

ЗАВОД НИЗКОВОЛЬТНОГО И ВЫСОКОВОЛЬТНОГО ОБОРУДОВАНИЯ

ЛЕНИНГРАД „ХИМИЯ“ ЛЕНИНГРАДСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ 1990

Рецензент: доктор физико-математических наук Ю. И. Бабенко

Мариничев А. Н. и др.

Физико-химические расчеты на микро-ЭВМ: Справочное издание /А. Н. Мариничев, М. Л. Турбович, И. Г. Зенкевич — Л.: Химия, 1990.— 256 с: ил.

Книга содержит решения различных физико-химических проблем (пересчет концентраций, расчет фазовых и химических равновесий, установление формул химических веществ по их молекулярным массам, определение хроматографических характеристик, обработка спектральных данных и некоторые другие, представленные в виде программ. Приводятся краткие характеристики наиболее распространенных микрокалькуляторов, рассматриваются математические задачи, возникающие при обработке результатов эксперимента.

Для научных и инженерно-технических работников, занимающихся изучением свойств веществ и различных технологических проблем. Может быть использована как пособие при проведении семинарских занятий со студентами вузов.

© А. Н. Мариничев, М. Л. Турбович, И. Г. Зенкевич 1990

Содержание книги Физико-химические расчеты на микро-ЭВМ

Введение

ЧАСТЬ I. Обработка данных физико-химических методов исследования на ПМК

1. Простейшие статистические расчеты

- 1.1. Расчет средних значений и стандартных отклонений
- 1.2. Объединение двух выборок данных
- 1.3. Расчет параметров линейной регрессии $y = ax + b$
- 1.4. Расчет параметров линейной регрессии $y = ax$
- 1.5. Вычисление погрешности функций по нормально распределенным случайным значениям аргумента

2. Расчеты свойств индивидуальных веществ, молекулярных характеристик, определение элементарного состава и установление брутто-формул. Обработка масс-спектрометрической и спектральной информации

- 2.1. Расчет молярного объема и летучести газа на основе уравнения состояния Ван-дер-Ваальса
- 2.2. Расчет коэффициентов уравнения Антуана
- 2.3. Расчет элементарного состава по брутто-формуле
- 2.4. Определение простейшей брутто-формулы соединения по элементному составу
- 2.5. Определение брутто-формулы соединения по молекулярной массе и элементному составу
- 2.6. Молекулярная рефракция и рефракционная дисперсия
- 2.7. Представление массовых чисел в системе счисления с основанием k
- 2.8. Расчет гомологических инкрементов аддитивных величин

ЗАВОД НИЗКОВОЛЬТНОГО И ВЫСОКОВОЛЬТНОГО ОБОРУДОВАНИЯ

- 2.9. Определение брутто-формулы органических соединений по точной массе
- 2.10. Определение брутто-формулы углеводородов и кислородсодержащих соединений по интенсивностям изотопных пиков $[M + 1]$
- 2.11. Определение содержания изотопной метки по интенсивностям сигналов в масс-спектрах органических соединений

3. Равновесие жидкость — пар в бинарных смесях

- 3.1. Расчет коэффициентов активности компонентов по полным данным о фазовом равновесии
- 3.2. Вычисление параметров уравнения Вильсона
- 3.3. Расчет состава и давления пара бинарного азеотропа при изотермических условиях с использованием уравнения Вильсона
- 3.4. Расчет равновесия жидкость — пар по свойствам азеотропной смеси с использованием уравнения Ван-Лаара

4. Фазовые и химические равновесия в многокомпонентных системах

- 4.1. Расчет коэффициентов активности компонентов по уравнению Вильсона
- 4.2. Расчет состава тройного азеотропа по методу Хяазе
- 4.3. Расчет состава и температуры кипения тройного азеотропа по методу Малесинского
- 4.4. Расчет состава и температуры кристаллизации тройной эвтектики, сосуществующей с одно- или двухкомпонентными твердыми фазами
- 4.5. Метод Темкина — Шварцмана для расчета значений константы равновесия реакции в газовой фазе по табличным термодинамическим данным
- 4.6. Определение рН растворов слабых кислот
- 4.7. Определение рН буферных растворов
- 4.8. Пересчет концентраций растворов
- 4.9. Пересчет концентраций ppm

