ЗАСТОСУВАННЯ EXCEL ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ В ХІМІЇ

Т. О. Шенаєва[1α], М. Г. Медведєв[2β]

[1] Україна, м. Кривий Ріг, Криворізький національний університет

[2] Україна, м. Київ, Національна академія керівних кадрів культури і мистецтва

[α] shenaevata@mail.ru

[β] zhirafita@gmail.com

Однією з особливостей хімії XXI століття є її інформатизація та математизація, при цьому хімія виходить на новий рівень розвитку з новими для неї можливостями. Багато авторів приділяють увагу місцю математики та інформатики в сучасній хімії: Н. Д. Вишнивецька, В. С. Вишнивецька, Т. М. Деркач, С. А. Неділько, М. Є. Соловйов, М. М. Соловйов, А. А. Черняк, Ж. А. Черняк, А. А. Якимович та інші.

Загальновідомо, що в умовах вищих навчальних закладів та середніх шкіл дуже гостро стоїть питання про роботу на комп'ютерах тільки з ліцензійними програмами, що на даному етапі не завжди можливо. В той же час комп'ютери в навчальних закладах та в домашніх умовах налагоджені, в основному, на операційну систему Windows з пакетом програм Microsoft Office. Табличний процесор Excel входить до цього пакету програм, має великі обчислювальні можливості, зручний та простий в користуванні, має російський інтерфейс, тому раціонально математичні методи в хімії здійснювати в Excel. Ряд авторів присвятили свої роботи математичному моделюванні в Excel [1; 3; 6]. Про популярність цієї програми говорить і той факт, що табличний процесор Excel активно розглядається та використовується в соціальних мережах.

Метою даної роботи є подання прикладів хімічних систем та процесів, які описуються за допомогою системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР), і алгоритмів розв'язування СЛАР в Excel.

Більшість фізичних, фізико-хімічних, хімічних та технологічних процесів описуються СЛАР. Наведено приклади хімічних систем та хімічних процесів, математичними моделями яких є СЛАР.

<u>Неорганічна хімія.</u> *Розчини та їх приготування з вихідного розчину та кристалічної речовини.* Розрахунок маси вихідних компонентів для приготування розчину певної маси та певної концентрації речовини. При цьому складають систему рівнянь, перше з яких є рівнянням балансу за масою розчину, який треба приготувати, друге є рівнянням матеріального балансу за речовиною в кінцевому розчині.

Фізична хімія. *Тиск багатокомпонентної хімічної системи.* Розрахунок тиску пари чистих компонентів, якщо відомо сумарний тиск суміші цих компонентів в однофазній системі за певної сталої температури та склад суміші. В даному випадку складають систему рівнянь, в кожному з яких підводиться баланс за тиском суміші. Кількість рівнянь повинна бути неменше кількості компонентів у суміші.

Аналітична хімія. *Спектрофотометричний аналіз багатокомпонентної суміші.* Розрахунок кількісного складу багатокомпонентної суміші за результатами вимірювання оптичної густини суміші при різних довжинах хвиль. При цьому складають систему рівнянь, в кожному з яких підводиться баланс за оптичною густиною суміші при певній довжині хвилі. Система рівнянь має розв'язок, якщо кількість довжин хвиль, при яких проводили вимірювання оптичної густини суміші, неменше кількості компонентів цієї суміші.

Регресійний аналіз результатів хімічного експерименту. За методом найменших квадратів знаходять рівняння регресії (математична модель експерименту), яке оптимально відповідає залежності функції, яку вивчають, від аргументів в експерименті (наприклад, розчинності речовин від температури).

Хімічна технологія. *Суміші та їх приготування для проведення певного технологічного процесу з компонентів, в тому числі, відходів виробництва.* Розрахунок маси вихідних компонентів для приготування суміші певної маси та певного складу. Для цього складають систему рівнянь, перше з яких є рівнянням балансу за масою суміші, яку треба приготувати, інші є рівняннями матеріального балансу за окремими речовинами в кінцевій суміші.

Наступний етап в роботі хіміка – це розв'язання СЛАР, яке іноді є складним та довготривалим процесом. Застосування Excel значно спрощує та прискорює цей процес і дозволяє хіміку більше уваги приділити хімічній суті даного процесу. Тому розглянемо методи розв'язування СЛАР із застосуванням Excel.

