



В. В. Грачев,

Филиал Кузбасского государственного технического университета имени Т. Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, Кемеровская область

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ MATHCAD И MS EXCEL ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОТДЕЛЬНОГО ТИПА ЗАДАЧ ПО ХИМИИ

Аннотация

В статье рассматривается возможность использования таких программных продуктов, как система компьютерной математики Mathcad и табличный процессор MS Excel, в области химии — для решения задачи подбора коэффициентов в уравнениях окислительно-восстановительных реакций после ее математической постановки. Подробно разобран пример решения конкретной задачи средствами Mathcad и MS Excel.

Ключевые слова: окислительно-восстановительные реакции, коэффициенты, система уравнений, Mathcad, MS Excel.

DOI: 10.32517/2221-1993-2019-18-10-51-54

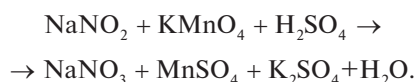
Изучение механизмов и особенностей окислительно-восстановительных реакций занимает важное место в школьном курсе химии (причем стоит заметить, это справедливо также и для соответствующих дисциплин в среднем профессиональном образовании и в образовательных программах вузов). При решении практических задач на эту тему большие затруднения у школьников традиционно могут быть связаны с определением коэффициентов в уравнениях окислительно-восстановительных реакций — как самостоятельно составленных, так и предлагаемых в виде готовой схемы взаимодействия, со всеми реагентами и продуктами. Стандартная методика подбора коэффициентов в уравнениях указанных реакций, безусловно, способствует пониманию их механизма обучающимися и позволяет достаточно оперативно выполнить расстановку коэффициентов в элементарных, «стандартных» уравнениях. Однако быстро и безошибочно определить коэффициенты в случае «нетривиальных» окислительно-восстановительных реакций различных типов, с многокомпонентными наборами реагентов и продуктов, как, например, в реакциях, рассматриваемых ниже, далеко не просто.

В условиях современной школы для решения задачи подбора коэффициентов, после ее математической постановки, можно использовать такие прикладные программные средства, как табличный процессор Microsoft Excel и весьма распространенная и достаточно мощная

система компьютерной математики Mathcad; при этом подходят, наряду с актуальными, и далеко не самые последние версии этих программ.

Рассмотрим возможный алгоритм решения задач подобного рода на примере межмолекулярной окислительно-восстановительной реакции [1, с. 155], в которой происходит окисление нитрита натрия (NaNO_2) перманганатом калия (KMnO_4) в кислой среде (H_2SO_4).

Реакция протекает по схеме:



Обозначив искомые коэффициенты a, b, c, d, e, f, g , записываем уравнение реакции в общем виде:

$$\begin{aligned} a\text{NaNO}_2 + b\text{KMnO}_4 + c\text{H}_2\text{SO}_4 &= \\ = d\text{NaNO}_3 + e\text{MnSO}_4 + f\text{K}_2\text{SO}_4 + g\text{H}_2\text{O}. \end{aligned} \quad (1)$$

Таким образом, приходим к системе алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} a = d, & \{\text{коэффициенты для Na}\} \\ 2a + 4b + 4c = 3d + 4e + 4f + g, & \{\text{коэффициенты для O}\} \\ b = 2f, & \{\text{коэффициенты для K}\} \\ b = e, & \{\text{коэффициенты для Mn}\} \\ 2c = 2g, & \{\text{коэффициенты для H}\} \\ c = e + f. & \{\text{коэффициенты для S}\} \end{cases}$$

Контактная информация

Грачев Вячеслав Валерьевич, канд. тех. наук, доцент кафедры естественно-научных дисциплин, филиал Кузбасского государственного технического университета имени Т. Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, Кемеровская область; адрес: 653033, Кемеровская область, г. Прокопьевск, ул. Ноградская, д. 19А; e-mail: gracheffVV@yandex.ru

V. V. Grachev,

Branch of Kuzbass State Technical University named after T. F. Gorbachev in Prokopyevsk, Kemerovo Region

USING MATHCAD AND MS EXCEL TO SOLVE AN INDIVIDUAL TYPE OF CHEMISTRY PROBLEMS

Abstract

The article discusses the possibility of using software products the computer mathematics system Mathcad and the spreadsheet processor MS Excel in chemistry — to solve the problem of selecting coefficients in the equations of redox reactions after its mathematical formulation. The example of solving a specific problem by means of Mathcad and MS Excel is analyzed in detail.