5. Определение кинетических параметров

- 5.1. Расчет константы скорости химической реакции методом длинных интервалов
- 5.2. Расчет константы скорости химической реакции методом коротких интервалов
- 5.3. Метод Гуггенгейма для расчета констант скоростей реакций первого порядка по результатам косвенных измерений концентраций
- 5.4. Метод Флинна для нахождения порядка химической реакции
- 5.5. Применение уравнений Лэнгмюра и Фрейндлиха для описания зависимости адсорбции газа на твердой поверхности от давления
- 5.6. Расчет значения k_{it} в зависимости от отношения констант и степени превращения для последовательной реакции
- 5.7. Расчет констант скоростей k_1 и k_2 последовательной реакции $A \rightarrow B \rightarrow C$ по данным о степени превращения через одинаковые интервалы времени
- 5.8. Расчет кривых непрерывной газовой экстракции летучего продукта жидкофазной реакции первого порядка

6. Расчеты хроматографических параметров

- 6.1. Оценка оптимальной скорости газа-носителя по соотношению Ван-Деемтера
- 6.2. Расчет коэффициента приведения характеристик колонки к безградиентному режиму (фактор Мартина)
- 6.3. Расчет объемов удерживания

ЗАВОД НИЗКОВОЛЬТНОГО И ВЫСОКОВОЛЬТНОГО ОБОРУДОВАНИЯ

- 6.4. Расчет времени удерживания несорбируемого газа (изотермические условия)
- 6.5. Время удерживания несорбируемого газа в режиме линейного программирования температуры
- 6.6. Расчет времен удерживания в режиме линейного программирования температуры
- 6.7. Логарифмические индексы удерживания (индексы Ковача)
- 6.8. Линейные индексы удерживания
- 6.9. Линейно-логарифмические (обобщенные) индексы удерживания
- 6.10. Основные методы количественного газохроматографического анализа
- 6.11. Количественный анализ смесей неизвестных веществ
- 6.12. Определение относительных констант скоростей химических реакций по газохроматографическим данным

7. Программы для ПМК высокого уровня (ТІ-59)

- 7.1. Вычисления с использованием уравнения Антуана
- 7.2. Корреляция изотермических данных о составах сосуществующих жидкой и идеальной газовой фаз бинарной системы и расчет интеграла Редлиха — Кистера
- 7.3. Кинетический анализ последовательных реакций типа $A \rightarrow B \rightarrow C$
- 7.4. Расчет равновесного состава бинарного раствора при заданных значениях температуры кипения и давления пара по уравнениям Маргулеса и Реиона (NRTL)

ЧАСТЬ II. Обработка экспериментальных данных на микро-ЭВМ

1. Персональный компьютер БК0010

- 1.1. Общая характеристика
- 1.2. Язык Фокал БК0010
- 1.3. Особенности языка Бейсик в БК0010
- 1.4. Составление библиотеки программ на языке Фокал
- 1.5. Организация вывода информации

2. Методы статистической обработки экспериментальных данных

- 2.1. Некоторые необходимые понятия
- 2.2. Нормальное распределение
- 2.3. Проверка гипотезы о совпадении теоретического значения величины со средним измеренным
- 2.4. Критерий Шовене — определение грубых промахов
- 2.5. Определение взвешенного среднего
- 2.6. Корреляция двух величин
- 2.7. Проверка гипотезы об эффективности изменений условий эксперимента

3. Вычислительные методы и программы

- 3.1. Операции с матрицами
- 3.2. Решение уравнений
- 3.3. Решение систем уравнений
- 3.4. Интерполирование функций
- 3.5. Численное дифференцирование функций
- 3.6. Численное интегрирование
- 3.7. Решение систем дифференциальных уравнений первой степени

ЗАВОД НИЗКОВОЛЬТНОГО И ВЫСОКОВОЛЬТНОГО ОБОРУДОВАНИЯ

Библиографический список

ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на большое число книг, статей и учебных пособий, например [1—7], посвященных проведению физико-химических вычислений, в существующей литературе имеется определенный пробел по использованию программируемых микрокалькуляторов ПМК — отечественных и зарубежных — для выполнения различных физико-химических расчетов, связанных с многократным применением соответствующих часто довольно громоздких формул, подбором параметров, статистической обработкой результатов наблюдений и т. п. Статьи и книги [8—11], содержащие программы для ПМК, обычно касаются изложения общематематических вопросов или достаточно несложных химических задач и не отражают возможностей и практики использования ПМК и микро-ЭВМ при решении физико-химических проблем.

