



РАСЧЕТЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ MATHCAD

Учебное пособие

2018

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Казанский национальный исследовательский
технологический университет»

РАСЧЕТЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ MATHCAD

Учебное пособие

Казань
Издательство КНИТУ
2018

УДК 66.02.001.24:004.42(075)

ББК 24:32.97я7

P24

*Печатается по решению редакционно-издательского совета
Казанского национального исследовательского технологического университета*

Рецензенты:

д-р техн. наук, проф. В. Н. Шарифуллин

канд. пед. наук, доц. С. М. Куценко

Авторы: Т. В. Лаптева, Н. Н. Зиятдинов, С. А. Лаптев,

Д. Д. Первухин

P24 Расчеты и моделирование в химической технологии с применением Mathcad : учебное пособие / Т. В. Лаптева [и др.]; Минобрнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2018. – 248 с.

ISBN 978-5-7882-2526-5

На примере использования универсального математического пакета Mathcad рассмотрены приемы решения типовых математических задач химической технологии, сопровождаемые упражнениями. Содержит также цикл лабораторных и контрольных работ для закрепления изученного материала.

Предназначено для бакалавров направлений подготовки 27.03.03 «Системный анализ и управление», 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биологии» и магистров направлений подготовки 19.04.01 «Биотехнология» (программа «Технология, оборудование и автоматизация биотехнологических производств»), 22.04.01 «Материаловедение и технологии материалов» (для всех направления подготовки), а также для аспирантов всех направлений подготовки.

Подготовлено на кафедре системотехники.

УДК 66.02.001.24:004.42(075)

ББК 24:32.97я7

ISBN 978-5-7882-2526-5

© Лаптева Т. В., Зиятдинов Н. Н., Лаптев С. А.,
Первухин Д. Д., 2018

© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2018

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	8
1. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ПАКЕТЕ MATHCAD	9
1.1. Вид курсора	13
1.2. Управляющие клавиши	14
1.3. Сохранение файлов	14
2. ВВОД ДАННЫХ	15
2.1. Числа	15
2.2. Переменные	15
2.3. Константы	16
2.4. Задание «Простейшие операции»	17
2.5. Задание «Вывод значений переменных»	18
2.6. Векторы и матрицы	19
2.7. Ранжированные переменные	20
2.8. Задание «Определение ранжированных переменных»	21
2.9. Ввод математических выражений	22
2.10. Вывод значений переменных	22
2.11. Сообщения об ошибках	23
3. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФУНКЦИЙ	24
3.1. Встроенные функции	24
3.2. Пользовательские функции	26
3.3. Задание «Определение функций пользователя»	26
3.4. Пользовательские операторы	27
3.5. Задание «Создание бинарного оператора»	28
3.6. Задание «Создание унарного оператора»	29
3.7. Элементы программирования в Mathcad	30
4. ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММ	33
4.1. Двумерные диаграммы	33
4.2. Задание «Формирование двумерной диаграммы»	34
4.3. Форматирование двумерной диаграммы	35
4.4. Задание «Форматирование диаграммы»	37



4.5. Просмотр графиков	38
4.6. Трехмерная графика	38
4.7. Задание «Отображение двумерных функций».....	39
4.8. Форматирование трехмерной диаграммы	40
4.9. Задание «Форматирование трехмерной диаграммы»	44
4.10. Задание «Отображение формы электронного облака при помощи параметрически связанных функций».....	47
5. ОФОРМЛЕНИЕ ДОКУМЕНТА.....	51
5.1. Ввод текста.....	51
5.2. Редактирование документа	51
5.3. Форматирование документа	52
5.4. Задание «Расчет давления газа»	54
5.5. Использование размерностей при вычислениях.....	57
5.6. Задание «Расчет теплообменника»	58
6. ОПЕРАЦИИ НАД МАТРИЦАМИ.....	62
Задание «Работа с матричными операциями»	64
7. ИНТЕГРИРОВАНИЕ В MATHCAD	72
7.1. Задание «Вычисление определенного интеграла»	72
7.2. Задание «Расчет автоклава».....	73
8. ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ В MATHCAD.....	81
Задание «Вычисление производной от функции».....	81
9. РЕШЕНИЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В MATHCAD.....	83
9.1. Решение задач в обычной математической постановке.....	83
9.2. Задание «Решение дифференциального уравнения первого порядка функцией odesolve»	85
9.3. Задание «Решение дифференциального уравнения высшего порядка функцией odesolve»	87
9.4. Задание «Решение дифференциального уравнения с разрывными функциями».....	88



9.5. Задание «Решение системы дифференциальных уравнений функцией <code>odesolve</code> »	90
9.6. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений в виде задачи Коши с понижением порядка	91
9.7. Задание «Решение системы дифференциальных уравнений с использованием понижения порядка производных»	94
9.8. Задание «Моделирование кинетики последовательно протекающих реакций».....	98
9.9. Задание «Моделирование кинетики химических реакций на основе жестких систем уравнений»	107
9.10. Решение краевой задачи.....	111
9.11. Задание «Моделирование кинетики последовательно протекающих реакций на основе краевой задачи».....	113
9.12. Задание «Уравнения с разрывными функциям».....	115
10. РЕШЕНИЕ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В MATHCAD ..	117
10.1. Решение одного уравнения	117
10.2. Задание «Поиск корня функции»	118
10.3. Задание «Расчет воздухоподогревателя парогенератора».....	119
10.4. Поиск корней полинома.....	124
10.5. Задание «Определение корней полинома».....	125
10.6. Решение систем уравнений и неравенств.....	125
10.7. Задание «Решение системы линейных уравнений»	128
10.8. Задание «Решение системы нелинейных уравнений».....	130
11. ОПТИМИЗАЦИЯ В MATHCAD.....	132
11.1. Постановка задачи оптимизации.....	132
11.2. Функции для решения задач оптимизации	134
11.3. Задача нелинейного программирования.....	135
11.4. Задача линейного программирования	136
11.5. Задание «Оптимизация плана выпуска продукции»	137
11.6. Задание «Поиск минимума нелинейной функции».....	139
11.7. Задание «Оптимизация режима работы реактора»	142
12. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ И АППРОКСИМАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ.....	148
12.1. Интерполяция данных	148
12.2. Аппроксимация данных	149



12.3. Задание «Интерполяция экспериментальных данных»	151
12.4. Задание «Решение обратной задачи кинетики».....	153
12.5. Задание «Двумерная интерполяция экспериментальных данных»	156
13. СИМВОЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ	158
13.1. Символьное вычисление выражений.....	158
13.2. Задание «Символьные вычисления и преобразования».....	160
13.3. Операции над матрицами.....	161
13.4. Задание «Символьные вычисления с матрицами»	162
13.5. Вычисление пределов функций	163
13.6. Поиск производных и первообразных.....	165
13.7. Решение алгебраических уравнений и неравенств.....	165
13.8. Задание «Символьное определение точки минимума функции»	165
14. ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ.....	168
14.1. Лабораторная работа «Оптимальное распределение пара в барабане котла».....	168
14.2. Лабораторная работа «Параметрическая идентификация модели теплоемкости вещества».....	173
14.3. Лабораторная работа «Расчет материально-теплого баланса замкнутой химико-технологической системы».....	179
14.4. Лабораторная работа «Условия Куна–Таккера».....	182
14.5. Лабораторная работа «Оптимизация стационарного режима замкнутой ХТС»	192
14.6. Лабораторная работа «Оптимальное проектирование и распределение нагрузки для ХТС параллельной структуры».....	198
14.7. Лабораторная работа «Обратная задача кинетики»	204
15. КОНТРОЛЬНЫЕ РАБОТЫ	213
15.1. Контрольная работа «Решение нелинейных алгебраических уравнений»	213
15.2. Контрольная работа «Поиск корней уравнений»	214
15.3. Контрольная работа «Символьные вычисления»	217
15.4. Контрольная работа «Решение отдельных дифференциальных уравнений»	223



15.5. Контрольная работа «Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений».....	225
15.6. Контрольная работа «Расчет ХТС».....	228
15.7. Контрольная работа «Описание экспериментальных данных»...	231
15.8. Контрольная работа «Проектирование оптимальной химико-технологической системы».....	233
15.9. Контрольная работа «Условия Куна–Таккера»	235
15.10. Контрольная работа «Решение задачи условной максимизации на основе условий Куна–Таккера»	237
15.11. Контрольная работа «Решение задачи условной оптимизации с ограничениями типа равенств на основе условий Куна–Таккера»	239
16. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ.....	241
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	246



ВВЕДЕНИЕ

Задачи, возникающие при математическом моделировании процессов химической технологии, сводятся к ряду элементарных: вычисление интегралов, решение дифференциальных и нелинейных алгебраических уравнений, исследование функций, статистический анализ экспериментальных данных и т.д.

В пособии на примере решения задач химической технологии показаны возможности универсального математического пакета Mathcad, разработанного фирмой MathSoft, Inc.

Пакет имеет гибкий современный интерфейс, предоставляет пользователю удобные средства для ввода данных и формирования условий задачи, что позволяет представить вычисления в естественной математической нотации, то есть в привычном пользователю представлении. Широкий спектр предоставленных пользователю шаблонов математических операций сосредоточен в девяти панелях инструментов согласно их предназначению, что значительно облегчает формирование математических выражений. Mathcad имеет свой командный язык, позволяющий создавать пользовательские вычислительные процедуры.

Принцип интерпретации математических выражений в ходе решения сформулированной задачи дает возможность пользователю легко видоизменять постановку задачи согласно требованиям исследования.

Инструменты наглядного вывода результатов вычислений (аналитические выражения, графики, диаграммы, динамические изображения) и средства подготовки отчетов позволяют формировать средствами пакета полноценные документы, форматируя текст и выражения согласно поставленным требованиям.

Пакет снабжен обширной справочной системой, имеет словарь терминов, демонстрационные примеры и встроенный интерактивный учебник.

Пособие рассчитано на пользователей, имеющих опыт работы в ОС Windows, поэтому действия, стандартные для всех приложений Windows, рассматриваться не будут.



1. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ПАКЕТЕ MATHCAD

Окно документа в Mathcad (рис. 1.1) разбито на страницы пунктирными линиями по горизонтали (1) и непрерывными по вертикали (2) исходя из параметров страницы, заданных в команде **Файл/Параметры страницы (File/Page Setup...)**.

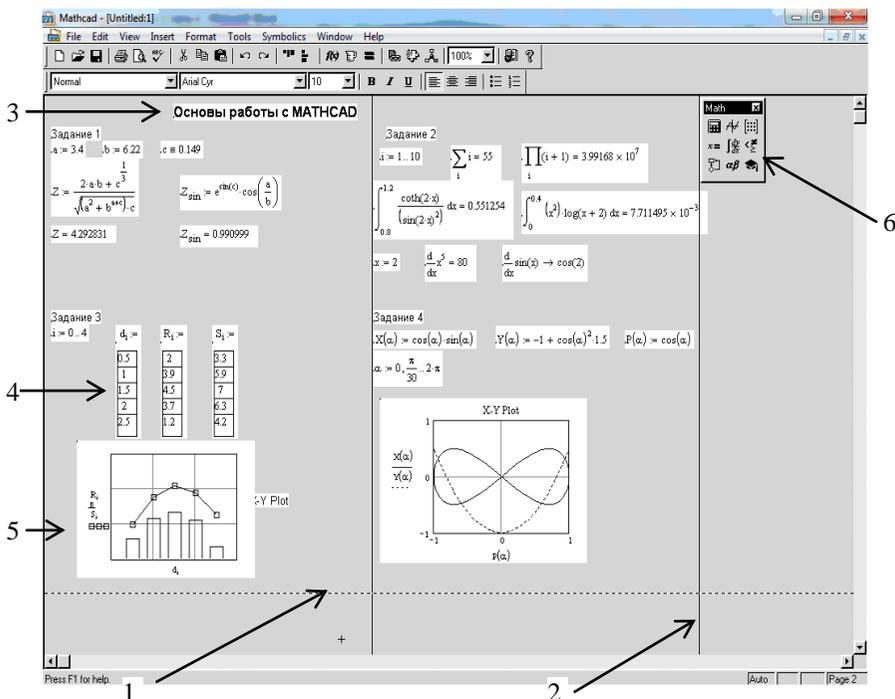


Рис. 1.1. Окно Mathcad

При работе в Mathcad документ строится из отдельных блоков: текстовых (3), формульных (4), графических (5).

Блоки можно перемещать и располагать в документе по желанию пользователя при помощи перетаскивания объекта мышью аналогично другим приложениям Windows. В процессе перемещения блоки могут располагаться на разных уровнях, налагаясь один на другой. При этом пользователь будет видеть части блоков, расположенных ниже, не закрытые вышерасположенными блоками. Расположение всех блоков и их гра-



ниц в документе можно увидеть, выполнив команду **Вид/Регионы (View/Regions)**. Пример отображения границ блоков приведен на рис. 1.1.

Если опция выключена, то видны границы только текущего блока – он заключен в рамку, в нем расположен курсор.

Математический пакет Mathcad проводит вычисление блоков документа последовательно слева направо, затем сверху вниз.

Вычисление блоков будет проводиться по мере их ввода или вывода на экран при просмотре документа, если включен режим **Автоматически вычислять (Automatic calculations)** меню **Инструменты/Вычисления (Tools/Calculate)**. В противном случае вычисления проводятся после выполнения команды **Вычислить (Calculate Now)** меню **Инструменты/Вычисления (Tools/Calculate)** либо нажатия клавиши **F9**.

Стандартная панель инструментов имеет, кроме аналогичных инструментов стандартных панелей других приложений Windows, специальные инструменты:

-  – **Мастер функций;**
-  – **Мастер размерностей;**
-  – пересчитать документ;
-  – расположить выделенные блоки в одной строке;
-  – расположить выделенные блоки друг под другом;
-  – вставить гиперссылку;
-  – вставить компонент из списка допустимых компонентов.

Кроме **Стандартной** панели инструментов окно может содержать панель **Форматирования** со стандартными для такой панели инструментами.

Окно документа может также содержать комплексную математическую панель (см. (6) на рис. 1.1), представленную на рис. 1.2.

Если она не отображена, подключить ее можно командой **Вид/Панели Инструментов/Математика (View/Toolbars/Math)**. Каждый из ее инструментов служит для вызова одной из панелей с узкоориентированными математическими инструментами:

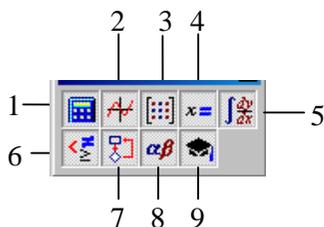


Рис. 1.2. Комплексная математическая панель



1. **Калькулятор (Calculator)** – шаблонами математических операций (рис. 1.3).

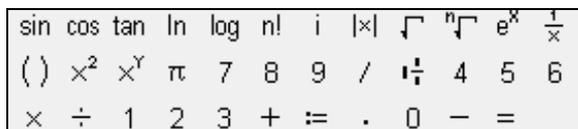


Рис. 1.3. Шаблоны панели **Калькулятор (Calculator)**

2. **График (Graph)** – шаблонами двумерных и трехмерных диаграмм (рис. 1.4).



Рис. 1.4. Панель **График (Graph)**

3. **Матрица (Matrix)** – шаблонами операций над матрицами и векторами (рис. 1.5).



Рис. 1.5. Панель **Матрица (Matrix)**

4. **Вычисления (Evaluation)** – шаблонами знаков присвоения значений переменным и получения значений переменных (рис. 1.6).

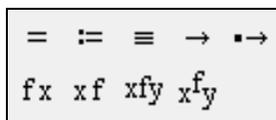


Рис. 1.6. Панель **Вычисления (Evaluation)**

5. **Математический анализ (Calculus)** – шаблонами производных, интегралов, суммирования, произведений и пределов (рис. 1.7).



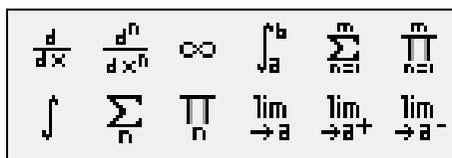


Рис. 1.7. Панель Математический анализ (Calculus)

6. **Булева алгебра (Boolean)** – шаблонами знаков сравнения и булевых операций (рис. 1.8).

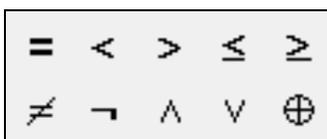


Рис. 1.8. Панель **Булева алгебра (Boolean)**

7. **Программирование (Programming)** – шаблонами команд встроенного языка программирования (рис. 1.9).

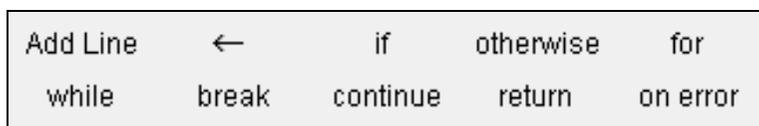


Рис. 1.9. Панель Программирование (Programming)

8. **Греческий (Greek)** – греческих символов;
 9. **Символьные (Symbolic)** – шаблонами согласования операций аналитических (символьных) вычислений (рис. 1.10).