Існує багато способів розв'язання СЛАР, які поділяють на дві групи:

1) *точні методи,* за допомогою яких знаходимо за певним алгоритмом точні значення коренів системи. До них відносяться метод Крамера, метод Жордана-Гаусса, метод Гаусса, метод оберненої матриці та інші;

2) *ітераційні методи,* за допомогою яких знаходимо корені системи з заданою заздалегідь точністю шляхом збіжних нескінченних процесів. Це такі методи, як метод простої ітерації, метод Гаусса-Зейделя, метод верхньої та нижньої релаксації та інші.

Легко реалізуються в Excel такі методи розв'язування СЛАР, як метод Крамера та матричний метод (або метод оберненої матриці).

Розв'язання СЛАР точними методами

Метод Крамера

Нехай задана система *n* лінійних рівнянь з *n* невідомими

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + & a_{12}x_2 + & \ldots + & a_{1n}x_n = & b_1 \\ a_{21}x_1 + & a_{22}x_2 + & \ldots + & a_{2n}x_n = & b_2 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n1}x_1 + & a_{n2}x_2 + & \ldots + & a_{nn}x_n = & b_n \end{cases}, \qquad (1)$$

тоді їй відповідає матриця:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad (2)$$

Якщо детермінант det $A = \Delta \neq 0$, ця система має єдиний розв'язок.

Замінимо у визначнику основної матриці Δ і-ий стовпець стовпцем вільних членів, тоді одержимо *n* інших визначників для знаходження *n* невідомих $\Delta_1, \Delta_2, \ldots, \Delta_n$. За формулами Крамера знаходимо невідомі:

$$x_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta}; x_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta}; \ldots; x_n = \frac{\Delta_n}{\Delta}. \qquad (3)$$

Таким чином, з формули (3) видно, що якщо визначник системи не дорівнює нулю ($\Delta \neq 0$), то система має лише один розв'язок.

Цей метод можна реалізувати в Excel за допомогою математичної функції майстра функцій *МОПРЕД (масив матриці)*, яка знаходить визначник матриці.

Метод оберненої матриці

1. Записуємо систему в матричній формі:

$$\mathbf{Ax = b},$$

де A – матриця коефіцієнтів; x – вектор невідомих; b – вектор вільних членів.

2. Обидві частини матричного рівняння множаться на матрицю, обернену до A:

$$\mathbf{A^{-1}Ax = A^{-1}b}. \qquad (4)$$

За визначенням, добуток матриці на обернену до неї дає одиничну матрицю, а добуток одиничної матриці на будь-який вектор дорівнює цьому ж вектору, тому рівняння (4) перетворюється до наступного вигляду:

$$\mathbf{x = A^{-1}b}.$$

Це і є розв'язок системи рівнянь.

Для здійснення цього методу в Excel застосовують математичну функцію *МОПРЕД* (*масив вихідної матриці A*), *МОБР* (*масив вихідної матриці A*), за допомогою якої знаходять обернену матрицю A^{-1}, та функцію *МУМНОЖ* (*масив матриці A^{-1}; масив вектора b*), яка знаходить добуток матриць. Функції подані з указанням їх синтаксису в Excel. Функції «*МУМНОЖ*» та «*МОБР*» – функції масивів, які в якості результату повертають масив значень.

Розв'язання СЛАР ітераційними методами

Метод простої ітерації

1. Нехай маємо систему *n* лінійних алгебраїчних рівнянь з *n* невідомими (1), основна матриця A (2) якої має детермінант $\det A = \Delta \neq 0$. Таким чином, система має єдиний розв'язок.

2. Перевіримо задану систему на виконання для всіх рівнянь наступної умови, достатньої на цьому етапі для збіжності наступного процесу ітерацій:

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|, \ i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5}$$

Якщо система n лінійних алгебраїчних рівнянь не задовольняє цій умові, то перетворюємо її на еквівалентну систему елементарними перетвореннями так, щоб виконувалась умова (5) для всіх діагональних коефіцієнтів. Вважаємо, що представлена система рівнянь (1) відповідає умові (5).