Предлагаемая читателю-химику книга нацелена в основном на изложение некоторых достаточно распространенных расчетных задач из физико-химической практики с применением ПМК или микро-ЭВМ. Книга состоит из двух частей. В первую часть включены программы для проведения вычислений из следующих областей физической химии: фазовые и химические равновесия, кинетика химических реакций, газовая хроматография, обработка масс-спектров. Каждая приводимая программа для ПМК «Электроника БЗ-34» или «TI Programmable 59» содержит преамбулу с изложением постановки задачи, алгоритма ее решения и основных формул, собственно программу и обязательно контрольный пример, в большинстве случаев из химической практики. Программы записаны в трехстолбцовой форме с указанием адресов (А), выполняемых (посредством нажатия соответствующих клавиш ПМК) команд (Ком) и кодов (К) этих команд, высвечивающихся на экране ПМК при загрузке и редактировании программы. В инструкциях к программам величины, численные значения которых высвечиваются на экране ПМК после выполнения команды С/П, набраны жирным шрифтом, при этом в двойных круглых скобках может рядом находиться ИПЫ, означающее, что именно из регистра памяти N нажатием клавиш ИПЫ может быть вызвано на экран это численное значение.

Вторая часть книги по своему замыслу резко отличается от первой. Появление его вызвано желанием авторов дать читателю для проведения физико-химических расчетов более мощный инструмент. Использование микро-ЭВМ позволяет значительно расширить круг решаемых задач и в ряде случаев распространить решение задач первого раздела на системы с большим числом компонентов, что уже оказывается невозможным при применении ПМК.

Авторы намеренно не приводят программ на языках микро-ЭВМ, соответствующих предлагаемому, программам для ПМК. Используя описанные алгоритмы, читатель без труда может составить нужные ему программы, способные на микро-ЭВМ обрабатывать значительно большие массивы данных со значительно большей скоростью, ориентируясь на конкретный вариант задачи. Помимо ознакомления с алгоритмами, приведенными в первой части, читателю необходимо для этого овладеть и языком программирования микро-ЭВМ. Обычно для таких задач используют один из диалоговых языков — Бейсик или Фокал.

ЗАВОД НИЗКОВОЛЬТНОГО И ВЫСОКОВОЛЬТНОГО ОБОРУДОВАНИЯ

Язык Бейсик широко распространен и описан, например, в работе [12]. Язык Фокал применяется на мини- и микро-ЭВМ ДВК, «Электроника-60», СМ-3, СМ-4, БК 0010 и т. д., в различных во многом сходных версиях Фокал-71, Фокал-С, Фокал БК0010. Он обладает рядом достоинств, в том числе компактностью программ, однако Фокал значительно менее распространен, чем Бейсик. Поэтому и литературы, посвященной Фокалу, чрезвычайно мало. Учитывая, что пользователи микро-ЭВМ ДВК и «Электроника-60» работают рядом с профессиональными программистами, способными оказать квалифицированную помощь, и могут использовать руководства по языку [13,14], авторы сочли необходимым сделать упор на описание версии Фокал БК 0010 для массовой отечественной микро-ЭВМ, в основном находящейся в личном пользовании. Описанию особенностей программирования для этой ЭВМ посвящена первая глава второй части. Следующие две главы имеют цель познакомить читателя с некоторыми статистическими методами обработки наблюдений и методами вычислительной математики. Авторы не претендуют на оригинальность идей. Более подробно с ними можно познакомиться по работам [15—21], откуда и заимствовано большинство описанных методов. В частности, все формулы, связанные с точностью вычислительных методов, приведенных в главе 3 второй части, основываются на [20]. Авторам хотелось лишь дать читателю готовый набор «инструментов» в виде краткого описания идеи, заложенной в тот или иной метод, и соответствующих готовых программ на двух языках.

В целом, говоря об использовании микро-ЭВМ для физико-химических расчетов, авторы надеются, что алгоритмы первой части и «инструменты» второй позволят читателям в значительной мере упростить процесс внедрения компьютеров в химическую практику.

[Скачать книгу](#) Мариничев А. Н., Турбович М. Л., Зенкевич И. Г. **Физико-химические расчеты на микро-ЭВМ**. Ленинград, Издательство Химия, 1990