

Завдання на лабораторну роботу №9

Тема: Лінійна регресія. Кореляційний зв'язок між величинами (Basic)

Скласти програму на алгоритмічній мові Basic та провести математичну обробку експериментального набору даних. Розрахувати коефіцієнти рівняння регресії, середньоквадратичне відхилення, дати оцінку ступеня кореляційності зв'язку між експериментальними даними, провести прогноз значень Y від заданих значень X на базі встановленого рівняння регресії $y = a + bx$. Побудувати графік, що відображає залежність між експериментальними даними, рівнянням регресії та прогнозованими даними (з використанням редактору Origin).

Варіант 1. Залежність енергії Гіббса ΔG^0_f утворення оксиду алюмінію Al_2O_3 (при стандартних умовах) в температурному інтервалі від 400 до 1750 К описується набором даних ($\Delta G^0_f = f(T)$):

T, K	400	500	750	1000	1250	1500	1750
ΔG^0_f , Дж/моль	-525	-505	-495	-473	-423	-400	-380

Розрахувати значення енергії Гіббса Al_2O_3 для таких температур: 2000, 2250, 2500 К.

Відповідь: $a = -569,1279$ $b = 0,1095$
 $r = 0,9882$ $S = 8,6262$

T, K	2000	2250	2500
ΔG^0_f , Дж/моль	-350.14	-322.76	-295.39

Варіант 2. Експериментальні дослідження температурної залежності розчинності хлориду калію у воді дало результати:

температура, t °C	0	10	20	30	40	50	60	70
розчинність, k_s г/100г H_2O	27	30	32	35	39	42	45	47

Розрахувати значення розчинності KCl у воді при таких температурах: 15, 25, 35, 45 °C

Відповідь: $a = 26,75$ $b = 0,2964$
 $r = 0,9975$ $S = 0.5101$

температура, t °C	15	25	35	45
розчинність, k_s г/100г H_2O	31.1964	34.1607	37.125	40.0893

Варіант 3. Залежність енергії Гіббса ΔG^0_f утворення оксиду хрому Cr_2O_3 (при стандартних умовах) в температурному інтервалі від 500 до 2000 К описується набором даних ($\Delta G^0_f = f(T)$):

T, K	500	750	1000	1250	1500	1750	2000
ΔG^0_f , Дж/моль	-335	-315	-300	-268	-245	-217	-195

Розрахувати значення енергії Гіббса Cr_2O_3 для таких температур: 2100, 2200, 2300, 2400 K.

Відповідь: $a = -387,6786$ $b = 9,5857 \cdot 10^{-2}$
 $r = 0,9969$ $S = 4,099$

T, K	2100	2200	2300	2400
ΔG_f^0 , Дж/моль	-186.38	-176.79	-167.21	-157.62

Варіант 4. Експериментальні дослідження температурної залежності розчинності хлориду талію(I) у воді дало результати:

температура, t °C	20	40	60	70	80	90	100
розчинність, k_s г/100г H_2O	0.04	0.39	0.72	0.92	1.08	1.27	1.43

Розрахувати значення розчинності TlCl у воді при таких температурах: 30, 50, 65, 75 °C

Відповідь: $a = -0,3111$ $b = 0,0175$
 $r = 0,9998$ $S = 9,224 \cdot 10^{-3}$

температура, t °C	30	50	65	75
розчинність, k_s г/100г H_2O	0.2124	0.5615	0.8233	0.9978

Завдання на лабораторну роботу №10

Тема: Лінеаризація нелінійних залежностей. Залежності константи швидкості хімічної реакції від температури $k=f(T)$ (рівняння Арреніуса) (Basic)

Скласти програму на алгоритмічній мові Basic та провести лінеаризацію (з використання математичних методів) залежності константи швидкості хімічної реакції від температури $k=f(T)$, що описується рівнянням Арреніуса. Розрахувати значення передекспоненційного множника та енергії активації, дати характеристику щільності зв'язку між експериментальними величинами константи швидкості та температури на основі розрахунку значення коефіцієнта парної кореляції, провести прогноз значень константи швидкості для заданих температур, побудувати графіки залежностей між величинами для експоненціального та лінеаризованого типів (з використанням редактору Origin).

Що необхідно зробити:

Провести лінеаризацію залежності константи швидкості хімічної реакції від температури, що описується рівнянням Арреніуса:

$$k = k_0 \exp^{\frac{E_a}{RT}}$$

Прологарифмувавши даний вираз, одержуємо:

$$\ln k = \ln k_0 - \frac{E_a}{R} \frac{1}{T}$$

Ввести позначення: $y = \ln k$; $a = \ln k_0$; $b = -E_a/R$; $x = -1/T$

З врахуванням даних позначень одержується лінеаризоване рівняння регресії $y = a + bx$. Розрахувавши коефіцієнти a і b , обчисліть значення передекспоненційного множника k_0 ($k_0 = \exp(a)$) та енергії активації E_a ($E_a = -b \times R$).

