

Федеральное агентство по образованию

---

Государственное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)

---

Кафедра систем автоматизированного проектирования и  
управления

Чистякова Т.Б., Антипин Р.В., Новожилова И.В., Гольцева Л.В.

# ПРОГРАММИРОВАНИЕ НА ЯЗЫКАХ ВЫСОКОГО УРОВНЯ. КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Учебное пособие  
для студентов заочной формы обучения

Санкт-Петербург  
2009

Чистякова, Т.Б. Программирование на языках высокого уровня. Курсовое проектирование [Текст]: учебное пособие для студентов заочной формы обучения/ Т.Б. Чистякова, Р.В. Антипин, И.В. Новожилова, Л.В. Гольцева. – СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2009. – 40 с.

В учебном пособии изложены рекомендации по выполнению курсового проектирования, направленного на изучение основных структур и принципов объектно-ориентированного программирования, технологических средств разработки программного обеспечения в среде разработки приложений на языке C++ .

Учебное пособие предназначено для студентов заочной формы обучения по направлению подготовки 230100 «Информатика и вычислительная техника» и соответствует разделам рабочей программы курсов «Программирование на языках высокого уровня», «Технологии программирования», «Объектно-ориентированное программирование», «Лингвистическое и программное обеспечение САПР», «Алгоритмические языки и программирование».

Ил. 5, табл. 5, библиогр. назв. 13

**Рецензенты:**

Соколов Г.А., зав. кафедрой автоматизации процессов химической промышленности Санкт-Петербургского государственного технического института (технического университета), д-р техн. наук, проф.

Утверждено на заседании учебно-методической комиссии факультета информатики и управления

Рекомендовано к изданию РИСо СПбГТИ(ТУ)

© СПбГТИ(ТУ), 2009г.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	4
<b>ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ КУРСОВОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ .....</b>	<b>5</b>
<b>ЗАДАНИЕ НА ВЫПОЛНЕНИЕ КУРСОВОГО ПРОЕКТА .....</b>	<b>6</b>
1 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ КАК ОБЪЕКТА ПРОГРАММИРОВАНИЯ .....	9
1.1 Описание кинетики химических реакций .....	9
1.2 Описание тепловых функций химической реакции .....	13
3 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНСТАНТ СКОРОСТЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ.....	14
4 ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА КИНЕТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗА .....	15
5 ПРИМЕР ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНСТАНТ ДЛЯ РЕАКЦИИ РАЗЛОЖЕНИЯ .....	21
6 ОЦЕНКА АДЕКВАТНОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ КИНЕТИКИ.....	23
7 ХАРАКТЕРИСТИКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА.....	24
<b>ПРИМЕР ВЫПОЛНЕНИЯ КУРСОВОГО ПРОЕКТА .....</b>	<b>24</b>
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	33
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....	34
ПРИЛОЖЕНИЕ А.....	35
ПРИЛОЖЕНИЕ Б .....	36
ПРИЛОЖЕНИЕ В .....	37
ПРИЛОЖЕНИЕ Г .....	38

## ВВЕДЕНИЕ

Высокоуровневые языки программирования разработаны для быстроты и удобства использования программистом. Основная черта высокоуровневых языков – это абстракция, то есть введение смысловых конструкций, кратко описывающих такие структуры данных и операции над ними, описания которых на машинном коде (или другом низкоуровневом языке программирования) очень длинны и сложны для понимания. Наиболее распространёнными языками подобного типа являются C++, Visual Basic, Java, Python, Ruby, Perl, Pascal, PHP. Языкам высокого уровня свойственно умение работать с комплексными структурами данных. В большинство из них интегрирована поддержка строковых типов, объектов, операций файлового ввода-вывода и т. п.

В последнее десятилетие активное развитие получают языки программирования с объектно-ориентированными возможностями. Объектно-ориентированный подход к проектированию сложных программных систем стал безусловным стандартом, поскольку способствует лучшей управляемости проектом на всех стадиях разработки, тестирования и внедрения. Объектно-ориентированное программирование (ООП) – парадигма программирования, в которой основными концепциями являются понятия объектов и классов. ООП в настоящее время является абсолютным лидером в области прикладного программирования.

Одним из наиболее распространенных объектно-ориентированных языков высокого уровня является C++, созданный Бьерном Страуструпом в начале 1980-х годов. Язык C++ полностью унаследовал и расширил возможности языка Си, который используется в задачах системного программирования. К достоинствам языка C++ можно отнести кроссплатформенность; возможность работы на низком уровне с памятью, адресами, портами; возможность создания обобщенных алгоритмов для разных типов данных, их специализация, и вычисления на этапе компиляции, используя шаблоны.

В данном учебном пособии представлены задания на выполнение курсового проектирования по изучению основных принципов ООП; технологических средств разработки программного обеспечения; языка программирования C++. В учебном пособии приведен пример создания программного обеспечения для исследования кинетики химических реакций с помощью инструментальной среды разработки приложений C++ Builder на языке C++.

## ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ КУРСОВОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Одним из основных требований к специалистам в области автоматизированных систем управления является умение программировать и знание языков программирования. Курс «Программирование на языках высокого уровня» относится к тем дисциплинам, которые закладывают основу знаний по программированию на языках высокого уровня. Курс должен заложить основу для всех последующих курсов в области программирования.

Целью курсового проектирования по учебной дисциплине «Программирование на языках высокого уровня» является закрепление знаний и навыков в области алгоритмизации, принципов объектно-ориентированного программирования, разработки, отладки и тестирования программных продуктов на языках высокого уровня.

В результате изучения дисциплины студенты должны:

### ***иметь представление***

- о возможностях языков программирования различного уровня;
- о современных тенденциях в области развития языков и систем программирования;
- об основных принципах создания Windows-приложений;

### ***знать***

- основные структуры данных, используемые в языках;
- синтаксис основных операторов языка C++;
- структуру программ на языке C++;
- основные принципы алгоритмизации;

### ***уметь***

- создавать схему алгоритма для любой функциональной задачи;
- уметь программировать на языке C++;
- проводить отладку и тестирование созданного программного продукта средствами изученных интегрированных сред;
- анализировать полученные результаты.

Задачами курсового проекта являются проектирование и создание прикладного программного обеспечения, позволяющего определять порядок химической реакции, константу скорости реакции, а также проводить статистический анализ результатов. В учебном пособии приведен пример создания программного обеспечения для исследования кинетики химических реакций с помощью инструментальной среды разработки приложений C++ Builder на языке C++.

## ЗАДАНИЕ НА ВЫПОЛНЕНИЕ КУРСОВОГО ПРОЕКТА

**Тема курсового проекта** по учебной дисциплине «Программирование на языках высокого уровня» сформулирована следующим образом: «Программный комплекс для определения константы скорости химической реакции (*указать реакцию*)». Вид химической реакции соответствует номеру варианта студента.

Студенту необходимо представить пояснительную записку о выполненном курсовом проекте, показать работоспособность разработанного программного обеспечения. Пояснительная записка представляется преподавателю в распечатанном виде, а также в электронном виде с программным обеспечением на любом носителе информации.

**Пояснительная записка** должна включать: титульный лист, задание на курсовое проектирование, постановку задачи, алгоритм решения задачи, программный код с комментариями и полученные результаты. Во время защиты курсового проекта студент должен подтвердить работоспособность программной реализации задания. Приветствуется подготовка презентации в редакторе Microsoft Power Point, показывающая этапы выполнения курсового проекта и важные аспекты в решении поставленной задачи. На титульном листе пояснительной записки к курсовому проекту необходимо указать фамилию, имя и отчество студента, номер учебной группы, номер варианта. Пример титульного листа приведен в Приложении А.

**Задание на курсовой проект** по дисциплине «Программирование на языках высокого уровня» одинаково по структуре для каждого студента.

### **Перечень подлежащих разработке вопросов:**

1. Ознакомиться с теорией по синтезу и анализу математических моделей (ММ) кинетики химических реакций.
2. Выполнить постановку задачи по исследованию кинетики химической реакции.
3. Составить формализованное описание задачи. Разработать структуру входных (экспериментальных данных по изменению концентрации компонентов во времени) и выходных данных (порядок реакции, константа скорости реакции).
4. Уточнить методы решения математической задачи.
5. Разработать алгоритм (блок-схему) для определения порядка химической реакции и константы скорости химической реакции.
6. Спроектировать структуру программы.
7. Разработать пользовательский интерфейс.
8. Выполнить предварительную оценку кинетических констант с использованием метода регрессионного анализа.

9. Провести статистический анализ результатов.
10. Составить программу, реализующую поставленную задачу.
11. Протестировать работоспособность программного обеспечения.

Пояснительная записка к курсовому проекту может иметь следующую структуру:

Титульный лист.

Задание.

Введение.

Аналитический обзор по выбору инструментальных средств для синтеза программного обеспечения.

Цель и задачи курсового проекта.

Функциональная структура программного комплекса.

Структура данных.

Алгоритм (блок-схема) определения порядка химической реакции и константы скорости химической реакции.

Описание пользовательского интерфейса.

Проверка адекватности математической модели кинетики.

Примеры тестирования работоспособности программного обеспечения.

Заключение

Список использованной литературы.

Номер варианта соответствует номеру первой буквы фамилии студента согласно таблице 1.

Таблица 1 – Распределение вариантов заданий

Первая буква фамилии студента	Номер варианта	Первая буква фамилии студента	Номер варианта
А	1	П	15
Б	2	Р	16
В	3	С	17
Г	4	Т	18
Д	5	У	19
Е, Ё	6	Ф	20
Ж	7	Х	21
З	8	Ц	22
И, Й	9	Ч	23
К	10	Ш, Щ	24
Л	11	Э	25
М	12	Ю	26
Н	13	Я	27
О	14	Пример решения	28

**Рекомендуемое программное средство** для выполнения курсового проекта: среда объектно-ориентированного программирования C++Builder 6.

**Перечень графического материала** может содержать следующие элементы:

1. Постановка задачи исследования кинетики химической реакции.
2. Формализованное описание задачи. Структура входных и выходных данных.
3. Методы регрессионного анализа для решения задачи.
4. Алгоритм (блок-схема) определения порядка химической реакции и константы скорости химической реакции.
5. Функциональная структура программного комплекса.
6. Результаты проверки адекватности разработанной модели.
7. Примеры тестирования работоспособности программного обеспечения.
8. Характеристика разработанного программного обеспечения.