Keywords: oxidized-restoring reactions, coefficients, equation system, Mathcad, MS Excel.

Очевидные математические преобразования не производим для большей наглядности.

Естественные ограничения для коэффициентов:

$$a \in N, b \in N, c \in N, d \in N, e \in N, f \in N, g \in N.$$

Для решения полученной системы уравнений в математическом пакете Mathcad можно использовать так называемый вычислительный блок *Given — Find* (Дано — Найти). Вид рабочего листа Mathcad с введенными исходными данными, вычислительным блоком и полученным решением (вектором коэффициентов) представлен на рисунке 1.

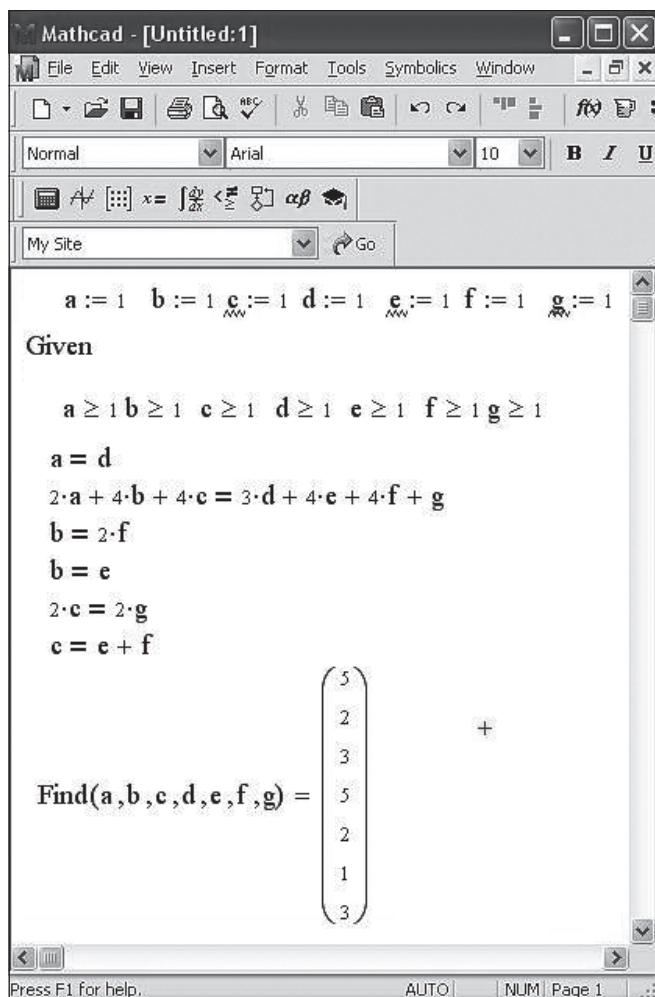


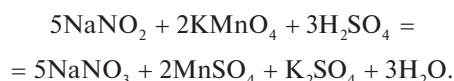
Рис. 1. Вид окна Mathcad с решением задачи нахождения коэффициентов в уравнении (1) с помощью вычислительного блока

Заметим, что каждому из неизвестных коэффициентов a, b, c, d, e, f, g предварительно присваивается начальное значение 1 (произвольное).

Таким образом, искомый вектор коэффициентов:

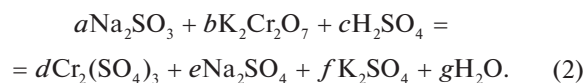
$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 3 \\ 5 \\ 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Окончательно получаем законченное уравнение окислительно-восстановительной реакции:



Для решения систем уравнений, к которым приводит математическая постановка задач нахождения коэффициентов в уравнениях химических реакций, на персональном компьютере можно также использовать стандартный табличный процессор MS Excel из пакета MS Office. В этом случае удобный инструмент — надстройка «Поиск решения». Левая часть одного из уравнений (после переноса в нее всех слагаемых из правой части) системы, полученной при формализации задачи, при этом может рассматриваться как целевая функция, значение которой посредством «Поиска решения» сводится к нулю. Остальные уравнения системы играют роль ограничений. Дополнительные ограничения продиктованы очевидными требованиями: коэффициенты уравнения реакции должны быть целыми положительными числами из последовательности 1, 2, ...