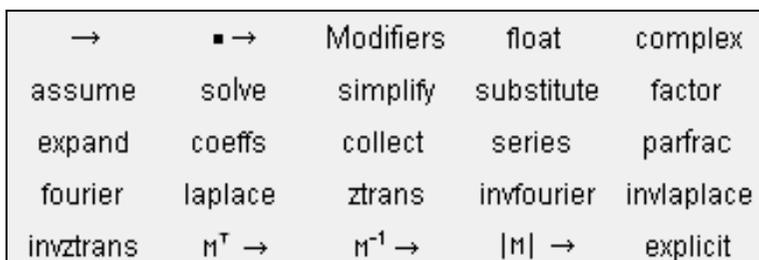


Рис. 1.10. Панель **Символьные (Symbolic)**



Подключение или отключение панелей инструментов проводится при помощи команды **Вид/Инструменты (View/Toolbars)**, скрыть любую панель также можно, вызвав команду **Скрыть (Hide)** ее контекстного меню.

Кроме панелей инструментов окно может содержать горизонтальную координатную линейку. Бегунки линейки указывают на начало первой строки, левую и правую границы текстового параграфа. Размерность шкалы линейки можно менять, используя команды ее контекстного меню: **Inches** – дюймы, **Centimeters** – сантиметры, **Points** – точки, **Picas** – пиксели. Подключение или отключение линейки проводится при помощи команды **Вид/Линейка (View/Ruler)**, скрыть ее можно также, вызвав команду **Hide** контекстного меню линейки.

В нижней части окна Mathcad, под горизонтальной полосой прокрутки, находится строка состояния. На ней располагается информация о режиме работы Mathcad, разграниченная разделителями (слева направо): контекстно зависящая подсказка о готовящемся действии; режим вычислений (автоматический **AUTO** или задаваемый вручную **Calc F9**); текущие режимы раскладки клавиатуры **CAP** и **NUM**; номер страницы, на которой находится курсор.

Для изменения масштаба отображения документа на экране используется команда **Вид/Масштаб (View/Zoom)** либо аналогичный инструмент *Стандартной* панели инструментов.

При работе с Mathcad можно использовать вызов команд из строки меню либо из контекстного меню блока, активизация которого проводится однократным щелчком правой кнопки мыши по нужному блоку.

1.1. Вид курсора

При перемещении по документу и по блокам документа курсор может принимать вид, подсказывающий пользователю, какие операции можно проводить в данной точке документа Mathcad. Вид курсора описан ниже:

+ красный крестообразный курсор перемещается по документу для указания местонахождения новых блоков;

| красная вертикальная черта – текстовый курсор – служит для указания места набора, вставки или удаления части текстового выражения;

┌, ┐ синий уголок, охватывающий часть выражения – математический курсор, служит для указания места вставки переменной в математичес-



ком шаблоне, также указывает к какой части математического выражения будет применена операция, знак которой в указанное место может ввести пользователь.

1.2. Управляющие клавиши

Для более удобной работы с блоками документа рекомендуется использовать следующие сочетания клавиш:

Shift+←/Shift+→ выделение части блока, охваченной математическим курсором;

→,←,↑,↓ перемещение любого курсора по документу (блоку);

Ins изменение разворота математического курсора;

Home/End перемещение курсора в начало/конец текущего блока;

Пробел растяжение математического курсора на одну позицию в выражении для указания части выражения, к которой будет применена операция, указанная следом.

1.3. Сохранение файлов

Сохранение созданного пользователем документа в файл проводится стандартным для Windows способом. Созданные в Mathcad файлы по умолчанию сохраняются в основанном на XML текстовом формате xtmcd. Также возможно сохранение в сжатом формате xtmcdz. Установить формат, используемый по умолчанию, можно командой **Инструменты/Настройки (Tools/Preferences)** на вкладке **Сохранить (Save)**.

С внедрением архитектуры XML появилась возможность конвертировать Mathcad-файлы в HTML-страницы. В этом случае блоки сохраняются в виде png-объектов. Настройки сохранения в HTML-странице устанавливаются командой **Инструменты/Настройки (Tools/Preferences)** на вкладке **Опции HTML (HTML Options)**.

Можно сохранить документ в формате rtf. В этом случае все формулы переводятся в векторные изображения, а текст остается доступным для редактирования.



2. ВВОД ДАННЫХ

2.1. Числа

Mathcad хранит все числа с двойной точностью с 17 знаками в мантиссе. Диапазон чисел, с которыми может проводить вычисления Mathcad, составляет от -10^{308} до 10^{308} . При работе с числовыми данными можно использовать различные формы представления чисел.

Десятичные числа:

- целые;
- с фиксированной десятичной точкой (в качестве разделителя целой и дробной части используется «.»);
- в экспоненциальной форме (для задания порядка после числа набирается «*10^», а затем значение порядка).

Кроме этого, Mathcad может хранить комплексные и мнимые числа, а также числа в других системах счисления.

2.2. Переменные

Задание имен переменных. Правила работы с Mathcad предполагают, что число начинается с цифры, а имя переменной или константы – с буквы. Кроме букв имя переменной может включать в себя цифры, знаки «∞», «^», знак подчеркивания, «%».

Обратите внимание на то, что Mathcad различает в именах регистр букв.

Существуют ограничения на имена переменных и констант:

- имя не может начинаться с цифры, знака подчеркивания, штриха или %;
- знак бесконечности может быть только первым в имени;
- все буквы в имени должны иметь один стиль и шрифт;
- имена не должны совпадать с именами встроенных функций, переменных и размерностей, иначе произойдет переопределение встроенного имени. В случае переопределения встроенные имена не могут использоваться по первоначальному назначению.

Имя переменной может содержать нижний уровень, то есть часть, визуально расположенную ниже имени, например k_{La} . В этом случае La не является индексом элемента матрицы, а позволяет задать удобную форму имени. Для задания такой формы имени перед частью имени нижнего уровня ставится точка «.» и вводится оставшаяся часть имени.



Имена встроенных функций можно просмотреть в окне команды **Вставка/Функция (Insert/Function...)** в списке **Имя функции (Function Name)**.

Имена встроенных переменных и их текущие значения перечислены на вкладке **Встроенные переменные (Built-In Variables)** команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/WorkSheet Options)**.

Имена, зарезервированные для единиц размерностей, перечислены в окне команды **Вставка/Единица измерения (Insert/Unit...)** в списке **Единица измерения (Unit)** при выбранной категории **Размерность (Dimension)**.

Задание значений переменным. Для ввода переменных нужно:

- задать имя определяемой переменной;
- ввести шаблон «:=» из панели **Калькулятор (Calculator)** для присвоения значения;
- задать значение переменной. В качестве значения могут использоваться числа или текстовые данные, матрицы или вектора, элементы которых заданы явно.

Вводить значение переменной удобнее, указав ее имя и задав знак «:=». Если переменная с таким именем не была определена, знак «:=» будет преобразован в знак присвоения значения переменной «:=». В том случае если переменная была определена ранее, будет выдано ее текущее значение. Такой подход позволяет корректно задавать имена новым переменным без риска случайного переопределения переменных, заданных ранее.

Вывод значений переменных. Для отображения значения переменной следует ввести ее имя и знак «:=». Точность отображения значений в Mathcad достигает 17 значащих цифр после запятой, однако по умолчанию выводятся 3 цифры после запятой.

2.3. Константы

Значения переменных доступны, начиная с того места в документе Mathcad, где было задано значение переменной, и правее и ниже по документу. В отличие от переменной, значение константы распространяется на весь документ. Однако в работе с константами есть ограничение – задать значение ей можно один раз.

Правила задания имен констант аналогично правилу задания имен переменных.



Для присвоения значения константе нужно:

- задать имя определяемой константы;
- ввести шаблон « \equiv » из панели **Вычисления (Evaluation)**;
- задать либо значение константы, либо имя переменной, используемой в Mathcad в качестве встроеной.

Как значение константы могут использоваться числа или текстовые данные, матрицы или вектора, элементы которых заданы явно. После присвоения константе значения оно становится известно во всем документе независимо от местонахождения блока с заданием константы.

2.4. Задание «Простейшие операции»

1. Загрузить Mathcad. Рассмотреть окно документа.
2. Рассмотреть, какие панели расположены в окне пакета. Оставить в окне только **Стандартную** панель инструментов. Отобразить комплексную математическую панель, используя соответствующую команду меню. Отобразить все панели, вызываемые из комплексной математической панели, щелкая мышью по соответствующим кнопкам в ней. Расположить математические панели в правой части экрана.
3. Ввести выражение, обращая внимание на вид курсора:
 $5+8$
нажать клавишу « \equiv ».
Попробуйте перетащить блок на новое место. Для этого подведите курсор к блоку; как только курсор примет вид , схватите блок, нажав левую кнопку мыши, и перетащите его на новое место.
4. Ввести выражение, используя для ввода знака « \equiv » клавишу « \equiv »,
 $a:=8$
5. Ниже введенного выражения ввести новое выражение
 $a+5$
нажать клавишу « \equiv ». Схватить полученный блок мышью и переместить его выше выражения, в котором проведено присвоение значения переменной a .
Как отреагировал Mathcad? Почему? Исправьте полученную ошибку.
6. Переместить курсор в нижнюю часть документа. Ввести выражение, используя для ввода знака « \equiv » клавишу « \equiv »,
 $b:=3$



Ниже вычислить результат выражения a/b .

Какое значение Вы получили? Почему?

7. Переместите курсор по документу ниже. Вычислите значение выражения

$$\frac{\sqrt{3} + b + 29 \cdot a}{a - \frac{4 \cdot b + 7}{11}}$$

Для указания части выражения, к которой нужно применить математическую операцию, охватывайте курсором эту часть, для чего нажимайте клавишу «пробел». После этого можно ввести знак операции.

8. Включить режим показа границ блоков, используя команду **Вид/Регионы (View/Regions)**. Рассмотреть вид документа. Отключить режим показа границ блоков.
9. Закрыть Mathcad без сохранения документа.

2.5. Задание «Вывод значений переменных»

1. Загрузить Mathcad.

Задать переменным с именами A, B, C, D значения, равные 1. Для задания значений использовать знак « \Leftarrow ».

После ввода знака « \Leftarrow » для переменных, чьи имена совпадают с названием единиц измерения физических величин, Mathcad будет выводить значение, заданное по умолчанию. Например, переменная A имеет заданное по умолчанию значение равное 1 ампер:

$$A = 1 \text{ A.}$$

Тем переменным, чьи имена не совпадают с названием единиц измерения, Mathcad знак « \Leftarrow » заменит на знак присвоения « \Leftarrow », после чего можно будет ввести нужное значение:

$$B := 1$$

$$C = 1 \text{ C}$$

$$D := 1$$

2. Ввести переменную с нижним уровнем в имени $\rho_{\text{ср}}$. Для этого с палитры **Греческие (Greek)** ввести символ ρ , ввести с клавиатуры символ «.», ввести ср. Mathcad отобразит двухуровневое имя $\rho_{\text{ср}}$.
Задать переменной значение 5.
3. Закрыть Mathcad без сохранения документа.



2.6. Векторы и матрицы

Mathcad поддерживает работу с векторами и двумерными матрицами.

Нумерация элементов матриц и векторов. Строки и столбцы матриц, а также элементы векторов нумеруются начиная с номера, задаваемого системной переменной **ORIGIN**. Ее значение по умолчанию равно 0.

Значение переменной можно задать на вкладке **Встроенные переменные (Built-In Variables)** команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/WorkSheet Options)** либо присвоить непосредственно в документе (рис. 2.1).

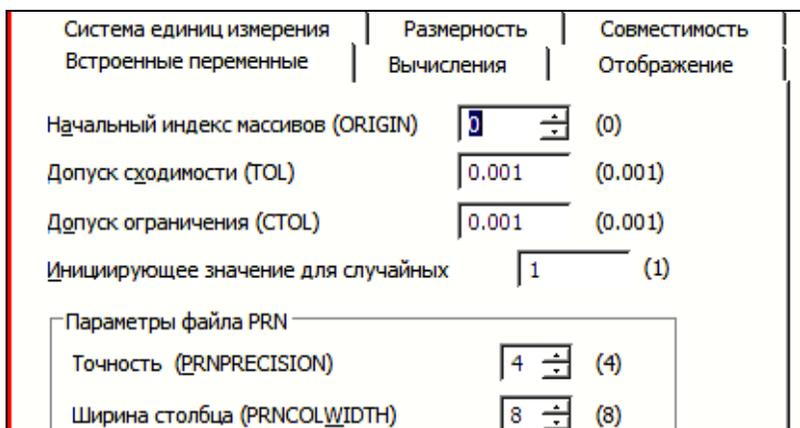


Рис. 2.1. Окно вкладки **Встроенные переменные (Built-In Variables)**

Задание значений элементам матриц и векторов. Для задания матрицы или вектора можно использовать несколько способов.

Способ 1. Использовать шаблон **Матрица или вектор (Matrix or vector)** панели **Матрица (Matrix)** или команду **Вставка/Матрица (Insert/Matrix)** – рис. 2.2.:

- в окне команды задать число строк **Rows** и столбцов **Columns**. Кнопка **ОК** вставит шаблон в документ и закроет окно, кнопка **Insert** вставит шаблон и оставит окно доступным;
- задать значения элементам, в качестве значений элементов матрицы могут использоваться числовые или текстовые данные, а также выражения, константы и переменные.





Рис. 2.2. Окно команды **Вставка/Матрица (Insert/Matrix)**

Указанным способом можно вводить матрицы размером до 100×100 элементов. Матрицы большего размера вводятся из файла функцией **READPRN**, либо матрицу можно составить из двух матриц при помощи функций **stack** (матрицы ставятся одна на одну сверху вниз) или **augment** (матрицы ставятся бок о бок слева направо).

Способ 2. Ввести матрицу, задав значения крайним элементам. Для задания элемента матрицы или вектора нужно:

- ввести имя элемента;
- нажать клавишу «[» либо использовать шаблон $\boxed{X_{ij}}$ из панели *Матрица (Matrix)*;
- ввести номер строки и номер столбца (если он есть), разделяя их запятой. Номера строки и столбца должны быть целыми числами;
- ввести «:=»;
- задать значение элемента.

Mathcad вычислит наибольшие номера строки и столбца, использовавшиеся при задании элементов, и определит по ним размер матрицы или вектора. Значения элементов, не заданных пользователем, будут автоматически заданы как нулевые.

2.7. Ранжированные переменные

Часто в вычислениях используют переменные, принимающие значения из числового ряда. Такие переменные называют ранжированными. При этом такая переменная не является вектором. Ранжированные переменные удобно использовать при выполнении однотипных операций над элементами матриц и векторов.

Например, ранжированная переменная, заданная в виде $j:=0,3..27$ имеет значения от 0 до 27 с шагом 3.

Для задания ранжированной переменной нужно:

- задать ее имя;
- ввести «:=»;
- задать первое значение последовательности;



- если значения переменной задаются с шагом, отличным от 1, ввести запятую и второй член ряда, при значениях ряда с шагом 1 второй член не вводится;
- ввести знак «;», он сразу примет вид «..»;
- ввести последний член числового ряда.

Например, чтобы ввести упомянутую переменную j , нужно ввести $j:=0,3$, затем нажать клавишу «;» и набрать число 27.

2.8. Задание «Определение ранжированных переменных»

1. Загрузить Mathcad.
2. Задать следующие переменные и константы: переменную a со значением 10, для чего ввести имя a , шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)** и число 10. Получим блок вида
 $a:=10$
3. Задать в строке ниже переменную b со значением 5, для чего ввести имя b , нажать клавишу с «:» и набрать число 5. Получим блок
 $b:=5$
4. Задать в следующей строке ранжированную переменную g , значениями которой является последовательность чисел от 0 до 12 с шагом 5. Для этого ввести имя g , нажать клавишу с «:» и ввести число 0 (это первое значение переменной), нажать клавишу с «;» и ввести число 5 (это второе значение), нажать клавишу с «;» и ввести число 12 (это последнее значение переменной), получим
 $g:=0,5..12$
5. Задать в следующей строке матрицу 2×2 вида

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Для этого ввести шаблон матрицы с панели **Матрица (Matrix)**, указать число строк 2, число столбцов 2, в полученный шаблон ввести значения.

6. В строках ниже вывести значения заданных выше переменных и констант. Для вывода значения переменной a ввести имя « a » и нажать клавишу со знаком «=». Mathcad выведет значение. Аналогичным образом вывести значения переменной b :

$$a=10$$

$$b=5$$



Вывод значений переменной r проводится аналогично:

$r =$

0
5
10

7. Закрывать Mathcad без сохранения документа.

2.9. Ввод математических выражений

Математическое выражение в общем виде можно представить как <операнд1><знак операции><операнд2>.

В качестве операндов могут выступать любые из известных в Mathcad типов данных, соответствующих используемой операции.

В качестве знаков операций используются шаблоны, приведенные в панелях **Калькулятор (Calculator)**, **Вычисление (Evaluation)** и **Булева алгебра (Boolean)**. Для части знаков операций удобнее использовать клавиши клавиатуры, описанные в табл. 2.1.

Таблица 2.1

Соответствие клавиш и знаков операций

Сложение	+	возведение в степень	^
Вычитание	-	квадратный корень	\
Умножение	*	присвоение значения переменной	:
Деление	/	присвоение значения константе	~

Приоритет выполнения операций – стандартный для математических выражений. Для изменения приоритета операций используются скобки «(», «)».

Прервать длительные вычисления можно клавишей Esc.

Для запрета вычисления какого-либо математического блока необходимо вызвать щелчком правой кнопки мыши контекстное меню блока и выбрать команду **Отключить вычисление (Disable Evaluation)**.

2.10. Вывод значений переменных

Для вывода в документе значений переменных и констант нужно:

- установить курсор правее или ниже места определения искомой переменной,
- ввести имя требуемой переменной или константы,
- ввести знак «=». Правее Mathcad выведет значение.



Вид полученного значения зависит от того, к какому типу данных принадлежало значение переменной. Например, на рис. 2.4 приведен пример присвоения значений переменным и вывода их значений в документе.