Приступая к выполнению курсового проекта, рекомендуется ознакомиться с методическими материалами [1,2,11,12].

Таблица 2 – Варианты заданий

Номер варианта	Химическая реакция
1	$A + B = C + D$
2	$A + 2B = C + D + E$
3	$2A + 4B = C$
4	$A + 3B = 2C$
5	$2A + B = 2C$
6	$A = B + 2C$
7	$2A + 3B = 2C$
8	$2A = 2B + C$
9	$A + B + C = D + E$
10	$3A + 2B = C + 5D$
11	$4A = 4B + 2C + D$
12	$A + 4B = C + 2D + 2E$
13	$3A + 8B = 3C + 2D + 4E$
14	$3A + B = C + D + 2E$
15	$6A = 2B + C$
16	$2A + 5B = 2C + 4D + E$
17	$4A + 6B = 2C + 2D$
18	$3A + 8B + 5C + 18D = 3E + 8F$
19	$A + 10B = C$
20	$3A + 4B = C$
21	$2A + 9B = C + 7D$
22	$5A + 3B = 3C + 2D$
23	$3A + B = C + D$
24	$A + 2B = 2C + D + E$
25	$7A + 2B = 4C + D$
26	$2A + 9B = C + 7D$
27	$A + B + 3C = 3D + E$
28	$2A + 4B + C = D + 2E$



# 1 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ КАК ОБЪЕКТА ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Изменение содержания вещества в химических реакторах происходит в результате его переноса за счет движения реакционной массы и химического реакций. Математическое описание химических реакций складывается из описания: стехиометрии; кинетики; порядка и молекулярности реакций.

## 1.1 Описание кинетики химических реакций

Стехиометрическое уравнение химической реакции представляет собой краткое выражение материального баланса химических реакций.

В общем виде стехиометрическое уравнение простой химической реакции может быть записано в следующем виде:

$$\sum_{j=1}^m \alpha_j A_j . \quad (1)$$

Этот способ записи стехиометрии можно распространить на сложные химические процессы с несколькими одновременно протекающими реакциями:

$$\sum_{j=1}^m \alpha_{ij} A_j = 0, \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad (2)$$

где  $i$  – номер реакции,  $i = 1, 2, \dots, r$ ;  $\alpha_{ij}$  – стехиометрический коэффициент  $j$ -го компонента в  $i$ -й реакции;  $\alpha_{ij} > 0$  – при образовании компонента;  $\alpha_{ij} < 0$  – при расходовании компонента;  $r$  – число протекающих реакций;  $A_j$  – вектор-столбец реагирующих компонентов;  $m_i$  – число реагентов в  $i$ -той реакции.

Система уравнений химических реакций в ЭВМ может быть получена автоматически, путём умножения вектор-столбца символов веществ  $A_j$  на матрицу стехиометрических коэффициентов.

Задание механизма химических реакций с помощью матрицы стехиометрических коэффициентов обеспечивает возможность, при необходимости, гибкого её изменения.

Для отражения химического состава веществ используется молекулярная матрица  $|\beta|$ , элемент  $\beta_{jk}$  которой представляет число атомов  $k$ -го элемента, содержащихся в молекуле  $j$ -го реагента.

Размерность матрицы  $|\beta|$  –  $(n \times l)$ , где  $n$  – число реагентов в системе;  $l$  – число химических элементов.

Условие сохранения числа атомов (или единиц заряда) может быть записано следующим образом:

$$\sum_{j=1}^n \beta_{jk} \alpha_{ij} = 0, \quad \begin{cases} i = 1, 2, \dots, r; \\ j = 1, 2, \dots, n; \\ k = 1, 2, \dots, l. \end{cases} \quad (3)$$

Размерность системы уравнений (3) определяется произведением числа химических элементов, входящих в состав молекул реагентов  $l$ .

Основным понятием химической кинетики является скорость химической реакции  $w_r$ , которая определяется как число молекул (или грамм-молекул), реагирующих в единицу времени, в единице объёма или на единице поверхности.

Скорость в единице объёма

$$w_r = -\frac{1}{V} \frac{dN_j}{dt}, \quad (4)$$

где  $w_r$  – скорость химической реакции, моль/(м<sup>3</sup>·с);  $V$  – объём реагирующей системы, м<sup>3</sup>;  $N_j$  – число молей  $j$ -го компонента (или грамм-моль).

Скорость на единице поверхности

$$w_r = -\frac{1}{S} \frac{dN_j}{dt}, \quad (5)$$

где  $S$  – поверхность реагирующей системы, м<sup>2</sup>.

Для  $V=\text{const}$  можно записать скорость химической реакции через концентрации компонента:

$$w_r = -\frac{d(N_j/V)}{dt} = \frac{dC_j}{dt}, \quad (6)$$

где  $C_j$  – концентрация  $j$ -го компонента, моль/м<sup>3</sup>.

Для вывода уравнения скорости химической реакции используется закон действия масс (основной постулат химической кинетики).

Если в реагирующей системе протекает реакция в соответствии со следующим стехиометрическим уравнением:



то в соответствии с законом действия масс скорость элементарной химической реакции пропорциональна концентрациям реагирующих веществ в степенях, равных их стехиометрическим коэффициентам, то есть в уравнении скорости реакции сомножителями являются вещества  $A_j$ , у которых стехиометрические коэффициенты отрицательны:

$$w_{ri} = k_i \prod_{j=1}^{m_i} C_{A_j}^{|\alpha_{ij}|}, \quad i = 1, 2, \dots, r, \text{ для } \alpha_{ij} < 0, \quad (7)$$

где  $r$  – число протекающих реакций.

Если при моделировании химических реакций не удаётся получить уравнение элементарной химической реакции и приходится использовать суммарные стехиометрические уравнения нескольких элементарных реакций (формальные), то показатели степени в кинетическом уравнении определяются экспериментально, а не из стехиометрического уравнения:

$$w_{ri} = k_i \prod_{j=1}^{m_i} C_{A_j}^{p_{ij}}, \quad (8)$$

где  $p_{ij}$  – экспериментально определяемые показатели степени для  $j$ -го компонента в  $i$ -й реакции.

Для математического описания порядка вводятся два понятия – порядок реакции и частный порядок по компоненту.

Порядок реакции – это сумма показателей степеней кинетического уравнения скорости химической реакции.

Если скорость химической реакции определяется по уравнению

$$w_r = k_i \prod_{j=1}^{m_i} C_{A_j}^{|\alpha_{ij}|},$$

то порядок реакции

$$n = \sum_{j=1}^m |\alpha_j|. \quad (9)$$

Для нескольких одновременно протекающих реакций определяется порядок для каждой реакции:

$$n_i = \sum_{j=1}^{m_i} |\alpha_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, r. \quad (10)$$

Следует отметить, что порядок реакции при практическом моделировании определяется часто экспериментально, так как не всегда удаётся описать элементарные стадии химических реакций, для которых справедлив закон действия масс. Отсюда не удаётся вычислить порядок непосредственно из стехиометрического уравнения, но в любом случае порядок определяется как сумма показателей степеней кинетического уравнения:

$$w_{ri} = k_i \prod_{j=1}^{m_i} C_{A_j}^{p_{ij}},$$

$$n_i = \sum_{j=1}^{m_i} p_{ij}. \quad (11)$$

Частный порядок  $p_{ij}$  определяется по отдельному исходному реагенту и равен показателю степени этого реагента в уравнении кинетики. При соблюдении закона действия масс:  $p_{ij} = \alpha_{ij}$ .

Порядок реакции определяет размерность константы скорости реакции:

$$w_{ri} = k_i \prod_{j=1}^{m_i} C_{A_j}^{p_{ij}},$$

$$[\text{моль/м}^3 \cdot \text{с}] = [\text{?}] \prod_{j=1}^{m_i} [\text{моль/м}^3]^{p_{ij}}.$$

Например,

$$\begin{aligned} \text{для } n=1, [\text{моль/м}^3 \cdot \text{с}] &= [\text{?}] [\text{моль/м}^3], \\ [k] &= [1/\text{с}]; \\ \text{для } n=2, [\text{моль/м}^3 \cdot \text{с}] &= [\text{?}] [(\text{моль/м}^3)^2], \\ [k] &= [\text{м}^3/\text{моль} \cdot \text{с}] \end{aligned}$$

Молекулярность химической реакции определяется как число молекул одновременно вступающих в элементарную стадию химических превращений. Для одной элементарной стадии молекулярность и порядок совпадают.

При описании скоростей сложных реакций с многокомпонентными смесями наряду с законом действия масс используется принцип независимости реакций, заключающийся в том, что скорость любой реакции не зависит от того, протекают ли в системе ещё какие-либо реакции.

Используя стехиометрические уравнения (2) и принцип независимости реакций, можно записать скорость образования или расходования любого компонента в системе:

$$\frac{dC_j}{dt} = w_j = \sum_{i=1}^r w_{ri} \alpha_{ij}, \quad (12)$$

или с учётом уравнения (8) скорости химической реакции:

$$w_j = \sum_{i=1}^r \alpha_{ij} \prod_{j=1}^{m_i} k_i C_j^{p_{ij}}, \quad j=1, 2, \dots, n. \quad (13)$$

где  $w_j$  – скорость образования или расходования  $j$ -го компонента в реакционной системе, моль/(м<sup>3</sup>·с);  $\alpha_{ij}$  – стехиометрический коэффициент  $j$ -го компонента в  $i$ -й реакции;  $C_j$  – концентрация  $j$ -го компонента, моль/м<sup>3</sup>;  $k_i$  – константа скорости  $i$ -й реакции (размерность зависит от порядка реакции);  $p_{ij}$  – частный порядок  $j$ -го компонента в  $i$ -й реакции;  $n$  – число реагентов в системе;  $t$  – время.

## 1.2 Описание тепловых функций химической реакции

Обоснование зависимости скорости реакции от температуры было получено Аррениусом. Им была сформулирована теория активных столкновений между молекулами: всякая реакция протекает через промежуточную стадию, связанную с переходом состояния молекул от нормальной (средней) энергии к состоянию с повышенной энергией.