Порядок решения задачи нахождения коэффициентов в MS Excel рассмотрим (уже не приводя общую схему реакции — без коэффициентов) на примере следующего уравнения окислительно-восстановительной реакции [1, с. 161], в которой происходит окисление сульфита натрия (Na_2SO_3) дихроматом калия ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$) в присутствии серной кислоты (H_2SO_4):



Отсюда получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} 2a = 2e, \\ a + c = 3d + e + f, \\ 3a + 7b + 4c = 12d + 4e + 4f + g, \\ 2b = 2f, \\ 2b = 2d, \\ 2c = 2g. \end{cases}$$

На рисунке 2 представлен вид окна в MS Excel с таблицей, содержащей исходные данные указанной задачи. Подбор коэффициентов здесь рассматривается как задача условной оптимизации, но не с поиском экстремума целевой функции, а предусматривающая сведение последней к некоторому значению. Для решения таких задач удобно использовать надстройку «Поиск решения». В ячейки коэффициентов занесены произвольные начальные значения; в качестве целевой функции выбрана левая часть третьего уравнения системы (приведенной выше), преобразованного к виду

$$f(a, b, c, d, e, f, g) = 0.$$

Или в явной форме:

$$3a + 7b + 4c - 12d - 4e - 4f - g = 0,$$

при ограничениях:

$$\begin{cases} a = e, \\ a = 3d + e + f - c, \\ b = f, \\ b = d, \\ c = g, \\ a, b, c, d, e, f, g \geq 1. \end{cases}$$

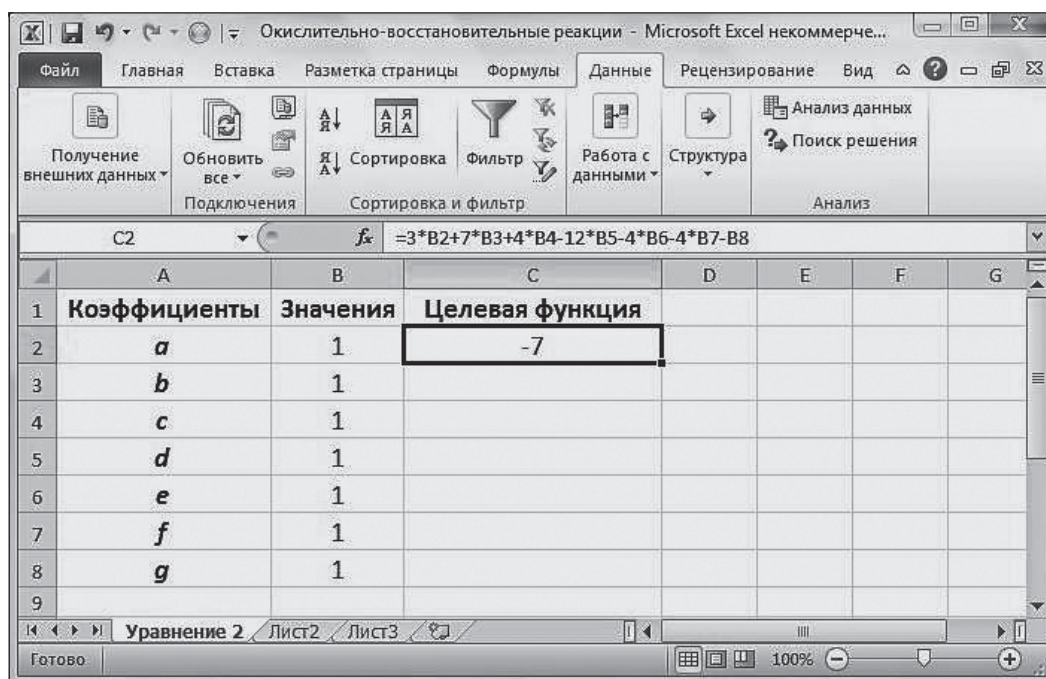


Рис. 2. Вид окна MS Excel с исходными данными для нахождения коэффициентов в уравнении (2)

Вид окна надстройки MS Excel «Поиск решения» с соответствующими настройками представлен на рисунке 3. Вид ограничений продиктован математической постановкой задачи, приведенной выше, и стандартны-

ми требованиями к коэффициентам в уравнении химической реакции. Найденные значения коэффициентов можно видеть на скриншоте электронной таблицы на рисунке 4.

