МУНИЦИПАЛЬНОЕ КАЗЕННОЕ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«СРЕДНЯЯ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ШКОЛА-ИНТЕРНАТ»

РАССМОТРЕНО
на заседании
педагогического совета
Протокол № 1
от 28.08.2023 г.

СОГЛАСОВАНО
Заведующий центра
образования
«Точка роста»
________/Л.А.Ершова
«29» августа 2023 г

УТВЕРЖДЕНО
Директор
МКОУ «Школа-интернат»
________ А.С. Егиазаров
Приказ № 82
«30» августа 2023 г.

ТОЧКА РОСТА

Рабочая программа курса внеурочной деятельности
«Математические методы в химии и химической технологии»

Класс 10-11
Всего часов на учебный год 68
Количество часов в неделю 2
Составлена в соответствии с реализацией программ естественно-научной направленности с использованием оборудования центра «Точка роста»

Составитель:
Шекемова Бэлла Юрьевна

2023— 2024 учебный год

Пояснительная записка.

Программа курса внеурочной деятельности «Математические методы в химии и химической технологии» ориентирована на учащихся 10-11 классов, проявляющих интерес к изучению химии и математики. Данная программа основной целью имеет обучение составлению математических моделей химических процессов, а второстепенной – анализ и исследование этих моделей.

При построении математических моделей химических задач мы будем основываться на теории математического моделирования. Умение решать расчётные задачи является одним из основных показателей уровня химического развития, глубины и полноты усвоения учащимися теоретического материала, наличия у них навыков приобретённых знаний с достаточной самостоятельностью.

Для большинства учащихся решение расчётных задач по математике представляет немалые трудности. Поэтому учителю требуется приложить максимальные усилия на начальном этапе решения задач, так как от этого будет зависеть дальнейший успех.

Программа рассчитана на 68 часов (2 часа в неделю), способствует углублению и расширению знаний учащихся по химии с помощью математики.

Математика является основным языком, на котором говорит современная наука, который постоянно используется в различных областях деятельности человека, в частности химии. Обучение этому языку, его основным диалектам, алгебраическому и геометрическому, – важнейшая цель математического образования.

Для повышения уровня качества математического образования старшеклассников, выбравших нематематические профили, в настоящее время особо активно используется профессиональная направленность обучения математике. Разрабатываются и внедряются в учебный процесс математические задачи с профильным содержанием, а также специальные методики обучения математике, основанные на использовании этих задач.

Однако обычно смысл этих задач состоит в том, что учащемуся дается условие, представляющее собой некую достаточно упрощенную и примитивную модель реальной ситуации, заданную в вербальной форме, которую требуется сначала перевести на математический язык, то есть ввести неизвестные и составить систему ограничений (уравнений и неравенств), а затем решить эту систему. Процесс решения в данном случае представляет собой применение цепочки готовых формул, смысл которых учащиеся довольно часто не понимают, а, значит, и объяснить решение не могут. Причина заключается в том, что важнейший этап – составление моделей – в этих задачах отсутствует. Необходимо пополнить традиционный список текстовых – сюжетных задач – задачами, в которых акцент делается на составление математической модели.

Тематическое планирование

№ п/п	Тема занятия	Количество часов
1	**Теоретические основы математического моделирования химических процессов**	37
1.1	Роль математики в химии	2
1.2	Внедрение математических методов в химию	5
1.3	Теоретические основы математического моделирования	6
1.4	Основные этапы математического моделирования	5
1.5	Подходы к построению простейших математических моделей	6
1.6	Нелинейность математических моделей	5
1.7	Примеры моделей	4
1.8	Классификация моделей	4
2	**Математическое моделирование химических процессов**	31
2.1	Математические модели химических процессов, описываемые линейными уравнениями и неравенствами	5
2.2	Модели химических процессов, описываемых алгебраическими системами линейных уравнений	6
2.3	Графические модели	5
2.4	Математические модели, описываемые нелинейными уравнениями и неравенствами	6
2.5	Математическое моделирование химических процессов, связанных с дифференциальным исчислением	5
2.6	Задачи для самостоятельного решения	4

Глава 1. Теоретические основы математического моделирования химических процессов

§1. Роль математики в химии

Найдется немного научных дисциплин, в которых использование математики оказалось бы настолько эффективно, как в химии. Традиция использования количественных методов анализа и совместной работы с математиками в этой области естествознания насчитывает уже несколько веков. Математические методы играют важную роль не только в научных исследованиях химических процессов, но и при изучении химических дисциплин.

Уже с первых уроков учащиеся начинают решать задачи на определение процентного состава вещества, делать расчеты по уравнениям реакций. При этом реализуются приемы решения задач, известные ученикам из уроков математики: используется метод пропорций, простейшие арифметические расчеты. Позже, например, при решении задач на равновесие, гидролиз, произведение растворимости используются решение квадратных уравнений, выполнение операций с дробями.

Но интеграция с математикой не ограничивается использованием математического аппарата для решения задач и выполнения операций с числами. Важна также сформированность пространственного мышления учащихся, полученная в курсе стереометрии, которая в общей химии реализуется при изучении темы «Гибридизация». В этой теме рассматриваются различные варианты пространственного строения частиц (молекул и ионов), поэтому необходимо представлять и уметь рисовать на плоскости такие объемные фигуры, как тетраэдр, октаэдр, додекаэдр, три-, тетра- и пентагональные пирамиды и т. д.

Можно выделить три причины, согласно которым математические методы сыграли и продолжают играть большую роль в развитии химии.

1. Многие количественные характеристики ряда химических
процессов могут быть достаточно легко измерены. В лаборатории часто можно получить числа и соотношения химических величин, математические действия над которыми дают очень важные результаты. В школьных и вузовских задачниках по химии и лабораторных работах основные действия связаны с арифметическими операциями.

2. Простые математические методы дают ответы именно на те вопросы, которые стоят перед химиками. Например, извечный вопрос химической термодинамики – пойдет ли та или иная реакция самопроизвольно. Ответ на этот вопрос может быть получен очень просто, – достаточно оценить с математических действий изменение энергии Гиббса.

3. Химия является наукой практической, а для применения математических методов это исключительно важно. Появляется ясный критерий – сработал выбранный подход или нет. Для проверки моделей и подтверждения предположений не надо ждать десятки и сотни лет, как в одних науках, или тысячи и десятки тысяч, как в других.

§2. Внедрение математических методов в химию

Говоря о применении математики в химии, обычно выделяют три этапа.

На первом этапе с XVIII до начала XX вв. важные результаты давали простые арифметические и алгебраические методы. Они позволяли устанавливать соотношения между количествами веществ, вступающих в реакцию. Термодинамические соотношения позволяли анализировать необходимые условия протекания реакций и условия равновесия.

Параллельно, начиная с XIX в., развивалась химическая кинетика, опирающаяся на простейшие обыкновенные дифференциальные уравнения и представления статистической физики. Многие закономерности удавалось сформулировать на удивление просто. Достаточно напомнить эмпирически установленное правило Вант-Гоффа, утверждающее, что скорость многих реакций при нагревании на 10 градусов увеличивается в 2–4 раза. Очень быстро удалось добиться понимания многих важных процессов и построить соответствующие простые и полезные математические модели.

Третий этап, начавшийся с 30-х гг. XX в., связан с развитием теории горения и взрыва. Здесь приходится рассматривать процессы, развивающиеся в пространстве и времени. Поэтому в качестве моделей химических процессов на арену выходят уравнения в частных производных, позволяющие описывать пространственно-распределенные системы. С другой стороны, рождается квантовая химия, связывающая свойства отдельных элементов и простейших молекул с решениями уравнения Шредингера – одной из самых глубоких и фундаментальных моделей современного естествознания.

§ 3. Теоретические основы математического моделирования

Модель – это копия объекта, в некотором смысле «более удобная», допускающая манипуляции в пространстве и времени. Другими словами модель (лат. modulus – мера) – это объект – заместитель объекта – оригинала, обеспечивающий изучение некоторых свойств оригинала.

Моделированием называется замещение одного объекта другим с целью получения информации о важнейших свойствах объекта-оригинала с помощью объекта-модели. Таким образом, моделирование может быть определено как представление объекта моделью для получения информации об этом объекте путем проведения экспериментов с его моделью. И.Т. Фролов отмечал, что «моделирование означает материальное или мысленное имитирование реально существующей системы путем специального конструирования аналогов (моделей), в которых воспроизводятся принципы организации и функционирования этой системы».

Если результаты моделирования подтверждаются и могут служить основой для прогнозирования процессов, протекающих в исследуемых объектах, то говорят, что *модель адекватна* объекту.

При моделировании, выборе и формулировке модели определяющими обстоятельствами являются объект, цель и метод (средства) моделирования.

В нашем курсе объекты моделирования – это химические процессы.

Методами моделирования служат методы динамической теории систем. Средства – дифференциальные и разностные уравнения, методы качественной теории дифференциальных уравнений.

Цели моделирования

1. Выяснение механизмов протекания химических процессов.
2. Идентификация и верификация параметров модели по экспериментальным данным.
3. Прогноз протекания химических процессов при различных начальных данных, внешних воздействиях, различных способах управления и т. п.

В настоящее время математическое моделирование вступает в новый принципиально важный этап своего развития, «встраиваясь» в структуры так называемого *информационного общества*. Впечатляющий прогресс средств переработки, передачи и хранения информации отвечает мировым тенденциям к усложнению и взаимному проникновению различных сфер человеческой деятельности. Без владения информационными «ресурсами» нельзя и думать о решении возникающих и разнообразных проблем, стоящих перед мировым сообществом. Однако информация как таковая зачастую мало что дает для анализа и прогноза, для принятия решений и контроля за их исполнением. Нужны надежные способы переработки информационного «сырья» в готовый «продукт», т. е. в точное знание.