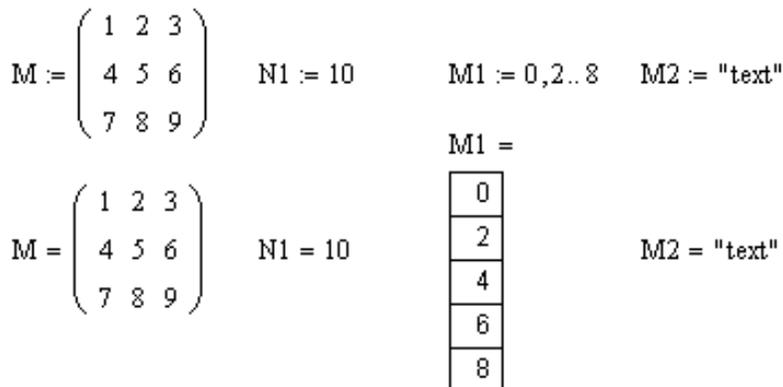


Рис. 2.4. Присвоение и вывод значений переменных

2.11. Сообщения об ошибках

Если по той или иной причине Mathcad не сможет произвести расчет части формулы, то она будет окрашена в красный цвет и ниже нее в прямоугольнике желтого цвета появится сообщение о причинах возникшей трудности. Так, например, если вы попытаетесь произвести неопределенную операцию деления на ноль, Mathcad выдаст следующее сообщение:

Divide by zero in function evaluation (При вычислении функции происходит деление на ноль).

В большинстве случаев содержащейся в сообщении краткой характеристики причин ошибки бывает вполне достаточно, чтобы ее устранить. Однако если вы не сможете разобраться в смысле сообщения, то нажмите клавишу **F1**. Будет открыта статья справочной системы, посвященная причинам и способам разрешения возникшей ошибки.

Заметим, что Mathcad проводит поиск ошибок в выражении постепенно. Поэтому, устранив первую ошибку, вы можете увидеть сообщение о следующей ошибке в том же выражении.



3. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФУНКЦИЙ

Общий вид записи функции следующий:

[имя1:=]<имя_функции>([<имя2>, <имя3>, ..., <имяN>]),

где

имя1 – имя переменной, которая получает возвращаемое функцией значение;

имя2, имя3, ..., имяN – аргументы функции: имена переменных или констант, либо значения, заданные в явном виде.

3.1. Встроенные функции

Для облегчения записи функции предназначен **Мастер функций**, кнопка которого $f(x)$ расположена на *Стандартной* панели инструментов.

После вызова **Мастера функций** на экране появляется окно **Вставка функции (Insert/Function...)** (рис. 3.1), где из списка **Категории функций (Function Category)** выбирается категория функций, а из списка **Имя функции (Function Name)** – имя функции.

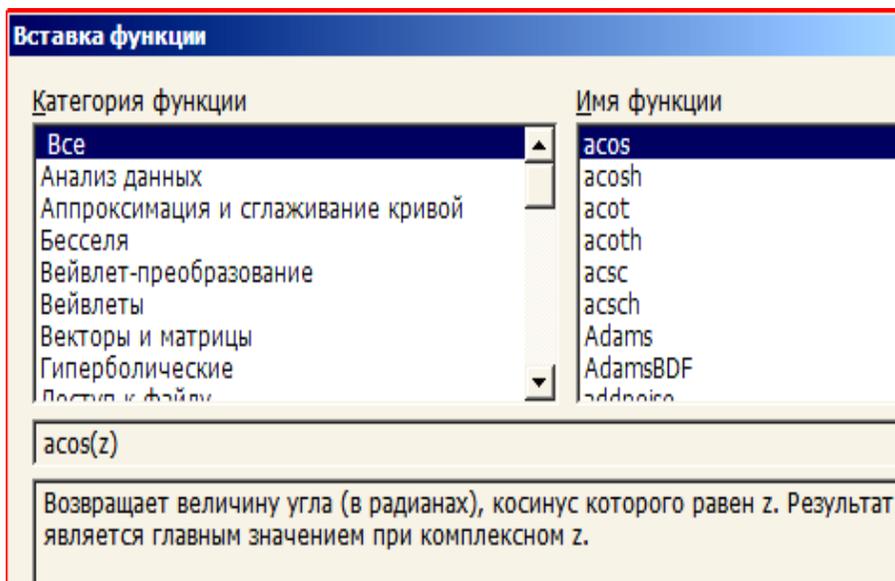


Рис. 3.1. Вид окна **Мастера функций**



В нижней части окна приводится описание синтаксиса записи функции, ее параметров и возвращаемого значения.

При вставке функции в документ используется одна из возможностей:

- кнопка **ОК**, щелчок по которой влечет вставку шаблона функции с закрытием окна **Мастера функций**;
- кнопка **Вставка (Insert)**, после щелчка по которой в документ вставляется шаблон функции, и окно **Мастера функций** остается доступным для продолжения выбора и вставки функций.

Многие функции имеют возможность выбора математического метода, реализующего функцию. Для его выбора нужно в документе вызвать контекстное меню функции и указать необходимые параметры. Если в контекстном меню функции отмечена опция **Автовыбор**, то система применяет для решения задачи метод, установленный по умолчанию.

Замечание 1. При проведении сравнения чисел, а также вычисления их целой или дробной части важен учет точности представления числа. По умолчанию Mathcad считает два числа x и y равными, если выполняется условие

$$2 \cdot \left| \frac{x - y}{x + y} \right| < 10^{-12}.$$

Операции выделения целой, дробной части числа, ближайшего целого к числу по умолчанию анализируют только 12 значащих цифр после десятичной точки.

Замечание 2. Mathcad может при анализе чисел использовать процессорную точность. В этом случае числа будут считаться равными, если разность между ними составит число, лежащее в диапазоне $[-10^{-307}; 10^{-307}]$.

Для подключения такой возможности необходимо отметить опцию **Использовать строгое равенство при сравнении и усечении (Use exact equality for comparison and truncation)** вкладки **Вычисления (Calculation)** окна команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/ Worksheet Options)**.

Замечание 3. Mathcad может в вычислениях допускать проведение операции деления на 0 для действия 0/0.

Для этого следует отметить опцию **0/0** на вкладке **Вычисления (Calculation)** окна команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/ Worksheet Options)**.



3.2. Пользовательские функции

В том случае, если нужно создать пользовательскую функцию, она определяется следующим образом:

$\langle \text{имя функции} \rangle (\langle \text{имя1} \rangle, \dots, \langle \text{имяN} \rangle) := \langle \text{Математическое выражение} \rangle$.

Имя функции задается по правилам задания имен переменных, $\text{имя1}, \dots, \text{имяN}$ – аргументы функции. Аргументы могут быть заданы в виде имен переменных либо непосредственно в виде чисел. Математическое выражение обычно зависит от аргументов функции $\langle \text{имя1} \rangle, \dots, \langle \text{имяN} \rangle$, но не обязательно.

При записи математических выражений пользовательских функций можно употреблять имена переменных, определенных выше определения функции. В качестве значений этих переменных при вызове функции будут использоваться те значения, что были заданы выше места определения функции.

Также при записи пользовательских функций можно вызывать как пользовательские, так и встроенные функции. Однако не все встроенные функции доступны для использования в пользовательских функциях.

Пользовательская функция может представлять собой программу, написанную средствами программирования Mathcad.

Mathcad не различает имен переменных и функций: если сначала определить функцию $f(x)$, а потом переменную f , то в оставшейся части документа будет утерян доступ к функции $f(x)$, и наоборот.

3.3. Задание «Определение функций пользователя»

Зададим функцию $f(x) = x^2$, определенную на множестве $X = \{x : -1 \leq x \leq 1\}$, и проверим ее выпуклость.

Для выявления выпуклости функции построим прямую, проходящую через точки $\{-1;1\}, \{1;1\}$. Эта функция имеет вид $f1(x) = 1$.

1. Загрузить Mathcad.

2. Задать пользовательскую функцию с именем f следующей формулой:

$$f(x) := x^2.$$

3. При задании функции после ввода имени f нужно ввести открывающуюся скобку, имя аргумента функции x и закрывающуюся скобку. Затем ввести шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)** и формулу, определяющую функцию.



4. Задать пользовательскую функцию с именем `f1` формулой $f1(x) := 1$.
5. Сохранить файл под именем **Квадратичная функция**.

3.4. Пользовательские операторы

Оператор отличается от функции в Mathcad тем, что записывается непосредственно в математическом выражении как знак операции. Mathcad позволяет создавать собственные операторы. Для этого служат шаблоны панели **Вычисления (Evaluation)**.

В Mathcad существуют операторы двух типов: унарные и бинарные. Действие унарных зависит от одной переменной, и к ним относятся, например, оператор квадратного корня или модуля числа. При этом Mathcad поддерживает как префиксные, так и постфиксные унарные операторы.

Бинарный оператор определяется в общем случае функцией двух переменных.

Для создания пользовательского унарного оператора необходимо выполнить следующие действия:

- задать имя будущего оператора;
- указать в скобках имя переменной, преобразованием которой определяется действие оператора;
- ввести оператор присваивания и записать то математическое действие, которое должен выполнять создаваемый оператор. Описанные действия приведут к заданию функции пользователя;
- для создания префиксного оператора выбрать шаблон **fx** панели **Вычисления (Evaluation)**, для создания постфиксного оператора служит шаблон **xf** той же панели. Mathcad отобразит шаблон для ввода оператора и операнда в виде ■■;
- в зависимости от того, префиксный или постфиксный оператор создан, следует вставить символ, соответствующий оператору, либо в первый шаблон, либо во второй;
- после ввода « \Rightarrow » Mathcad приступит к вычислениям и выдаст полученное решение.

Замечание 4. Учитывая то, что в математике принято операторы обозначать специальными символами, лучше для этого использовать подходящий значок, нежели слово. Для того чтобы ввести в документ некоторый редкий математический значок, нужно вызвать команду **Help/QuickSheets (Помощь/Шпаргалки)**, далее открыть **Extra Math**



Symbols (Дополнительные математические символы). При этом откроется таблица, содержащая 55 символов, применяющихся для обозначения различных операций в математике. Любой из символов можно копировать и вставлять в документ для использования.

Задание бинарного оператора ничем принципиально не отличается от определения унарного, с той разницей, что при формировании соответствующей функции пользователя задаются не один, а два аргумента. Для формирования бинарного оператора служат инструменты $x^f y$ и $x^f y$ панели **Вычисления (Evaluation)**.

Инструмент $x^f y$ при использовании формирует шаблон в виде $\blacksquare \blacksquare \blacksquare$, где в первое слева знакоместо вводят значение первого аргумента, во второе – имя операнда, в третье – значение второго аргумента.

Инструмент $x^f y$ при использовании формирует шаблон вида



где в левое нижнее знакоместо вводят значение первого аргумента, в правое нижнее знакоместо – значение второго аргумента, в верхнее – имя операнда.

3.5. Задание «Создание бинарного оператора»

Создать оператор Av, вычисляющий среднее для двух чисел.

1. Загрузить Mathcad.
2. Создать пользовательскую функцию с именем Av, аргументами которой являются переменные x и y. Функция должна вычислять среднее между значениями этих переменных.

Для этого набрать

$$Av(x,y):=0.5 \cdot (x+y)$$

3. Переместить курсор в следующую строку и вычислить среднее между числами 171 и 39. Для этого из панели **Вычисления (Evaluation)** вызвать инструмент $x^f y$, после чего Mathcad выдаст шаблон в виде $\blacksquare \blacksquare \blacksquare$.

В левый шаблон в виде \blacksquare ввести число 39, в правый – число 171, в центральный шаблон в виде \blacksquare ввести имя функции Av.

Нажать клавишу « \Rightarrow ».

Mathcad выдаст

$$39 Av 171=105$$

4. Сохранить документ под именем **Оператор**.



3.6. Задание «Создание унарного оператора»

Создать оператор \exists , выдающий в качестве результата признак того, делится ли число на 4. Если число делится на 4, то оператор должен выдать 1, в противном случае – выдать 0.

Пояснение к заданию. Для определения оператора необходимо создать соответствующую его действию функцию пользователя. Создаваемая функция должна определять, равен ли нулю результат деления числа x на 4.

Для этого воспользуемся встроенной функцией `if`. Функция имеет 3 аргумента: первый – логическое условие. Если оно истинно, то выполняется действие, записанное на месте второго аргумента, в противном случае – действие, записанное на месте третьего аргумента.

Согласно условию задания, в качестве второго аргумента будем использовать число 1, в качестве третьего – число 0.

Запишем логическое условие. Число делится на 4, если дробная часть результата деления будет равна 0.

Для получения остатка от деления вычтем из результата деления целую часть результата деления. Для получения целой части любого числа Mathcad предлагает функцию `trunc`.

Тогда условие примет вид

$$\frac{x}{4} - \text{trunc}\left(\frac{x}{4}\right).$$

Выполнение задания

1. Открыть Mathcad. Открыть документ **Оператор**.
2. Создать пользовательскую функцию с именем \exists с одним аргументом x . Функция должна определять четность заданного числа.

Для задания имени функции вызвать команду **Помощь/Шпаргалки (Help/QuickSheets)**, открыть **Дополнительные математические символы (Extra Math Symbols)**.

3. Выбрать символ \exists , скопировать его и вставить в документ, правее него указать в скобках имя аргумента x и ввести знак присвоения. Mathcad отобразит

$$\exists(x) := \blacksquare$$

4. Ввести в шаблон текста функции функцию `if`. Для этого установить курсор в шаблон правее знака «:=» и вызвать **Мастер функций** инструментом $\boxed{f(x)}$.



5. Включить отображение всех функций, найти в перечне функций функцию с именем `if` и вставить ее. Mathcad отобразит $\exists(x) := \text{if}(\blacksquare, \blacksquare, \blacksquare)$

6. Установить курсор в первый шаблон и ввести логическое условие $\left(\frac{x}{4} - \text{trunc}\left(\frac{x}{4}\right)\right) = 0$

Для этого ввести выражение $\frac{x}{4} - \text{trunc}\left(\frac{x}{4}\right)$, после чего заключить его в скобки и ввести знак `=` с панели **Булева алгебра (Boolean)** и ввести 0. Mathcad отобразит требуемое выражение.

7. Ввести в шаблон второго аргумента число 1, в шаблон третьего – число 0. В результате должно получиться выражение вида

$$\exists(x) := \text{if}\left[\left(\frac{x}{4} - \text{trunc}\left(\frac{x}{4}\right)\right) = 0, 1, 0\right]$$

8. Переместить курсор в следующую строку и проверить делятся ли на 4 числа 171 и 232. Для этого из панели **Вычисления (Evaluation)** вызвать инструмент `xf`, после чего Mathcad выдаст шаблон в виде $\blacksquare \blacksquare$.

9. В левый шаблон \blacksquare ввести число 171, в правый – скопировать символ \exists . Нажать клавишу `<=>`.

Mathcad выдаст

$$171\exists = 0$$

10. Переместить курсор в следующую строку и из панели **Вычисления (Evaluation)** вызвать инструмент `xf`, после чего в левый шаблон \blacksquare ввести число 232, в правый – скопировать символ \exists . Нажать клавишу `<=>`.

Mathcad выдаст

$$232\exists = 1$$

11. Сохранить документ.

3.7. Элементы программирования в Mathcad

Построение пользовательских функций в Mathcad часто требует проведения значительного объема вычислений. В этом случае запись таких вычислений в виде одного математического выражения может потребовать либо больших предварительных преобразований, либо не-



возможна вообще. В этом случае удобно записать последовательность вычислений в виде небольшой программы.

Программа в Mathcad представляет собой последовательность операторов, объединенных в пользовательскую функцию. Для написания программ в Mathcad служат инструменты панели *Программирование (Programming)* (рис. 1.9).

Инструмент добавления строки программы. Для добавления новой строки в программу необходимо использовать инструмент **Add line** панели *Программирование (Programming)*. Все строки программы слева соединены единой линией. Отдельные линии соответствуют циклам.

Оператор присвоения. Для присвоения переменным значений предусмотрен оператор \leftarrow . Использование других шаблонов запрещено. Слева от оператора указывается имя переменной, справа – математическое выражение, которое может включать известные функции и состоять из нескольких операторов, объединенных общей линией.

Условный оператор. Условный оператор вставляется инструментом **if** панели *Программирование (Programming)* и представлен шаблоном ■ if ■.

В правый шаблон ■ вставляется условие, записанное при помощи инструментов сравнения панели *Булева алгебра (Boolean)*. В левом шаблоне указывается оператор, который следует выполнить, если условие истинно.

В том случае, если нужно выполнение действия, когда условие ложно, используется инструмент ■ otherwise. Инструмент вставляется непосредственно после условного оператора. В левой позиции указывается оператор, который нужно выполнить, если условие, указанное в операторе **if**, ложно.

Операторы циклов. Предусмотрено два оператора цикла: **for** и **while**.

Оператор **for** – инструмент **for** ■ \in ■. После слова **for** указывается имя ранжированной переменной, а после знака \in – область ее определения. Затем указывается один или несколько операторов, соединенных линией. Эти операторы выполняются столько раз, сколько значений имеет ранжированная переменная.

Оператор **while** – инструмент **while** ■. После слова **while** указывается условие, а затем один или несколько операторов, соединенных линией. Эти операторы выполняются, пока условие истинно.



Оба оператора вставляют в программу еще одну строку для ввода оператора, выполняемого в цикле. В свою очередь, в эту строку можно при помощи инструмента **Add line** вставить несколько строк для выполнения в цикле нескольких операторов. Эти операторы будут соединены слева собственной линией, отличной от линии программы.