Каждая частица – молекула, радикал, ион – энергетически более или менее устойчивое состояние. Перестройка реагирующих частиц требует разрыва или ослабления отдельных химических связей, на что необходимо затратить энергию. Реагировать могут лишь молекулы с повышенной энергией (активные молекулы). Превращение исходных частиц в продукты реакции связано с преодолением потенциального барьера. Характеризует это сочетание энергия активации  $E$ . Энергия активации – то минимальное количество суммарной энергии сталкивающихся молекул, которое необходимо для вступления их в реакцию. В химическом превращении участвуют только такие частицы, энергия которых больше  $E$ , доля таких частиц равна  $d = e^{-E/RT}$  (закон Больцмана).

Зависимость константы скорости реакции от температуры согласно закону Аррениуса имеет вид:

$$k = k_0 e^{-E/RT}, \quad (14)$$

где  $k_0$  – предэкспоненциальный множитель, размерность его определяется размерностью константы скорости реакции;  $T$  – температура, К;  $R$  – универсальная газовая постоянная, кДж/(моль·К);  $E$  – энергия активации, кДж/моль.

Зависимость скорости реакции от температуры иногда выражают через температурный коэффициент скорости  $K_C$  реакции, характеризующий скорости при изменении температуры на 10 К:

$$K_c = \frac{k_{(T_1+10)}}{k_{(T_1)}} = \frac{k_0 \exp\left(-\frac{E}{R(T_1+10)}\right)}{k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_1}\right)} = \exp\left\{\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_1+10} - \frac{1}{T_1}\right)\right\}. \quad (15)$$

С увеличением энергии активации температурный коэффициент скорости увеличивается, с увеличением температуры – снижается.

В сложной реакционной системе реакции образования целевого продукта, как правило, имеют меньшую энергию активации, чем побочные реакции разложения.

Для выбора конструктивных характеристик реакторов, систем обогрева и охлаждения необходимо иметь численные значения тепловых эффектов химических реакций, т.е. количества энергии, выделяющейся или поглощённой на 1 моль превращенных веществ  $q$ , кДж/моль.

Математическое описание тепловых функций химической реакции позволяет оценить влияние температуры на скорость процесса, выход целевых и побочных продуктов; выбрать конструктивные и режимные характеристики процесса, обеспечивающие наилучшие значения оценок эффективности.

### 3 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНСТАНТ СКОРОСТЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

В учебном пособии рассмотрена следующая задача кинетики:

**Известно:**

экспериментальные данные по изменению концентрации компонентов или скоростей реакций во времени, при различных условиях эксперимента (температуры):

$$C_{j3}=f(t) \text{ или } w_{j3}=f(C_{j3}, t), \\ C_{j3}=f(t, T) \text{ или } w_{j3}=f(C_{j3}, T, t).$$

**Требуется определить:**

- константы скоростей реакций  $k_i$ ;
- предэкспоненциальные множители  $k_{0i}$  и энергии активации  $E_i$ .

#### 4 ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА КИНЕТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗА

В настоящее время термин «регрессия» означает статистическую связь между случайными величинами. Задача ставится таким образом: по данной выборке объема  $n$  найти уравнение приближенной регрессии и оценить допускаемую при этом ошибку. Эта задача решается методами регрессионного и корреляционного анализа. Уравнение приближенной регрессии существенно зависит от выбираемого метода приближения. В качестве такого метода обычно выбирают метод наименьших квадратов. Пусть задан некоторый класс функций  $f(x)$ , накладывающих на выборку одинаковое число связей  $l$ . Число связей  $l$  равно числу неопределенных коэффициентов, входящих в аналитическое выражение этой функции. Чаще всего используют многочлены различной степени.

Наилучшее уравнение приближенной регрессии дает та функция из рассматриваемого класса, для которой сумма квадратов имеет наименьшее значение.

$$\Phi = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i)]^2.$$

При нормальном распределении случайных величин метод наименьших квадратов обосновывается в теории вероятностей как частный случай принципа максимума правдоподобия.

По методу наименьших квадратов можно обрабатывать любые экспериментальные данные, однако оптимальность этой процедуры доказывается только для нормального распределения. В простейшем случае зависимость между измеряемыми величинами  $x$  и  $y$  носит линейный характер, поэтому экспериментальные точки группируются около некоторой прямой линии, как показано на рисунке 1.

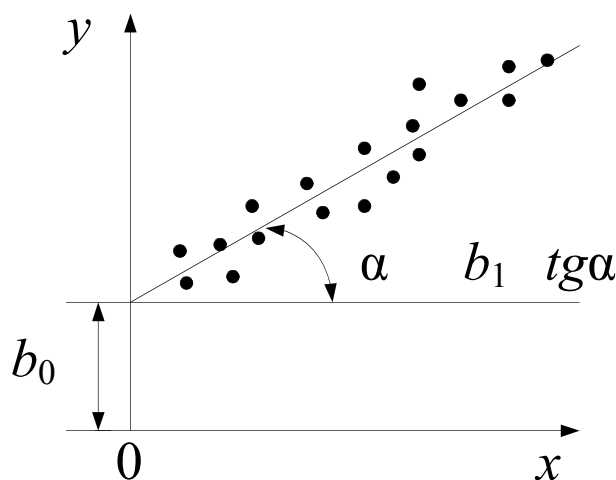


Рисунок 1 – Линейная зависимость между измеряемыми величинами

Уравнение прямой линии имеет вид:

$$y = b_0 + b_1 x, \quad (16)$$

где  $b_0$  – длина отрезка от начала координат до точки пересечения прямой с осью  $y$ ;  $b_1$  – тангенс угла наклона  $\alpha$  к оси  $x$ .

Прямую линию стараются провести так, чтобы сумма квадратичных отклонений расчетных значений  $y_p$  от экспериментальных значений  $y_э$  была минимальной для всех  $n$  рассматриваемых опытов:

$$R = \sum_i (y_p - y_э)^2 \longrightarrow \min.$$

Уравнение  $y = b_0 + b_1 x$ , в которое подставлены значения коэффициентов, принято называть *уравнением линейной регрессии*.

Система уравнений для определения коэффициентов в общем виде записывается так:

$$\frac{\partial R}{\partial b_0} = 0; \quad \frac{\partial R}{\partial b_1} = 0. \quad (17)$$

Система нормальных уравнений при этом имеет вид:

$$\sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 x_i) = 0, \quad \sum_{i=1}^n y_i x_i - \sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 x_i) x_i = 0,$$

или

$$nb_0 + b_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i, \quad b_0 \sum_{i=1}^n x_i + b_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i. \quad (18)$$

Коэффициенты  $b_0$  и  $b_1$  легко найти при помощи определителей:

$$b_0 = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n y_i & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \sum_{i=1}^n x_i^2 - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (19)$$



$$b_1 = \frac{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad (20)$$

$b_0$  проще найти по известному  $b_1$  из первого уравнения системы:

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}. \quad (21)$$

Процедуры вычисления коэффициентов регрессии, корреляции и некоторых других величин, необходимых для их статистического оценивания можно упростить, если вычислить следующие промежуточные величины:

$$s_1 = n; s_2 = \sum_i x_i; s_3 = \sum_i y_i; s_4 = \sum_i x_i^2; s_5 = \sum_i x_i y_i; s_6 = \sum_i y_i^2.$$

Другими словами,  $n$  – это общее число опытов, в которых измерялись значения величин  $x$  и  $y$ ;  $s_2$  характеризует сумму всех измеренных значений  $x$ , а  $s_3$  – сумму всех значений величины  $y$ . Остальные обозначения также понятны из формул.

Уравнение (21) показывает, что между коэффициентами  $b_0$  и  $b_1$  существует корреляционная зависимость. Для количественной оценки линейной корреляции используется коэффициент парной корреляции  $r_{xy}$ :

$$r_{xy} = \frac{s_1 s_5 - s_2 s_3}{\sqrt{(s_1 s_4 - s_2^2)(s_1 s_6 - s_3^2)}}. \quad (22)$$

Этот коэффициент может принимать следующие значения:

1.  $r_{xy}=0$  – это свидетельствует об отсутствии корреляционной связи между  $x$  и  $y$ ;
2.  $r_{xy}=1$  – в данном случае существует строгая положительная детерминистическая связь (т.е. описываемая строгой физико-химической формулой);
3.  $r_{xy}=-1$  – между  $x$  и  $y$  существует строгая отрицательная детерминистическая связь;
4.  $-1 < r_{xy} < 1$  – это наиболее распространенный случай: корреляционная связь может быть как положительной, так и отрицательной и характеризоваться различной степенью тесноты связи.

Чем ближе абсолютное значение коэффициента корреляции  $|r_{xy}|$  к единице, тем сильнее линейная связь между  $x$  и  $y$ . Следует отметить, что  $r_{xy}$  одновременно отражает степень случайности и криволинейности связи между величинами  $x$  и  $y$ . Например, зависимость  $y$  от  $x$  может быть близкой к функциональной, но существенно нелинейной. В этом случае  $r_{xy}$  будет значительно меньше единицы.

После того как уравнение регрессии найдено, необходимо провести статистический анализ результатов. Этот анализ заключается в проверке значимости всех коэффициентов регрессии в сравнении с ошибкой воспроизводимости и адекватности уравнения. Такое исследование называется регрессионным анализом.

Оценка значимости коэффициентов производится по критерию Стьюдента:

$$t_j = \frac{|b_j|}{s_{bj}}. \quad (23)$$

где  $b_j$  – коэффициент уравнения регрессии;  $s_{bj}$  – среднее квадратичное отклонение  $j$ -го коэффициента. Значения коэффициента Стьюдента при 10%-ном, 5%-ном и 2,5%-ном уровнях значимости приведены в ПРИЛОЖЕНИИ В.