Математические модели позволяют решать многие практические задачи, в том числе и химические. Но чтобы построить такую модель и работать с ней, необходимо овладеть определенными умениями.

Формализация – построение модели объекта или явления, т. е. перевод конкретной задачи с естественного языка на математический язык формул, уравнений, неравенств, систем.

Работа с моделью – оперирование формальными структурами, структурными соотношениями и их связями. Конкретно это выражается в выборе алгоритма для решения уравнений и неравенств, построении графиков и т. п.

Владение компьютерными технологиями – это создание программ, «переводящих» модель и алгоритм на доступный компьютеру язык. Их можно назвать «электронным» эквивалентом изучаемого объекта, пригодным для непосредственного испытания на «экспериментальной установке» – компьютере.

Интерпретация – перевод результатов с математического языка на язык исходной задачи, описания области применения полученных результатов.

Все эти мыслительные процессы составляют процесс математического моделирования.

3.1. Основные этапы математического моделирования

1. Построение модели

На этом этапе выбирается некоторый «нематематический» объект — явление природы, механизм химической реакции, молекулы вещества и т. д. Сначала выявляются основные особенности явления и связи между ними на качественном уровне. Кроме сведений общего характера о природе объекта и целях его исследования, эта стадия может содержать также некоторые предположения (реакция протекает в замкнутом пространстве, парциальные давления веществ постоянны и т. д.). Затем найденные качественные зависимости формулируются на языке математики, то есть строится математическая модель.

Это самая трудная стадия моделирования. Математическая модель (или ее фрагменты) исследуется теоретическими методами, что позволяет получить важные предварительные знания об объекте.

2. Решение математической задачи, к которой приводит модель

На этом этапе большое внимание уделяется разработке алгоритмов и численных методов решения задачи на персональном компьютере, при помощи которых результат может быть найден с необходимой точностью и за допустимое время. Для этого осуществляется выбор (или разработка) алгоритма для реализации модели на компьютере. Модель представляется в форме, удобной для применения численных методов, определяется последовательность вычислительных и логических операций, которые нужно произвести, чтобы найти искомые величины с заданной точностью. Вычислительные алгоритмы должны не искажать основные свойства модели и, следовательно, исходного объекта, быть экономичными и адаптирующимися к особенностям решаемых задач и используемых компьютеров.

3. Интерпретация полученных следствий из математической модели

На этом этапе создаются программы, «переводящие» модель и алгоритм на доступный компьютеру язык. К ним предъявляются требования экономичности и адаптивности. Их можно назвать «электронным» эквивалентом изучаемого объекта, уже пригодным для непосредственного испытания на «экспериментальной установке» — компьютере. После проведенных вычислений, получается некоторый результат. Следствия, выведенные из модели на языке математики, интерпретируются на языке, принятом в данной области.

4. Проверка адекватности модели

На этом этапе выясняется, согласуются ли результаты эксперимента с теоретическими (расчетными) следствиями из модели в пределах определенной точности.

В результате исследования модели не только достигается поставленная цель, но и должна быть установлена всеми возможными способами (сравнением с практикой, сопоставлением с другими подходами) ее адекватность – соответствие объекту и сформулированным предположениям. Неадекватная модель может дать результат, сколь угодно отличающийся от истинного, и должна быть либо отброшена, либо соответствующим образом модифицирована.

5. Модификация модели

На этом этапе происходит либо усложнение модели, чтобы она была адекватной действительности, либо ее упрощение ради достижения практически приемлемого решения.

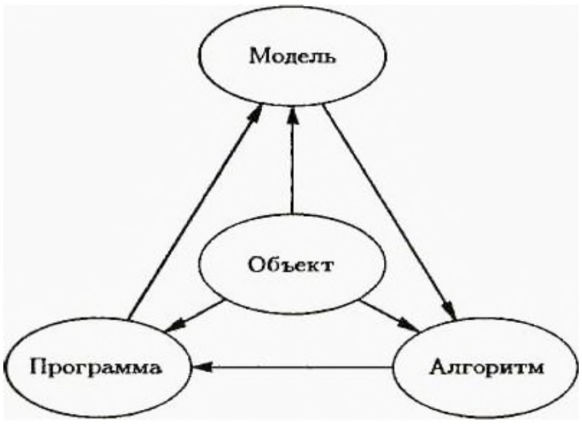


Рис. 1. Этапы моделирования объекта или процесса

3.2. Подходы к построению простейших математических моделей

Рассмотрим некоторые подходы к построению простейших математических моделей, иллюстрирующие применение фундаментальных законов природы, вариационных принципов, аналогий, иерархических цепочек.

1. Фундаментальные законы природы. Наиболее распространенный метод построения математических моделей состоит в применении *фундаментальных законов природы* к конкретной ситуации. Эти законы общепризнаны, многократно подтверждены опытом, служат основой множества научно-технических достижений. На первый план выдвигаются вопросы, связанные с тем, какой закон (законы) и как следует применять в данном случае.

а) *Сохранение энергии.*

б) *Сохранение материи.*

в) *Сохранение импульса.*

Для математического моделирования химических процессов обычно используется закон сохранения массы, утверждающий, что независимо от происходящих превращений исходных веществ друг в друга и образования промежуточных веществ их общий объем всегда остается постоянным.

2. Вариационные принципы. Вариационные принципы представляют собой весьма общие утверждения о рассматриваемом объекте (системе, явлении) и гласят, что из всех возможных вариантов его поведения (движения, эволюции) выбираются лишь те, которые удовлетворяют определенному условию. Обычно согласно этому условию некоторая связанная с объектом величина достигает экстремального значения при его переходе из одного состояния в другое.

3. Применение аналогий при построении моделей. В огромном числе случаев при попытке построить модель какого-либо объекта либо невозможно прямо указать фундаментальные законы или *вариационные принципы*, которым он подчиняется, либо, с точки зрения сегодняшних знаний, вообще нет уверенности в существовании подобных законов, допускающих математическую формулировку. Одним из плодотворных подходов к такого рода объектам является использование аналогий с уже изученными явлениями.

4. *Иерархический подход к получению моделей.* Лишь в редких случаях бывает удобным и оправданным построение *математических моделей* даже относительно простых объектов сразу во всей полноте, с учетом всех факторов, существенных для его поведения. Поэтому используется подход, реализующий принцип «от простого — к сложному», когда следующий шаг делается после достаточно подробного изучения не очень сложной модели. При этом возникает цепочка (*иерархия*) все более полных моделей, каждая из которых обобщает предыдущие, включая их в качестве частного случая.

3.3. Нелинейность математических моделей

Простота рассмотренных выше моделей во многом связана с их *линейностью*. С точки зрения математики это означает, что любая линейная комбинация решений (например, их сумма) также является решением задачи. Тогда нетрудно, найдя решение в каком-либо частном случае, построить решение в более общей ситуации. Поэтому о качественных свойствах общего случая можно судить по свойствам частного – различие между двумя решениями носит лишь количественный характер. Например, увеличение в два раза скорости истечения ракетного топлива ведет также к двукратному увеличению скорости ракеты, уменьшение угла падения светового луча на отражающую поверхность означает такое же изменение угла отражения и т. д. Другими словами, в случае линейных моделей отклик объекта на изменение каких-то условий пропорционален величине этого изменения.

Для *нелинейных математических моделей* знание о поведении части объекта еще не гарантирует знания поведения всего объекта, а его отклик на изменение условий может качественно зависеть от величины этого изменения. Так, уменьшение угла падения луча света на границу раздела двух сред приводит к уменьшению угла преломления, но только до определенного предела.

Большинство реальных процессов и соответствующих им *математических моделей* нелинейны. Линейные же модели отвечают весьма частным случаям и, как правило, служат лишь первым приближением к реальности.

3.4. Примеры моделей

1. Портрет дамы. Пусть некто заказывает художнику портрет любимой женщины. Рассмотрим объект, метод (средства) и цель моделирования.

Объектом моделирования является женщина.

Метод (средства) – краски, кисти, холст. Эмаль, если портрет будет сделан на медальоне. Фотоаппарат и пленка. Рекламный щит, если кто-то хочет, чтобы его даму видели все. Обложка журнала или экран телевизора. Наконец, сам художник, фотограф или рекламное агентство в лице своих дизайнеров.

Цель. При моделировании целью является, как правило, манипуляция с пространством и временем. Сохранить облик дамы во времени. Повесить портрет в гостиной или

медальон с изображением любимой на шею, как это делали в старину.

Другая цель – воспроизведение изображения (модели) объекта с целью сделать модель доступной некоторому кругу людей.

2. Самолет в аэродинамической трубе. Помещая самолет в аэродинамическую трубу и испытывая его в различных воздушных потоках, мы решаем задачу взаимодействия системы с внешней средой. Это еще одна очень важная цель моделирования. При этом в корпусе самолета не обязательно должны находиться кресла, и тем более, стюардессы. Какие из свойств объекта необходимо учесть, а какие можно опустить, степень подробности воспроизведения моделью объекта определяется теми вопросами, на которые хотят ответить с помощью модели.

3. *Аквариум* является примером физического моделирования. В аквариуме можно моделировать водную экосистему – речную, озерную, морскую, заселив ее некоторыми видами рыб, поддерживая определенный состав воды, температуру, даже течения. Необходимо строго контролировать условия эксперимента. Какие компоненты естественной системы и с какой точностью будут воспроизведены, зависит от цели моделирования.

4. *Моделирование химических реакций, протекающих на поверхности катализаторов.* Цель моделирования – выявление возможных режимов протекания реакций (например, наличие или отсутствие колебаний концентраций веществ), которые напрямую зависят от типа стационарных состояний.

