

УДК 518.621

А.Ф. Хрусталеv

Севастопольский национальный технический университет

Студгородок, г. Севастополь, Украина, 99053

E-mail: root@sevgtu.sebastopol.ua

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Раскрывается содержание, роль и назначение вычислительного эксперимента как метода исследования.

1. Вычислительный эксперимент как метод познания

Наше время характеризуется широким внедрением компьютеров во все сферы человеческой деятельности. С их появлением при решении многих задач используется метод, называемый вычислительным экспериментом.

В простейших случаях он сводится к вычислениям, связанным с перебором всех возможных вариантов из некоторого допустимого множества, отбрасыванию тех, которые не удовлетворяют условиям задачи.

Как говорил Шерлок Холмс «То, что остается после исключения всего невозможного, истинно».

При изучении какого-либо процесса математическими методами, прежде всего, строится его математическая модель. Изменяя в ней параметры, можно оценить влияние различных факторов на поведение процесса, т. е. получить такую же богатую информацию, как и при натурных испытаниях. По существу такая работа очень близка к эксперименту, только роль экспериментальной установки выполняет ЭВМ, а вместо реального процесса исследуется его математическая модель. Именно поэтому изучение реального, физического процесса таким способом в рамках принятой модели называют вычислительным или математическим экспериментом.

Одно из его достоинств состоит в том, что он дешевле, проще и безопаснее натурального. В вычислительном эксперименте можно моделировать условия, которые еще невозможно создать в лаборатории. Конечно, вычислительный эксперимент тесно связан с натурным, поскольку математическая модель процесса строится на основе закономерностей, выявленных из опыта, она должна хорошо отражать определенные стороны физического процесса. Вычислительный и натуральный эксперименты дополняют друг друга и позволяют получать новые результаты.

Проще всего разобраться в сущности вычислительного эксперимента можно, применив его к решению задач из различных дисциплин.

2. Приложение метода к решению химических задач

Сначала рассмотрим задачу из школьного учебника [1, с. 50].

Углеводород содержит в массовых долях 0,8889 или 88,89 % углерода. Его плотность по воздуху равна 1,862. Найдите молекулярную формулу этого углеводорода, напишите формулы и названия возможных его изомеров.

Исключив из условия информацию о массовой доле углерода и отбросив цифру 2 из его плотности, запишем формулу углеводорода в виде C_xH_y , тогда для определения индексов x и y получим уравнение:

$$12x + y = 54 \quad (1,86 \cdot 29) \quad (1)$$

из которого видно, что x не может быть более 4. Цифру 2 мы отбросили потому, что 29 имеет две значащие цифры, а 1 является цифрой старшего разряда приближенного числа 1,862. По этому поводу в [3, с. 379] сказано: «Есть основания не считать значащей цифрой единицу, если она является цифрой старшего разряда приближенного числа, то есть первой слева его цифрой. Принимая это правило, мы должны, например, число 12,47 считать имеющим не 4, а только 3 значащие цифры». Вычислив из уравнения (1) все значения y при x равном 1; 2; 3 и 4, получим четыре пары значений (x, y) : (1;42), (2;30), (3;18), (4;6) и C_4H_6 – формула углеводорода. (Из-за несоответствия валентностей других углеводородов нет). На записи формул и названий возможных изомеров не останавливаемся: они полностью определяются найденной молекулярной формулой.

Проведенные здесь вычисления могут быть автоматизированы и выполнены компьютером по соответствующей программе. Однако в результате вычислений могут быть получены и посторонние решения, а потому необходима проверка по содержанию (в нашем примере химическому) задачи.

Итак, анализ, проверка результатов исполнения программы человеком или компьютером является неотъемлемой составной частью решения задачи, без которой оно не может быть признано полноценным, даже если посторонние решения и не появились!