3.Розв'яжемо перше рівняння відносно x_1, друге – відносно x_2 і так далі. В результаті одержимо таку систему *в ітераційній формі*:

$$\begin{cases} x_1 = & \beta_1 + & \alpha_{12}x_2 + & \alpha_{13}x_3 + & \ldots + & \alpha_{1n}x_n \\ x_2 = & \beta_2 + & \alpha_{21}x_1 + & \alpha_{23}x_3 + & \ldots + & \alpha_{2n}x_n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ x_n = & \beta_n + & \alpha_{n1}x_1 + & \alpha_{n2}x_2 + & \ldots + & \alpha_{nn-1}x_{n-1} \end{cases}, \tag{6}$$

де $\beta_i = \dfrac{b_i}{a_{i,i}}$; $\alpha_{i,j} = \dfrac{a_{i,j}}{a_{i,i}}$ при $i \neq j$ та $a_{i,j} = 0$ при $i = j$.

Тоді одержимо систему в матричному вигляді:

$$\mathbf{x} = \beta + \alpha\mathbf{x}, \tag{7}$$

де

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{pmatrix}; \ \beta = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \ldots \\ \beta_n \end{pmatrix}; \ \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \ldots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \ldots & \alpha_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \ldots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}.$$

4. Розв'яжемо систему методом послідовних наближень (ітерацій). За *нульовий розв'язок* приймемо або розв'язок якимось прямим методом, або стовпець вільних членів, тобто, $\mathbf{x}^{(0)} = \beta$, або будь-які довільні числа.

5. Підставимо одержані значення $\mathbf{x}^{(0)}$ у праві частини рівнянь системи в ітераційній формі (6) і одержимо перше наближення $\mathbf{x}^{(1)} = \beta + \alpha\mathbf{x}^{(0)}$, потім друге наближення $\mathbf{x}^{(2)} = \beta + \alpha\mathbf{x}^{(1)}$ і так далі. В загальному вигляді маємо, що (k)-е наближення розраховуємо за формулою $\mathbf{x}^{(k)} = \beta + \alpha\mathbf{x}^{(k-1)}$.

Якщо послідовність наближень $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(k)}, \ldots$ має границю, тобто

$$x_i^* = \lim_{k\to\infty} x_i^{(k)}, \; i = 1,2 \ldots, n,$$

то ця границя буде розв'язком системи (7) $x_j^* = (x_1^*, x_j^*, \ldots, x_n^*)$.

Умова закінчення ітераційного процесу для отримання розв'язку наступна:

$$\left| x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)} \right| \le \varepsilon, \; i = 1,2,\ldots, n, \qquad (8)$$

де $\varepsilon > 0$, не більше граничної похибки наближеного розв'язку.

Метод Гаусса-Зейделя

Якщо в методі простої ітерації при обчисленні k-го наближення $x^{(k)}=(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)})$ використовуємо тільки результати (k-1)-го наближення, то в ітераційному методі Гаусса-Зейделя для обчислення $x_i^{(k)}$ використовують вже знайдені значення $x_1^{(k)}, \ldots, x_{i-1}^{(k)}$. Умови збіжності методу Гаусса-Зейделя ті ж самі, що і для методу простої ітерації, але ітераційний процес в цьому випадку відбувається швидше, хоч обчислення більш громіздкі.

Для здійснення цього методу в Excel треба привести СЛАР до ітераційної форми, налагодити обчислювальний ітераційний процес за допомогою меню «сервіс», ініціалізувати ітераційний процес уведенням початкових наближень та застосуванням логічної функції ЕСЛИ(лог_выражение; знач_если_истина; знач_если_ложь), при введенні рівнянь використати посилання. Ітераційний процес продовжують до тих пір, поки не досягають задовільної збіжності до розв'язку.

Цей метод більш складний для реалізації в Excel, тому покажемо алгоритм на прикладі.

Приклад. Нехай треба розв'язати таку систему рівнянь:

$$\begin{cases} -8x_1 + \quad x_2 + \quad 2x_3 = \quad 0 \\ 5x_1 + \quad 7x_2 + \quad -x_3 = \quad 10 \\ 2x_1 + \quad x_2 + \quad -4x_3 = \quad -2 \end{cases}$$

Перетворимо систему лінійних рівнянь до ітераційної форми

$$\begin{cases} x_1 = \left(\dfrac{1}{8}\right)\cdot(x_2 + 2x_3) \\ x_2 = \left(\dfrac{1}{7}\right)\cdot(10 - 5x_1 + x_3) \\ x_3 = \left(\dfrac{1}{4}\right)\cdot(2 + 2x_1 + x_2) \end{cases}$$

Відкриваємо робочий аркуш Excel і налагоджуємо обчислювальний ітераційний процес:

- обираємо команду *Сервис → Параметры*;
- відкриваємо вкладку *Вычисления*;
- вмикаємо режим *Вручную*;
- ставимо відмітку на перемикач *Итерации*;
- уводимо в поле *Предельное число итераций* значення 1;
- відмикаємо режим *Пересчёт перед сохранением;*
- тиснемо на кнопку *ОК*.