5. *Популяция дрозофилы* является классическим объектом моделирования микроэволюционного процесса и примером исключительно удачно найденной модели. Еще более удобной моделью являются вирусы, которые можно размножать в пробирке. Хотя не вполне ясно, справедливы ли эволюционные закономерности, установленные на вирусах, для законов эволюции высших животных.

Из приведенных примеров видно, что любая физическая модель обладает конкретными свойствами физического объекта. В этом ее преимущества, но в этом и ее ограничения.

6. *Моделирование химических реакторов.* Цель моделирования – предсказание результатов протекания химико-технологических процессов при заданных условиях в аппаратах любого размера. Процесс в реакторе складывается из большого числа химических и физических взаимодействий на различных структурных уровнях — молекула, макрообласть, элемент реактора, реактор. В соответствии со структурными уровнями процесса строится многоступенчатая математическая модель реактора. С помощью математической модели выбираются оптимальные условия проведения процесса, определяются необходимое количество

катализатора, размеры и форма реактора, параметрическая чувствительность процесса к начальным и краевым условиям, переходные режимы, а также исследуется устойчивость процесса.

3.5. Классификация моделей

Классифицировать модели можно по разным критериям.

1. По характеру решаемых проблем модели могут быть разделены на *функциональные* и *структурные*. В первом случае все величины, характеризующие явление или объект, выражаются количественно. При этом одни из них рассматриваются как независимые переменные, а другие — как функции от этих величин. Математическая модель обычно представляет собой систему уравнений разного типа (дифференциальных, алгебраических и т. д.), устанавливающих количественные зависимости между рассматриваемыми величинами. Во втором случае модель характеризует структуру сложного объекта, состоящего из отдельных частей, между которыми существуют определенные связи. Как правило, эти связи не поддаются количественному измерению. Для построения таких моделей удобно использовать теорию графов. Граф – это математический объект, представляющий собой некоторое множество точек (вершин) на плоскости или в пространстве, некоторые из которых соединены линиями (ребрами).

2. По характеру исходных данных и результатов предсказания модели могут быть разделены на *детерминистические* и *вероятностно-статистические*. Модели первого типа дают определенные, однозначные предсказания. Модели второго типа основаны на статистической информации, а предсказания, полученные с их помощью, имеют вероятностный характер.

Математическая модель может возникнуть тремя путями: 1) в результате прямого изучения реального процесса. Такие модели называются *феноменологическими;* 2) в результате процесса дедукции.

Новая модель является частным случаем некоторой общей модели. Такие модели называются *асимптотическими;* 3) в результате процесса индукции. Новая модель является обобщением элементарных моделей. Такие модели называют *моделями ансамблей*.

Существуют всевозможные классификации математических моделей. Выделяют линейные и нелинейные модели, стационарные и динамические, модели, описываемые алгебраическими, интегральными и дифференциальными уравнениями, уравнениями в частных производных. Можно выделять классы детерминируемых моделей, вся информация в которых является полностью определяемой, и стохастических моделей, то есть зависящих от случайных величин и функций. Математические модели различают также и по применению к различным отраслям науки.

Выводы к главе 1

Процесс моделирования начинается с моделирования упрощенного процесса, который с одной стороны отражает основные качественные явления, с другой стороны допускает достаточно простое математическое описание. По мере углубления исследования строятся новые модели, более детально описывающие явление. Факторы, которые считаются второстепенными на данном этапе, отбрасываются. Однако, на следующих этапах исследования, по мере усложнения модели, они могут быть включены в рассмотрение. В зависимости от цели исследования один и тот же фактор может считаться основным или второстепенным.

Математическая модель и реальный процесс не тождественны между собой. Как правило, математическая модель строится с некоторым упрощением и при некоторой идеализации. Она лишь приближенно отражает реальный объект исследования, и результаты исследования реального объекта математическими методами носят приближенный характер. Точность исследования зависит от степени адекватности модели и объекта и от точности применяемых методов вычислительной математики.

Глава 2. Математическое моделирование химических процессов

Химия – наука экспериментальная. Все результаты исследований строения и реакций веществ должны проверяться на опыте с последующими рекомендациями к практическому использованию. Моделирование свойств и реакционной способности химических соединений – составная часть общей стратегии исследований. Основные причины необходимости математического моделирования и исследования моделей определяются необходимостью развития теоретических представлений о строении веществ и прогнозирования условий протекания химико-технологических процессов.

Существует три типа математических моделей (математического описания) сложных химических процессов.

1. **Стохастические** модели используют вероятностные представления о процессах в объекте исследования. Вычисляются функции распределения вероятностей для переменных параметров модели (концентрация, температура в случае химических процессов). Эти модели пока что редко используются в химической кинетике, но они оказались полезными для описания и моделирования поведения больших систем (химических комплексов, химических предприятий).

2. **Статистические** модели используют для описания эксперимента на работающем объекте исследования. Описывается связь значений входящих в систему и выходящих из системы переменных без использования физикохимической информации о происходящих в объекте процессах (модель черного ящика). Математическим описанием поведения системы обычно являются уравнения в форме полиномов. Для обеспечения статистической независимости параметров модели используют

планирование эксперимента (например, ортогональные планы эксперимента).

3. **Детерминированные** модели основаны на закономерностях физикохимических процессов с определенной структурой модели. Именно такими моделями являются теоретически обоснованные кинетические модели.

§ 1. Математические модели химических процессов, описываемые линейными уравнениями и неравенствами

Рассмотрим пример.

На столе стоит три колбы. В каждой из них находится смесь двух веществ *А* и *Б*. В первой колбе 30 мл вещества *А* и 50 мл вещества *Б*. Во второй 60 мл вещества *А* и 35 мл вещества *Б*, в третьей 45 мл вещества *А* и 25 мл вещества *Б*.

Чтобы ответить на вопрос, каков объем смеси в каждой из колб, нужно 3 раза повторить одно и то же действие – сложение:

в 1 колбе 30 + 50 = 80 мл;

во 2 колбе 60 + 35 = 95 мл;

в 3 колбе 45 + 25 = 70 мл.

Однако если использовать математический язык, то эти три разные ситуации можно объединить в одну: обозначим количество вещества *А* переменной a, а количество вещества *Б* – b. Тогда общий объем смеси (он равен сумме количества вещества *А* и количества вещества *Б*) запишется как $a + b$.

Запись $a + b$ называют *математической моделью* данной реальной ситуации.

В качестве примера приведем таблицу, показывающую различные реальные ситуации относительно количеств веществ *А* и *Б* и их математические модели.

Реальная ситуация	**Математическая модель**
В колбе одинаковое количество веществ *А* и *Б*	$a = b$
Вещества *А* на 20 мл больше, чем вещества *Б*	$a - b = 20$ или $b+20=a$
Вещества *А* на 35 мл меньше, чем вещества *Б*	$b - a = 35$ или $b = a + 35$ или $a = b - 35$
Вещества *А* в два раза больше, чем вещества *Б*	$a = 2\,b$
Вещества *А* в два раза меньше, чем вещества *Б*	$a=b/2$ или $b=2a$
Если в колбу добавить 15 мл вещества *А* и 25 мл вещества *Б*, то количество веществ в колбе станет равным	$a+15=b+25$
Если в колбу добавить 20 мл вещества *А*, то количество вещества *Б* станет в два раза больше, чем количество вещества *А*	$b=2(a+20)$

В данной таблице мы строили математическую модель, основываясь на реальной ситуации. Не менее важно уметь по заданной математической модели описывать словами реальную ситуацию.

Например, что означает (при тех же обозначениях) следующая математическая модель:

Следует отметить, что можно было воспользоваться не пропорцией, а правилом: чтобы найти *p* % от числа *a*, необходимо число *a* умножить на число $\frac{p}{100}=0{,}01p$. В нашем случае:

$$x=\frac{p}{100}\cdot M\,.$$

Подставляя в уравнение исходные данные (*M = 300 г, p = 15 %*), получаем:

$$x=\frac{300\cdot 15}{100}=45 \text{ или } x=0{,}15\cdot 300=45 \text{ (г).}$$

45 г соли содержится в исходном растворе.

Тогда содержание воды в данном растворе можно вычислить, вычтя из общего количества раствора количество соли:

$$M-x=300-45=255 \text{ (г)}$$

Ответ: Чтобы приготовить 300 г 15 %-ного раствора соли, надо взвесить 45 г соли, отмерить 255 мл воды и растворить соль в воде.

Замечание

Построенная модель называется *алгебраической* моделью (ее также называют *аналитической*), так как представляет собой алгебраическое уравнение.

Все наши рассуждения в ходе решения задачи можно разделить на три этапа.

На первом этапе, введя переменную *x* и переведя текст задачи на математический язык, мы составили математическую модель – в виде уравнения

$$x\cdot 100=M\cdot p\,.$$

На втором этапе мы решили это уравнение, используя известные нам методы. На этом этапе мы не думали ни про соль, ни про воду, а занимались «чистой» математикой, работали только с математической моделью.

На третьем этапе мы использовали полученное решение, чтобы ответить на вопрос задачи. На этом этапе мы снова вернулись к химическим величинам – воде и соли.

Пример 2. Какова масса раствора, если масса воды в растворе равна 120 г, а процентное содержание соли в растворе равно 84 %?

Решение

Введем обозначения:

x г – масса всего раствора;

a г – масса воды в растворе;

$(x-a)$ г – масса соли в данном растворе;

p % – процентное содержание соли в растворе.