Пропуск шага и прерывание циклов. Для пропуска шага в операторах цикла используется оператор **continue**. Он используется совместно с оператором условия **if** и вставляется в левую позицию оператора. Оператор **continue** вызывает пропуск шага цикла, который соответствует моменту, когда условие в операторе **if** истинно.

Для прерывания цикла в операторах цикла используется оператор **break**. Он используется совместно с оператором условия **if** и вставляется в левую позицию оператора. Оператор **break** вызывает прекращение цикла, как только условие в операторе **if** становится истинным.

Прерывание программы. Для прерывания программы используется оператор **return** – инструмент **return** ■. Справа от оператора указывается выражение, значение которого возвращает программа. Оператор может использоваться в левой части условного оператора.

Формирование функции, содержащей программу, проводится следующим образом:

- задаются имя функции, ее аргументы в скобках, вводится знак присвоения «:=» обычным для функций образом;
- при помощи инструмента **Add line** панели **Программирование (Programming)** добавляется такое количество строк, какое нужно для формирования программы;
- в каждой из строк записываются необходимые для работы функции и операторы, не допускается оставлять в программе пустые строки;
- последняя строка служит для указания имени переменной, которая содержит возвращаемое значение.

Возвращаемое значение может быть как отдельным числом, так и иметь матричное представление. Все записанные в программе выражения должны опираться либо на аргументы функции, либо на числовые константы, либо на переменные, описанные до формирования функции.



4. ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММ

4.1. Двумерные диаграммы

Для создания двумерных диаграмм используются либо команды меню **Вставка/График (Insert/Graph)**, либо инструменты панели **График (Graph)** – рис. 4.1.



Рис. 4.1. Инструменты создания двумерных диаграмм

Каждый из инструментов вставляет в документ шаблон двумерной диаграммы, где в пустые области следует ввести выражения для соответствующих параметров диаграммы.

Mathcad поддерживает два типа двумерных диаграмм:

- график X-Y (X-Y Plot) – декартов график, инструмент 
- полярный график, инструмент 

Декартов график. График строится, как правило, в три шага:

- 1) сформировать пользовательскую функцию одной переменной либо ввести в шаблон заготовки диаграммы запись функции в явном виде рядом с осью ординат;
- 2) сформировать вектор значений аргумента и ввести имя вектора в шаблон заготовки диаграммы рядом с осью абсцисс;
- 3) построить диаграмму.

Последний шаг, в свою очередь, включает следующие действия:

- установить курсор в документе в то место, где нужно расположить диаграмму;
- щелкнуть по инструменту **График X-Y** или выбрать соответствующую команду в меню **Вставка (Insert)**. В документе появится заготовка диаграммы – прямоугольник с шаблонами для указания функции у левой и аргумента у нижней стороны соответственно (рис. 4.2);

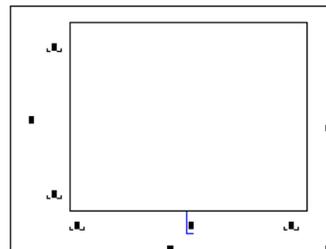


Рис. 4.2. Шаблон создания декартова графика



– вставить в шаблоны заготовки диаграммы имя функции (или вектора), имя аргумента.

В заготовке есть другие шаблоны, которые можно не заполнять:

- диапазон изменения значений по оси ординат;
- диапазон изменения аргумента. MathCad задаст диапазон изменения аргумента от -10 до 10 и рассчитает диапазон изменения функций.

Замечание. Если нужно отобразить на диаграмме более одной функции, то их имена или выражения вводятся в шаблон для имени функции через запятую.

Для формирования дополнительной оси ординат используется опция *Включить дополнительную ось Y (Enable secondary Y axis)* окна команды **Формат/График/График X-Y (Format/Graph/X-Y Plot)**. После выполнения команды в шаблоне графика становится доступна дополнительная ось ординат.

Диаграмма отображается в шаблоне после вывода курсора из зоны диаграммы (автоматический режим расчетов) или после нажатия клавиши F9 (ручной режим расчетов).

Параметрический декартов график используется для отображения зависимости значений двух функций одного аргумента друг от друга. Если ранее диапазон изменения аргумента не был определен, он будет задан по умолчанию как $[-10;10]$.

Полярный график. Используется, если аргумент представляет собой угол, изменяющийся от 0 до 360 , а значения функции имеют период. Выражения для функций вводятся в шаблоны заготовки диаграммы аналогично декартову графику.

4.2. Задание «Формирование двумерной диаграммы»

Отобразить функции $f(x) = x^2$ и $f1(x) = 1$, определенные на множестве $X = \{x: -1 \leq x \leq 1\}$.

1. Загрузить Mathcad. Открыть файл **Квадратичная функция**.
2. Установить курсор ниже блоков с определением функций и ввести шаблон декартова графика. В шаблон под осью абсцисс ввести имя x , в шаблон левее оси ординат – имя $f(x)$, ввести запятую, ввести имя $f1(x)$.
3. Изменить область определения функций. Для этого установить курсор в позицию на шаблоне диаграммы, где выведено значение левой



границы x . Это – число -10 . Стереть это число и ввести число -1 . Аналогично изменить правый предел для x на значение 1 .

4. Значение верхнего предела оси ординат задать как 1.5 . Диаграмма примет вид, представленный на рис. 4.3.

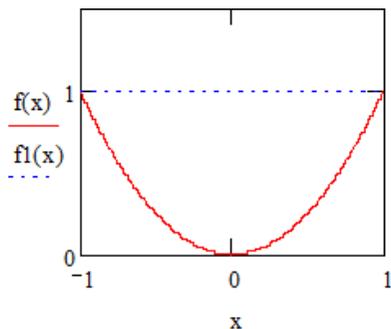


Рис. 4.3. Вид диаграммы

5. Сохранить файл. Закрыть Mathcad.

4.3. Форматирование двумерной диаграммы

Чтобы приступить к форматированию, можно дважды щелкнуть по диаграмме мышью либо вызвать команду **Формат/График/График X-Y (Format/Graph/X-Y Plot)**. Окно команды имеет ряд вкладок, которые рассмотрим ниже (рис. 4.4).

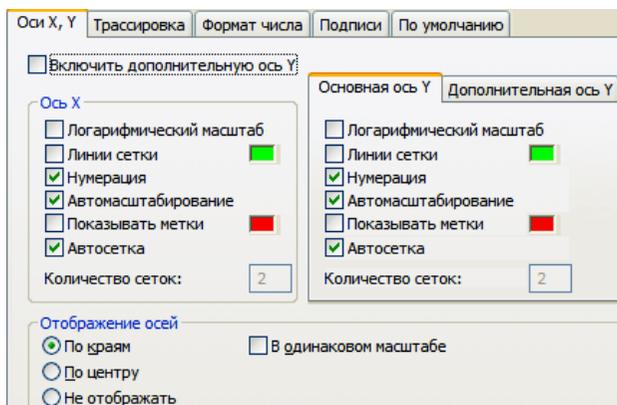


Рис. 4.4. Вкладки окна форматирования двумерной диаграммы



Вкладка **Оси X,Y (X,Y Axes)** позволяет для каждой из осей X и Y включить/выключить следующие опции:

- *Логарифмический масштаб (Log scale)* – логарифмическая шкала;
- *Линии сетки (Grid lines)* – отображение линий сетки;
- *Нумерация (Numbered)* – оцифровка оси;
- *Автомасштабирование (Auto scale)* – автоматический выбор параметров шкал;
- *Показывать метки (Show markers)* – выводит метки точек, координаты которых на оси записаны пользователем в шаблоны у оси. Значения выводятся на график, на ось будут опущены перпендикуляры;
- *Автосетка (Auto grid)* – число линий сетки задано по умолчанию. При отключении опции в поле *Количество сеток* можно задать число линий сетки по оси.

Область **Отображение осей (Axis Style)** – задает вид осей: *По краям (Boxed)* – оси образуют прямоугольник, пересекаясь в точках с минимальными значениями; *По центру (Crossed)* – оси пересекаются в точке (0;0); *Не отображать (None)* – оси не отображаются; *В одинаковом масштабе (Equal scales)* – одинаковый масштаб по обеим осям.

Вкладка **Трассировка (Traces)** – позволяет оформить линии графиков на диаграмме. Информация об оформлении кривых выводится в списке, где «кривая n» – имя кривой с номером n.

Ниже списка приводятся поля, в которых можно задать другое оформление вида кривой:

- Обозначение в легенде (Legend label) – имя кривой;
- Частота символов (Symbol Frequency) – плотность размещения символов на кривой;
- Символ (Symbol) – маркер точек на кривой;
- Ширина символа (Symbol Weight) – толщина символа;
- Линия (Line) – тип линии;
- Толщина линии (Line Weight) – толщина линии;
- Цвет (Color) – цвет линии;
- Тип (Type) – тип отображения кривой: ломаная, гладкая, ступенчатая, точечная и др.

Ниже расположены опции:

- *Скрыть аргументы (Hide arguments)* – скрывает аргументы осей на графике,
- *Скрыть легенду (Hide legend)* – скрывает легенду.

Окно вкладки приведено на рис. 4.5.



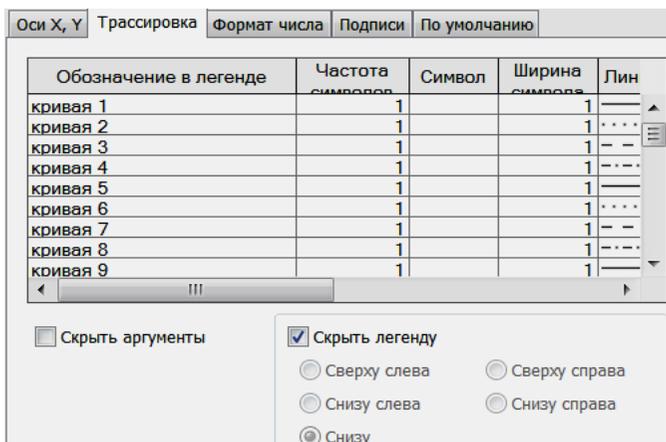


Рис. 4.5. Вкладка Трассировка (Traces)

Вкладка **Формат числа (Number Format)** – аналогично форматированию числа в выражении, задает формат нумерации на осях.

Вкладка **Подписи (Labels)** – для задания подписей на графике.

Вкладка **По умолчанию (Defaults)** – позволяет задавать настройки, которые Mathcad будет использовать по умолчанию.

Размеры блока с диаграммой изменяются аналогично другим приложениям Windows.

4.4. Задание «Форматирование диаграммы»

Отформатировать полученную в файле **Квадратичная функция** диаграмму, приведя ее к виду, данному на рис. 4.6.

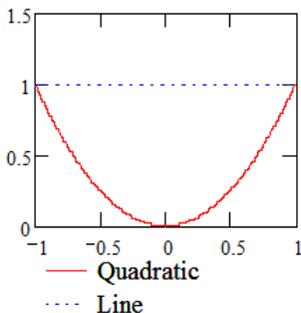


Рис. 4.6. Вид диаграммы после форматирования



1. Загрузить Mathcad. Открыть файл **Квадратичная функция**.
2. Двойным щелчком по диаграмме открыть окно форматирования.
3. На вкладке **Оси X,Y (X,Y Axes)** снять отметки с опций *Автосетка (Auto grid)* для обеих осей.
4. Задать количество линий сетки по оси аргумента равное 4, а по оси функции – равное 3.
5. На вкладке **Трассировка** задать имя первой функции Quadratic, второй – Line.
6. Отметить опцию *Скрыть аргументы*, снять отметку с опции *Скрыть легенду*, указав, что легенда выводится внизу диаграммы.
7. Сохранить файл. Закрыть Mathcad.

4.5. Просмотр графиков

Масштаб. Для изменении масштаба служит инструмент **Масштаб (Zoom)** панели **График (Graph)**. После щелчка по инструменту нужно на графике указать мышью масштабируемую область и выбрать нужный режим: zoom – увеличить, unzoom – уменьшить.

Трассировка. Для любой точки двумерной диаграммы можно получить значения ее координат X-Координата (X-Value), Y-Координата (Y-Value). Для этого нужно щелкнуть по диаграмме, затем щелкнуть по инструменту **Трассировка (Trace...)** панели **График (Graph)** либо вызвать команду **Формат/График/Трассировка (Format/Graph/ Trace...)**, а затем щелкнуть по интересующей точке на диаграмме.

В появившемся окне трассировки будут выводиться координаты указанной точки. При передвижении мыши по диаграмме в окне выводятся новые координаты. Координаты можно скопировать (кнопки **Копировать X (Copy X)**, **Копировать Y (Copy Y)** и т.д.).

4.6. Трехмерная графика

Mathcad поддерживает 6 типов трехмерных диаграмм:

- Поверхность;
- Линии уровня;
- Векторное поле;
- Столбчатая диаграмма;
- Точки данных;
- Лоскутный график (трехмерный график разброса).



На диаграмме выводятся значения элементов двумерной матрицы, номера строк и столбцов которой указывают на координаты точек, а значения элементов – на значения функции в этих точках.

На диаграммах могут отображаться параметрически связанные функции, их имена вставляются в шаблон графика в скобках через запятую.

Для вставки диаграмм в документ можно использовать шаблоны панели **График (Graph)** или команды меню **Вставка/График (Insert/Graph)**. В полученном шаблоне трехмерной диаграммы указать имена отображаемых функций в нижнем знаменателе.

Для более удобного отображения значений двумерных функций можно использовать результаты работы встроенной функции **CreateMesh**. Функция имеет следующие аргументы:

- имя функции, значения которой будут отображены;
- левая граница диапазона изменения первого аргумента функции;
- правая граница диапазона изменения первого аргумента функции;
- левая граница диапазона изменения второго аргумента функции;
- правая граница диапазона изменения второго аргумента функции;
- число точек для первого аргумента в диапазоне;
- число точек для второго аргумента в диапазоне.

Значения, возвращаемые функцией **CreateMesh**, необходимо сохранить в переменной, имя которой вводится в шаблон трехмерной диаграммы.

Аналогично двумерной диаграмме, на трехмерной могут быть отображены несколько функций. Для этого в шаблоне диаграммы через запятую вводятся имена переменных, хранящих значения функций.

4.7. Задание «Отображение двумерных функций»

Подготовим данные для двумерных функций:

$$f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2, \quad f_2(x_1, x_2) = \frac{x_1^2}{4} + x_2^2.$$

1. Загрузить Mathcad.
2. Задать пользовательские функции f_1 и f_2 согласно заданию.
3. В переменной F_1 сохранить значения для отображения функции f_1 . Для этого установить курсор ниже блоков с определением функций и ввести выражение
 $F_1 := \text{CreateMesh}(f_1, -2, 2, -2, 2, 100, 100)$



4. Аналогично ввести выражение для второй функции:
 $F2 := \text{CreateMesh}(f2, -4, 4, -2, 2, 100, 100)$
5. Сохранить файл под именем **Линии уровня**.

4.8. Форматирование трехмерной диаграммы

Для того чтобы начать форматирование диаграммы, нужно дважды щелкнуть по ней мышью либо вызвать команду **Формат/График/3D График (Format/Graph/3D Graph)**. Окно команды имеет следующие вкладки (рис. 4.7):

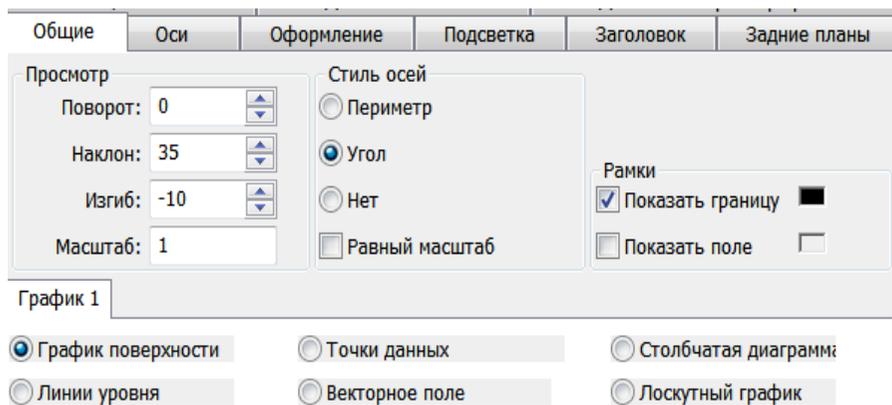


Рис. 4.7. Вид вкладки **Общие**

1) **Общие (General)** – здесь расположены области, в которых сосредоточены опции, задающие основные параметры диаграммы:

- опции области **Просмотр (View)** – разворот и масштаб диаграммы;
- опции области **Стиль осей (Axis Style)** – изменение расположения осей: по периметру, в углу, без осей, задать равный масштаб осей;
- опции области **Рамки (Frames)** – управление отображением рамок области диаграммы, цветом рамки и области.

В нижней части вкладки расположены дополнительные вкладки **График1 (Plot1)**, ..., **ГрафикN (PlotN)** – изменение типа диаграммы для каждой из выведенных диаграмм при выводе нескольких функций.

2) **Оси (Axes)** – здесь расположены области, в которых сосредоточены опции форматирования осей (рис. 4.8). Вкладка, в свою очередь, имеет вкладки для каждой оси.