До комірки А1 вводимо «*Розвязок систем рівнянь. Метод Гаусса-Зейделя*».

До комірки А3 вводимо «*Поч. флаг*».

До комірки В3 вводимо початковий флаг ініціалізації (спочатку *ИСТИНА*, потім *ЛОЖЬ*), який би переводив обчислювальний процес в певний початковий стан.

При введенні значення *ИСТИНА* функція *ЕСЛИ (лог_выражение; знач_если_истина; знач_если_ложь)* повертає початкові наближення в стовпець розв'язку (0;0;0), тобто, в якості аргументу функції (*ЕСЛИ) знач_если_истина* використовуємо початкові наближення 0;0;0.

При введенні значення *ЛОЖЬ* функція *ЕСЛИ (лог_выражение; знач_если_истина; знач_если_ложь)* повертає наступні наближення в стовпець розв'язку, тобто, в якості аргументу функції (*ЕСЛИ) знач_если_ложь* використовуємо стовпець приведених рівнянь.

До комірки А6 вводимо «**Початкові значення**».

До комірок А7:А9 вводимо стовпець початкових наближень, нехай це будуть нулі (0;0;0).

Вводимо стовпець рівнянь в ітераційній формі:

До комірки В6 вводимо «*Рівняння*».

До комірки В7 вводимо =(C8+2*C9)/8.

До комірки В8 вводимо =(10-5*C7+C9)/7.

До комірки В9 вводимо =(2+2*C7+C8)/4.

В комірку С6 вводимо «*Розв'язки*».

В комірку С7 вводимо формулу: =ЕСЛИ(B3; A7; B7) і копіюємо її в комірки C8 та C9.

Для проведення розрахунків встановлюємо флаг ініціалізації рівним ИСТИНА і натискаємо клавішу F9. Після ініціалізації листа змінюємо значення флага ініціалізації на ЛОЖЬ і натискаємо клавішу F9. Перехід до наступної ітерації здійснюємо за допомогою клавіші F9. Ітераційний процес продовжуємо доти, поки не буде виконуватись умова (8).

Висновки

Більшість фізичних, фізико-хімічних, хімічних та технологічних процесів описується системами лінійних рівнянь.

Наведені приклади хімічних систем та процесів, які описуються за допомогою системи лінійних алгебраїчних рівнянь.

Застосування Excel значно спрощує та прискорює розв'язок систем лінійних рівнянь.

Описані алгоритми розв'язання систем лінійних рівнянь в Excel точними методами (метод Крамера та метод оберненої матриці) та ітераційним методом Гаусса-Зейделя.

Представлені приклади систем з різних областей хімії та алгоритми розв'язання систем лінійних рівнянь в Excel можуть бути корисними для викладачів вищих навчальних закладів та вчителів шкіл з поглибленим вивченням хімії.

Література

1. Вишнивецька Н. Д. Хімія та математика. Міжпредметний зв'язок / Н. Д. Вишнивецька, В. С. Вишневецька // Хімія. – 2004. – № 19-21. – С. 2-9; № 22-23. – С. 41-46; №24. – С. 7-11.
2. Деркач Т. М. Інформаційні технології у викладанні хімічних дисциплін : навч.-метод. посіб / Т. М. Деркач – Дніпропетровськ : Вид-во ДНУ, 2008. – 336 с.
3. Кузьмичов А. І. Моделювання засобами MS Excel : навчальний посібник / Кузьмичов А. І., Медведєв М. Г. – К. : Ліра-К, 2011. – 214 с.
4. Неділько С. А. Математичні методи в хімії / С. А. Неділько – К. : Либідь, 2005. – 256 с.
5. Соловьёв М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьёв, М. М. Соловьёв. – М. : СОЛОН-Пресс, 2005. – 536 с.
6. Черняк А. А. MathCad и Excel для школьников: решение уравнений и неравенств / А. А. Черняк, Ж. А. Черняк, А. А. Якимович // Информатика и образование. – 2009. – №3 – С. 60-86.