Тогда для определения массы раствора составим пропорцию:

$$\begin{cases} x\text{ г} & - & 100\% \\ x-a\text{ г} & - & p\% \end{cases} \Leftrightarrow \frac{x}{x-a}=\frac{100}{p}.$$

Используя основное свойство пропорции, получим:

$$p\cdot x=100\cdot(x-a) \text{ или } x-a=x\cdot\frac{p}{100}.$$

Полученное уравнение является математической моделью задачи. Подставим известные числовые данные (*a = 120, p = 84 %*), раскроем скобки, слагаемые, содержащие неизвестную, перенесем в левую часть уравнения и решим его:

$$84x-100x=-12000 \Leftrightarrow -16x=-12000 \Leftrightarrow x=\frac{12000}{16}=750 \text{ г.}$$

Ответ: Масса всего раствора составляет 750 г.

Пример 3. Сколько миллилитров спирта может содержаться в 500 мл раствора, процентное содержание спирта в котором не менее 40 % и не более 50 %?

Решение

Так как процентное содержание спирта в растворе находится в пределах от 40 до 50 %, то и масса спирта в этом растворе величина непостоянная.

Введем обозначения:

x – масса спирта в данном растворе;

M – масса всего раствора;

p – процентное содержание вещества в растворе;

p_1 – минимальное процентное содержание спирта в растворе;

p_2 – максимальное процентное содержание спирта в растворе.

Из примера 1 знаем, что

$$x = M \cdot \frac{p}{100}.$$

Согласно условию задачи, получаем двойное неравенство, представляющее математическую модель этой задачи:

$$\frac{M \cdot p_1}{100} \le x \le \frac{M \cdot p_2}{100}.$$

Подставляя исходные данные, вычисляем:

$$\frac{500 \cdot 40}{100} \le x \le \frac{500 \cdot 50}{100} \;\Leftrightarrow\; 5 \cdot 40 \le x \le 5 \cdot 50 \;\Leftrightarrow\; 200 \le x \le 250.$$

Ответ: В 500 миллилитрах раствора, процентное содержание спирта в котором не менее 40 % и не более 50 %, содержится от 200 до 250 миллилитров спирта.

Пример 4. Вычислить среднюю скорость химической реакции*, если через 20 секунд от начала реакции концентрация веществ составляла 0,05 моль/л, а через 40 секунд – 0,04 моль/л.

Решение

Введем обозначения:

t_1 – первоначальное время измерения концентрации вещества;

t_2 – последующее время измерения концентрации вещества;

---

* *Под скоростью химической реакции понимают изменение концентрации одного из реагирующих веществ в единицу времени при неизменном объеме системы.*

c_1 – значение концентрации вещества в момент времени t_1;

c_2 – значение концентрации вещества в момент времени t_2.

Так как концентрация вещества A в момент времени t_1 измеряется величиной c_1, а в момент t_2 – величиной c_2, то за промежуток времени $\Delta t = t_2 - t_1$ изменение концентрации вещества составит $\Delta c = c_2 - c_1$, тогда уравнение для определения средней скорости химической реакции $\overline{v}$ будет иметь вид:

$$\overline{v} = -\frac{c_2 - c_1}{t_2 - t_1} = \frac{\Delta c}{\Delta t}.$$

Это уравнение есть математическая модель для определения средней скорости реакции.

Знак минус ставится потому, что, несмотря на убывание концентрации вещества A и, следовательно, на отрицательное значение разности $c_2 - c_1$, скорость реакции может быть только положительной величиной.

Подставляя данные задачи в математическую модель, получаем решение:

$$v = \frac{c_1 - c_2}{t_2 - t_1} = \frac{0,05 - 0,04}{40 - 20} = \frac{0,01}{20} =$$
$$= \frac{1}{100} : \frac{20}{1} = \frac{1}{100} \cdot \frac{1}{20} = \frac{1^{\backslash 5}}{2000} = \frac{5}{10000} = 0,0005 \ \frac{\text{моль}}{\text{л·с}}$$

Ответ: Средняя скорость химической реакции равна $0,0005 \ \frac{\text{моль}}{\text{л·с}}$.

Пример 5. Как изменится скорость химической реакции

$$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2,$$

если уменьшить объем газовой смеси в 2 раза?

Решение

Введем обозначения:

$$X = CO, \quad Y = O_2, \quad Z = CO_2.$$

Тогда уравнение реакции перепишется:

$$2X + Y \rightarrow 2Z.$$

Используя закон действующих масс*, запишем уравнение для определения скорости реакции. Это и будет математической моделью данной задачи:

$$v = k[Y]\cdot[X]^2.$$

Учитывая, что уменьшение объема газовой смеси в 2 раза влечет за собой увеличение концентрации веществ в 2 раза, запишем выражение скорости химической реакции и проведем вычисление:

$$v = k[2Y]\cdot[2X]^2 = k\cdot 2[Y]\cdot 4[X] = 8k[Y]\cdot[X].$$

Таким образом, скорость реакции увеличится в 8 раз.

Ответ: Скорость реакции увеличится в 8 раз.

Пример 6. Определите массы исходных растворов с массовыми долями серной кислоты 7,5 и 60 %, если при их смешивании образовался раствор массой 350 г с массовой долей серной кислоты 15 %.

Решение

Введем обозначения:

M – масса раствора;

p – массовая доля серной кислоты в образовавшемся растворе;

p_1 – массовая доля серной кислоты в первом растворе;

p_2 – массовая доля серной кислоты во втором растворе;

m_1 – масса раствора с p_1 % серной кислоты, тогда

M–m_1 – масса раствора с p_2 % серной кислоты.

---

* Если в реакции в отдельном столкновении участвуют a молекул A и b молекул B, то есть $aA + bB \rightarrow C$, то имеет место равенство: $v = k\cdot[A]^a\cdot[B]^b$ (a и b часто не равны стехиометрическим коэффициентам вследствие сложного механизма реакции).

Используя правило креста,

$$\begin{array}{ccccc|c}
p_2\,\% & & & & (p-p_1)\,\% & m_1 \\
 & \diagdown & & \diagup & & \\
 & & p\,\% & & & \\
 & \diagup & & \diagdown & & \\
p_1\,\% & & & & (p_2-p)\,\% & M-m_1
\end{array}$$

запишем пропорцию*:

$$\frac{p-p_1}{p_2-p}=\frac{m_1}{350-m_1}.$$

Отсюда математическая модель будет иметь вид уравнения:

$$\left(p-p_1\right)\cdot\left(M-m_1\right)=\left(p_2-p\right)\cdot m_1.$$

Подставив исходные данные, найдем решение полученной модели:

$$\left(15-7{,}5\right)\cdot\left(350-m_1\right)=\left(60-15\right)\cdot m_1,$$
$$2625-7{,}5m_1-45\cdot m_1=0,$$
$$m_1=50.$$

Тогда: $m_2=350-50=300$.

Ответ: $m_1=50$ г; $m_2=300$ г.

---

*Массы смешанных растворов обратно пропорциональны разностям массовых долей смешиваемых растворов и массовой доли смеси *p*.

Пример 7. Железная пластинка массой 18 г опущена в раствор сульфата меди (II). Когда она покрылась медью, ее масса стала равной 20 г. Какая масса железа перешла в раствор?

Решение

Составим уравнение реакции:

$$Fe \quad + \quad CuSO_4 \quad \to \quad Cu \quad + \quad FeSO_4.$$

Введем обозначения:

$A = Fe,\ \ B = CuSO_4,\ \ C = Cu,\ \ D = FeSO_4.$

Тогда уравнение реакции перепишется в виде:

$$A + B \to C + D.$$

Известно, что:

$$M(Fe) = 56 \text{ г/моль}, M(CuSO_4) = 160 \text{ г/моль}, M(Cu) = 64 \text{ г/моль}.$$

Обозначим:

x – количество вещества железа и меди:

$$x = \nu(Fe) = \nu(Cu).$$

Тогда:

$56 \cdot x$ – масса железа, перешедшего в раствор;

$64 \cdot x$ – масса меди, выделившейся на пластинке.

Запишем математическую модель:

$$18 - 56x + 64x = 20.$$

Решаем уравнение и получаем:

$$x = \frac{1}{4} = 0{,}25 \text{ моль}.$$

Отсюда:

$$m(Fe) = 0{,}25 \cdot 56 = 14 \text{ г} \ \text{– перешло в раствор.}$$

Ответ: 14 г железа перешло в раствор.

§2. Модели химических процессов, описываемых алгебраическими системами линейных уравнений

В этом параграфе рассмотрим примеры построения математических моделей химических процессов, которые можно свести к системам линейных уравнений.

Пример 1. К 120 г 15 %- ного раствора соли добавили 80 г воды. Вычислить массовую долю соли во вновь полученном растворе.

Решение

Для решения данной задачи необходимо вычислить сначала массу соли в растворе, а затем ее массовую долю в новом растворе (масса одна и та же в обоих растворах). Говоря математическим языком, в данной задаче две неизвестных величины x и y. Введем обозначения:

M – масса раствора;

p – процентное содержание (массовая доля) соли в исходном растворе;

x – масса соли в растворе;

y – массовая доля соли в новом растворе.

Зная из условия задачи массу исходного раствора и массовую долю соли в нем, можно записать уравнение для нахождения массы соли в растворе (см. предыдущий раздел):

$$x = \frac{p}{100} \cdot M.$$

Этот же результат можно получить с помощью составления пропорции:

$$\left.\begin{array}{rcr} M\text{ г} & - & 100\% \\ x\text{ г} & - & p\% \end{array}\right\} \Leftrightarrow \frac{M}{x} = \frac{100}{p} \Leftrightarrow 100 \cdot x = M \cdot p. \qquad (1)$$

По условию задачи в раствор добавили 80 г воды, т. е. масса раствора стала равной $M+80$.