Если  $t_j$  больше табличного  $t_p(f)$  для выборочного уровня значимости  $p$  и числа степеней свободы  $f=f_{\text{воспр}}$ , то коэффициент  $b_j$  значимо отличается от нуля;  $s_{bj}$  определяется:

$$s_{b_0} = \sqrt{\frac{s_{\text{воспр}}^2 \sum_{i=1}^n x_i^2}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}}, \quad s_{b_1} = \sqrt{\frac{s_{\text{воспр}}^2 n}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}}.$$

Здесь  $s_{\text{воспр}}^2$  – дисперсия воспроизводимости, характеризующая точность результатов измерений, полученных для  $m$  параллельных опытов по  $n$  измерений:

$$s_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{u=1}^m (y_{iu} - \bar{y}_i)}{n(m-1)}.$$

$f_{\text{воспр}}$  – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости:

$$f_{\text{воспр}} = \sum_{i=1}^n (m_i - 1).$$

Незначимые коэффициенты исключаются из уравнения регрессии. Оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново, поскольку коэффициенты закоррелированы друг с другом. Адекватность уравнения проверяется по критерию Фишера:

$$F = \frac{s_{\text{ад}}^2}{s_{\text{воспр}}^2}, \quad (24)$$

где  $s_{\text{ад}}^2$  – дисперсия адекватности

$$s_{\text{ад}}^2 = \frac{SS_{\text{ад}}}{f_{\text{ад}}}.$$

$SS_{\text{ад}}$  – сумма квадратов адекватности  $SS_{\text{ад}} = SS_{\text{ост}} - SS_{\text{воспр}}$ ,

$f_{\text{ад}}$  – число степеней свободы дисперсии адекватности

$$f_{\text{ад}} = f_{\text{ост}} - f_{\text{воспр}} = n - l, \quad (25)$$

$l$  – число коэффициентов в уравнении регрессии,

$SS_{\text{воспр}}$  – сумма квадратов, связанная с дисперсией воспроизводимости  $s_{\text{воспр}}^2$

$$SS_{\text{воспр}} = \sum_{i=1}^n \sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \bar{y}_i)^2, \quad \bar{y}_i = \frac{1}{m_i} \sum_{u=1}^{m_i} y_{iu},$$

$$s_{\text{воспр}}^2 = \frac{SS_{\text{воспр}}}{f_{\text{воспр}}},$$

$SS_{\text{ост}}$  – остаточная сумма квадратов

$$SS_{\text{ост}} = \sum_{i=1}^n \sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \hat{y}_i)^2, \quad f_{\text{ост}} = \sum_{i=1}^n m_i - l,$$

$f_{\text{ост}}$  – число степеней свободы остаточной дисперсии  $s_{\text{ост}}^2$

$$s_{\text{ост}}^2 = \frac{SS_{\text{ост}}}{f_{\text{ост}}} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n m_i - l}.$$

Если  $F$  окажется меньше табличного значения  $F_{1-p}(f_1, f_2)$  для уровня значимости  $p$  и числа степеней свободы  $f_1=f_{ад}$  и  $f_2=f_{воспр}$ , уравнение адекватно эксперименту.

Для одинакового числа опытов  $m_1=m_2=\dots=m_i=\dots=m_n=m$  вычисления упрощаются:

$$S_{ад}^2 = \frac{m \sum_{i=1}^n (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{n-l},$$

Если опыты проведены без параллельных, а для получения дисперсии воспроизводимости проделана отдельная серия из  $m$  опытов, тогда:

$$S_{ад}^2 = S_{ост}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-l}, S_{воспр}^2 = \frac{\sum_{u=1}^m (y_u^0 - \bar{y}^0)^2}{m-1}, \bar{y}^0 = \frac{1}{m} \sum_{u=1}^m y_u^0.$$

При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости можно оценить качество аппроксимации принятым уравнением, сравнив  $S_{ост}^2$  и дисперсию относительно среднего  $S_y^2$ :

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1},$$

по критерию Фишера

$$F = \frac{s_y^2(f_1)}{s_{ост}^2(f_2)}. \quad (26)$$

В этом случае критерий Фишера показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно полученного уравнения регрессии по сравнению с рассеянием относительно среднего. Чем больше значение  $F$  превышает табличное  $F_{1-p}(f_1, f_2)$  для выборочного уровня значимости  $p$  и чисел степеней свободы  $f_1=n-1$  и  $f_2=n-l$ , тем эффективнее уравнение регрессии.

Вычисление остаточной дисперсии имеет большое значение в теории статистических методов построения эмпирических зависимостей. В литературе можно встретить разные наименования этой величины: остаточная дисперсия, сумма квадратов остатков, остаточная сумма квадратов. Остаточная дисперсия представляет собой показатель ошибки предсказания уравнением регрессии результатов опытов. Качество предсказания определяют, сравнивая остаточную дисперсию с общей дисперсией  $S_y^2$ , таким образом, критерий Фишера

показывает, во сколько раз уравнение регрессии предсказывает результаты опытов лучше, чем среднее  $\bar{y}$ .

Значения критерия Фишера для уровней значимости 5% приведены в ПРИЛОЖЕНИИ Г.

## 5 ПРИМЕР ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНСТАНТ ДЛЯ РЕАКЦИИ РАЗЛОЖЕНИЯ

Для известного механизма химической реакции:  $A \xrightarrow{k} B + C$  определим константу скорости  $k$ , если имеется таблица экспериментальной зависимости концентрации компонента  $C_A$  от времени:  $C_A = f(t)$ .

Скорость расщепления компонент  $C_A$  в системе выражается уравнением:

$$\frac{dC}{dt} = w = kC^n, \quad (27)$$

где  $n$  – порядок реакции,  $w$  – скорость реакции.

Заменим производную концентрации компонента  $C$  по времени  $t$  на легко вычисляемую величину:

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = \frac{C_i - C_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, \quad (28)$$

$C_i, C_{i-1}$  – значения концентрации компонента  $C$  соответственно в моменты времени  $t_i, t_{i-1}$ . Таким образом получаем формулу для вычисления расчетной концентрации компонента  $C$ :

$$C_i = C_{i-1} + kC^n(t_i - t_{i-1}). \quad (29)$$

Теперь необходимо привести уравнение (29) к такому виду, чтобы можно было воспользоваться линейной регрессией для решения поставленной задачи. Для этого прологарифмируем его и получим выражение:

$$\ln w = \ln k + n \ln C. \quad (30)$$

Эта зависимость линейная. Уравнение прямой в данном случае выражается формулой (21), где  $y = \ln w$ ,  $x = \ln C$ ,  $b_1 = n$ ,  $b_0 = \ln k$ .

Зная экспериментальные значения концентрации  $C$  и времени  $t$ , мы можем определить  $y$  и  $x$  в выражении (21).

Необходимо подобрать коэффициенты  $b_0$  и  $b_1$  так, чтобы сумма квадратичных отклонений расчетных значений величины  $y$  от экспериментальных значений была минимальной для всех рассматриваемых опытов:

$$R = \sum_i (y_p - y_o)^2 \longrightarrow \min. \quad (31)$$

Фактически необходимо минимизировать разницу между расчетными и экспериментальными значениями концентраций (рисунок 2).

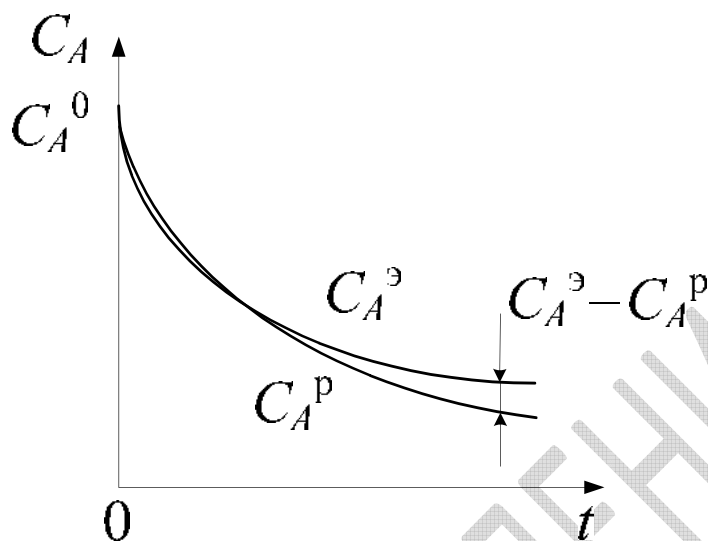


Рисунок 2 – Экспериментальные и расчетные концентрации компонента А

Определив по методу наименьших квадратов  $\ln k$  и  $n$ , находим  $k = \exp(\ln k)$ . Подставив полученное значение  $k$  в уравнение (27), мы сможем определить расчетные значения концентрации компонента С.

Если необходимо найти предэкспоненциальный множитель и энергию активации  $E$ , то можно снова обратиться к линейной регрессии. Для этого прологарифмируем выражение закона Аррениуса и получим выражение:

$$k = k_0 \exp(E/(RT)), \ln k = \ln k_0 - E/(RT). \quad (32)$$

Введя обозначения (34):

$$y = \ln k, \quad b_0 = \ln k_0, \quad b_1 = -E/R, \quad x = 1/T.$$

мы получили линейризованное уравнение регрессии вида  $y=a+bx$ , и сможем рассчитать предэкспоненциальный множитель  $k_0$  и энергию активации  $E$ .

Регрессионные модели относятся к классу стохастических моделей систем. Для применимости стохастического подхода должны выполняться следующие требования:

- 1) массовость проводимых экспериментов, то есть достаточно большое их число;
- 2) повторяемость условий экспериментов, оправдывающая сравнение результатов различных экспериментов;
- 3) статистическая устойчивость.

Поэтому для того, чтобы воспользоваться формулами для вычисления критерия Фишера, мы должны принять, что эти требования выполняются, иначе расчеты статистических критериев бессмысленны.

## 6 ОЦЕНКА АДЕКВАТНОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ КИНЕТИКИ

Свойство адекватности характеризует способность модели описывать свойства объекта с точностью не ниже заданной.

Для приближенного описания одних и тех же явлений могут быть предложены различные модели, и для оценки их качества необходимо выбрать критерий для сравнения расчетных и экспериментальных данных. Чаще всего рассчитываются функционалы, характеризующие степень расхождения между экспериментальными и расчетными данными.

Пусть для  $t$  значений начальных условий в  $q$  точках проведены измерений  $r \leq n$  компонент вектора переменных  $C$ . Если адекватность модели оценивается для заданного набора начальных условий, то функционал, характеризующий степень расхождения между экспериментальными и расчетными данными, будет иметь вид, представленный выражением:

$$F_1 = \sum_{j=1}^r \sum_{l=1}^q \sum_{k=1}^t m_j (C_{jlk}^p - C_{jlk}^э)^2, \quad (33)$$

где  $C_{jlk}^p$ ,  $C_{jlk}^э$  – расчетное и экспериментальное значение концентрации  $j$ -го компонента в 1-ый момент времени при  $k$ -ом начальном условии эксперимента;  $m_j$  – весовой коэффициент  $j$ -го компонента, который выбирается проектировщиком постоянным для всего времени исследования.