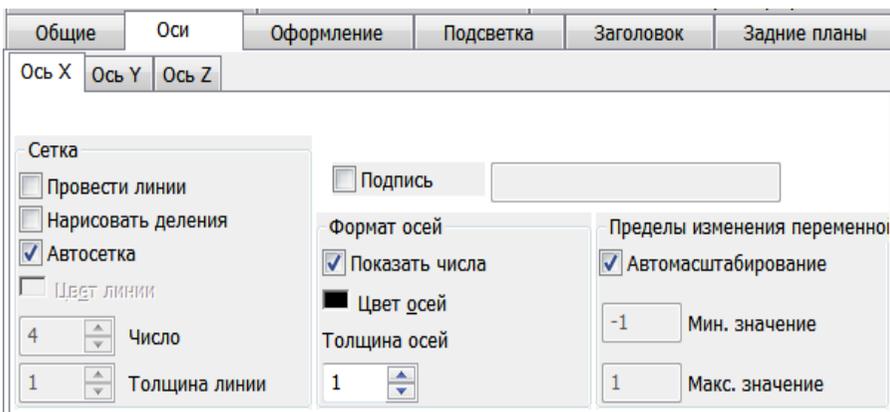


Рис. 4.8. Вид вкладки **Оси**

Каждая из таких вкладок включает следующие области с группами опций форматирования:

- опции области **Сетка (Grids)** – изменение линий сетки;
- опции области **Формат осей (Axis Format)** – толщина, цвет линии оси и вывод меток оси;
- опции области **Пределы изменения переменной (Axis Limits)** – задание границ оси.

3) **Оформление (Appearance)** – здесь расположены области, в которых сосредоточены опции форматирования диаграмм (рис. 4.9).

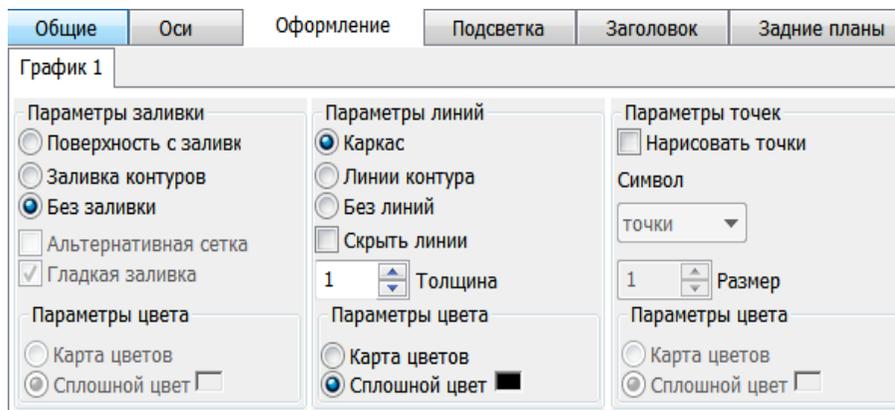


Рис. 4.9. Вид вкладки **Оформление**



Вкладка, в свою очередь, имеет вкладки для каждой из диаграмм. Каждая из них включает области с группами опций форматирования:

- опции области **Параметры заливки (Fill Options)** – изменение цвета и типа заливки диаграммы;
- опции области **Параметры линий (Line Options)** – изменение цвета и типа линий диаграммы;
- опции области **Параметры точек (Point Options)** – изменение цвета и типа точек диаграммы.

4) **Подсветка (Lighting)** – здесь расположены области, в которых сосредоточены опции освещения диаграммы. При включенной опции *Включить подсветку (Enable Lighting)* прочие опции вкладки позволяют задать освещение диаграммы при помощи лампочек, чье местонахождение и цвет выбираются на вкладках **Свет1**, ..., **Свет8**.

5) **Заголовок (Title)** – здесь проводится форматирование заголовка диаграммы.

6) **Задние планы (Backplanes)** – здесь расположены области, в которых сосредоточены опции оформления заднего плана X-Y, Y-Z, X-Z (рис. 4.10).

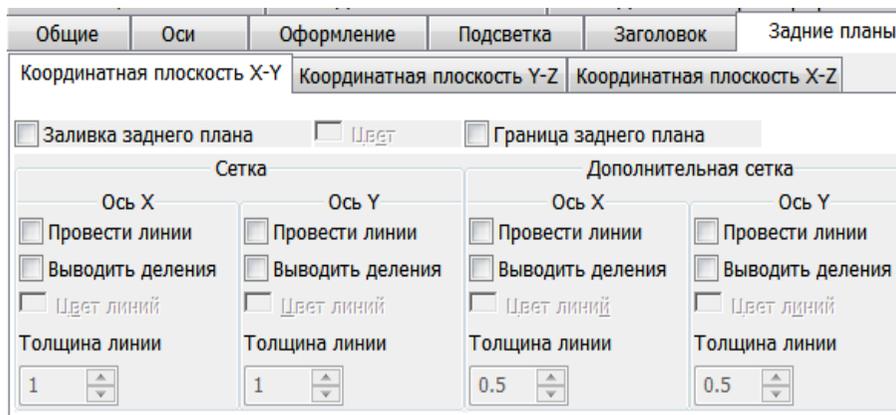


Рис. 4.10. Вид вкладки **Задние планы**

Вкладка, в свою очередь, включает вкладки согласно сочетанию пар осей. Параметры для каждой пары осей задаются отдельно.

В областях **Сетка (Grids)** и **Дополнительная сетка (Sub-Grids)** задаются параметры основной и дополнительной сеток, соответственно, по каждой из включенных в план осей.



7) **Специальная (Special)** – вкладка включает опции для специального оформления диаграмм **Столбчатая (Bar Plot)** и **Поверхность (Surface Plot)** (рис. 4.11).

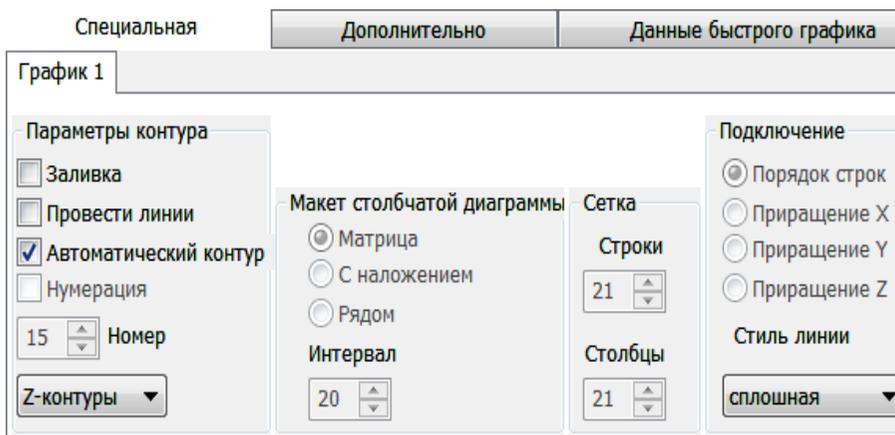


Рис. 4.11. Вид вкладки **Специальная**

Опции вкладки позволяют в области **Параметры контура (Contour Options)** задать окраску поверхности в соответствии с линиями уровней. Для диаграммы типа **Столбчатая** можно изменить тип диаграммы.

8) **Данные быстрого графика (QuickPlot Data)** – вкладка включает опции для форматирования параметрической 3D-диаграммы (рис. 4.12).

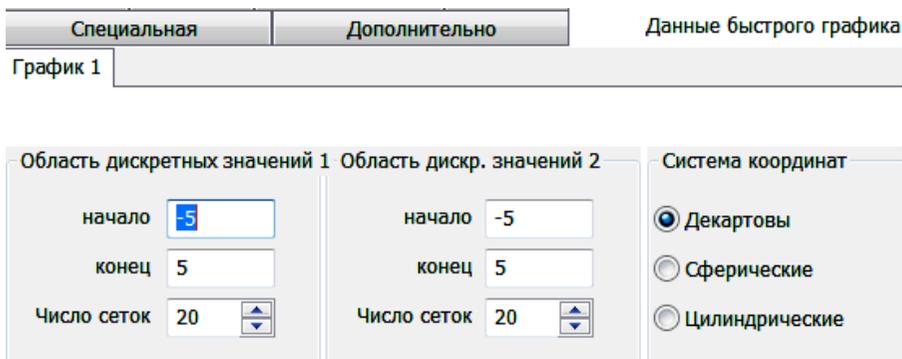


Рис. 4.12. Вид вкладки **Данные быстрого графика**



Вкладка включает пронумерованные вкладки для каждой из диаграмм, на которых расположены опции областей:

- **Область дискретных значений 1 (Range 1)** – для указания диапазона изменения первого аргумента функции;
- **Область дискретных значений 2 (Range 2)** – для указания диапазона изменения второго аргумента функции.

В полях *Число сеток (# of Grids)* – задаются количества точек для обоих аргументов, задающих координаты точек, в которых будет просчитана функция.

- Область *Система координат (Coordinate System)* – для выбора типа координатной системы: декартова, сферическая, цилиндрическая.

9) **Дополнительно (Advanced)** – вкладка включает дополнительные опции (рис. 4.13).

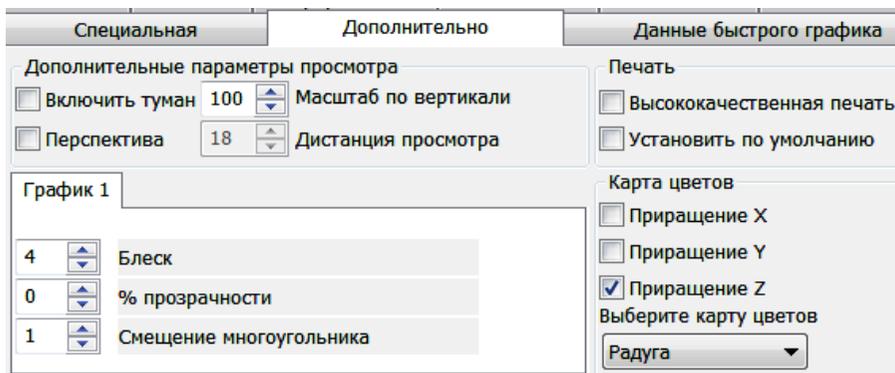


Рис. 4.13. Вид вкладки **Дополнительные**

Опции вкладки служат для изменения яркости линий диаграммы, вертикальной шкалы, качества отображения графика, выбора карты цветов отображения диаграммы и др.

4.9. Задание «Форматирование трехмерной диаграммы»

Построим линии уровня для двумерных функций, определенных в задании 4.7.

1. Загрузить Mathcad. Открыть файл **Линии уровня**.
2. Переместить курсор ниже блоков с определением переменных и ввести шаблон трехмерной поверхности. В шаблон диаграммы ввести имя переменной F1.



3. Двойным щелчком открыть окно форматирования диаграммы.
4. На вкладке **Дополнительно (Advanced)** выбрать цветовую палитру *Радуга (Rainbow)* в списке *Выберите карту цветов (Choose Colormap)*.
5. На вкладке **Специальная (Special)** выбрать *X-Контуры* и отметить опцию *Провести линии (Draw Lines)*. Аналогичные действия сделать для *Y-Контуры*.
6. На вкладке **Оформление (Appearance)** отметить опцию *Заливка контуров (Fill Contours)*, отметить опцию *Каркас (Wireframe)* и опцию *Сплошной цвет (Solid Color)*, выбрав для нее черный цвет. Диаграмма примет вид, приведенный на рис. 4.14. Аналогично отобразить и отформатировать диаграмму функции $f_2(x_1, x_2)$.

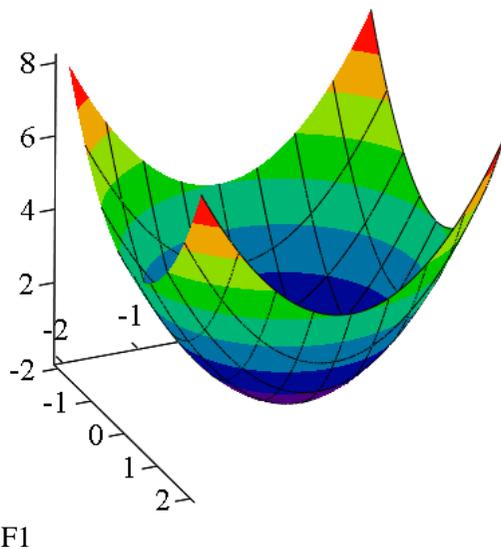
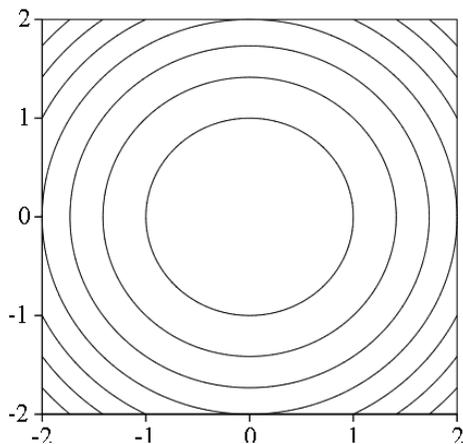


Рис. 4.14. Вид трехмерной поверхности после проведенного форматирования

7. Двойным щелчком открыть окно форматирования диаграммы первой функции и на вкладке **Общие (General)** отметить опцию *Линии уровня (Contour Plot)*. Диаграмма примет вид, приведенный на рис. 4.15.

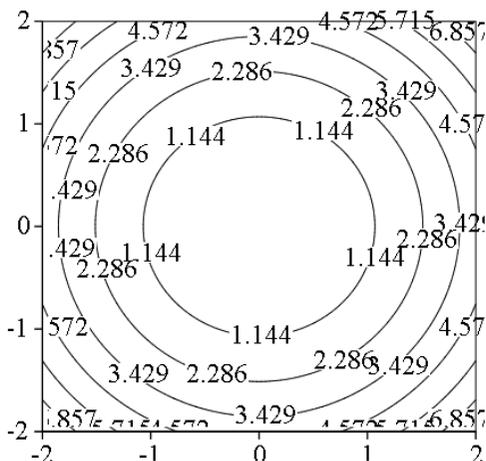




F1

Рис. 4.15. Вид диаграммы после проведенного форматирования

8. Затем открыть вкладку **Специальная (Special)** и отметить опцию *Нумерация (Numbered)*, предварительно сняв отметку с опции *Автоматический контур (Auto Contour)*, в поле *Число (Number)* указать количество линий 6. Диаграмма примет вид, приведенный на рис. 4.16.



F1

Рис. 4.16. Вид линий уровня после проведенного форматирования



9. Провести отображение линий уровня и форматирование для второй функции.
10. Сохранить файл.
11. Закрывать Mathcad.

4.10. Задание «Отображение формы электронного облака при помощи параметрически связанных функций»

Изобразить на графике приблизительную форму электронных облаков в атомах.

Подготовка к решению

По современным представлениям электронные уровни в атоме определяются четырьмя квантовыми числами.

Форма электронного облака определяется двумя из этих чисел:

- l определяет тип орбитали (значения 0-3 соответствуют s-, p-, d-, f-орбиталям);
- m определяет магнитный момент электрона и может изменяться в диапазоне от $-l$ до l .

При $m=0$ форма электронного облака определяется на основе многочленов Лежандра первого рода:

$$P(x) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \cdot \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad (4.1)$$

где l – степень многочлена.

В этом случае элемент поверхности определяется как

$$Y(\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \cdot |P(\cos(\varphi))|. \quad (4.2)$$

Параметрическое задание соответствующей поверхности имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} x(\theta, \varphi) &= Y(\varphi) \sin \varphi \cos \theta, \\ y(\theta, \varphi) &= Y(\varphi) \sin \varphi \sin \theta, \\ z(\theta, \varphi) &= Y(\varphi) \cos \varphi. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Углы θ, φ изменяются в диапазоне от 0 до 2π .

Выполнение задания

1. Загрузить Mathcad.
2. Определить переменную L, которая укажет тип орбитали:
L:=3



3. Построение поверхности будем проводить по точкам.
В каждом диапазоне зададим по 100 точек.
4. Ввести для указания номеров точек следующие ранжированные переменные
 $i := 0..100$ $j := 0..100$
5. Задать значения параметров θ и ϕ , определяющих поверхность, как элементы одномерных массивов.

Номера элементов массивов будут задавать ранжированные переменные, введенные выше.

Используйте шаблон \boxed{Xn} элемента массива на панели **Матрица** (**Matrix**) для ввода θ_i, ϕ_j .

$$\theta_i := i \cdot \frac{2 \cdot \pi}{100}$$

$$\phi_j := j \cdot \frac{2 \cdot \pi}{100}$$

6. Ввести пользовательские функции для расчета многочлена Лежандра по формуле (4.1) и поверхности по формуле (4.2). Для ввода производной использовать шаблон $\boxed{\frac{d^n}{dx^n}}$ панели **Математический анализ** (**Calculus**).

В формуле (4.2) используется операция модуля

$$P(x) := \frac{1}{2^L \cdot L!} \cdot \frac{d^L}{dx^L} (x^2 - 1)^L$$

$$Y(\phi) := \left| \sqrt{\frac{2 \cdot L + 1}{4 \cdot \pi}} \cdot P(\cos(\phi)) \right|$$

7. Определить двумерные матрицы X_e, Y_e, Z_e , определяющие значения координат x, y и z в зависимости от значений параметров θ и ϕ , согласно формулам (4.3):

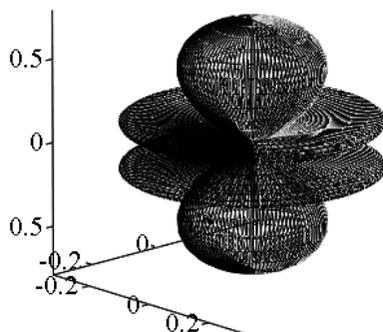
$$X_{e, i, j} := Y(\phi_j) \cdot \sin(\phi_j) \cdot \cos(\theta_i)$$

$$Y_{e, i, j} := Y(\phi_j) \cdot \sin(\phi_j) \cdot \sin(\theta_i)$$

$$Z_{e, i, j} := Y(\phi_j) \cdot \cos(\phi_j)$$

8. Вставить в документ шаблон трехмерной поверхности.
9. В область ввода имени функции введите в скобках имена функций X_e, Y_e, Z_e , задающих поверхность параметрически.
Mathcad отобразит поверхность согласно рис. 4.17.