Теперь, зная массу нового раствора (M+80) и количество соли (x), составляем уравнение для нахождения массовой доли соли:

$$\left.\begin{array}{l} M+80 \text{ г} \quad - \quad 100\% \\ x \text{ г} \quad - \quad y\% \end{array}\right\} \Leftrightarrow \frac{M+80}{x}=\frac{100}{y} \Leftrightarrow (M+80)\cdot y = x\cdot 100. \qquad (2)$$

Объединяя уравнения (1) и (2) в систему, получаем математическую модель задачи:

$$\begin{cases} 100\cdot x = M\cdot p\ , \\ (M+80)\cdot y = x\cdot 100. \end{cases}$$

Подставляя числовые данные задачи и решая систему из двух линейных уравнений с двумя неизвестными, получим:

$$\begin{cases} x=\dfrac{p}{100}\cdot M, \\ y=\dfrac{x\cdot 100}{(M+80)}; \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x=\dfrac{15}{100}\cdot 120, \\ y=\dfrac{x\cdot 100}{200}; \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x=0{,}15\cdot 120, \\ y=\dfrac{x}{2}; \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x=18, \\ y=9. \end{cases}$$

Ответ: Массовая доля соли в растворе, полученном добавлением 80 г воды к 120 г 15%-ного раствора соли, равна 9 %.

Пример 2. Имеются два раствора серной кислоты в воде: первый – 40 %-ный, второй – 60 %-ный. Эти два раствора смешали, после чего добавили 5 кг чистой воды и получили 20 %-ный раствор. Если бы вместо 5 кг чистой воды добавили 5 кг 80 %-ного раствора, то получился бы 70 %-ный раствор. Сколько было 40 %-ного и 60 %-ного раствора?

Решение

Введем обозначения:

x – масса первого раствора,

y – масса второго раствора.

Тогда

$(x+y+5)$ – масса 20 %-ного раствора.

Так как:

- в x кг 40 %-ного раствора содержится $0,4x$ кг кислоты,
- в y кг 60 %-ного раствора содержится $0,6y$ кг кислоты,
- в $(x+y+5)$ кг 20 %-ного раствора содержится $0,2\cdot(x+y+5)$ кг кислоты,

то по условию задачи можно составить первое уравнение:

$$0,4x+0,6y=0,2(x+y+5).$$

Если вместо 5 кг воды добавить 5 кг 80 %-ного раствора, то получится раствор массой $(x+y+5)$ кг, в котором будет $(0,4x+0,6y+0,8\cdot 5)$ кг кислоты, что составит 70 % от $(x+y+5)$ кг.

Согласно этим данным составляем второе уравнение:

$$0,4x+0,6y+4=0,7(x+y+5).$$

Тогда математическая модель задачи будет иметь вид системы из двух уравнений с двумя неизвестными:

$$\begin{cases}0,4x+0,6y=0,2(x+y+5),\\ 0,4x+0,6y+4=0,7(x+y+5).\end{cases}$$

Решая систему одним из известных способов, находим решение:

$$x=1,\ y=2.$$

Ответ: Масса первого раствора составляет 1 кг, второго – 2 кг.

Пример 3. Имеются два сплава золота и серебра. В одном сплаве количество этих металлов находится в отношении 3:5, а в другом – в отношении 1:3. Сколько нужно взять каждого сплава, чтобы получить 20 кг нового сплава, в котором золото и серебро находились бы в отношении 3:7.

Решение

Введем обозначения:

x – вес первого сплава,

y – вес второго сплава.

По условию задачи количество золота и серебра вместе в первом сплаве составляет 8 частей (3+5), их них 3 части – золото и 5 частей – серебро, а во втором сплаве – общее количество металлов составляет 4 части (металлы находятся в отношении 1:3). Вес первого сплава x кг, второго – y кг, таким образом, получаем следующие соотношения:

$\frac{3}{8}x$ кг – масса золота в первом сплаве,

$\frac{5}{8}x$ кг – масса серебра в первом сплаве,

$\frac{1}{4}y$ кг – масса золота во втором сплаве,

$\frac{3}{4}y$ кг – масса серебра во втором сплаве.

Необходимо получить 20 кг нового сплава, в котором золото и серебро находились бы в отношении 3:7, тогда содержание золота и серебра в этом сплаве составит соответственно:

$\frac{3}{10}\cdot 20 = 6$ кг и $\frac{7}{10}\cdot 20 = 14$ кг.

Исходя из вышесказанного, составим таблицу:

	Первый сплав	Второй сплав	Новый сплав
Масса (общая)	x кг	y кг	20 кг
Масса золота	$\frac{3}{8}x$ кг	$\frac{1}{4}y$ кг	$\frac{3}{10}\cdot 20 = 6$ кг

Масса серебра	$\frac{5}{8}x$ кг	$\frac{3}{4}y$ кг	$\frac{7}{10}\cdot 20=14$ кг

Основываясь на данных таблицы, построим математическую модель задачи, которая представляет собой систему двух линейных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{3}{8}x+\frac{1}{4}y=6, \\ \frac{5}{8}x+\frac{3}{4}y=14. \end{cases}$$

Первое уравнение показывает, сколько нужно взять золота для нового сплава, второе – сколько серебра.

Решая систему, находим:

$$x=8,\ y=12.$$

Ответ: Нужно взять 8 кг первого сплава и 12 кг второго сплава.

Пример 4. Имеются два различных сплава меди со свинцом. Если взять 1 кг первого сплава и 1 кг второго сплава и переплавить их, то получится сплав, содержащий 65 % меди. Если взять два куска – кусок I и кусок II первого и второго сплавов соответственно, имеющих суммарную массу 7 кг, и переплавить их, то получится сплав, содержащий 60 % меди. Какова масса меди, содержащейся в сплаве, получающемся при совместной переплавке куска первого сплава, равного по массе куску II, и куска второго сплава, равного по массе куску I?

Решение

Введем обозначения:

x кг – масса куска I,

y кг – масса куска II,

p – процентное содержание меди в первом сплаве;

q – процентное содержание меди во втором сплаве соответственно,

M – масса меди, содержащейся в сплаве, получающемся при совместной переплавке.

Используя условие задачи, приходим к следующей системе уравнений, представленной в таблице*.

Условия задачи	Уравнение
Переплавка 1 кг первого сплава и 1 кг второго сплава дает сплав, содержащий 65 % меди	$1 \cdot \frac{p}{100} + 1 \cdot \frac{q}{100} = 2 \cdot \frac{65}{100}$
Суммарная масса куска I и куска II равна 7 кг	$x + y = 7$
Если переплавить кусок I и кусок II, то получится сплав, содержащий 60 % меди	$x \cdot \frac{p}{100} + y \cdot \frac{q}{100} = (x+y) \cdot \frac{60}{100}$
Масса меди (M), содержащейся в сплаве, получающемся при совместной переплавке куска первого сплава, равного по массе куску II, и куска второго сплава, равного по массе куску I	$M = y \cdot \frac{p}{100} + x \cdot \frac{q}{100}$

Таким образом, математическая модель задачи представима в виде следующей системы:

* Соответствующие концентрации меди равны $\frac{p}{100}\%$ и $\frac{q}{100}\%$.

$$\begin{cases} 1\cdot\dfrac{p}{100}+1\cdot\dfrac{q}{100}=2\cdot\dfrac{65}{100}, \\ x+y=7, \\ x\cdot\dfrac{p}{100}+y\cdot\dfrac{q}{100}=(x+y)\cdot\dfrac{60}{100}, \\ M=y\cdot\dfrac{p}{100}+x\cdot\dfrac{q}{100}. \end{cases}$$

Умножим первое и второе уравнения на 100:

$$\begin{cases} p+q=130, \\ x+y=7, \\ px+qy=420, \\ M=\dfrac{qx+py}{100}. \end{cases}$$

Имеющаяся система уравнений позволяет найти M. Перемножим почленно первое и второе уравнения и вычтем из произведения третье уравнение:

$$(p+q)(x+y)-(px+qy)=130\cdot 7-420\,.$$

Раскрыв скобки и приведя подобные, получим:

$$\cancel{px}+py+qx+\cancel{qy}-\cancel{px}-\cancel{qy}=490$$
$$py+qx=490.$$

Подставив в четвертое уравнение системы, получим:

$$M=\frac{qx+py}{100}=\frac{490}{100}=4{,}9.$$

Ответ: 4,9 кг.

§ 3. Графические модели

Математические модели бывают не только алгебраическими (в виде неравенств, уравнений). Существуют *словесные модели* – описание реальных ситуаций словами; *графические* – модель представляет собой график функции; *геометрические* – модель представляет собой геометрическую фигуру (например, граф химической реакции – многоугольник). Графические модели часто также называют геометрическими.

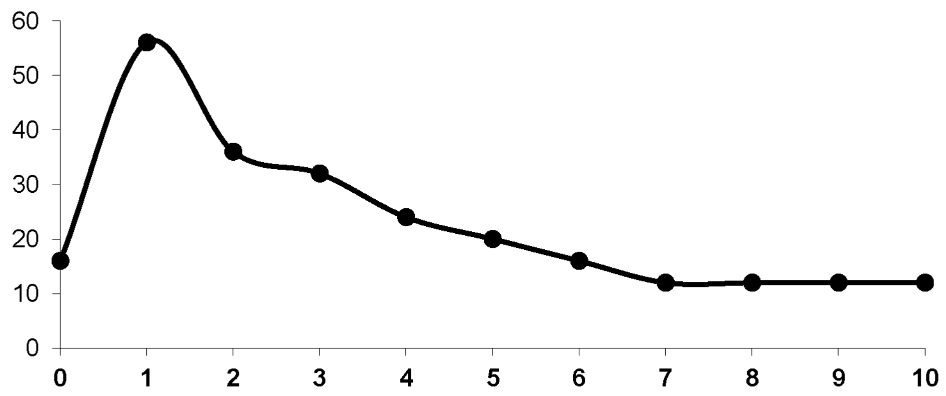
Пример 1

Построить график изменения температуры смеси в ходе реакции по ее значениям, полученным с помощью прибора в течение 10 минут. Данные представлены в таблице.