Критерий (33) может быть использован, если измеряется концентрация одного компонента, обычно целевого продукта, или нескольких из состава реакционной массы, имеющих близкий диапазон измерения. Если же концентрации измеряемых компонентов находятся в избытке и сильно отличаются друг от друга, можно использовать критерий вида (34):

$$F_2 = \sum_{j=1}^r \sum_{l=1}^q \sum_{k=1}^t m_j \left( \frac{(C_{jlk}^p - C_{jlk}^э)^2}{(C_{jlk}^э)^2} \right). \quad (34)$$

В случае высокой конверсии отдельных компонентов, когда их содержание стремится к нулю, следует использовать критерий вида (35).

$$F_2 = \sum_{j=1}^r \sum_{l=1}^q \sum_{k=1}^t m_j \left( \frac{(C_{jlk}^p - C_{jlk}^э)^2}{\Delta C_j^2} \right), \quad (35)$$

где  $\Delta C_j$  – диапазон изменения концентрации  $j$ -го компонента.

При анализе адекватности ММ должны учитываться ограничения на входные параметры, заданные в виде критериальных ограничений.

Выбор весовых коэффициентов для зависимостей (33)-(35) связан с точностью экспериментальных данных и их важностью с точки зрения мнения экспертов.

## 7 ХАРАКТЕРИСТИКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА

Таким образом, формализованное описание задачи определения констант скоростей химической реакции, как объекта программирования, позволяет создать программный комплекс, обладающий следующими характеристиками:

**1. Операционная система, ОС** (англ. *operating system*) – базовый комплекс компьютерных программ, обеспечивающий управление аппаратными средствами компьютера, работу с файлами, ввод и вывод данных, а также выполнение прикладных программ и утилит: **Microsoft Windows**.

**2. Язык программирования:** C++ – компилируемый строго типизированный язык программирования общего назначения.

**3. Количество разработанных классов (class): 2**, а именно

*TForm1* – класс ввода исходных данных (начальные концентрации конечных компонентов, распределение концентраций исходных компонентов во времени);

*TForm2* – класс вывода результатов расчета (порядок реакции, константа скорости реакции, дисперсия, коэффициент корреляции).

**4. Количество потоков выполнения команд** (нитей, threads): одна последовательность хода управления внутри программы.

**5. Распределенность приложения:** локальное.

**6. Инструментальная среда разработки:** C++ Builder 6.

**7. Количество исходных файлов программы:** 5 (regres.cpp, MainInterpol.h, MainInterpol.cpp, RezultInterpol.h, RezultInterpol.cpp).

## ПРИМЕР ВЫПОЛНЕНИЯ КУРСОВОГО ПРОЕКТА

Уравнение химической реакции дано в общем виде для реакции разложения:  $A \xrightarrow{k} B + 2C$ .

Алгоритм для определения константы скорости реакции представлен на рисунке 3. Алгоритм позволяет на основании исходных данных определить  $k$  – константы скорости реакции,  $n$  – порядок реакции,  $r$  – коэффициент корреляции и  $d$  – дисперсии. Исходными данными являются:

- изменение концентрации исходного компонента  $C_A(t)$  во времени,
- начальные концентрации компонентов  $C_B$  и  $C_C$ ,
- количество экспериментальных точек  $N$ .



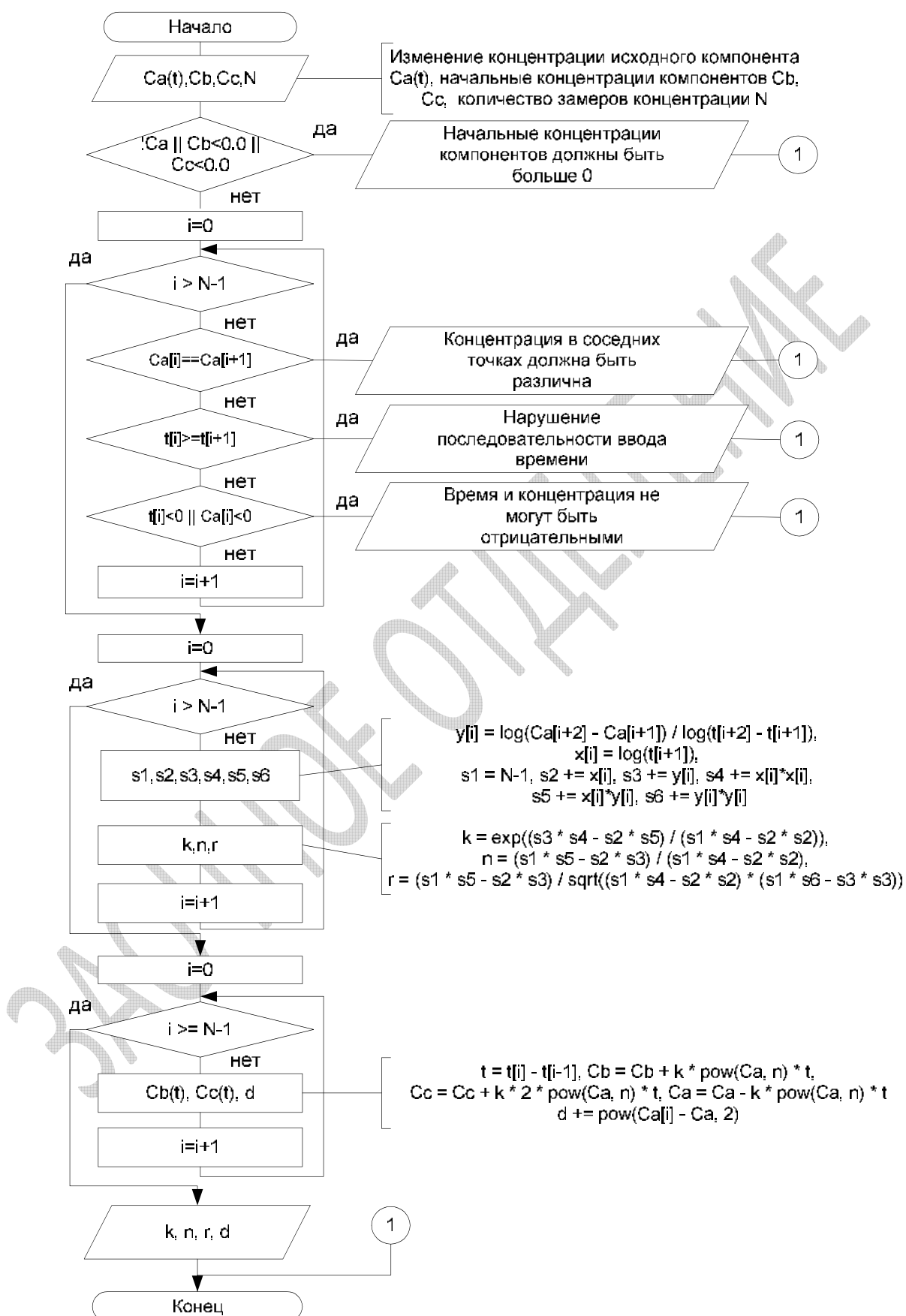


Рисунок 3 – Алгоритм определения константы скорости реакции

Для реализации алгоритма решения задачи кинетики разработано программное обеспечение, включающее графический пользовательский интерфейс. В качестве интегрированной среды разработки программного обеспечения (*Integrated Development Environment, IDE*) используется C++ Builder. C++ Builder среда быстрой разработки (*rapid application development, RAD*), выпускаемая компанией CodeGear. Среда предназначена для написания программ на языке программирования C++. C++ Builder объединяет библиотеку визуальных компонентов и среду программирования.

Программа состоит из двух форм (окон), представленных на рисунках 4 и 5 соответственно и позволяющих вводить начальные данные и отображать результаты расчета. Программа включает пять исходных файлов программы: `regres.cpp`, `MainInterpol.h`, `MainInterpol.cpp`, `RezultInterpol.h`, `RezultInterpol.cpp`. Ниже приведен состав файлов с подробными комментариями.

Графический интерфейс включает следующие классы визуальных компонентов: формы `TForm`, изображения `TImage`, панели `TPanel`, группы элементов `TGroupBox`, метки `TLabel`, однострочный редактор текста с меткой `TLabelledEdit`, график `TChart`, кнопки `TButton`, компонент для ввода и изменения числовых значений `TUpDown`, таблица `TStringGrid`, и.т.д.

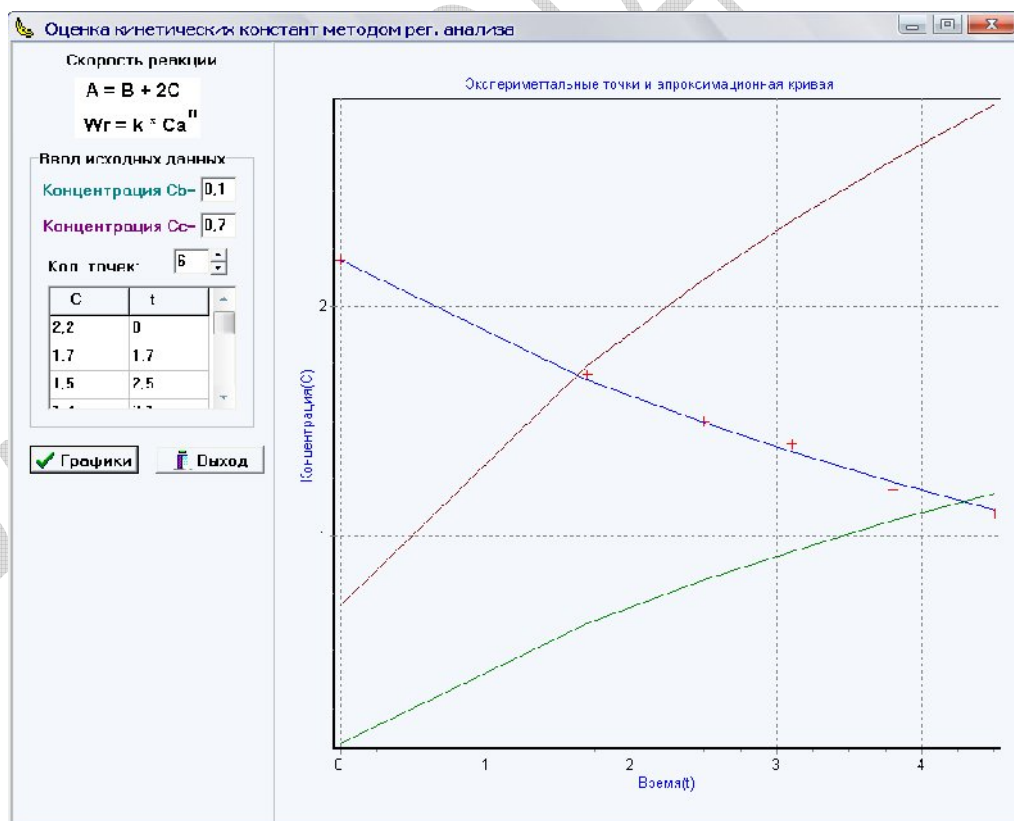


Рисунок 4 – Форма ввода исходных данных, отображения экспериментальных значений и расчетных кривых концентраций