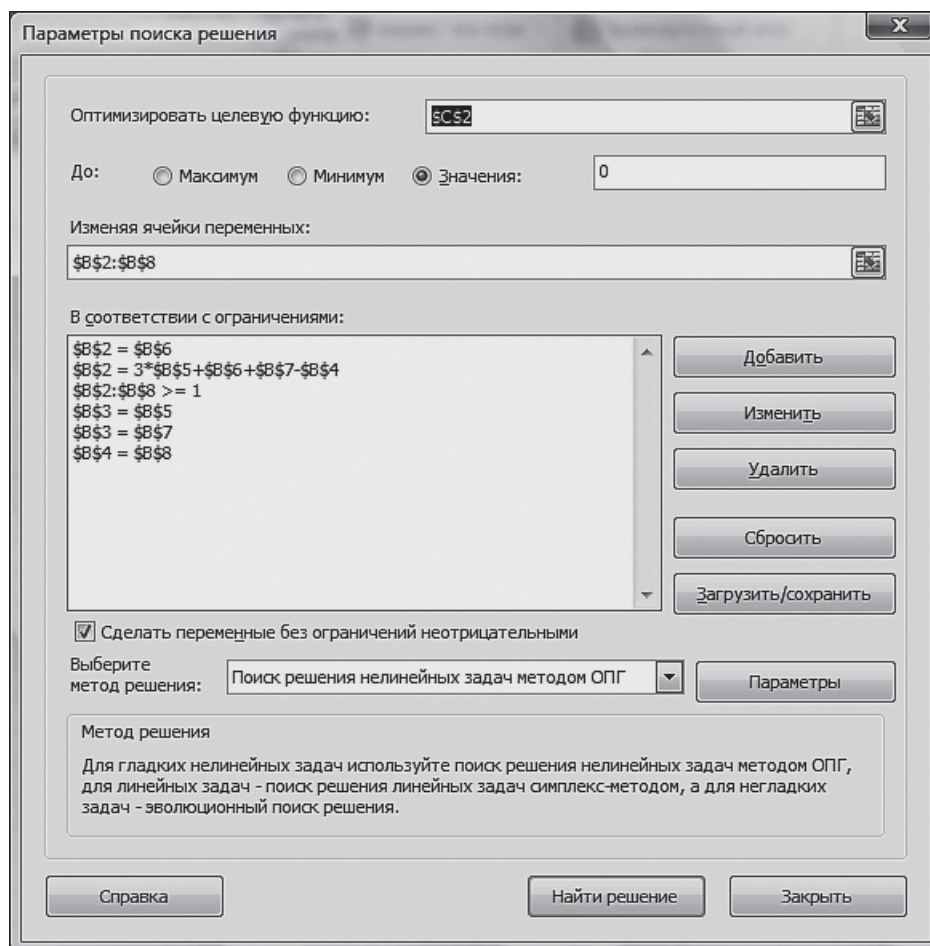


Рис. 3. Вид окна надстройки MS Excel «Поиск решения», используемой для нахождения коэффициентов в уравнении (2)