Время, мин	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Температура, C^{o}	16	56	36	32	24	20	16	12	12	12	12

Решение

Построим прямоугольную систему координат. По горизонтальной оси будем откладывать значения времени, а по вертикальной – значения температуры. Отметим на координатной плоскости точки, координатами которых являются числа из таблицы. Всего получается 10 точек. Соединим их плавной линией, в результате получим график температуры.



Построенный график – это математическая модель, описывающая зависимость температуры от времени. Анализируя этот график, можно описать словами, что происходило с температурой смеси во время реакции в течение 10 минут. В течение первой минуты температура резко поднялась до 56 градусов, после чего смесь постепенно стала охлаждаться. На седьмой минуте температура опустилась до 12 градусов и оставалось такой в последующее время. Глядя на график температуры, можно определить, какая и когда была наибольшая температура (56 градусов на первой минуте протекания реакции), когда менялась очень резко (в первые две минуты), когда перестала меняться (после седьмой минуты).

Эта математическая модель относится к графическим.

Часто в задачах по химии требуется графически проиллюстрировать происходящие химические реакции. Преимуществом графического изображения по сравнению с другими способами задания функции являются его наглядность и легкая обозримость. Приведем еще два примера.

Пример 2. Зависимость изменения скорости реакции, протекающей по уравнению

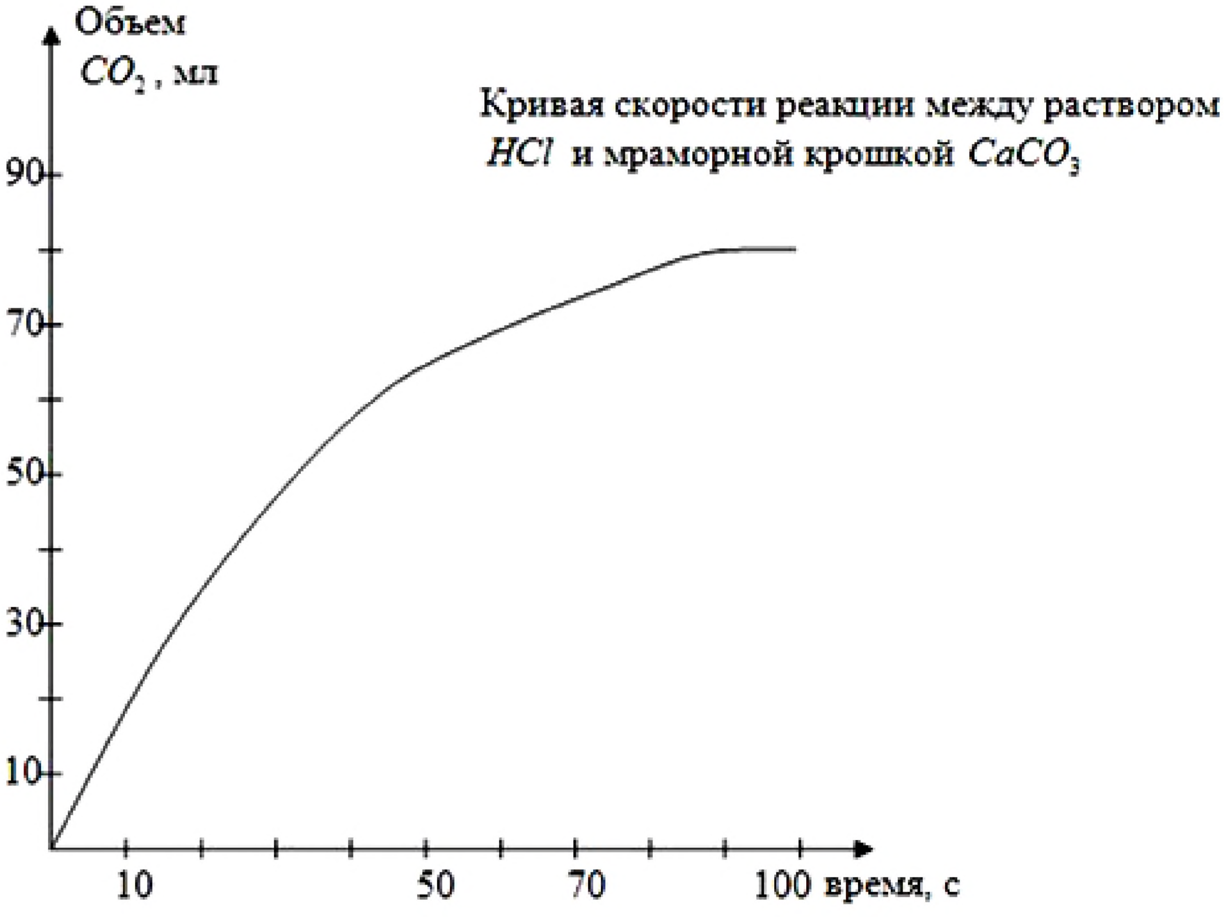
$$CaCO_{3(\text{тв.})} + 2HCl_{(\text{водн.})} = CaCl_{(\text{водн.})} + CO_{2(\text{г.})} + H_2O_{(\text{ж.})},$$

от концентрации CO_2 не удается представить одной формулой, которая с нужной степенью точности охватывала бы все важные для практики случаи. Эта зависимость может быть представлена таблицей, часть которой имеет вид:

Время, сек.	0	15	30	45	60	75	90	100
Объем CO_2, мл	0	27	47	61	69	75	80	80

В таблице приведены типичные результаты эксперимента, позволяющего проследить изменение скорости реакций с течением времени. Если по этим результатам построить график, получится кривая скорости, которая показывает изменение во времени количества образующегося продукта или используемого реагента.

Построим прямоугольную систему координат. По горизонтальной оси будем откладывать значения времени, а по вертикальной – значения объема CO_2. Отметим на координатной плоскости точки, координатами которых являются числа из таблицы. Всего получается 8 точек. Соединив их плавной кривой, получим график данной функциональной зависимости.



Построенный график – это математическая модель, описывающая зависимость объема CO_2 от времени.

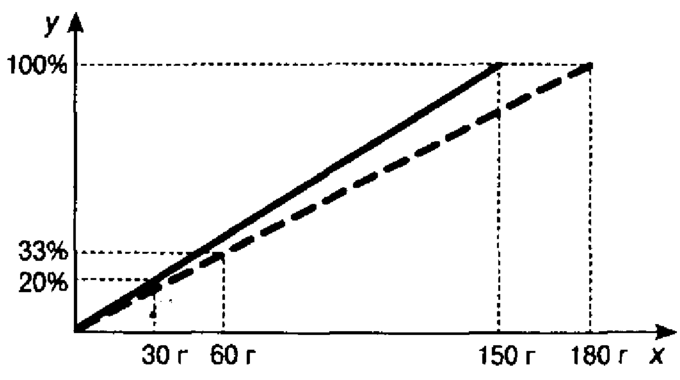
Пример 3. К 150 г 20 %-ного раствора соли добавили 30 г соли. Определите массовую долю соли в полученном растворе.

Решение

Решение задачи начинаем с построения системы координат. На оси *Ox* откладываем массу раствора 150 г, на оси *Oy* – 100 %. Строя перпендикуляры из этих точек, находим точку их пересечения. Соединяем её прямой линией с точкой начала координат.

Для исходного раствора находим массу растворённого вещества (30 г). Затем строим новый отрезок для нового раствора, полученного в результате добавления соли к исходному. На оси *Ox* от точки, соответствующей массе исходного раствора, откладываем вправо 30 г (масса добавленной соли). Это масса полученного раствора. Восстанавливаем из неё перпендикуляр до пересечения с прямой, проходящей через отметку 100 % на оси *Oy*. Точку их пересечения соединяем с началом координат – получаем отрезок, соответствующий новому раствору (показан пунктирной линией). На оси *Ox* от точки, показывающей массу соли в первом растворе, откладываем вправо 30 г (масса добавленной соли) и получаем массу соли во втором растворе. Восстанавливаем из неё перпендикуляр до пересечения с пунктирным отрезком, а из точки пересечения – перпендикуляр на ось *Oy*. Значение равно массовой доле соли во втором растворе.

Таким образом, математическая модель рассматриваемой задачи представима в следующем графическом виде:



Ответ: Массовая доля соли равна 33 %.

§ 4. Математические модели, описываемые нелинейными уравнениями и неравенствами

Здесь мы рассмотрим несколько примеров на составление и решение математических моделей, которые включены в содержание единого государственного экзамена по математике. Некоторые задачи описывают в большей степени физические процессы. Для того чтобы мы могли понимать окружающую нас действительность, а также научиться её моделировать, осознавать её поведение в прошлом и уметь прогнозировать в будущем, необходимы и такие задачи, которые описывают различные процессы естествознания.

Явления неживой природы обладают рядом особенностей, позволяющих достаточно точно описывать и предсказывать их поведение. Главные из этих особенностей – неизменность физических и химических законов во времени, а также найденные учеными относительно простые функциональные законы, описывающие приближенные модели таких систем.

Задания с прикладным содержанием, включённые в экзаменационные варианты ЕГЭ по математике под номером В10, представляют собой задачи на анализ явления, описываемого формулой функциональной зависимости.

Решение предложенных задач условно можно разделить на несколько шагов.

1. Анализ условия и вычленение формулы, описывающей заданную ситуацию, а также значений параметров, констант или начальных условий, которые необходимо подставить в эту формулу.
2. Математическая интерпретация задачи – сведение её к уравнению или неравенству, т. е. составление математической модели данной задачи и её решение.
3. Анализ полученных результатов.

Проиллюстрируем этот подход на нескольких примерах.