(Xe,Ye,Ze)

Рис. 4.17. Вид диаграммы

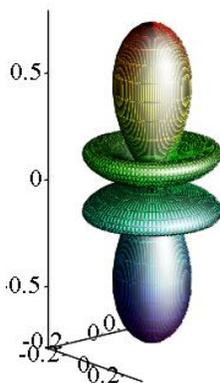
10. Отформатировать диаграмму.

На вкладке **Общие (General)** отметьте опцию *Равный масштаб (Equal Scales)*.

На вкладке **Оформление (Appearance)** в области *Параметры заливки (Fill Options)* отметьте *Поверхность с заливкой (Fill Surface)*, *Гладкая заливка (Smooth Shading)*, *Карта цветов (Colormap)*.

На вкладке **Подсветка (Lighting)** отметьте опцию *Включить подсветку (Enable Lighting)*, включите *Свет 1 (Light 1)*, выберите *Отраженный цвет (Specular color)* белый.

Наклоните оси. Поверхность примет вид согласно рис. 4.18.



(Xe,Ye,Ze)

Рис. 4.18. Вид диаграммы после форматирования



11. Выведите ниже на отдельных диаграммах двумерные сечения поверхности, используя функции X_e , Y_e , Z_e .
Вы должны получить диаграммы согласно рис. 4.19.

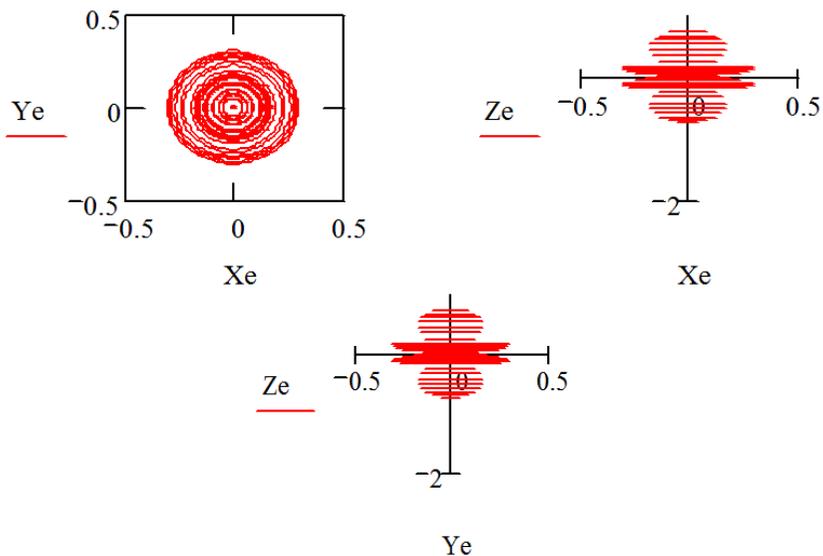


Рис. 4.19. Двумерные сечения поверхности

12. Сохранить документ под именем **Облако**.



5. ОФОРМЛЕНИЕ ДОКУМЕНТА

5.1. Ввод текста

Чтобы ввести текстовый блок, нужно курсор в виде «+» установить в требуемое место документа и начать вводить текст. Для организации новой строки текстового блока используется клавиша «Enter».

Если в текст нужно вставить математическое выражение с использованием шаблонов математических панелей, используется команда **Вставка/Регион формул (Insert/Math region)**, после чего курсор в тексте примет вид математического курсора. После ввода математического выражения необходимо переместить курсор куда-либо в текстовую часть блока с целью возвращения блоку текстового формата. Курсор при этом примет вид текстового курсора.

Математические блоки вычисляются в тексте автоматически. При необходимости можно запретить выполнение вычисления вставленного в текст математического блока аналогично любому математическому блоку.

5.2. Редактирование документа

Редактирование документа проводится путем правки отдельных блоков. Для этого используются клавиши и приемы, аналогичные редакторам текста.

Удаление указанного блока проводится командой **Правка/Удалить (Edit/Delete)** либо кнопкой **Delete**.

Операции удаления, копирования, вырезания, вставки, перетаскивания мышью можно выполнять и над группой блоков, предварительно выделив их. Выделение нескольких рядом стоящих блоков проводится стандартным для Windows образом. Вокруг них необходимо растянуть при помощи мыши пунктирный прямоугольник. Выделить несколько блоков можно, щелкнув по первому блоку мышью, и, нажав клавишу CTRL, щелкать по остальным блокам.

Выделение всех блоков документа проводится командой **Правка/Выделить все (Edit/Select All)**

Отменить проведенные над блоком операции можно, используя команду **Правка /Отменить (Edit/Undo)**. Вернуть отмененное действие можно командой **Правка /Вернуть (Edit/Redo)**.



5.3. Форматирование документа

Изменение формата представления блоков документа проводится при помощи меню **Формат (Format)**. Меню включает следующие команды:

1. **Уравнение...(Equation...)** – позволяет настроить стили оформления математических выражений документа.
2. **Результат...(Result...)** – настройка стиля представления результата вычислений (рис. 5.1).

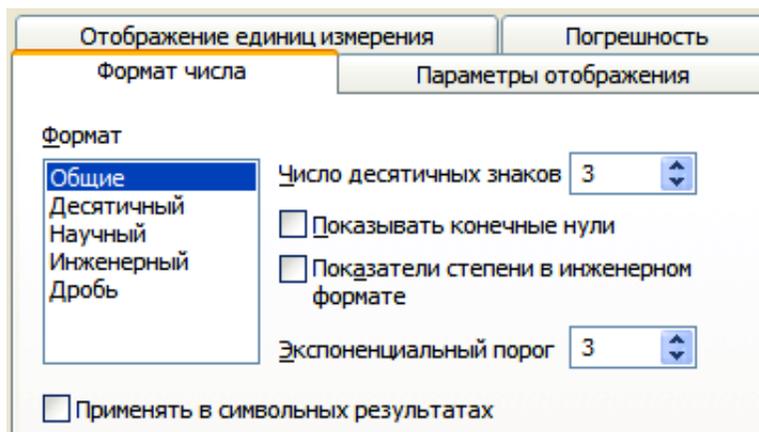


Рис. 5.1. Вид вкладки **Формат числа**

Окно содержит вкладки:

2.1. Вкладка **Формат числа (Number Format)**. Поддерживаются 4 формы вывода чисел:

- а) **Общие (General)** – общий стиль (принят по умолчанию). Позволяет:
 - настроить вывод заданного числа знаков после запятой в числе (**Число десятичных знаков (Number of decimal places)**);
 - включить опцию вывода замыкающих нулей (**Показывать конечные нули (Show trailing zeros)**);
 - отображать число в экспоненциальной форме с использованием инженерного формата (см. ниже) (**Показывать степени в инженерном формате (Show exponents in engineering format)**);
 - задать максимальное число десятичных знаков после запятой, после превышения которого число будет выводиться в экспоненциальной



форме (вида 123.34×10^2) – опция **Экспоненциальный порог (Exponential threshold)**.

б) **Десятичный (Decimal)** – стиль вывода в форме с фиксированной десятичной точкой. Имеет:

– опцию **Число десятичных знаков (Number of decimal places)**;

– поле **Показывать конечные нули (Show trailing zeros)**.

в) **Научный (Scientific)** – научный стиль. Число всегда выводится в экспоненциальной форме. Имеет:

– опцию **Число десятичных знаков (Number of decimal places)**;

– поле **Показывать конечные нули (Show trailing zeros)**;

– опцию управления представлением экспоненциальной части **Показатели степени в виде $E \pm 000$ (Show exponents as $E \pm 000$)**.

г) **Инженерный (Engineering)** – инженерный стиль. Число всегда выводится в экспоненциальной форме и приводится к виду, где степень десяти всегда кратна 3. Имеет:

– опцию **Число десятичных знаков (Number of decimal places)**;

– опцию **Показатели степени в виде $E \pm 000$ Show exponents as $E \pm 000$** ;

– поле **Показывать конечные нули (Show trailing zeros)**.

2.2. Вкладка **Параметры отображения (Display options)** – режимы вывода на экран. Вкладка содержит:

– список **Стиль отображения матриц (Matrix display style)** представления матриц;

– опцию **Развертывать вложенные массивы (Expand nested arrays)** – управляет режимом отображения вложенных матриц – либо в строковом виде, либо матричном.

2.3. Вкладка **Отображение единиц измерения (Unit Display)** – режимы отображения единиц размерностей.

2.4. Вкладка **Погрешность (Tolerance)** – дополнительные режимы отображения.

3. **Текст... (Text...)** – раскрывает окно форматирования шрифта, аналогичное другим приложениям Windows. Команда доступна, если курсор находился в текстовом блоке.

4. **Абзац... (Paragraph...)** – окно форматирования абзаца в текстовом блоке. Опции команды дублируют кнопки панели **Форматирования**.

5. **Табуляция...(Tabs...)** – команда задания позиции табулостопа левого края. Табулостоп можно устанавливать щелчком мыши в координатной линейке.



6. **Стиль... (Style...)** – команда создания и изменения стиля форматирования текста. Действует аналогично командам других приложений Windows.

7. **Свойства (Properties)** – команда изменения свойств блока. Отдельные вкладки:

– **Отображение (Display)** – вкладка содержит опции оформления внешнего вида блока. Включает опцию выбора цвета заливки области блока и отображения рамки блока;

– **Вычисления (Calculation)** – вкладка доступна, если курсор был установлен в вычисляемый блок.

5.4. Задание «Расчет давления газа»

Рассчитаем давление реального газа по уравнению Ван-дер-Ваальса:

$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{V^2}, \quad (5.1)$$

где P – давление; T – температура; V – объем; R – удельная газовая постоянная; a и b – индивидуальные константы для каждого вещества;

$\frac{a}{V^2}$ – величина, учитывающая силу межмолекулярного взаимодействия; b – величина, учитывающая собственный объем молекул газа.

1. Загрузить Mathcad. Создать новый документ.
2. Ввести текстовый блок следующего содержания:
«Ввод данных для расчета зависимости Ван-дер-Ваальса».
3. Установить курсор в конец введенного текстового блока и ввести в него формулу (5.1):

$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{V^2}.$$

Для этого сначала выполнить команду **Вставка/Регион формул (Insert/Math region)**, ввести имя P , шаблон « $=$ » панели **Булева алгебра (Boolean)**.

Ввести имя R , нажать клавишу с «*», ввести имя T , затем, используя клавишу «Пробел», охватить уголком курсора произведение и нажать клавишу со знаком «/», после чего можно вводить знаменатель в появившийся шаблон.



9. Переместить блок, в котором выведено значение переменной T, выше блока, где было введено значение этой переменной.

Для этого щелкнуть мышью по соответствующему блоку, схватить его мышью и перенести на новое место.

Значение переменной в этом блоке не будет выведено, поскольку блок с определением значения переменной оказался ниже блока с выводом значения.

10. Прodelать аналогичные действия с блоком, в котором выведено значение константы b. Изменилось ли содержимое перемещенного блока? (Поскольку значение константы известно во всем документе, содержимое блока не изменилось.)
11. Отменить режим выделения блоков документа – команда **Вид/Регионы (View/Regions)**.
12. Установить курсор ниже последнего введенного блока и ввести математическое выражение уравнения Ван-дер-Ваальса в виде (5.1):

$$P := \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{V^2}.$$

Для ввода знака присвоения использовать шаблон «:=». Ввод формулы проводить аналогично предыдущему пункту.

13. В правой странице документа вывести рассчитанное значение давления P, для чего ввести имя переменной P, а затем знак «=»:
- $$P = 2.66$$

14. Вывести в результирующем выражении 6 цифр после десятичной точки, выводя при этом замыкающие нули. Для этого поместить курсор в блок с результатом вычисления значения P, вызвать окно команды **Формат/Результат... (Format/Result...)**.

На вкладке **Формат числа (Number Format)** выбрать формат вывода числа **Общие (General)**.

Установить в поле **Число десятичных знаков (Number of decimal places)** число 6.

Отметить опцию **Показывать конечные нули (Show trailing zeros)**.

15. Сохранить документ.

16. Отменить возможность вычислений у блока, содержащего вычисление значения давления P. Использовать для этого команду **Отключить вычисление (Disable Evaluation)** контекстного меню блока.



После выполнения команды блок, содержащий вывод значения вычисленной переменной, значение не показывает.

Восстановить возможность вычисления для блока, задав команду **Включить вычисление (Enable Evaluations)** контекстного меню.

17. Сохранить документ.

5.5. Использование размерностей при вычислениях

Переменные в Mathcad могут иметь размерности кроме числовых значений. Mathcad поддерживает следующие системы единиц:

- SI (СИ),
- MKS (МГС – метр-грамм-секунда),
- SGS (СГС – сантиметр-грамм-секунда),
- US (Британская система).

Для присвоения переменной значения с размерностью нужно:

- ввести имя переменной, знак присвоения значения, ввести значение,
- ввести знак умножения,
- вызвать **Мастер размерностей** из *Стандартной* панели инструментов либо при помощи команды **Вставка/Единица измерения... (Insert/Unit...)**. В окне **Мастера размерностей** нужно выбрать в списке **Размерность (Dimension)** размерность, а затем в списке **Единица измерения (Unit)** – единицу измерения этой размерности. По завершении щелкнуть по кнопке **ОК**.

Вывод значения переменной, имеющей размерность, по умолчанию проводится в системе SI. Выбор другой системы единиц проводится на вкладке **Система единиц измерения (Unit System)** команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/Worksheet Options)**.

Пользователь может определить в документе свои названия единиц размерностей, отсутствующие в Mathcad. В этом случае новая единица размерности задается как константа, которой присваивается значение, равное значению этой единицы в пересчете на известные в Mathcad размерности.

Нужно отметить, что при вычислении выражения, содержащего значения с указанием размерностей, размерности должны быть заданы для всех операндов в выражении. Кроме того, при проведении сложных вычислений наличие размерностей в выражениях часто не позволяет получить результат.



5.6. Задание «Расчет теплообменника»

По трубам одноходового кожухотрубчатого теплообменника проходит воздух при средней температуре $50\text{ }^\circ\text{C}$ и давлении (по манометру) 2 кгс/см^2 со скоростью 9 м/с . Барометрическое давление 740 мм рт. ст.

Число труб в теплообменнике 121, наружный диаметр труб 38 мм , толщина стенки трубы 2 мм . Плотность воздуха при нормальных условиях $1,293\text{ кг/м}^3$.

Определить массовый расход воздуха, объемный расход воздуха при рабочих и нормальных условиях.

Подготовка к решению

Массовый расход воздуха M рассчитывается по уравнению

$$M = V\rho_r, \quad (5.2)$$

где V – объемный расход воздуха при рабочих условиях; ρ_r – плотность газа.

Объемный расход рассчитывается по уравнению

$$V = v \cdot f, \quad (5.3)$$

где v – скорость движения газа; f – площадь поперечного сечения трубопровода.

В нашем случае площадь поперечного сечения рассчитывается:

$$f = n \frac{\pi}{4} (d - 2l)^2, \quad (5.4)$$

где d – внешний диаметр; l – толщина стенки трубы; n – число труб.

Следовательно, массовый расход можно рассчитать как

$$M = vn \frac{\pi}{4} (d - 2l)^2 \rho_r. \quad (5.5)$$

Плотность любого газа ρ_r при температуре t_r и давлении p_r может быть рассчитана по формуле

$$\rho_r = \rho_0 \frac{p_r t_0}{p_0 t_r}, \quad (5.6)$$

где ρ_0 – плотность газа при нормальных условиях, т.е. при температуре $t_0 = 273\text{ К}$ и давлении $p_0 = 760\text{ мм рт. ст.}$

Рабочее давление p_r рассчитывается как сумма барометрического давления p_b и давления по манометру p_m .



Объемный расход воздуха V при рабочих условиях рассчитывается как

$$V = M / \rho_r. \quad (5.7)$$

Объемный расход воздуха V_0 при нормальных условиях рассчитывается как

$$V_0 = M / \rho_0. \quad (5.8)$$

Выполнение задания

1. Создать новый документ.
2. Поскольку в задании используются данные, имеющие размерности, отсутствующие в Mathcad, определим эти размерности. Введем константу mm_Hg – для единицы мм рт. ст. Для этого поместим курсор в первую строку документа и введем константу
mm_Hg≐ 133.3 Pa

При определении константы использовать шаблон «≐» панели **Вычисления (Evaluation)**. Для вставки размерности ввести после числа знак умножения «*». Затем, выполнив команду **Вставка/Единица измерения... (Insert/Unit...)**, выбрать размерность Pressure (Давление) и имя единицы Pa, далее подтвердить выбор, щелкнув по кнопке **ОК**.

3. В следующих строках ввести исходные данные задания: перевести курсор в следующую свободную строку документа и ввести характеристики труб теплообменника
n := 121 d := 38 · mm l := 2 · mm

Для присвоения значения переменным использовать инструмент «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**.