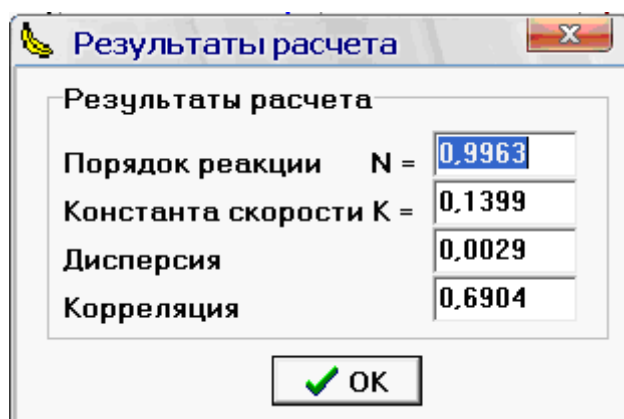


Рисунок 5 – Форма отображения результатов расчета

Исходный код программы:

### 1) regres.cpp

```
#include <vcl.h>
#pragma hdrstop
//-----
USEFORM("MainInterpol.cpp", Form1);
USEFORM("RezultInterpol.cpp", Form2);
//Функция, с которой начинается выполнение программы
WINAPI WinMain(HINSTANCE, HINSTANCE, LPSTR, int)
{
    try
    {
        Application->Initialize(); //Инициализация приложения
        Application->Title = "Regres"; //Задание заголовка
        Application->CreateForm(__classid(TForm1), &Form1); // Создание формы
        Application->Run();
        // Запуск обработчика событий и визуализация компонентов
    } // Обработчик исключений Exception
    catch (Exception &exception)
    {
        Application->ShowException(&exception);
    }
    catch (...) // Обработчик всех исключений
    {
        try
        {
            throw Exception("");
        }
        catch (Exception &exception)
        {
            Application->ShowException(&exception);
        }
    }
    return 0;
}
```

### 2) MainInterpol.h

```

//Задание стражей включения, обеспечивающих дублирования заголовочного файла
#ifndef MainInterpolH
#define MainInterpolH
//Подключение заголовочных файлов
#include <Classes.hpp>
#include <Controls.hpp>
#include <StdCtrls.hpp>
#include <Forms.hpp>
#include <Chart.hpp>
#include <ExtCtrls.hpp>
#include <TeEngine.hpp>
#include <TeeProcs.hpp>
#include <Grids.hpp>
#include <Buttons.hpp>
#include <ComCtrls.hpp>
#include <Graphics.hpp>
#include <Series.hpp>
//Объявление класса формы
class TForm1 : public TForm
{
__published: // Объявление визуальных компонентов на форме
    TPanel *Panel1;
    TPanel *Panel2;
    TChart *Chart1;
    TGroupBox *GroupBox1;
    TStringGrid *StringGrid1;
    TLabel *Label1;
    TImage *Image1;
    TBitBtn *BitBtn1;
    TBitBtn *BitBtn2;
    TLabel *Label2;
    TEdit *Edit1;
    TUpDown *UpDown1;
    TPointSeries *Series1;
    TLineSeries *Series2;
    TLabeledEdit *LabeledEdit1;
    TLabeledEdit *LabeledEdit2;
    TLineSeries *Series3;
    TLineSeries *Series4;
//Объявление обработчиков событий
    void __fastcall FormCreate(TObject *Sender);
    void __fastcall UpDown1Click(TObject *Sender, TUDBtnType Button);
    void __fastcall BitBtn1Click(TObject *Sender);
private: // User declarations
public: // User declarations
    double k, n, d, r;
    __fastcall TForm1(TComponent* Owner);
};
extern PACKAGE TForm1 *Form1;
#endif

```

### 3) MainInterpol.cpp

```
#include <vcl.h>
#pragma hdrstop
#include "RezultInterpol.h"
#include "MainInterpol.h"
#include "math.h"
//-----
#pragma package(smart_init)
#pragma resource "*.dfm"
TForm1 *Form1;
//Определение конструктора формы
__fastcall TForm1::TForm1(TComponent* Owner)
    : TForm(Owner), k(0.0), n(0.0), r(0.0), d(0.0)
{
}
//Определение инициализации формы
void __fastcall TForm1::FormCreate(TObject *Sender)
{
//Задание полей заголовка таблицы
    StringGrid1->Cells[0][0] = "  C";
    StringGrid1->Cells[1][0] = "  t";
}
//Определение обработчика нажатия на кнопку для изменения количества строк
//таблицы
void __fastcall TForm1::UpDown1Click(TObject *Sender, TUDBtnType Button)
{
    StringGrid1->RowCount = UpDown1->Position + 1;
}
//Определение обработчика кнопки расчета и построения графиков
void __fastcall TForm1::BitBtn1Click(TObject *Sender)
{
//Инициализация переменных необходимых для решения задачи кинетики
    d = 0.0;
    int i, reg_up(0), reg_down(0);
    double *y, *x, s1(UpDown1->Position - 1),
    s2(0.0), s3(0.0), s4(0.0), s5(0.0), s6(0.0), ca, cb, cc, t;
    //Очистка графиков после предыдущего расчета
    Series1->Clear();
    Series2->Clear();
    Series3->Clear();
    Series4->Clear();
    try
    {
//Создание в динамической памяти массива для хранения экспериментальных данных
        y = new double[UpDown1->Position - 1];
        x = new double[UpDown1->Position - 1];
        if(!y || !x) throw "НЕТ свободной памяти";

        //Задание начальных значений концентраций
        ca = StringGrid1->Cells[0][1].ToDouble();
        cb = LabeledEdit1->Text.ToDouble();
        cc = LabeledEdit2->Text.ToDouble();
    }
}
```

```

//Проверка входных данных на допустимость значений
if(!ca || cb < 0.0 || cc < 0.0)
throw "Начальные концентрации компонентов должны быть больше 0";
for(i = 0; i < UpDown1->Position - 1; i++)
{
    if(StringGrid1->Cells[0][i + 1].ToDouble() > StringGrid1->Cells[0][i + 2].ToDouble())
        reg_down++;
    else reg_up++;
    if(StringGrid1->Cells[0][i + 1].ToDouble() == StringGrid1->Cells[0][i + 2].ToDouble())
throw "Концентрация в соседних точках должна быть различна";
    if(StringGrid1->Cells[1][i + 1].ToDouble() >= StringGrid1->Cells[1][i + 2].ToDouble())
throw "Нарушение последовательности ввода времени";
    if(StringGrid1->Cells[1][i+1].ToDouble()< 0||StringGrid1->Cells[0][i + 1].ToDouble()<0)
throw "Время и концентрация не могут быть отрицательными";
}
//Расчет значений локальных переменных, необходимых для решения задачи
for(i = 0; i < UpDown1->Position - 1; i++)
{
    y[i] = log(fabs(StringGrid1->Cells[0][i + 2].ToDouble() -
StringGrid1->Cells[0][i + 1].ToDouble()) /
(StringGrid1->Cells[1][i + 2].ToDouble() -
StringGrid1->Cells[1][i + 1].ToDouble()));
    x[i] = log(StringGrid1->Cells[0][i + 1].ToDouble());
    s2 += x[i]; s3 += y[i];
    s4 += x[i] * x[i];
    s5 += x[i] * y[i];
    s6 += y[i] * y[i];
}
//Расчет константы скорости реакции, порядка реакции, коэффициента корреляции
k = exp((s3 * s4 - s2 * s5) / (s1 * s4 - s2 * s2));
n = (s1 * s5 - s2 * s3) / (s1 * s4 - s2 * s2);
r = (s1 * s5 - s2 * s3) / sqrt((s1 * s4 - s2 * s2) * (s1 * s6 - s3 * s3));

//Построение графиков и расчет концентраций компонентов реакции
for(int i = 1; i <= UpDown1->Position; i++)
{
    Series1->AddXY(StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble(),
StringGrid1->Cells[0][i].ToDouble());
    if(ca < 0) throw "Модель невозможно описать линейной регрессией";
    if(i == 1)
    {
        Series2->AddXY(StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble(), ca );
        Series3->AddXY(StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble(), cb );
        Series4->AddXY(StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble(), cc );
    }
    else
    {
        t = StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble() - StringGrid1->Cells[1][i - 1].ToDouble();
        Series3->AddXY(StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble(), cb = cb + k * pow(ca, n) * t);
        Series4->AddXY(StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble(), cc = cc + k * 2*pow(ca, n)*t);
        if(reg_down > reg_up)

```

```

Series2->AddXY(StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble(), ca =ca-k*pow(ca, n) * t);
    else
Series2->AddXY(StringGrid1->Cells[1][i].ToDouble(), ca =ca+k*pow(ca, n) * t);
    }
//расчет дисперсии
    d += pow(StringGrid1->Cells[0][i].ToDouble() - ca, 2);
    }
//Создание формы отображения результатов
Application->CreateForm(__classid(TForm2), &Form2);
//Отображение формы
Form2->ShowModal();

    delete[]y;
    delete[]x;
}
catch(char*str)
{
    Series1->Clear();
    Series2->Clear();
    Series3->Clear();
    Series4->Clear();
    // Вывод сообщения об ошибке
    Application->MessageBox(str, "Ошибка", MB_ICONERROR | MB_OK);
}
catch(EConvertError&)
{
    // Вывод сообщения об ошибке
    Application->MessageBox("Не правильный тип данных", "Ошибка",
MB_ICONERROR | MB_OK);
    delete[]y;
    delete[]x;
}
catch(...)
{
    // Вывод сообщения об ошибке
    Application->MessageBox("НЕ известная ошибка", "Ошибка",
MB_ICONERROR | MB_OK);
}
}
}