Пример 1. В ходе распада радиоактивного изотопа его масса уменьшается по закону

$$m(t)=m_0\cdot 2^{-\frac{t}{T}},$$

где

m_0 – начальная масса изотопа,

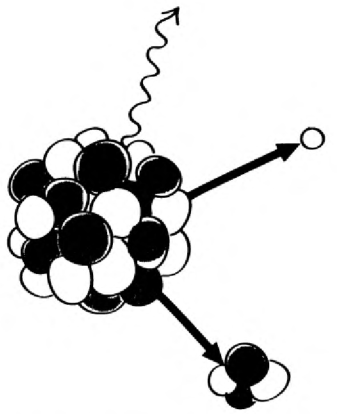
t – время, прошедшее от начала распада,

T – период полураспада в минутах.

В лаборатории получили вещество, содержащее $m_0=40$ мг изотопа азота-13, период полураспада которого T = 10 мин.

В течение скольких минут масса изотопа азота-13 будет не меньше 10 мг?

Решение



По условию задачи, в ходе распада радиоактивного изотопа его масса уменьшается по закону

$$m(t)=m_0\cdot 2^{-\frac{t}{T}},$$

и масса изотопа азота-13 должна быть не меньше 10 мг. Тогда математическая модель данной задачи имеет вид:

$$m(t)\geq 10.$$

Подставляя заданные значения параметров $m_0 = 40$ мг и T = 10 мин, получим:

$$40 \cdot 2^{-\frac{t}{10}} \geq 10 \;\Leftrightarrow\; 2^{-\frac{t}{10}} \geq \frac{10}{40} = 2^{-2} \underset{2>1}{\Leftrightarrow} -\frac{t}{10} \geq -2 \;\Leftrightarrow\; t \leq 20.$$

Таким образом, масса изотопа азота-13 будет не меньше 10 мг в течение 20 минут.

Ответ: 20 минут.

Пример 2. При адиабатическом процессе для идеального газа выполняется закон

$$p \cdot V^k = const,$$

где

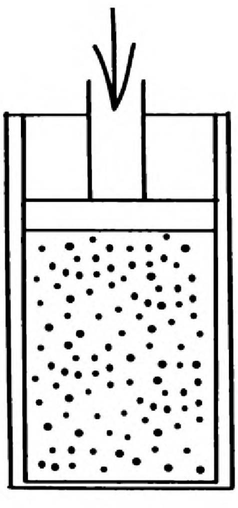
p (Па) – давление в газе,

V – объём газа в кубических метрах.

В ходе эксперимента с одноатомным идеальным газом (для него $k = \frac{5}{3}$) из начального состояния, в котором $const = 10^5$ Па $\cdot$ м^5, газ начинают сжимать.

Какой наибольший объём V может занимать газ при давлениях p не меньше $3{,}2 \cdot 10^6$ Па? Ответ выразите в кубических метрах.

Решение



Так как:

1) при адиабатическом процессе для идеального газа выполняется закон

$$p \cdot V^k = const,$$

2) по условию задачи давление p должно быть не меньше $3,2 \cdot 10^6$ Па,

то приходим к математической модели, которая представляет собой неравенство:

$$p(V) \geq 3,2 \cdot 10^6.$$

При заданных значениях параметров $k = \dfrac{5}{3}$ и $const = 10^5$ Па $\cdot$ м^5 получаем:

$$10^5 \cdot V^{-\frac{5}{3}} \geq 3,2 \cdot 10^6 \Leftrightarrow V^{-\frac{5}{3}} \geq 3,2 \cdot 10 \Leftrightarrow V^{\frac{5}{3}} \leq \frac{1}{32} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow V \leq \left(\frac{1}{32}\right)^{\frac{3}{5}} \Leftrightarrow V \leq \frac{1}{8} \text{ м}^3.$$

Таким образом, наибольший объем при заданных условиях, занимаемый газом, может составлять 1/8 или 0,125 м^3.

Ответ: 0,125 м^3.

§ 5. Математическое моделирование химических процессов, связанных с дифференциальным исчислением

Химия изучает свойства веществ и их зависимость от условий – температуры, давления, концентрации. Поэтому химикам часто приходится исследовать функции одной или нескольких переменных. Основной способ исследования функции – анализ ее производной. Некоторые законы химии имеют дело с производными и устанавливают правила, по которым можно рассчитать производные и найти искомые функции.

В первую очередь это касается химической кинетики – науки о скоростях и механизмах химических реакций. Скорость химической реакции показывает, насколько быстро увеличивается количество продуктов реакции и уменьшается количество исходных веществ (реагентов). Она обычно определяется как производная от концентрации продуктов по времени.

Рассмотрим несколько примеров математического моделирования химических процессов, связанных с понятием производной и интегрирования.

Пример 1. Пусть количество вещества, вступившего в химическую реакцию, задается зависимостью:

$$m(t) = \frac{t^2}{2} + 3t - 3 \text{ (моль).}$$

Найти скорость химической реакции через 3 секунды.

Решение

Дана функция $m = m(t)$, где m – количество некоторого вещества, вступившего в химическую реакцию в момент времени t.

Приращению времени Δt будет соответствовать приращение Δm величины m.

Отношение $\dfrac{\Delta m}{\Delta t}$ – есть средняя скорость химической реакции за промежуток времени Δt. Предел этого отношения при стремлении Δt к нулю есть скорость химической реакции в данный момент времени.

Таким образом, математическая модель данной задачи имеет вид:

$$v(3) = m'(3).$$

Найдем производную:

$$v(t) = m'(t) = \left(\frac{t^2}{2} + 3t - 3\right)' = t + 3.$$

Тогда скорость химической реакции через 3 секунды составит:

$$v(3) = m'(3) = 3 + 3 = 6.$$

Ответ: скорость химической реакции через 3 секунды составит 6 моль/с.

Пример 2. Найти скорость реакции в момент времени $t = 10$ сек., если концентрация исходного продукта меняется по закону

$$C_{\text{исх.}} = -50e^{-0,2t}.$$

Решение

Скорость химической реакции есть производная концентрации продуктов реакции, т. е.:

$$\upsilon = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta C}{\Delta t} = \mathrm{C}'.$$

Поэтому математическая модель данной задачи будет иметь вид уравнения:

$$v = C'(10).$$

Найдем производную:

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

Тогда скорость реакции в момент времени $t = 10$ сек. будет:

$$v = C'_{\text{исх.}}(10) = 10 \cdot e^{-0,2 \cdot 10} = \frac{10}{e^2} \approx 1,35 \text{ моль/сек.}$$

Ответ: 1,35 моль/сек.

Пример 3. Установить, при каком процентном содержании кислорода в газовой смеси скорость окисления оксида азота будет максимальной.

Решение

Реакция имеет вид:

$$2NO + O_2 = 2NO_2.$$

Обозначим:

x – концентрация NO,

y – концентрация O_2.

Так как концентрации удобно выражать в объемных процентах, то

$$x + y = 100.$$

Отсюда:

$$y = 100 - x. \qquad (1)$$

Используя закон действующих масс (см. §1), запишем уравнение для определения скорости реакции:

$$v = k \cdot x^2 y. \qquad (2)$$

Подставляя выражение (1) в (2), получим математическую модель задачи:

Найти максимум функции

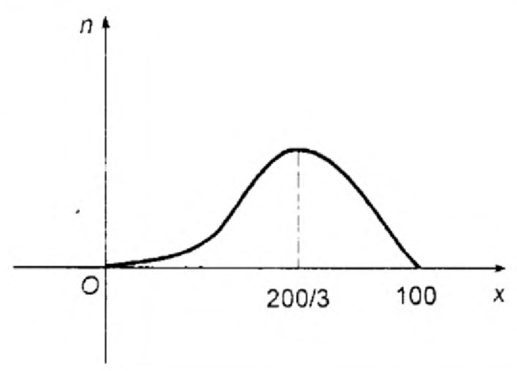
$$v = k\left(100x^2 - x^3\right). \qquad (3)$$

Найдем производную и стационарные точки:

$$v' = k\left(200x - 3x^2\right);$$

$$k\left(200x - 3x^2\right) = 0 \iff 200x - 3x^2 = 0 \iff \left[\begin{array}{l} x_1 = 0, \\ x_2 = \dfrac{200}{3}. \end{array}\right.$$

Так как $v'(1) > 0$, а $v'(80) < 0$, то точка $x_2 = \dfrac{200}{3}$ является точкой максимума функции (3) и поэтому $y_2 = 100 - \dfrac{200}{3} = \dfrac{100}{3} \approx 33{,}3$ – максимальная концентрация O_2 (см. рисунок).



Ответ: Скорость окисления окажется максимальной, если в смеси будет содержаться 33,3 % кислорода.

Замечание. Так как в процессе реакции стехиометрическое соотношение $y : x$ сохраняется, то при содержании в исходной смеси 33,3 % кислорода скорость реакции будет максимально возможной в течение всего процесса. Однако этот результат верен только в том случае, когда рассматриваемая реакция будет необратимой, что возможно в определенном диапазоне температур.