Теперь рассмотрим вариант алгоритма и программы вывода молекулярной формулы (МФ) углеводорода по массовой доле L углерода в нём. Для этого запишем МФ углеводорода в виде C_xH_y и

найдем связь между индексами: $\frac{Ax}{Ax + By} = L$ или

$$x = \frac{BLy}{A(1-L)}, \quad (2)$$

где A и B относительные атомные массы соответственно углерода и водорода. Прежде всего, отметим, что x и y – натуральные числа, причём y – чётное, поскольку число атомов водорода в молекуле любого углеводорода – чётное. Поэтому, начиная с $y = 2$ и увеличивая каждый раз его величину на 2, будем получать в соответствии с (2) значения x , которые, как правило, целыми не являются, а потому каждое значение x необходимо округлить до ближайшего целого и из целых x и y выбрать те, для

которых имеет место неравенство: $\left| \frac{Ax}{Ax + By} - L \right| \leq E$, где E – граница погрешности массовой доли углерода.

Поскольку в молекуле предельного углеводорода C_xH_{2x+2} с x атомами углерода связано максимальное количество атомов водорода, равное $2x + 2$, для индексов x и y МФ C_xH_y любого углеводорода справедливо неравенство:

$$y \leq 2x + 2 \quad (3)$$

Если при всех указанных ограничениях в результате исполнения алгоритма окажется, что существует только одна пара значений x и y , удовлетворяющая условию задачи, то она имеет единственное решение, если не существует ни одной пары значений x и y – задача решения не имеет, иначе решение не однозначное.

В соответствии с этим алгоритмом запишем на языке бейсик программу МФ.

```
10 PRINT "ВВЕДИТЕ L, A, B, E": INPUT L, A, B, E
20 Y = 0: T = 0: K = 0
30 Y = Y + 2
40 D = L*B*Y/(A*(1-L))
50 X = INT(D + .5)
60 IF (ABS(A*X/(A*X + B*Y) - L) > E) THEN 30
70 IF Y <= 2*X + 2 THEN T = T + 1: PRINT "X = "; X, "Y = "; Y
80 IF T = 0 THEN PRINT "РЕШЕНИЯ НЕТ": GOTO 10
90 IF K=0 THEN K = K + 1: GOTO 30
100 IF T = 1 THEN PRINT "РЕШЕНИЕ ЕДИНСТВЕННОЕ": GOTO 10
110 PRINT "РЕШЕНИЕ НЕ ОДНОЗНАЧНОЕ": GOTO 10
120 END
```

Задача. Какова простейшая и молекулярная формула газообразного углеводорода, если массовая доля углерода равна 81,82 % и водорода – 18,18 %, а 10^{-3} м³ этого углеводорода (н.у.) имеют массу $2,6 \cdot 10^{-3}$ кг? [2, с. 49].

Исключим из условия всю информацию, кроме массовой доли углерода в углеводороде, которую округлим до 0,818. Дело в том, что последняя цифра 2 массовой доли хотя и является значащей, но надёжность её точности невелика, тогда как последняя цифра числа 0,818 будет практически достоверной. Именно поэтому, исполнив программу при $L = 0,818$, $E = 0,001$, (модуль погрешности $L=0,818$ не превосходит единицы последнего сохранённого разряда, поэтому E полагаем равным 0,001), $A = 12,01$, $B = 1,01$, получим однозначный результат: C_3H_8 – молекулярная формула углеводорода. Ответ авторов книги – C_4H_{10} , однако, он неверный.

Дело в том, что в условии задачи величина 10^{-3} м³ = 1 л содержит всего одну значащую цифру, равную 1, которую «есть основания не считать значащей ...» [3, с. 379].

Самое точное данное рассматриваемой задачи 81,82 % имеет четыре значащие цифры, а, потому решая задачу, исходя только из этого значения (остальные количественные данные исключаются), компьютер выдал правильный ответ! С целью контроля проверим оба результата C_4H_{10} и C_3H_8 , для чего рассмотрим вспомогательную задачу, обратную данной.

Последняя составляется так, что в её условие включается ответ к исходной задаче, а одно или несколько имеющих высокую точность данных исходной задачи объявляются новыми неизвестными. Если в результате решения обратной задачи новые неизвестные практически совпадут с

соответствующими значениями, которые даны в условии исходной задачи, то приходим к выводу, что задача решена правильно.