```

#### 4) **RezultInterpol.h**

```

#ifndef RezultInterpolH
#define RezultInterpolH
//-----
#include <Classes.hpp>
#include <Controls.hpp>
#include <StdCtrls.hpp>
#include <Forms.hpp>
#include <Buttons.hpp>
#include <ExtCtrls.hpp>
//-----

```

```

class TForm2 : public TForm
{
__published: // IDE-managed Components
    TPanel *Panel1;
    TGroupBox *GroupBox2;
    TLabel *Label3;
    TLabel *Label4;
    TEdit *Edit2;
    TEdit *Edit3;
    TLabel *Label1;
    TEdit *Edit1;
    TLabel *Label2;
    TEdit *Edit4;
    TBitBtn *BitBtn1;
    void __fastcall FormShow(TObject *Sender);
private: // User declarations
public: // User declarations
    __fastcall TForm2(TComponent* Owner);
};
//-----
extern PACKAGE TForm2 *Form2;
//-----
#endif

```

## 5) RezultInterpol.cpp

```

#include <vcl.h>
#pragma hdrstop
#include "MainInterpol.h"
#include "RezultInterpol.h"
//-----
#pragma package(smart_init)
#pragma resource "*.dfm"
TForm2 *Form2;
//-----
__fastcall TForm2::TForm2(TComponent* Owner)
    : TForm(Owner)
{
}
//Определение обработчика отображения формы
void __fastcall TForm2::FormShow(TObject *Sender)
{
    //Вывод результатов расчета
    Edit2->Text = FloatToStrF(Form1->n, ffGeneral, 4, 4);
    Edit3->Text = FloatToStrF(Form1->k, ffGeneral, 4, 4);
    Edit1->Text = FloatToStrF(Form1->d, ffGeneral, 4, 4);
    Edit4->Text = FloatToStrF(Form1->r, ffGeneral, 4, 4);
}

```



Тестирование разработанного в среде C++ Builder программного обеспечения проводилось при следующих входных данных:

Начальная концентрация  $C_B = 0,1$  моль/л;  $C_C = 0,7$  моль/л.

Распределение концентрации  $C_A(t)$  во времени  $t$  приведено в таблице 3.

Таблица 3 – Распределение концентрации компонента  $A$  во времени  $t$ ,  $C_A(t)$

Концентрация $C_A$ , моль/л	Время $t$ , с
2,2	0
1,7	1,7
1,5	2,5
1,4	3,1
1,2	3,8
1,1	4,5

**Результаты расчета:**

Порядок реакции  $n = 1$

Константа скорости реакции  $k = 0,14$  1/с

**Проверка адекватности модели:**

Дисперсия  $d = 0,003$  (моль / л)<sup>2</sup>

Коэффициент корреляции  $r = 0,69$

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Учебное пособие предназначено для студентов заочной формы обучения по направлению подготовки 230100 «Информатика и вычислительная техника» и соответствует разделам рабочей программы курсов «Программирование на языках высокого уровня», «Технологии программирования», «Объектно-ориентированное программирование», «Лингвистическое и программное обеспечение САПР», «Алгоритмические языки и программирование». Приведенные в учебном пособии материалы могут быть использованы при выполнении учебных проектов и небольших программных продуктов.

В учебном пособии отражены основные принципы объектно-ориентированного программирования, основные структуры программирования, приведен пример программной реализации в среде C++ Builder для исследования кинетики химических реакций. Для уточнения сложных вопросов программирования необходимо использовать рекомендуемую в учебном пособии справочную литературу.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1) Архангельский, А.Я. Программирование в С++Builder 6 и 2006: [разработка программ для Windows: методические и справочные материалы по С++Builder] / А. Я. Архангельский, М. А. Тагин. – Москва : БИНОМ, 2007. – 1181 с.
- 2) Страуструп, Бьерн. Язык программирования С++ / Бьерн Страуструп; Пер. с англ. С. Анисимова, М. Кононова; Под ред. Ф. Андреева, А. Ушакова. – Спец. изд. – М.: Бином; СПб.: Нев. диалект, 2001. – 1098 с.
- 3) Подбельский, В.В. Язык СИ++ / В.В. Подбельский. – 5-е изд. – М.: Финансы и статистика, 2008. – 559 с.
- 4) Шилдт, Герберт. С++. Базовый курс / Герберт Шилдт; [пер. с англ. Н.М. Ручко]. – 3-е изд. – М.: Вильямс, 2008. – 620 с.
- 5) Элджер, Джефф. С++ / Джефф Элджер; [Пер. с англ. Е. Матвеев]. – СПб.: Питер: Питер Бук, 2001. – 320 с.
- 6) Эккель, Брюс. Философия С++: Практ. программирование / Брюс Эккель, Чак Эллисон; [Пер. с англ. Е. Матвеев]. – М.: Питер, 2004. – 608 с.
- 7) Липпман, Стенли Б. Язык программирования С++: вводный курс / Стенли Б. Липпман, Жози Лажойе, Барбара Му; [пер. с англ. и ред. В. А. Коваленко]. – 4-е изд. – М.: Вильямс, 2007. – 889 с.
- 8) Астахова, И.Ф. Язык С++ / И.Ф. Астахова, С.В. Власов, В.В. Фертиков, А.В. Ларин. – Минск: Новое знание, 2003. – 200 с.
- 9) Иванова, Г.С. Основы программирования / Г.С. Иванова. – Изд. 4-е, стер. – М.: Изд-во МГТУ, 2007. – 415 с.
- 10) Иванова, Г.С. Объектно-ориентированное программирование / Г.С. Иванова, Т.Н. Ничушкина, Е.К. Пугачев; под ред. Г.С. Ивановой. – Изд. 3-е, стер. – М.: Изд-во МГТУ, 2007. – 366 с.
- 11) Чистякова, Т.Б. Программирование на языках высокого уровня. Базовый курс [Текст]: учебное пособие для студентов заочной формы обучения / Т.Б. Чистякова, Р.В. Антипин, И.В. Новожилова. – СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2008. – 227 с.
- 12) Чистякова, Т.Б. Синтез и анализ математических моделей кинетики химических реакций [Текст]: учебное пособие / Т.Б. Чистякова, Л.В. Гольцева, А.М. Островская, Ю.В. Островский. – СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2002. – 70 с.
- 13) Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учебное пособие / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. – Москва : Академкнига, 2008. – 415 с.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

Федеральное агентство по образованию

---

Государственное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

---

Кафедра систем автоматизированного проектирования и управления

Направление подготовки: 230100 – Информатика и вычислительная техника

Уровень подготовки: бакалавр техники и технологии

Учебная дисциплина: Программирование на языках высокого уровня

Курс: X

Группа: XXX

Пояснительная записка к курсовому проекту на тему:  
**«Программный комплекс для определения константы скорости  
химической реакции (указать реакцию)»**

Вариант №X

Студент \_\_\_\_\_ Фамилия И.О.

Руководитель \_\_\_\_\_ Фамилия И.О.

Рекомендуемая оценка \_\_\_\_\_

Санкт-Петербург  
20XX

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательное)

Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(Технический университет)

### ЗАДАНИЕ

на курсовое проектирование по дисциплине «Программирование на языках высокого уровня»  
студенту Фамилия Имя Отчество (полностью) \_\_\_\_\_ группы № \_\_\_\_\_

Форма обучения: заочная

Факультет Информатики и управления

Кафедра Систем автоматизированного проектирования и управления

Направление подготовки: 230100 – Информатика и вычислительная техника

Уровень подготовки: бакалавр техники и технологии

Тема Программный комплекс для определения константы скорости химической реакции

#### Исходные данные к работе

1. Лекции по дисциплине «Программирование на языках высокого уровня». Фамилия И.О. лектора
2. Чистякова, Т.Б. Программирование на языках высокого уровня. Базовый курс [Текст]: учебное пособие для студентов заочной формы обучения / Т.Б. Чистякова, Р.В. Антипин, И.В. Новожилова. – СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2008. – 227 с.
3. Страуструп, Б. Язык программирования C++ / Бьерн Страуструп; Пер. с англ. С. Анисимова, М. Кононова; Под ред. Ф. Андреева, А. Ушакова. – Спец. изд. – М.: Бином; СПб.: Нев. диалект, 2001. – 1098 с.
4. Архангельский, А.Я. Программирование в C++Builder 6 и 2006: [разработка программ для Windows: методические и справочные материалы по C++Builder] / А. Я. Архангельский, М. А. Тагин. - Москва : БИНОМ, 2007. – 1181 с.

#### Перечень подлежащих разработке вопросов, документов

1. Ознакомиться с теорией по синтезу и анализу ММ кинетики химических реакций.
2. Выполнить постановку задачи по исследованию кинетики химической реакции.
3. Составить формализованное описание задачи. Разработать структуру входных и выходных данных.
4. Уточнить методы решения математической задачи.
5. Разработать алгоритм (блок-схему) для определения порядка и константы скорости реакции.
6. Спроектировать структуру программы.
7. Разработать пользовательский интерфейс.
8. Выполнить предварительную оценку кинетических констант с использованием метода регрессионного анализа.
9. Провести статистический анализ результатов.
10. Составить программу, реализующую поставленную задачу.
11. Протестировать работоспособность программного обеспечения.

#### Перечень графического материала

1. Постановка задачи исследования кинетики химической реакции.
2. Формализованное описание задачи. Структура входных и выходных данных.
3. Методы регрессионного анализа для решения задачи.
4. Алгоритм (блок-схема) определения порядка и константы скорости химической реакции.
5. Функциональная структура программного комплекса.
6. Результаты проверки адекватности разработанной модели.
7. Примеры тестирования работоспособности программного обеспечения.
8. Характеристика разработанного программного обеспечения.

#### Виды и объём работы, выполняемой с использованием ЭВМ и САПР

1. Разработка программного обеспечения в среде MS Visual Studio 2005, C++Builder 6
2. Оформление документации в Microsoft Word, Microsoft Visio.
3. Выполнение презентации с помощью Microsoft Power Point 2003.

