**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

**Приближенные методы решения систем**

**дифференциальных уравнений на примере кинетики химических реакций**

**Индивидуальное задание по дисциплине «Углубленный курс информатики»**

Выполнил студент гр. 2Д91 А.В. Радионов

(Подпись)

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

Отчет принят:

Преподаватель

Доцент ОХИ ИШПР, к.т.н. В.А. Чузлов

(Подпись)

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

**Вариант 6**

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) = 1.2 моль/л; СВ(0) = СС(0) = 0 моль/л; t= [0;10], с шагом h=1; k1 = k2 = 0.38 с-1. Постройте график изменения расчетной концентрации каждого вещества во времени.

**Программная реализация:**

**program** lab\_6\_idz;

**type**

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

arr = **array of** real;

**const**

comp\_count = 3;

k: arr = (0.38, 0.38);

**var**

c: arr;

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

**begin**

SetLength(result, comp\_count);

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

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

result[2] := 2 \* (k[0] \* c[0] - k[1] \* c[1] \* c[2] \* 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] := 1.2;

c[1] := 0;

c[2] := 0;

writeln('Решение методом Эйлера:':32);

print\_results(eyler\_method(0, 10, 1, c));

writeln;

writeln('Решение методом Рунге-Кутты:':35);

print\_results(runge\_kutt\_method(0, 10, 1, c))

**end**.

**Ответ:**

Решение методом Эйлера:

0.0000 1.2000 0.0000 0.0000

1.0000 0.7440 0.4560 0.9120

2.0000 0.6054 0.5946 1.1892

3.0000 0.6949 0.5051 1.0102

4.0000 0.6267 0.5733 1.1466

5.0000 0.6749 0.5251 1.0501

6.0000 0.6385 0.5615 1.1230

7.0000 0.6650 0.5350 1.0701

8.0000 0.6451 0.5549 1.1098

9.0000 0.6597 0.5403 1.0806

10.0000 0.6488 0.5512 1.1025

Решение методом Рунге-Кутты:

0.0000 1.2000 0.0000 0.0000

1.0000 0.8420 0.3580 0.7159

2.0000 0.7034 0.4966 0.9932

3.0000 0.6671 0.5329 1.0658

4.0000 0.6572 0.5428 1.0856

5.0000 0.6544 0.5456 1.0911

6.0000 0.6537 0.5463 1.0927

7.0000 0.6534 0.5466 1.0931

8.0000 0.6534 0.5466 1.0932

9.0000 0.6534 0.5466 1.0933

10.0000 0.6534 0.5466 1.0933