Указывая размерность, нужно после числа ввести знак умножения «*», затем, выполнив команду **Вставка/Единица измерения... (Insert/Unit...)**, выбрать размерность Length (Длина) и имя единицы mm, далее подтвердить выбор, щелкнув по кнопке **ОК**.

4. Затем перевести курсор в следующую строку и ввести значения давления барометрического и по манометру, задавая имена переменным с нижним уровнем, для чего нажимать клавишу с «.» перед вводом части имени нижнего уровня

$$p_m := 2 \cdot \frac{\text{kgf}}{\text{cm}^2} \quad p_b := 740 \cdot \text{mm_Hg}.$$

Указывая размерность kgf/cm^2 , нужно после числа ввести знак умножения «*», выполнить команду **Вставка/Единица измерения...**



(**Insert/Unit...**), выбрать размерность Force (Сила) и имя единицы kgf (кгс), щелкнуть по кнопке **ОК**.

Затем нажать клавишу «/» и в полученный шаблон дроби ввести в знаменатель размерность cm^2 . Для этого выполнить команду **Вставка/ Единица измерения... (Insert/Unit...)**, выбрать размерность Length (Длина) и имя единицы cm, далее подтвердить выбор, щелкнув по кнопке **ОК**.

После этого нажать клавишу с «^» и в шаблон показателя степени ввести число 2.

Для указания размерности mm_Hg нужно после числа ввести знак умножения «*», а затем имя константы mm_Hg.

5. В следующей строке введем значение средней температуры. Поскольку в Mathcad нет размерности $^{\circ}\text{C}$, введем это значение в Кельвинах:

$$t_r := (50 + 273) \cdot \text{K} .$$

Для указания размерности K нужно выбрать размерность Temperature (Температура) и имя единицы K.

6. Далее введем значение температуры, давления и плотности воздуха при нормальных условиях:

$$t_0 := 273 \cdot \text{K} \quad p_0 := 760 \cdot \text{mm_Hg} \quad \rho_0 := 1.293 \cdot \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} .$$

Указанные переменные имеют в нижнем уровне имени знак 0. Перед его вводом нажмите клавишу с «.». Ввод размерностей K и mm_Hg описан выше.

Для указания значению переменной ρ_0 размерности kg/m^3 нужно после числа 1,293 ввести знак умножения «*», выполнить команду **Вставка/Единица измерения... (Insert/Unit...)**, выбрать размерность Mass (Масса) и имя единицы kg (кг), далее подтвердить выбор, щелкнув по кнопке **ОК**.

Затем нажать клавишу «/» и в полученный шаблон дроби ввести в знаменатель размерность m^3 . Для этого снова выполнить команду **Вставка/Единица измерения... (Insert/Unit...)**, выбрать размерность Length (Длина) и имя единицы m, далее подтвердить выбор, щелкнув по кнопке **ОК**. Нажать клавишу с «^» и в полученный шаблон показателя степени ввести число 3.

Ниже введем значение скорости:

$$v := 9 \cdot \frac{\text{m}}{\text{sec}} .$$



7. Ввод размерности $\frac{m}{sec}$ проводится аналогично описанному выше. Для указания размерности sec выполнить команду **Вставка/Единица измерения... (Insert/Unit...)**, выбрать размерность Time (Время) и имя единицы sec (с), далее подтвердить выбор, щелкнув по кнопке **ОК**.

8. Вычислим значение рабочего давления:

$$P_r := P_b + P_m.$$

Для ввода индексов r, b, и m в нижней части имен переменных использовать клавишу с «.».

9. Вычислим значение плотности воздуха при рабочем давлении по формуле (5.6)

$$\rho_r := \rho_0 \cdot \frac{P_r \cdot t_0}{P_0 \cdot t_r}.$$

Индексы в именах переменных вводить в нижний уровень при помощи клавиши «.».

10. Рассчитаем массовый расход воздуха по формуле (5.5). Для этого в следующей свободной строке ввести выражение

$$M := v \cdot n \cdot \frac{\pi}{4} \cdot (d - 2 \cdot l)^2 \cdot \rho_r.$$

11. Рассчитаем по формуле (5.7) объемный расход воздуха при рабочих условиях. Для этого в следующей строке ввести выражение

$$V := \frac{M}{\rho_r}.$$

12. Рассчитаем по формуле (5.8) объемный расход воздуха при нормальных условиях. Для этого в следующей строке ввести выражение

$$V_0 := \frac{M}{\rho_0}.$$

13. Вывести рассчитанные значения массового расхода воздуха M, объемного расхода воздуха при рабочих и нормальных условиях V и V₀

$$M = 3.144 \text{ kgs}^{-1}$$

$$V = 0.989 \text{ m}^3\text{s}^{-1}$$

$$V_0 = 2.432 \text{ m}^3\text{s}^{-1}.$$

14. Сохранить документ под именем **Volume**.



6. ОПЕРАЦИИ НАД МАТРИЦАМИ

Mathcad поддерживает работу с матрицами одномерными, называемыми еще векторами, а также с матрицами двумерными. Программа предлагает множество операций над матрицами. При задании операций следует учитывать правила матричной алгебры.

Инструменты для вставки в документ шаблонов наиболее часто используемых операций содержатся на панели *Матрица (Matrix)* и приведены в табл. 6.1.

Таблица 6.1

Инструменты панели *Матрица (Matrix)*

$\begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix}$	Шаблон вектора/матрицы
X_n	Шаблон элемента вектора/матрицы
X^{-1}	Шаблон обратной матрицы
$ X $	Шаблон определителя матрицы
$\vec{f}(M)$	Векторизация. Изменяет выражение $f(M)$, содержащее операции над матрицами, так, чтобы действия проводились поэлементно.
$M^{<>}$	Извлечение столбца
M^T	Шаблон транспонированной матрицы
$m..n$	Шаблон ранжированной переменной
$\vec{X} \bullet \vec{Y}$	Шаблон скалярного произведения
$\vec{X} \times \vec{Y}$	Шаблон векторного произведения
$\sum v$	Шаблон суммы элементов вектора

При вычислении суммы, разности, частного, произведения матриц и векторов, умножения либо деления их на число знаки соответствующих операций записываются в естественном математическом виде аналогично операциям над числами.

Для проведения операций с матрицами предназначено множество функций. Рассмотрим ниже часть наиболее употребляемых:

augment(A,B,..) возвращает матрицу, состоящую из поставленных бок о бок слева направо матриц A, B и т.д. Матрицы должны иметь одинаковое количество строк.

stack(A,B,..) возвращает матрицу, состоящую из поставленных друг на друга сверху вниз матриц A, B и т.д. Матрицы должны иметь одинаковое количество столбцов.

identity(n) возвращает единичную матрицу порядка n.



- matrix(m,n,f)** возвращает матрицу размерности $m \times n$, каждый элемент которой равен значению $f(i, j)$, где f – определенная ранее функция с двумя параметрами; i – номер строки; j – номер столбца.
- submatrix(A,i1,i2,j1,j2)** возвращает матрицу, представляющую собой вырезку из матрицы A со строки $i1$ по строку $i2$, со столбца $j1$ по столбец $j2$.
- diag(A)** возвращает матрицу, по диагонали которой стоят элементы вектора A , остальные элементы равны 0.
- max(A)** возвращает наибольший элемент матрицы A .
- min(A)** возвращает наименьший элемент матрицы A .
- rank(A)** возвращает ранг матрицы A , т.е. максимальное число ее линейно независимых строк.
- tr(A)** возвращает след матрицы A .
- qr(A)** возвращает матрицу Q , состоящую из матриц M и B , дающих разложение матрицы A , где $A=M \cdot B$. Причем матрица M – ортогональная, матрица B – верхняя треугольная. В матрице Q матрицы M и B квадратные, одинакового порядка, стоят бок о бок слева направо.
- lu(A)** возвращает Lu-разложение матрицы A , то есть матрицу Q , состоящую из матриц M , B и C , где $M \cdot A=B \cdot C$. Причем матрица B – нижняя треугольная, C – верхняя треугольная. В матрице Q матрицы M , B и C квадратные, одинакового порядка, стоят бок о бок слева направо.
- genviv(A)** возвращает матрицу M левую обратную к матрице A : $M \cdot A=E$, где A – матрица $m \times n$, M – матрица $n \times m$.
- cols(A)** возвращает число столбцов в матрице A .
- rows(A)** возвращает число строк в матрице A .
- mean(A)** возвращает среднее значение элементов матрицы A .
- conde(A)** возвращает число обусловленности матрицы A в норме евклидова пространства.
- norme(A)** возвращает евклидову норму матрицы A .
- sort(V)** возвращает вектор, в котором проведена сортировка элементов вектора по возрастанию их значений.
- reverse(V)** возвращает вектор, в котором проведена сортировка элементов вектора по убыванию их значений.
- csort(A,n)** сортирует строки матрицы так, чтобы в столбце с номером n значения возрастали.



rsort(A,n) сортирует столбцы матрицы так, чтобы в строке с номером n значения возрастали.

В алгебре матриц используются понятия собственных векторов и собственных чисел матриц.

Вектор $v \in R^n$, отличный от нуля, называется собственным вектором матрицы A , если существует число λ (вещественное или комплексное), такое, что $Av = \lambda v$.

Число λ называется собственным числом или значением матрицы A , соответствующим собственному вектору v .

Совокупность всех собственных значений матрицы называется ее спектром.

След матрицы – это сумма значений элементов главной диагонали матрицы.

Для вычисления собственных векторов и собственных чисел матриц предназначены функции, вычисляющие:

eigenvals(A) собственные значения квадратной матрицы A .

eigenvec(A, l) собственный вектор матрицы A , отвечающий собственному значению l .

eigenvecs(A) собственные вектора матрицы.

Замечание. При работе с матрицами часто используется обратная матрица. Однако в том случае, когда матрица близка к сингулярной или плохо обусловлена, некачественно вычисленная обратная матрица не будет соответствовать условию

$$AA^{-1} = I.$$

Для повышения точности вычисления обратных матриц рекомендуется использовать опцию **Использовать строгую проверку вырожденности матриц (Use strict singularity checking for matrices)** вкладки **Вычисления (Calculation)** окна команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/Worksheet Options)**.

В этом случае Mathcad будет использовать более медленный, но более точный алгоритм.

Задание «Работа с матричными операциями»

1. Открыть Mathcad.
2. Ввести с использованием шаблонов матрицы M , N и K вида



$$M := \begin{pmatrix} 8 & 7 & -3 & 2 \\ 7 & 1 & 0 & 4 \\ -3 & 0 & -5 & 9 \\ 2 & 4 & 9 & 2 \end{pmatrix} \quad N := \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \\ 3 & 1 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \quad K := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 8 & 7 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Сначала ввести имя матрицы M, затем шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)** и ввести шаблон матрицы, взяв его из панели **Матрица (Matrix)**.

В окне указать число строк (rows) и число столбцов (columns), равное 4, щелкнуть по кнопке **ОК**. В полученный шаблон матрицы ввести значения элементов.

При вводе для перехода от элемента к элементу можно использовать клавиши со стрелками.

Аналогичным образом ввести матрицу N, имеющую 4 строки и 2 столбца, и матрицу K, имеющую 2 строки и 4 столбца.

3. Ввести разреженную матрицу M2. Поскольку матрица разрежена, то можно ввести ее, задав значения ненулевым элементам.

Матрица M2 состоит из 4 строк и 4 столбцов и имеет только три элемента, отличные от нуля – M2_{1,1}, M2_{1,3}, M2_{3,0}.

Зададим матрицу, определив только эти элементы: при задании элемента M2_{1,1} ввести имя M2, нажать клавишу с «[» для получения шаблона индекса элемента, набрать число 1, запятую, число 1, после чего ввести шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)** и ввести число 6

$$M2_{1,1} := 6$$

Задание элементов M2_{1,3} и M2_{3,0} проводить аналогично

$$M2_{1,3} := 8$$

$$M2_{3,0} := 2$$

Вывести матрицу M2, получив

$$M2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 8 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

4. Вывести значения первых элементов каждой из матриц M, N, K
M_{0,0} N_{0,0} K_{0,0}.

Для этого в следующей свободной строке ввести имя матрицы M, нажать клавишу с «[» и в полученный шаблон ввести номер строки 0,



далее, через запятую, номер столбца 0. Затем ввести знак «=» и вывести курсор из блока. Правее будет выведен результат
 $M_{0,0} = 8$

Аналогичным образом в строках ниже получить значения первых элементов матриц N и K

$$N_{0,0} = 1 \quad K_{0,0} = 1$$

5. Найти обратную матрицу к M.

Установить курсор в следующей свободной строке, ввести имя матрицы M и шаблон обратной матрицы панели **Матрица (Matrix)** « X^{-1} », затем нажать клавишу со знаком «=»

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} -2.052 \times 10^{-3} & 0.132 & -0.051 & -0.029 \\ 0.132 & -0.156 & 0.027 & 0.059 \\ -0.051 & 0.027 & -0.019 & 0.083 \\ -0.029 & 0.059 & 0.083 & 0.037 \end{pmatrix}$$

6. Найти собственные значения и собственные вектора матрицы M. Для этого установить курсор в следующей свободной строке и вызвать **Мастер функций**, где выбрать категорию функций *Векторы и матрицы*, имя функции *eigenvals*, щелкнуть по кнопке **ОК**. В полученный шаблон функции ввести имя матрицы M и ввести знак «=».

При работе в версии Mathcad ниже 11 будет выведено

$$\text{eigenvals}(M) = \begin{pmatrix} -3.994 \\ 8.268 \\ 13.634 \\ -11.908 \end{pmatrix}$$

В более младших версиях Mathcad выдаст

$$\text{eigenvals}(M) = \begin{pmatrix} -11.908 \\ -3.994 \\ 8.268 \\ 13.634 \end{pmatrix}$$

7. Перевести курсор в строке правее, вызвать **Мастер функций**, где выбрать категорию функции *Векторы и матрицы*, имя функции *eigenvecs*, щелкнуть по кнопке **ОК**.



В полученный шаблон функции ввести имя матрицы M; ввести знак « \Rightarrow ». При работе в версии Mathcad ниже 11 будет выведено

$$\text{eigenvecs}(M) = \begin{pmatrix} 0.495 & 0.385 & 0.766 & -0.144 \\ -0.838 & -0.026 & 0.536 & -0.098 \\ 0.142 & -0.576 & 0.047 & -0.804 \\ 0.181 & -0.721 & 0.352 & 0.569 \end{pmatrix}$$

В более младших версиях Mathcad выдаст

$$\text{eigenvecs}(M) = \begin{pmatrix} -0.144 & 0.495 & 0.385 & 0.766 \\ -0.098 & -0.838 & -0.026 & 0.536 \\ -0.804 & 0.142 & -0.576 & 0.047 \\ 0.569 & 0.181 & -0.721 & 0.352 \end{pmatrix}$$

8. Вычислить матрицы, элементами которых являются корни квадратные из элементов матрицы M, синусы от элементов матрицы M, экспоненты от элементов матрицы M, соответственно.

Для этого переместить курсор по документу вниз и записать выражение \sqrt{M} , после чего охватить это выражение курсором при помощи клавиши «пробел» и применить операцию векторизации $\overrightarrow{f}(M)$ из панели *Матрица (Matrix)*.

Затем нажать клавишу « \Rightarrow ». Mathcad выдаст

$$\overrightarrow{\sqrt{M}} = \begin{pmatrix} 2.828 & 2.646 & 1.732i & 1.414 \\ 2.646 & 1 & 0 & 2 \\ 1.732i & 0 & 2.236i & 3 \\ 1.414 & 2 & 3 & 1.414 \end{pmatrix}$$

Аналогично построить остальные выражения.

Mathcad выдаст

$$\overrightarrow{\sin(M)} = \begin{pmatrix} 0.989 & 0.657 & -0.141 & 0.909 \\ 0.657 & 0.841 & 0 & -0.757 \\ -0.141 & 0 & 0.959 & 0.412 \\ 0.909 & -0.757 & 0.412 & 0.909 \end{pmatrix}$$



$$\vec{e}_M = \begin{pmatrix} 2.981 \times 10^3 & 1.097 \times 10^3 & 0.05 & 7.389 \\ 1.097 \times 10^3 & 2.718 & 1 & 54.598 \\ 0.05 & 1 & 6.738 \times 10^{-3} & 8.103 \times 10^3 \\ 7.389 & 54.598 & 8.103 \times 10^3 & 7.389 \end{pmatrix}$$

9. Ввести вектор w со значениями 1, 2, 3.
 10. Построить диагональную матрицу, по главной диагонали которой стоят элементы вектора w .

Для этого ввести имя вектора, знак присвоения «:=», шаблон матрицы из панели **Матрица (Matrix)**, указать число строк 3, число столбцов, равное 1, ввести элементы вектора. Mathcad выдаст

$$w := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

11. Переместить курсор ниже, вызвать **Мастер функций**, где выбрать категорию функций *Векторы и матрицы*, имя функции diag , щелкнуть по кнопке **ОК**. Указать в качестве аргумента функции имя вектора w . Нажать клавишу «=». Mathcad выдаст

$$\text{diag}(w) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

12. Для матрицы $\begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 11 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 9 \end{pmatrix}$ найти ее разложения функциями qr и lu .

Найдем сначала разложение матрицы функцией qr , сохранив его в переменной R . Разложение функцией lu найдем позже.