Дата выдачи задания:

Дата представления работы к защите:

Руководитель

курсового проектирования

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

\_\_\_\_\_

(инициалы, фамилия)

Задание принял  
к выполнению

\_\_\_\_\_

(подпись, дата)

\_\_\_\_\_

(инициалы, фамилия)

**ПРИЛОЖЕНИЕ В**  
(справочное)

Значения критерия Стьюдента

Таблица 4 – Значения критерия Стьюдента

<i>f</i>	<b>Процентные точки распределения Стьюдента</b>		
	<b>10%</b>	<b>5%</b>	<b>2,5%</b>
	<i>t</i>	<i>t</i>	<i>t</i>
1	3,08	6,31	12,74
2	1,89	2,92	4,30
3	1,64	2,35	3,18
4	1,53	2,13	2,78
5	1,48	2,01	2,57
6	1,44	1,94	2,45
7	1,41	1,89	2,36
8	1,40	1,86	2,31
9	1,38	1,83	2,26
10	1,37	1,81	2,23
11	1,36	1,80	2,20
12	1,35	1,78	2,18
13	1,35	1,77	2,16
14	1,35	1,76	2,14
15	1,34	1,75	2,13
16	1,34	1,75	2,12
17	1,33	1,74	2,11
18	1,33	1,73	2,10
19	1,33	1,73	2,09
20	1,33	1,73	2,09

# ПРИЛОЖЕНИЕ Г

(справочное)

Значения критерия Фишера ( $p=5\%$ )

Таблица 5 – Значения критерия Фишера

$f_1 \backslash f_2$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	20	24	30	40	60	120	$\infty$
1	161,45	199,50	215,71	224,58	230,16	233,99	236,77	238,88	240,54	241,88	243,91	245,95	248,01	249,05	250,09	251,14	252,20	253,25	254,32
2	18,513	19,000	19,164	19,247	19,296	19,330	19,353	19,371	19,385	19,396	19,413	19,429	19,446	19,454	19,462	19,471	19,479	19,487	19,496
3	10,128	9,5521	9,2766	9,1172	9,0135	8,9406	8,8868	8,8452	8,8123	8,7855	8,7446	8,7029	8,6602	8,6385	8,6166	8,5944	8,5720	8,5494	8,5265
4	7,7086	6,9443	6,5914	6,3883	6,2560	6,1631	6,0942	6,0410	5,9988	5,9644	5,9117	5,8578	5,8025	5,7744	5,7459	5,7170	5,6878	5,6581	5,6281
5	6,6079	5,7861	5,4095	5,1922	5,0503	4,9503	4,8759	4,8183	4,7725	4,7351	4,6777	4,6188	4,5581	4,5272	4,4957	4,4638	4,4314	4,3984	4,3650
6	5,9874	5,1433	4,7571	4,5337	4,3874	4,2839	4,2066	4,1468	4,0990	4,0600	3,9999	3,9381	3,8742	3,8415	3,8082	3,7743	3,7398	3,7047	3,6688
7	5,5914	4,7374	4,3468	4,1203	3,9715	3,8660	3,7870	3,7257	3,6767	3,6365	3,5747	3,5108	3,4445	3,4105	3,3758	3,3404	3,3043	3,2674	3,2298
8	5,3177	4,4590	4,0662	3,8378	3,6875	3,5806	3,5005	3,4381	3,3881	3,3472	3,2840	3,2184	3,1503	3,1152	3,0794	3,0428	3,0053	2,9669	2,9276
9	5,1174	4,2565	3,8626	3,6331	3,4817	3,3738	3,2927	3,2296	3,1789	3,1373	3,0729	3,0061	2,9365	2,9005	2,8637	2,8259	2,7872	2,7475	2,7067
10	4,9646	4,1028	3,7083	3,4780	3,3258	3,2172	3,1355	3,0717	3,0204	2,9782	2,9130	2,8450	2,7740	2,7372	2,6996	2,6609	2,6211	2,5801	2,5379
11	4,8443	3,9823	3,5874	3,3567	3,2039	3,0946	3,0123	2,9480	2,8962	2,8536	2,7876	2,7186	2,6464	2,6090	2,5705	2,5309	2,4901	2,4480	2,4045
12	4,7472	3,8853	3,4903	3,2592	3,1059	2,9961	2,9134	2,8486	2,7964	2,7534	2,6866	2,6169	2,5436	2,5055	2,4663	2,4259	2,3842	2,3410	2,2962
13	4,6672	3,8056	3,4105	3,1791	3,0254	2,9153	2,8321	2,7669	2,7144	2,6710	2,6037	2,5331	2,4589	2,4202	2,3803	2,3392	2,2966	2,2524	2,2064
14	4,6001	3,7389	3,3439	3,1122	2,9582	2,8477	2,7642	2,6987	2,6458	2,6021	2,5342	2,4630	2,3879	2,3487	2,3082	2,2664	2,2230	2,1778	2,1307
15	4,5431	3,6823	3,2874	3,0556	2,9013	2,7905	2,7066	2,6408	2,5876	2,5437	2,4753	2,4035	2,3275	2,2878	2,2468	2,2043	2,1601	2,1141	2,0658
16	4,4940	3,6337	3,2389	3,0069	2,8524	2,7413	2,6572	2,5911	2,5377	2,4935	2,4247	2,3522	2,2756	2,2354	2,1938	2,1507	2,1058	2,0589	2,0096
17	4,4513	3,5915	3,1968	2,9647	2,8100	2,6987	2,6143	2,5480	2,4943	2,4499	2,3807	2,3077	2,2304	2,1898	2,1477	2,1040	2,0584	2,0107	1,9604
18	4,4139	3,5546	3,1599	2,9277	2,7729	2,6613	2,5767	2,5102	2,4563	2,4117	2,3421	2,2686	2,1906	2,1497	2,1071	2,0629	2,0166	1,9681	1,9168
19	4,3808	3,5219	3,1274	2,8951	2,7401	2,6283	2,5435	2,4768	2,4227	2,3779	2,3080	2,2341	2,1555	2,1141	2,0712	2,0264	1,9796	1,9302	1,8780
20	4,3513	3,4928	3,0984	2,8661	2,7109	2,5990	2,5140	2,4471	2,3928	2,3479	2,2776	2,2033	2,1242	2,0825	2,0391	1,9938	1,9464	1,8963	1,8432
21	4,3248	3,4668	3,0725	2,8401	2,6848	2,5727	2,4876	2,4205	2,3661	2,3210	2,2504	2,1757	2,0960	2,0540	2,0102	1,9645	1,9165	1,8657	1,8117
22	4,3009	3,4434	3,0491	2,8167	2,6613	2,5491	2,4638	2,3965	2,3441	2,2967	2,2258	2,1508	2,0707	2,0283	1,9842	1,9380	1,8895	1,8380	1,7831
23	4,2793	3,4221	3,0280	2,7955	2,6400	2,5277	2,4422	2,3748	2,3201	2,2747	2,2036	2,1282	2,0476	2,0050	1,9605	1,9139	1,8649	1,8128	1,7570
24	4,2597	3,4028	3,0088	2,7763	2,6207	2,5082	2,4226	2,3551	2,3001	2,2547	2,1834	2,1077	2,0267	1,9838	1,9390	1,8920	1,8424	1,7897	1,7331
25	4,2417	3,3852	2,9912	2,7587	2,6030	2,4904	2,4047	2,3371	2,2821	2,2365	2,1649	2,0889	2,0075	1,9643	1,9192	1,8718	1,8217	1,7684	1,7110
26	4,2252	3,3690	2,9751	2,7426	2,5868	2,4741	2,3883	2,3205	2,2655	2,2197	2,1479	2,0716	1,9898	1,9464	1,9010	1,8533	1,8027	1,7488	1,6906
27	4,21,00	3,2541	2,9604	2,7278	2,5719	2,4591	2,3732	2,3053	2,2601	2,2043	2,1323	2,0558	1,9736	1,9299	1,8842	1,8361	1,7851	1,7307	1,6717
28	4,1960	3,3404	2,9467	2,7141	2,5581	2,4453	2,3593	2,2913	2,2360	2,1900	2,1179	2,0411	1,9586	1,9147	1,8687	1,8203	1,7689	1,7138	1,6541
29	4,1830	3,3277	2,9340	2,7014	2,5454	2,4324	2,3463	2,2782	2,2229	2,1768	2,1045	2,0275	1,9446	1,9005	1,8543	1,8055	1,7537	1,6981	1,6377
30	4,1709	3,3158	2,9223	2,6896	2,5336	2,4205	2,3343	2,2662	2,2107	2,1646	2,0921	2,0148	1,9317	1,8874	1,8409	1,7918	1,7396	1,6835	1,6223
40	4,0848	3,2317	2,8387	2,6060	2,4495	2,3359	2,2490	2,1802	2,1240	2,0772	2,0035	1,9245	1,8389	1,7929	1,7444	1,6928	1,6373	1,5766	1,5089
60	4,0012	3,1504	2,7581	2,5252	2,3683	2,2540	2,1665	2,0970	2,0401	1,9926	1,9174	1,8364	1,7480	1,7001	1,6491	1,5943	1,5343	1,4673	1,3893
120	3,9201	3,0718	2,6802	2,4472	2,2900	2,1750	2,0867	2,0164	1,9588	1,9105	1,8337	1,7505	1,6587	1,6084	1,5543	1,4952	1,4290	1,3519	1,2539

$\infty$	3,8415	2,9957	2,6049	2,3719	2,2141	2,0986	2,0096	1,9384	1,8799	1,8307	1,7522	1,6664	1,5705	1,5173	1,4591	1,3940	1,3180	1,2214	1,0000
----------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

ЗАОЧНОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Кафедра систем автоматизированного проектирования и управления

ПРОГРАММИРОВАНИЕ НА ЯЗЫКАХ ВЫСОКОГО УРОВНЯ.  
КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Учебное пособие  
для студентов заочной формы обучения

Чистякова Тамара Балабековна  
Антипин Роман Васильевич  
Новожилова Инна Васильевна  
Гольцева Лариса Владимировна

---

Отпечатано с оригинал макета. Формат 60х90 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>  
Печ. л. 37,2. Тираж 100 экз. Заказ №

---

Государственное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет), ИК «Синтез»

---

190013, г. Санкт-Петербург, Московский пр., д. 26