§ 6. Задачи для самостоятельного решения

Решить задачи с помощью математического моделирования

1. К 120 г 15 %-ного раствора соли добавили 80 г воды. Вычислить массовую долю соли во вновь полученном растворе.
2. К 200 г 4 %-ного раствора сахара добавили 5 г сахара. Определить массовую долю вещества в полученном растворе.
3. К 260 г 20 %-ного раствора серной кислоты добавили 40 г 50%-ного раствора серной кислоты. Какова массовая доля вещества (серной кислоты) во вновь полученном растворе.
4. Определите процентное содержание соли в растворе, если в 300 г раствора содержится 15 г соли.
5. В сосуде находится 10 %-ный раствор спирта. Из сосуда отлили $\frac{1}{3}$ содержимого, а в оставшуюся часть налили такое количество воды, что сосуд оказался заполненным на $\frac{5}{6}$ первоначальной массы. Какое процентное содержание спирта оказалось окончательно в сосуде?
6. К 80 г раствора с неизвестной массовой долей вещества добавили 40 г воды. Вычислить массовую долю соли в исходном растворе, если после разбавления она стала равна 18 %.
7. Определить массу соли, которую надо добавить к 80 г 10 %-ного раствора, чтобы получить 25 %-ный раствор этой соли.
8. Требуется приготовить раствор массой 320 г с массовой долей хлорида калия 3 %. Рассчитайте массу KCl и массу воды, которые необходимы для приготовления раствора.
9. Нитрат калия массой 10 г растворили в воде объемом 150 мл. Плотность воды равна 1 г/мл. Рассчитайте массовую долю соли в растворе.
10. В воде массой 100 г при температуре 25°C растворяется фосфат калия K_3PO_4 массой 106 г. Рассчитайте массу фосфата калия, необходимую для приготовления 20 г раствора K_3PO_4, насыщенного при температуре 25°C.
11. Сколько граммов 8 % -ного и 75 %-ного растворов некоторого вещества нужно взять для получения 400 г 42 %-ного раствора?

12. Смешали 30 %-ный раствор соляной кислоты с 10 %-ным и получили 600 г 15 %-ного раствора. Сколько граммов 10 %-ного раствора было взято?
13. В первой колбе находится однопроцентный раствор уксуса, а во второй колбе – пятипроцентный. В третью колбу выливают половину раствора из каждой колбы. В результате колба содержит двухпроцентный раствор. Во сколько раз масса раствора в первой колбе больше массы раствора во второй?
14. Имеется два раствора кислоты. Первый раствор состоит из 1056 г кислоты и 44 г воды, а второй – из 756 г кислоты и 1344 г воды. Из этих растворов необходимо получить 1500 г нового раствора, содержание кислоты в котором 40 %. Сколько граммов первого и второго растворов нужно для этого смешать?
15. Во сколько раз увеличится скорость химической реакции при повышении температуры от 300 до 350^0, если температурный коэффициент равен 2.
16. Реакция при 50°С протекает за 2 мин. 15 сек. За какое время закончится эта реакция при $t = 70\ ^\circ\mathrm{C}$, если в этом случае температурный коэффициент скорости равен 3?
17. В замкнутый сосуд вместимостью 5 л помещены водород массой 0,8 г и хлор. Через 10 с в результате реакции масса водорода снизилась до 0,3 г. Вычислите среднюю скорость реакции.
18. Две реакции протекают с такой скоростью, что за единицу времени в первой реакции образовался сероводород массой 3 г, во второй – йодоводород массой 10 г. Какая из реакций протекала с большей средней скоростью?
19. При повышении температуры на $10\ ^\circ\mathrm{C}$ скорость некоторой реакции возрастает в три раза. При температуре $0\ ^\circ\mathrm{C}$ скорость реакции составляет 1 моль/(л$\cdot$с). Вычислите скорость этой реакции при температуре $30\ ^\circ\mathrm{C}$.
20. На сколько градусов необходимо увеличить температуру, чтобы скорость реакции возросла в 27 раз, если известно, что при увеличении температуры на $10\ ^\circ\mathrm{C}$ скорость реакции возрастает в три раза.
21. При температуре $20\ ^\circ\mathrm{C}$ реакция протекает за 2 минуты. За сколько времени будет протекать эта же реакция при температуре $0\ ^\circ\mathrm{C}$?

22. Построить график изменения температуры смеси в ходе реакции по ее значениям, полученным с помощью прибора в течение 10 секунд. Данные представлены в таблице.

Время, мин	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Температура, С^{o}	5	15	24	26	30	20	18	14	8	4	4

23. С помощью составления графической модели решить задачу:
К 250 г 40 %-ного раствора соли добавили 70 г соли. Определите массовую долю соли в полученном растворе.

24. При адиабатическом процессе для идеального газа выполняется закон
$$p \cdot V^k = const,$$
где p (Па) – давление в газе, V – объём газа в кубических метрах. В ходе эксперимента с одноатомным идеальным газом (для него $k = \frac{5}{3}$) из начального состояния, в котором $const = 200\text{ Па} \cdot \text{м}^5$, газ начинают сжимать. Какой наибольший объём V может занимать газ при давлениях p не меньше $6{,}25 \cdot 10^5$ Па? Ответ выразите в кубических метрах.

25. При адиабатическом процессе для идеального газа выполняется закон
$$p \cdot V^k = const,$$
где p (Па) – давление в газе, V – объём газа в кубических метрах. В ходе эксперимента с трёхатомным идеальным газом (для него $k = \frac{4}{3}$) из начального состояния, в котором $const = 2 \cdot 10^3\text{ Па} \cdot \text{м}^4$, газ начинают сжимать. Какой наибольший объём V может занимать газ при давлениях p не меньше $1{,}25 \cdot 10^6$ Па? Ответ выразите в кубических метрах.

26. В ходе распада радиоактивного изотопа его масса уменьшается по закону
$$m(t) = m_0 \cdot 2^{-\frac{t}{T}},$$
где m_0 – начальная масса изотопа, t – время, прошедшее от начала распада, T – период полураспада в минутах. В лаборатории получили газ, содержащий $m_0 = 16$ мг изотопа азота-13, период полураспада которого T = 10 мин. В течение скольких минут масса изотопа азота-13 будет не меньше 2 мг?

27. В ходе распада радиоактивного изотопа его масса уменьшается по закону

$$m(t) = m_0 \cdot 2^{-\frac{t}{T}},$$

где m_0 – начальная масса изотопа, t – время, прошедшее от начала распада, T – период полураспада в часах. В лаборатории получили газ, содержащий $m_0 = 80$ мкг изотопа натрия-24, период полураспада которого T = 15 ч. В течение скольких часов масса изотопа натрия-24 будет не меньше 10 мкг?

28. Уравнение процесса, в котором участвовал газ, записывается в виде

$$p \cdot V^k = const,$$

где p (Па) – давление в газе, V – объём газа в кубических метрах, a – положительная константа. При каком наименьшем значении константы а уменьшение вчетверо объёма газа, участвующего в этом процессе, приводит не менее чем к двукратному увеличению давления?

29. Пусть количество вещества, вступившего в химическую реакцию, задается зависимостью:

$$m(t) = \frac{1}{4}t^2 + 6t - 5 \text{ (моль)}.$$

Найти скорость химической реакции через 4 секунды.

30. Пусть количество вещества, вступившего в химическую реакцию, задается зависимостью:

$$m(t) = \frac{t^2}{2} + 2t - 15 \text{ (моль)}.$$

Найти скорость химической реакции через 10 секунд.

31. Найти скорость реакции в момент времени $t = 5$ сек., если концентрация исходного продукта меняется по закону

$$C = -25e^{-0,1t}.$$

Библиографический список

1. Габриелян О.С. Химия. 10 класс: учеб. для общеобразоват. учеб. заведений. М.: Дрофа, 2002.
2. Габриелян О.С. Химия. 8 класс: учеб. для общеобразоват. учеб. заведений. М.: Дрофа, 2002.
3. Габриелян О.С. Химия. 9 класс: учеб. для общеобразоват. учеб. заведений. М.: Дрофа, 2001.
4. Гущин Д.Д., Малышев А.В. ЕГЭ 2011. Математика. Задача B10. Задачи прикладного содержания: рабочая тетрадь / под ред. А.Л. Семенова и И.В. Ященко. М.: МЦНМО, 2011. 72 с.
5. Еремин В.В. Теоретическая и математическая химия для школьников. М.: МЦНМО, 2007. 392 с.
6. Мордкович А.Г. Алгебра. 7 класс: в 2 ч. Ч. 1. Учебник для учащихся общеобразовательных учреждений. М.: Мнемозина, 2009. 160 с.
7. Перегудов А.В. Введение в математическую химию: практикум к элективному курсу для 9 класса в рамках предпрофильной подготовки / Краснояр. гос. пед. ун-т им. В.П. Астафьева. Красноярск, 2009. 64 с.
8. Перегудов А.В. Подготовка к ЕГЭ по математике: в 3 ч. Краснояр. гос. пед. ун-т им. В.П. Астафьева. Красноярск, 2009.
9. Перегудов А.В. Дополнительный курс математики для учащихся 10 классов / Краснояр. гос. пед. ун-т им. В.П. Астафьева. Красноярск, 2010.
10. Пушкарева Т.П., Быков В.И. К программному обеспечению учебного процесса по математическому моделированию // Высшая школа на пути реформ. Красноярск: КГТУ, 1998. С. 130.

11. Ризниченко Г.Ю. Лекции по математическим моделям в биологии: учеб. пособие для студентов биол. специальностей вузов. М.: Ижевск: R&C Dynamics (РХD), 2002.

12. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. 2-е изд. Испр. М.: Физматлит, 2001. 320 с.

13. Справочник школьника. Решение задач по химии / Сост. Н.И. Берман. М.: Филол.. об-во «Слово», 1996.

14. Фомин С.В., Беркинблит М.Б. Математические проблемы в биологии. URL: http://www.library.biophys.msu.ru/FominBerk/main.htm

15. Хомченко Г.П. Пособие по химии для поступающих в вузы. М.: РИА «Новая волна», 2008.

16. Хомченко И.Г. Решение задач по химии. М.: РИА «Новая волна», 2009.

17. Pushkaryeva T.P., Bykov V.I. Simple models of critical phenomena in kinetic region and their parametric analysis // Third Int/ Conference jn Unsteady state Processes in Catalysis. Novosibirsk: Institute of Catalysis, 1998. P. 98–99.