**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ**

**ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки Химическая технология

Отделение химической инженерии

**ИНДИВИДУАЛЬНОЕ ЗАДАНИЕ «ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ НА ПРИМЕРЕ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ»**

**вариант 5**

**Лабораторная работа по дисциплине «Углубленный курс информатики»**

Выполнил студент гр. 2Д91 Е.А. Резинкина

(Подпись)

\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2020 г.

Отчет принят:

Преподаватель

доцент ОХИ ИШПР, к.т.н. В.А. Чузлов

(Подпись)

\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2020 г.

Томск 2020 г.

**Цель работы:** применить знания, полученные в курсе «Углубленный курс информатики», на практике c использованием методов Эйлера и Рунге-Кутта.

**Практическая часть**

**Задание 1**

По данному механизму химической реакции и уравнениям материального баланса вычислить изменение концентраций химических веществ с использованием алгоритмов методов Эйлера и Рунге-Кутта.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

при t=0 СА(0)=0,94 моль/л; СВ(0)=0 моль/л; СС(0)=0.72 моль/л.

t = [0;1], с шагом h = 0.1; k1=0.56; k2=0.25

**Программная реализация**

**program** variant\_5;

**type**

matrix = **array of array of** real;

arr = **array of** real;

**const**

comp\_count = 3;

k: arr = (0.56, 0.25);

**var**

c: arr;

**function** right\_parts(t: real; c: arr): arr;

**begin**

SetLength(result, comp\_count);

result[0] := -k[0] \* c[0] \* c[1] \* c[1] + k[1] \* c[2];

result[1] := 2 \* (-k[0] \* c[0] \* c[1] \* c[1] + k[1] \* c[2]);

result[2] := k[0] \* c[0] \* c[1] \* c[1] - k[1] \* c[2];

**end**;

**function** eyler\_method(start\_t, stop\_t, h: real; c0: arr): matrix;

**var**

i, j: integer;

t: real;

f, c: arr;

**begin**

SetLength(result, Trunc((stop\_t - start\_t) / h) + 1);

**for** i := 0 **to** High(result) **do**

SetLength(result[i], Length(c0) + 1);

SetLength(c, Length(c0));

t := start\_t;

**for** i := 0 **to** High(c0) **do**

c[i] := c0[i];

**for** i := 0 **to** High(result) **do**

**begin**

result[i, 0] := t;

**for** j := 0 **to** High(c) **do**

result[i, j + 1] := c[j];

f := right\_parts(t, c);

**for** j := 0 **to** High(c) **do**

c[j] := c[j] + h \* f[j];

t := t + h

**end**;

**end**;

**function** runge\_kutt\_method(start\_t, stop\_t, h: real; c0: arr): matrix;

**var**

i, j: integer;

t: real;

k1, k2, k3, k4: arr;

c: arr;

**function** sum\_map(a: real; array1, array2: arr): arr;

**var**

i: integer;

**begin**

SetLength(result, Length(array1));

**for** i := 0 **to** High(result) **do**

result[i] := array1[i] + array2[i] \* a

**end**;

**begin**

SetLength(result, Trunc((stop\_t - start\_t) / h) + 1);

**for** i := 0 **to** High(result) **do**

SetLength(result[i], Length(c0) + 1);

SetLength(c, Length(c0));

t := start\_t;

**for** i := 0 **to** High(c0) **do**

c[i] := c0[i];

**for** i := 0 **to** High(result) **do**

**begin**

result[i, 0] := t;

**for** j := 0 **to** High(c) **do**

result[i, j + 1] := c[j];

k1 := right\_parts(t, c);

k2 := right\_parts(t + h / 2, sum\_map(h / 2, c, k1));

k3 := right\_parts(t + h / 2, sum\_map(h / 2, c, k2));

k4 := right\_parts(t + h, sum\_map(h, c, k3));

**for** j := 0 **to** High(c) **do**

c[j] := c[j] + h / 6 \* (k1[j] + 2 \* k2[j] + 2 \* k3[j] + k4[j]);

t := t + h

**end**;

**end**;

**procedure** print\_results(res: matrix);

**var**

i, j: integer;

**begin**

**for** i := 0 **to** High(res) **do**

**begin**

**for** j := 0 **to** High(res[i]) **do**

write(res[i, j]:10:4);

writeln

**end**;

**end**;

**begin**

SetLength(c, comp\_count);

c[0] := 0.94;

c[1] := 0;

c[2] := 0.72;

writeln('Решение методом Эйлера:');

print\_results(eyler\_method(0, 1, 0.1, c));

writeln;

writeln('Решение методом Рунге-Кутты:');

print\_results(runge\_kutt\_method(0, 1, 0.1, c))

**end**.

**Ответ**

Решение методом Эйлера:

0.0000 0.9400 0.0000 0.7200

0.1000 0.9580 0.0360 0.7020

0.2000 0.9755 0.0710 0.6845

0.3000 0.9923 0.1046 0.6677

0.4000 1.0084 0.1368 0.6516

0.5000 1.0236 0.1673 0.6364

0.6000 1.0379 0.1959 0.6221

0.7000 1.0513 0.2225 0.6087

0.8000 1.0636 0.2471 0.5964

0.9000 1.0748 0.2697 0.5852

1.0000 1.0851 0.2902 0.5749

Решение методом Рунге-Кутты:

0.0000 0.9400 0.0000 0.7200

0.1000 0.9578 0.0355 0.7022

0.2000 0.9749 0.0699 0.6851

0.3000 0.9914 0.1029 0.6686

0.4000 1.0072 0.1343 0.6528

0.5000 1.0220 0.1640 0.6380

0.6000 1.0360 0.1919 0.6240

0.7000 1.0489 0.2179 0.6111

0.8000 1.0609 0.2419 0.5991

0.9000 1.0719 0.2639 0.5881

1.0000 1.0820 0.2840 0.5780

**Задание 2**

Постройте график изменения расчетной концентрации каждого вещества во времени.

**Ответ**

**Выводы**

В ходе работы были составлена программа для вычисления изменения концентраций химических веществ с использованием алгоритмов методов Эйлера и Рунге-Кутта и построены графики изменения расчетной концентрации во времени для трех компонентов.