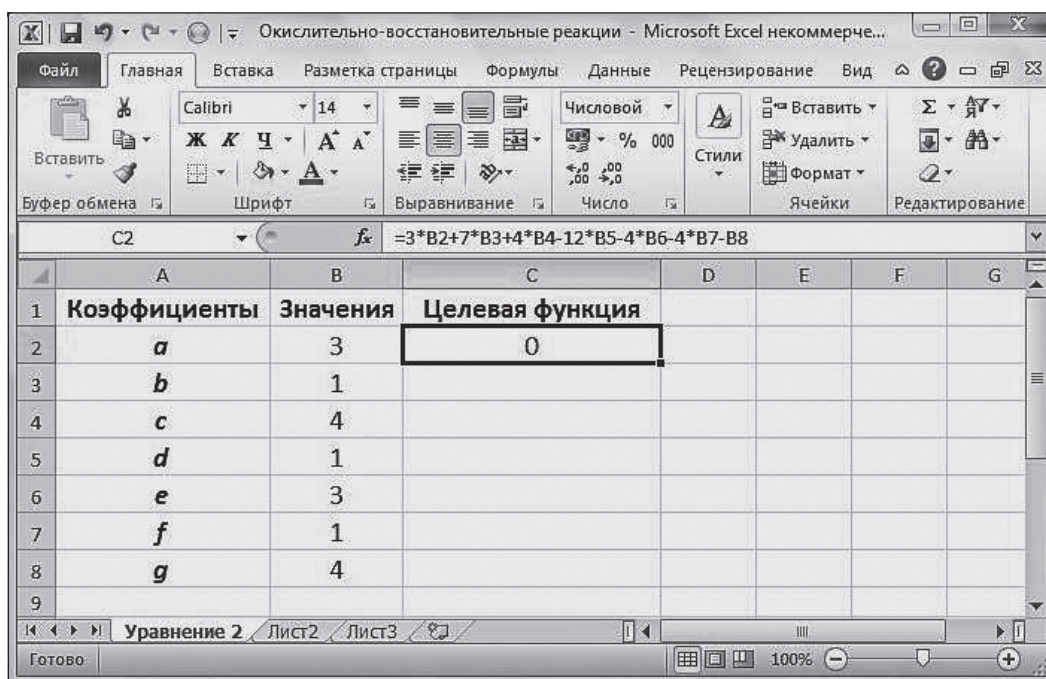
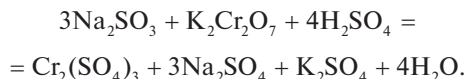


Рис. 4. Вид окна MS Excel с найденными коэффициентами в уравнении (2)

Искомый вектор коэффициентов:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 3 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, уравнение реакции (2) после подстановки числовых значений коэффициентов будет таким:



* * *

Описанный подход к решению задачи нахождения коэффициентов в уравнениях окислительно-восстановительных реакций, бесспорно, является более формальным по сравнению со стандартной «химической» методикой и, уж конечно, не заменяет ее. Однако использование вычислительного блока Mathcad или надстройки «Поиск решения» в MS Excel позволяет быстро определить коэффициенты не только в относительно простых уравнениях,

являющихся хрестоматийными учебными примерами, но и в тех по-настоящему сложных уравнениях окислительно-восстановительных реакций, которые могут встретиться на практике (отнюдь не только в школе!). Сведение задачи по химии к задаче чисто математической и решение ее на компьютере — это довольно необычная идея и, «наводя мосты» между химией, математикой, информатикой, она имеет немалые шансы на то, чтобы заинтересовать любознательного школьника. Кроме того, решение подобных задач химического содержания может быть полезно для параллельного изучения (на уроках информатики или факультативно) достаточно популярного в настоящее время математического пакета Mathcad, вычислительных и оптимизационных инструментов чрезвычайно распространенного табличного процессора MS Excel и наглядной демонстрации возможностей применения этих современных программных средств в естественно-научной сфере.

Список использованных источников

1. Романцева Л. М., Лецинская З. Л., Суханова В. А. Сборник задач и упражнений по общей химии: учебник. Пособие для нехимических специальностей вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1991. 288 с.

Уважаемые читатели!

В номере 9-2019 журнала «Информатика в школе» в статье К. Ю. Полякова «Задачи на анализ логических выражений в ЕГЭ по информатике» условие задачи 4 на с. 31 следует читать так:

Для какого наименьшего целого неотрицательного числа A выражение

$$(xy < 2A) \vee (y < x) \vee (y \geq 11)$$

тождественно истинно, т. е. принимает значение 1 при любых целых неотрицательных x и y ?

То есть в выражении должно быть 11, а не 10.

Приносим извинения за допущенную ошибку.