. – Мн.: Современная школа, 2005. – 608 с.

3. Григорьева Л. М. Интегрированный урок (математика + химия) по теме "Графический метод решения химических задач" / Л. М. Григорьева, Л. А. Трофимова [Электронный ресурс] // Фестиваль педагогических идей «Открытыйурок»: [сайт]. Режим доступа: http://xn--i1abbnckbmcl9fb.xn--p1ai/.

4. Еремин В. В. Теоретическая и математическая химия для школьников. Подготовка к математическим олимпиадам / В. В. Еремин. – М.: МЦНМО, 2007. – 392 с.

5. Жирякова М. В. Вопросы и задачи по физической химии для биологов / М. В. Жирякова, Т. М. Рощина, О. Н. Рыжова, Л. А. Тифлова. Под ред. проф. Н.Е. Кузьменко. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 2005. – 128 с.

6. Злотников Э.Г. В. Краткий справочник по химии / Э.Г. Золотников. 3-е изд. – СПб.: Питер, 2012. -192 с.

7. Киселева Е. В. Сборник примеров и задач по физической химии. Учеб.пособие для химико-технологич. вузов. / Е. В. Киселева, Г. С. Каретников, И. В. Кудряшов. – Изд. 4-е, доп. и перераб.– М., «Высш. школа», 1976. – 381 с.

8. Коган В. Е. Физическая химия. Часть 2. Химическая кинетика: Учебное пособие / В. Е. Коган, Г. С. Зенин, Н. В. Пенкина. – СПб: СЗТУ, 2005. – 226 с.

9. Кравченко Т. А. Сборник примеров и задач по физической химии. Химическая термодинамика: Для студентов

химических факультетов университетов / Т. А. Кравченко, А. В. Введенский, О. А. Козадеров. – Воронеж, 2002. – 64 с.

10. Кудряшов И. В. Сборник примеров и задач по физической химии: Учеб. пособие для хим.-технол. спец. вузов / И. В. Кудряшов, Г. С. Каретников. – 6-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. шк., 1991. – 527 с.

11. Мартынов В. И. Вектор химической реакции / В. И.Мартынов // Химия: [сайт].Режим доступа: http://him.1september.ru/article.php?ID=200701308.

12. Математика. Часть II. Математический анализ и дифференциальные уравнения. Учебное пособие. Под ред. Г. Г. Хамова. – СПб. Изд-воРГПУ имени А. И. Герцена, 2009. – 353с.

13. Минакова Т. С. Сборник примеров и задач по физической химии: учеб.пособие / Т. С. Минакова, Л. В. Цыро, О. В. Магаев. – Томск: Издательский Дом Томского государственного университета, 2013. – 152 с.

14. Неділько С. А. Математичні методи в хімії: Підручник / С. А. Неділько. – К.: Либідь, 2005. – 256 с.

15. Основы физической химии. Теория и задачи: Учеб.пособие для вузов / В. В. Еремин, С. И. Каргов, И. А. Успенская, Н. Е. Кузьменко, В. В. Лунин. – М.: Издательство «Экзамен», 2005. – 480 с.

16. Пономарева К. С. Сборник задач по физической химии: Учеб.пособие. / К. С. Пономарева, В. Г. Гугля, Г. С. Никольский. – 2-е изд., испр. – М.: Издательский Дом МИСиС, 2008. – 340 с.

17. Скатецкий В. Г. Математические методы в химии: учеб.пособие для студентов вузов / В. Г. Скатецкий, Д. В. Свиридов, В. И. Яшкин. – Мн.: ТетраСистемс, 2006. – 368 с.

18. Соколенко Л. О. Прикладні задачі в курсі алгебри і початків аналізу: практикум. Навчальний посібник / Л. О. Соколенко, Л. Г. Філон, В. О. Швець. – Київ: НПУ імені

М. П. Драгоманова, 2010. – 128 с.

19. Химия : Большой энцикл. слов. : Содержит ок. 9000 ст. / Гл. ред. И. Л. Кнунянц. – 2-е изд., репринт. – М. : Большая Рос. Энцикл., 1998. – 792 с.

20. Эмануэль Н. М. Курс химической кинетики: Учебник для хим. фак. ун-тов / Н. М. Эмануэль, Д. Г. Кнорре. – 4-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. шк, 1984. – 463 с.