В условии нашей задачи самую высокую относительную точность имеет массовая доля углерода 0,8182, содержащая четыре значащие цифры. Итак, пусть C_4H_{10} – формула углеводорода. Тогда массовая доля углерода, формально найденная на основе целочисленных значений атомных масс, будет 0,8276; с помощью табличных значений относительных атомных масс ($a_c = 12,011$, $a_h = 1,0080$) 0,8266. Оба эти числа довольно сильно отличаются от массовой доли 0,8182, содержащейся в условии исходной задачи. Значит, первый ответ (совпадающий с ответом из книги) должен быть отвергнут. Уже отсюда следует, что проверка ответа – это необходимая составная часть решения задачи.

Что касается второго ответа, то массовая доля углерода в углеводороде C_3H_8 (при целочисленных значениях относительных атомных масс элементов) полностью совпадает с соответствующим значением

в условии задачи: $\frac{3 \cdot 12}{3 \cdot 12 + 8 \cdot 1} \cdot 100\% = 81,82\%$.

Конечно, некорректно на основании целочисленных значений относительных атомных масс записывать результат в виде, как если бы в нём содержались четыре значащие цифры. В таких случаях следует, как и выше, пользоваться табличными значениями (тогда массовая доля углерода будет 81,71 %). Значит, C_3H_8 – молекулярная формула углеводорода.

Итак, ответ, который выдал компьютер – правильный, так как он основан на массовой доле углерода, содержащей четыре значащие цифры!

Отметим, что при округлении массовой доли углерода до значения 0,82, когда $E = 0,01$, программа выдаст оба результата: C_3H_8 и C_4H_{10} и сообщение «РЕШЕНИЕ НЕ ОДНОЗНАЧНОЕ». Подчеркнём также, что при этом сообщении в программе не предусмотрена печать всех ответов, так как их может быть теоретически бесконечно много, например в случае простейшей формулы CH_2 , когда молекулярная формула может быть любой кратности C_nH_{2n} , где n – натуральное число.

Приведём также пример, когда программа даёт ответ «РЕШЕНИЯ НЕТ».

При сжигании вещества, массовая доля углерода в котором равна 60 %, образуется только оксид углерода (IV) и вода. Содержит ли это вещество кислород?

Вещество, о котором идёт речь, содержит углерод, водород и возможно кислород. Допустим, что оно не содержит кислород. Тогда это – углеводород, массовая доля углерода в котором 60 %. Исполнив программу МФ при $L = 0,60$, $A = 12$, $B = 1,0$, $E = 0,01$, получим ответ «РЕШЕНИЯ НЕТ». Значит, вещество содержит кислород.

Подчеркнём, что математическая модель – это не только уравнение (2), но и дополнительные условия (в частности (3)), устанавливающие границы его применимости. Уравнение (2) это только компонент математической модели.

Предлагаемая программа позволяет решать также задачи для полностью замещённых галогенпроизводных углеводородов и соответствующие задачи для кремневодородов. В этих случаях величине B должны быть присвоены значения относительных атомных масс соответствующих элементов.

С помощью программы МФ легко обнаруживаются лишние данные (если они имеются) в условиях соответствующих задач по химии в методических руководствах, задачниках для высших и средних учебных заведений, в пособиях для поступающих в вузы, сборниках олимпиадных задач и журнальных статьях.

Эта программа может быть применена для проведения исследовательских работ на стыке таких фундаментальных дисциплин как информатика и химия. Она будет способствовать выработке навыков использования алгоритмов и ЭВМ при решении химических задач.

3. Применение метода к решению математических задач

Методом вычислительного эксперимента решим задачу № 1151 из учебника алгебры [4].

Существует ли такое двузначное число, которое при делении на сумму квадратов его цифр даёт в частном 2 и в остатке 6, а при делении на произведение его цифр даёт в частном 4 и остатке 6?

Будем искать двузначное число, которое при делении на произведение его цифр даёт в частном 4 и в остатке 6 (Остальная информация отбрасывается). Тогда, на основании сохранённой информации и программы перебора всех чисел от 10 до 99 придем к выводу, что число, о котором идет речь, не существует.