На основі одержаних даних k_0 та E_a за рівнянням Арреніуса розрахувати значення константи швидкості хімічної реакції k для заданих температур T .

Варіант 1. Вихідний масив залежності k від T .

k	3.1·10 ⁻⁵	0.255	5.157	23.195	57.17	104.32
T	100	200	300	400	500	600

Результат: $k_0 = 2,11 \cdot 10^3$ $E_a = 1,5 \cdot 10^4$ $S_{\text{відх}} = 9,24 \cdot 10^{-4}$

Розрахувати значення k при температурах:

Дано	T	150	250	350	450	550
Відповідь	k	1.26·10 ⁻²	1.551	12.179	38.273	79.315

Варіант 2. Вихідний масив залежності k від T .

k	0.265	146.255	1200.2	3438.1	6464.88	9848.92
T	100	200	300	400	500	600

Результат: $k_0 = 8,08 \cdot 10^4$ $E_a = 1,05 \cdot 10^4$ $S_{\text{відх}} = 1,9625 \cdot 10^{-4}$

Розрахувати значення k при температурах:

Дано	T	150	250	350	450	550
Відповідь	k	17.834	517.226	2189.99	4882.52	8132.54

Завдання на лабораторну роботу №11

Тема: Обробка експериментальних даних методами простого та лінійного згладжування. Їх порівняльна характеристика (Табличний редактор Excel)

Провести математичну обробку експериментального набору даних методами простого, лінійного три- та п'ятиординатного згладжування, розрахувати значення середньоквадратичного відхилення розрахункових величин від експериментальних. Результати розрахунків надати у вигляді таблиці та відповідних графіків залежностей між величинами (побудову графіків проводити з використанням графічного редактора Origin). На основі одержаних результатів дати порівняльну характеристику роботи вище перерахованих методів згладжування для різних типів залежностей між вимірюваними величинами.

Експериментальний набір даних:

Варіант-1									
X	0	2	4	6	8	10	12	14	16
Y	0,4	1,9	3,6	4,5	4,8	3,4	1,7	0,9	0,3
Варіант-1									
X	0	1	2	3	4	5	6	7	8
Y	8	11	16	25	28	33	37	44	49

Результат згладжування:

Варіант 1.

Згладжування		Просте		Триординатне		П'ятиординатне	
Дослід	Уексп	Урозр	Відх.(%)	Урозр	Відх.(%)	Урозр	Відх.(%)
1	0.4	0.4000	0.0000	0.3667	8.3333	0.8200	105.0000
2	1.9	1.9400	2.1053	1.9667	3.5088	1.9000	0.0000
3	3.6	3.3067	8.1481	3.3333	7.4074	3.0400	15.5556
4	4.5	4.1333	8.1481	4.3000	4.4444	3.6400	19.1111
5	4.8	4.1733	13.0556	4.2333	11.8056	3.6000	25.0000
6	3.4	3.2467	4.5098	3.3000	2.9412	3.0600	10.0000
7	1.7	1.9933	17.2549	2.0000	17.6471	2.2200	30.5882
8	0.9	0.9400	4.4444	0.9667	7.4074	1.0700	18.8889
9	0.3	0.3000	0.0000	0.2667	11.1111	0.2000	33.3333
Сер.кв.відхилення (%)			0.3012		0.2606		0.6219
Максимальне відхилення (%)			17.2549		17.6471		105.0000

Варіант 2.

Згладжування		Просте		Триординатне		П'ятиординатне	
Дослід	Уексп	Урозр	Відх.(%)	Урозр	Відх.(%)	Урозр	Відх.(%)
1	8	8.0000	0.0000	7.6667	4.1667	7.4000	7.5000
2	11	11.4000	3.6364	11.6667	6.0606	12.2000	10.9091
3	16	17.0667	6.6667	17.3333	8.3333	17.6000	10.0000
4	25	23.4000	6.4000	23.0000	8.0000	22.6000	9.6000
5	28	28.2000	0.7143	28.6667	2.3810	27.8000	0.7143
6	33	33.0000	0.0000	32.6667	1.0101	33.4000	1.2121
7	37	37.8000	2.1622	38.0000	2.7027	38.2000	3.2432
8	44	43.6000	0.9091	43.3333	1.5152	43.5000	1.1364
9	49	49.0000	0.0000	49.3333	0.6803	47.8000	2.4490
Сер.кв.відхилення (%)			0.7663		1.0274		1.2966
Максимальне відхилення (%)			6.6667		8.3333		10.9091