Рассмотрим также другое решение, обозначив через x и y соответственно число десятков и число единиц двузначного числа, тогда для нахождения неизвестных получим уравнение:

$10x + y = 4xy + 6$, где $1 \leq x \leq 9$, $0 \leq y \leq 9$, x, y – целые числа. Из уравнения имеем: $y = \frac{10x - 6}{4x - 1}$. Теперь вычислив y при всех целых x , удовлетворяющих двойному неравенству $1 \leq x \leq 9$, убедимся в том, что только $y(2) = 2$ является целым числом и поэтому, если двузначное число, о котором идет речь, и существует, то оно равно 22. Однако уравнение $y = \frac{10x - 6}{4x - 1}$ есть следствие задачи, а потому необходима ещё проверка результата по условию. Но проверка показывает, что при делении числа 22 на 4 в частном получается 5, а не 4, т.е. число 22 не удовлетворяет условию задачи. Следовательно, не существует двузначное число, о котором идёт речь.

Аналогично решается задача № 1108 [5], если из её условия исключить информацию «на 3».

«Дано двузначное число. Число его единиц на 3 меньше числа десятков. Произведение этого числа на число, записанное теми же цифрами в обратном порядке, равно 574. Найдите данное число».

По условию двузначное число дано, значит, в отличие от предыдущей задачи, решение существует, т.е. задача непротиворечива. С помощью любой программы находим произведение каждого двузначного числа на соответствующее число, записанное теми же цифрами в обратном порядке, и в результате выбираем только те числа, для которых указанное произведение равно 574.

Таких чисел только два: 41 и 14, но число единиц меньше числа десятков в первом из них, поэтому число, о котором идёт речь, равно 41. Кстати, из этого решения следует, что число единиц в нем на три меньше числа десятков.

4. ЭВМ – соавтор открытия

Ярким примером удачного применения вычислительного эксперимента в физике было открытие Т-слоя (Теплового слоя).

Его суть состоит в том, что в плазме, взаимодействующей с магнитным полем, при определенных условиях возникают слои высокой температуры.

Как отмечает академик А.А. Самарский [6, с. 45]: «Т-слой был открыт с помощью вычислительных экспериментов. С высокой точностью были описаны условия, при которых должен возникать неизвестный прежде эффект. Физические эксперименты, в которых он мог бы появиться, тогда еще не ставились в силу их сложности. Это породило борьбу мнений, вызвало недоверие со стороны некоторых ученых, занимающихся исследованиями плазмы, – уж очень необычная была ситуация: физический эффект открыт математиками.

Между тем, получив от математиков точное описание нового эффекта, физики взялись обнаружить его экспериментально. Три различных научных коллектива Москвы, Новосибирска и Сухуми, независимо друг от друга на различных установках зарегистрировали Т-слой». Соавтором нового физического открытия стала ЭВМ.

Итак, вычислительный эксперимент – это современная технология и методология проведения различных исследований. Его основой является математическая модель, теоретической базой – вычислительная математика, а технической – компьютеры.

Библиографический список

1. Рудзитис Г.Е., Химия: Органическая химия. / Г.Е. Рудзитис, Ф.Г. Фельдман — М.: Просвещение, 1993. — 272 с.
2. Романцева Л.М. Сборник задач и упражнений по общей химии / Л.М. Романцева, З.Л. Лещинская, В.А. Суханова. — М.: Высш. шк., 1991. — 288 с.
3. Энциклопедия элементарной математики. — М – Л : ГИТТЛ, 1951. — Т. 1. — 448 с.
4. Макарычев Ю.Н Алгебра-9/ Ю. Н. Макарычев, Н.Г. Миндюк, К.И. Нешков, С.Б. Суворова — М.: Просвещение, 2003. — 270 с.
5. Макарычев Ю.Н. Алгебра-8 / Ю.Н. Макарычев, Н.Г. Миндюк, К.И. Нешков, С.Б. Суворова — М.: Просвещение, 1997. — 239 с.
6. Самарский А.А. Вычислительный эксперимент в физике. Что такое прикладная математика / А.А. Самарский. — М.: Знание, 1980. — 64 с.

Поступила в редакцию 05.09.2006 г.