Ввести имя R , знак присвоения «:=», вызвать **Мастер функций**, выбрать категорию функций *Векторы и матрицы*, имя функции qr , щелкнуть по кнопке **ОК**. Указать в качестве аргумента функции требуемую матрицу. Выдать значение матрицы R .

$$R = \begin{pmatrix} 0.089 & 0.607 & 0.79 & 11.225 & 2.94 & 3.029 \\ 0.98 & -0.195 & 0.039 & 0 & 4.512 & 9.773 \\ 0.178 & 0.77 & -0.612 & 0 & 0 & -1.52 \end{pmatrix}$$



13. Выделить из полученной матрицы ортогональную и верхнюю квадратную.

В матрице R искомые матрицы стоят бок о бок слева направо, и первой слева стоит ортогональная матрица.

Для ее извлечения используем функцию `submatrix`.

Ввести имя матрицы M, знак присвоения «:=», вызвать **Мастер функций**, выбрать категорию функций *Векторы и матрицы*, имя функции `submatrix`, щелкнуть по кнопке **ОК**. Ввести имя матрицы R, диапазоны строк и столбцов, которые следует извлечь:

$$M := \text{submatrix}(R, 0, 2, 0, 2)$$

Вывести ниже матрицу M:

$$M = \begin{pmatrix} 0.089 & 0.607 & 0.79 \\ 0.98 & -0.195 & 0.039 \\ 0.178 & 0.77 & -0.612 \end{pmatrix}$$

14. Второй слева в матрице R стоит верхняя треугольная матрица.

Ввести имя матрицы B, знак присвоения «:=», вызвать **Мастер функций**, выбрать категорию функций *Векторы и матрицы*, имя функции `submatrix`, щелкнуть по кнопке **ОК**. Ввести имя матрицы R, диапазоны строк и столбцов, которые следует извлечь:

$$B := \text{submatrix}(R, 0, 2, 3, 5)$$

Вывести ниже матрицу B:

$$B = \begin{pmatrix} 11.225 & 2.94 & 3.029 \\ 0 & 4.512 & 9.773 \\ 0 & 0 & -1.52 \end{pmatrix}$$

15. Проверить результат работы функции `qr`, для чего перемножим полученные матрицы. Mathcad выдаст

$$M \cdot B = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 11 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 9 \end{pmatrix}$$

16. Найти разложение матрицы $\begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 11 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 9 \end{pmatrix}$ при помощи функции `lu`,

сохранив его в переменной Q. Ввести имя Q, знак присвоения «:=», вызвать **Мастер функций**, где выбрать категорию функций *Векторы и матрицы*, имя функции `lu`, щелкнуть по кнопке **ОК**.



Указать в качестве аргумента функции требуемую матрицу.

Вывести значение матрицы Q. Mathcad выдаст

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 11 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0.091 & 1 & 0 & 0 & 2.818 & 4.909 \\ 0 & 0 & 1 & 0.182 & 1.29 & 1 & 0 & 0 & 2.484 \end{pmatrix}$$

17. Выделить из полученной матрицы Q верхнюю и нижнюю треугольные матрицы.

В полученной матрице искомые матрицы стоят бок о бок слева направо, и второй слева стоит нижняя треугольная матрица. Для ее извлечения используем функцию submatrix.

Ввести имя матрицы B, знак присвоения «:=», вызвать **Мастер функций**, где выбрать категорию функций *Векторы и матрицы*, имя функции submatrix, щелкнуть по кнопке **ОК**. Ввести имя матрицы Q, диапазоны строк и столбцов, которые следует извлечь:

$B := \text{submatrix}(Q, 0, 2, 3, 5)$

Вывести ниже матрицу B

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.091 & 1 & 0 \\ 0.182 & 1.29 & 1 \end{pmatrix}$$

18. Третьей слева в матрице Q стоит верхняя треугольная матрица.

Ввести имя матрицы C, знак присвоения «:=», вызвать **Мастер функций**, где выбрать категорию функций *Векторы и матрицы*, имя функции submatrix, щелкнуть по кнопке **ОК**. В первый шаблон ввести имя матрицы Q, далее ввести диапазоны строк и столбцов, которые следует извлечь:

$C := \text{submatrix}(Q, 0, 2, 6, 8)$

Mathcad выдаст

$$C = \begin{pmatrix} 11 & 2 & 1 \\ 0 & 2.818 & 4.909 \\ 0 & 0 & 2.484 \end{pmatrix}$$

19. Выделим теперь в матрицу A первую слева матрицу из матрицы Q.

Проделать это аналогично предыдущему пункту. Mathcad выдаст

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



20. Проверить результат работы функции `lu`, для чего перемножить полученные матрицы и исходную матрицу $\begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 11 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 9 \end{pmatrix}$.

Умножим матрицу `A` на исходную матрицу и выведем результат. Mathcad выдаст

$$A \cdot \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 11 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 9 \end{pmatrix}$$

21. Вычислить произведение нижней и верхней треугольных матриц. Получим

$$B \cdot C = \begin{pmatrix} 11 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 9 \end{pmatrix}$$

Мы видим, что функция работает корректно.

22. Сохранить документ под именем **Matrixes** и закрыть его.



7. ИНТЕГРИРОВАНИЕ В MATHCAD

Mathcad позволяет вычислять значения как определенных, так и неопределенных интегралов для заданных функций.

При вычислении определенных и неопределенных интегралов используются шаблоны панели *Математический анализ (Calculus)*. Вставив шаблон в документ, нужно ввести:

- выражение подынтегральной функции;
- переменную интегрирования;
- если нужно, пределы интегрирования.

Подынтегральная функция может быть задана именем определенной ранее функции пользователя либо задана явно. Подынтегральная функция должна иметь числовое значение. При вычислении двойных и т.д. интегралов шаблон однократного интеграла вставляется на место функции предыдущего.

Пределы интегрирования могут быть функциями. Они должны иметь в качестве значения действительные числа и одинаковые единицы измерения.

При вычислении определенных интегралов пользователь может выбирать численный метод расчета, используя контекстное меню математического выражения, включающего знак интеграла.

Меню включает методы:

- **Ромберга (Romberg)** – метод Ромберга, применяется в большинстве случаев, базируется на методе трапеций;
- **Адаптивный (Adaptive)** – адаптированный метод Симпсона, применяется для сильно меняющихся на интервале функций;
- **Предел в бесконечности (Infinite Limit)** – метод применяется в случае, если один или оба предела интегрирования являются бесконечностью;
- **Особая конечная точка (Singular Endpoint)** – метод применяется в случае, если вычисляемая функция не имеет значения на одном или обоих концах отрезка интегрирования.

7.1. Задание «Вычисление определенного интеграла»

Вычислить интеграл от функции

$$f(x) = x \cdot \sin(x)$$

на интервале от $[0; 1]$.



Выполнение задания

1. Создать новый документ.
Определить функцию
 $f(x) := x \cdot \sin(x)$
2. Ввести имя f , открывающую скобку, имя x , закрывающую скобку, шаблон «:=» панели **Вычисления (Evaluation)**, затем ввести имя x , нажать клавишу с «*», ввести выражение $\sin(x)$.
В следующей строке проинтегрируем функцию на заданном интервале, введя выражение

$$\int_0^1 f(x) dx,$$

для чего вставить шаблон определенного интеграла панели **Математический анализ (Calculus)**, задать нижний предел интегрирования 0 и верхний предел 1 (для перемещения между позициями для задания пределов интегрирования, функции и переменной интегрирования можно использовать клавишу «Tab»), в позиции для записи функции ввести имя функции в виде $f(x)$, задать имя переменной интегрирования x , нажать клавишу «=».

Mathcad выдаст результат

$$\int_0^1 f(x) dx = 0.301$$

3. Сменить метод интегрирования на Singular Endpoint, для чего установить курсор в подынтегральное выражение, вызвать контекстное меню щелчком правой кнопки мыши, щелкнуть по команде Singular Endpoint. Рассмотреть влияние всех доступных в меню методов на вычисление результата.
4. Сохранить документ под именем **Zadanie3**.

7.2. Задание «Расчет автоклава»

В автоклаве ведется реакция при температуре 130 °С и давлении 10 атм в атмосфере азота. Объем газового пространства 100 л. Вследствие неплотностей давление в течение 10 мин уменьшилось до 9.7 атм. Допустимым давлением является 6 атм. Следует подсчитать, как долго будет продолжаться процесс в аппарате, и какой порядок имеет величина неплотности.

Истечение газа принимаем как адиабатическое и обратимое.



Подготовка к решению

Расход газа на выходе из автоклава максимален при критическом давлении, кГ/м^2 , вычисляемом по формуле

$$p_{kr} = p \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k}{k-1}},$$

где k – величина, вычисляемая по формуле

$$k = \frac{C_p}{C_v},$$

где C_p , C_v – теплоемкости газа при постоянном давлении и постоянном объеме, кал/моль, соответственно, связанные соотношением

$$C_p - C_v = R,$$

где R – газовая постоянная и $C_v = 5$ кал/моль для азота.

При этом температура на выходе K вычисляется как

$$T_{kr} = T \left(\frac{2}{k+1} \right),$$

где T – температура в автоклаве, K .

Рассчитаем критический удельный объем газа, $\text{м}^3/\text{кг}$, при этих условиях:

$$v_{kr} = \frac{Vm}{m} \cdot \frac{T_{kr}}{T_0} \cdot \frac{p_0}{p_{kr}},$$

где Vm , m – объем 1 кг-моль азота при нормальных условиях и молекулярный вес газа при нормальных условиях $T_0 = 273$ К, $p_0 = 10^4$ кг/м^2 , соответственно.

Для азота известны

$$Vm = 22.4 \text{ м}^3/(\text{кг-моль}) \text{ и } m = 28 \text{ моль}^{-1}.$$

При изменении давления от 10 до 6 атм критическое давление будет всегда больше атмосферного, до которого газ расширяется после выхода из автоклава.

Скорость выхода газа при критических условиях, м/с , вычисляется по формуле

$$u_{kr} = \sqrt{g \cdot k \cdot p_{kr} \cdot v_{kr}},$$

где g – ускорение свободного падения, м/с^2 .

Весовой расход азота на выходе из автоклава, $\text{кг/м}^2 \cdot \text{с}$, равен

$$G = \frac{u_{kr}}{v_{kr}}.$$



Вес находящегося в автоклаве газа, кг, равен

$$W = \frac{Vg}{\nu p},$$

где Vg – объем газового пространства, м³; νp – удельный объем газа в автоклаве, м³/кг, при давлении p , кг/м².

При падении давления на dp вес будет убывать:

$$dW = \frac{-Vg}{\left(\frac{Vm}{m} \cdot \frac{T}{T_0} \cdot p_0 \cdot \frac{1}{dp}\right)}.$$

С другой стороны, падение давления произошло за время $d\tau$, с, при истечении азота через щель сечением sf , м². Уравнение расхода имеет вид

$$W = G \cdot sf \cdot \tau.$$

Подставив выражения для G и νkr , вычислим убыль газа:

$$dW = \frac{ukr \cdot sf}{\frac{Vm}{m} \cdot \frac{Tkr}{T_0} \cdot \frac{p_0}{\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}} \cdot \frac{1}{p}} d\tau.$$

Приравнивая правые части двух выражений для dW , выразим $d\tau$

$$d\tau = \frac{1}{sf} \frac{\frac{-Vg}{\left(\frac{Vm}{m} \cdot \frac{T}{T_0} \cdot p_0\right)}}{ukr} \cdot dp.$$

$$\frac{Vm}{m} \cdot \frac{Tkr}{T_0} \cdot \frac{p_0}{\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}} \cdot \frac{1}{p}$$

Интервал времени и значения начального и конечного давлений известны, найдем величину сечения неплотности sf , а затем и требуемый интервал времени, после которого реакция не может протекать.

Для этого из уравнения для $d\tau$ выразим sf , проинтегрируем полученное выражение по давлению, подставив значения начального давления 10 атм, а конечного – значение 9.7 атм. Также подставим известное значение интервала времени $d\tau = 10$ мин (600 с).



Затем, зная величину сечения неплотности sf , найдем искомый интервал времени, за который давление опустится с 10 до 6 атм.

Выполнение задания

1. Открыть Mathcad.
2. В первой строке ввести исходные данные, приводя их к одной системе единиц.

Имена переменным даны не с использованием индексов массивов, а с использованием нижнего уровня.

Поэтому для ввода части имени нижнего уровня вводить символ «.», после чего Mathcad образует нижний уровень имени:

$$R := 2 \quad C_v := 5$$

$$T := 403 \quad V_g := 0.1 \quad d\tau := 600$$

$$T_0 := 273 \quad p_0 := 10^4$$

$$V_m := 22.4 \quad m := 28$$

Вводя символ τ , использовать панель **Греческий (Greek)**.

3. В строке ниже рассчитать

$$C_p := R + C_v$$

4. Правее ввести блок

$$k := \frac{C_p}{C_v}$$

5. Ниже вычислить

$$T_{kr} := T \cdot \left(\frac{2}{k+1} \right)$$

6. В следующей строке ввести блок

$$u_{kr} := \sqrt{9.81 \cdot k \cdot \left[\left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k}{k-1}} \right] \cdot \left[\frac{V_m}{m} \cdot \frac{T_{kr}}{T_0} \cdot \frac{p_0}{\left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k}{k-1}}} \right]}$$

Для этого ввести имя переменной u_{kr} , шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, нажать клавишу с « $\sqrt{\quad}$ » для ввода знака квадратного корня. Под знаком корня ввести число 9.81, знак «*», имя k , знак «*», число 2, знак «/», выражение $k+1$.



Затем нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором дробь и вставить шаблон задания степени при помощи одновременного нажатия клавиш «Ctrl» и «^». Ввести в шаблон степени имя k, нажать клавишу с «/», набрать знаменатель степени k-1. Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором выражение

$$\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}},$$

ввести знак «*»,

затем дробь $\frac{V_m}{m}$,

нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором дробь, нажать клавишу с «*»,

ввести дробь $\frac{T_{kr}}{T_0}$, где для ввода 0 использовать клавишу с «.»

Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором последнюю дробь и ввести знак «*», затем ввести имя p, нажать клавишу с «.» и ввести 0.

Для ввода знаменателя нажать клавишу с «/».

7. Скопировать в знаменатель введенное ранее выражение

$$\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}.$$

8. В следующей строке ввести выражение для вычисления sf:

$$sf := \frac{\frac{-V_g}{\left(\frac{V_m}{m} \cdot \frac{T}{T_0} \cdot P_0\right)} \cdot \frac{1}{p}}{\frac{V_m}{m} \cdot \frac{T_{kr}}{T_0} \cdot \frac{P_0}{\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}}} \cdot d\tau$$



Для этого ввести имя переменной sf , шаблон «:=» панели **Калькулятор** (*Calculator*), ввести шаблон интеграла с верхним и нижним пределом из панели **Математический анализ** (*Calculus*), задать значения верхнего предела 9.7, нижнего 10, далее ввести подынтегральную функцию, представляющую собой частное двух дробей. Будьте внимательны при вводе функции, обратите внимание на местоположение дифференциала dr в выражении.

- а) Ввести выражение для числителя

$$\frac{-Vg}{\left(\frac{Vm}{m} \cdot \frac{T}{T_0} \cdot p_0 \right)}$$

Для этого:

- ввести выражение для числителя дроби ($-Vg$), нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором числитель, нажать клавишу «/», чтобы получить шаблон дроби;
- ввести выражение для знаменателя

$$\left(\frac{Vm}{m} \cdot \frac{T}{T_0} \cdot p_0 \right)$$

Для ввода нижних частей имен использовать клавишу с «.», после чего вводить 0.

- б) Нажимать клавишу «Пробел», пока курсор не охватит дробь

$$\frac{-Vg}{\left(\frac{Vm}{m} \cdot \frac{T}{T_0} \cdot p_0 \right)}$$

- в) Нажать клавишу с «/» для получения шаблона знаменателя.
 г) Ввести в знаменатель подынтегрального выражения новую дробь

$$\frac{ukr}{\frac{Vm}{m} \cdot \frac{Tkr}{T_0} \cdot \frac{p_0}{\frac{k}{k+1}} \cdot \frac{1}{p}}$$

Для этого:

- ввести выражение для числителя ukr ;
- нажать клавишу «/» для получения шаблона дроби;
- ввести выражение для знаменателя



$$\frac{V_m}{m} \cdot \frac{T_{kr}}{T_0} \cdot \frac{P_0}{\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}} \cdot \frac{1}{p}$$

Для ввода нижних частей имен использовать клавишу с «.», после чего вводить нижнюю часть имени 0.

- д) В шаблон переменной интегрирования ввести имя p.
 - е) При помощи клавиши «Пробел» охватить курсором построенное интегральное выражение.
 - ж) Нажать клавишу «/», ввести имя dt в знаменатель. Вывести курсор за пределы выражения.
9. Вывести в следующей строке рассчитанное значение переменной sf. Для этого ввести имя переменной и знак «=»

$$sf = 2.178 \times 10^{-8}$$

10. В следующей строке ввести выражение для вычисления интервала времени τ_k (рис. 7.1).

$$\tau_k := \frac{1}{sf} \cdot \int_{10}^6 \frac{\frac{-V_g}{\left(\frac{V_m}{m} \cdot \frac{T}{T_0} \cdot P_0\right)}}{\frac{ukr}{\frac{V_m}{m} \cdot \frac{T_{kr}}{T_0} \cdot \frac{P_0}{\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}} \cdot \frac{1}{p}}} dp$$

Рис. 7.1. Выражение для вычисления интервала времени τ_k

Для этого:

- ввести имя τ_k , шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**;
- ввести 1, нажать клавишу «/», в знаменатель ввести sf;
- нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором дробь, нажать «*».



Для получения интегрального выражения скопируем его из введенного ранее блока:

- установить курсор в интегральное выражение, где рассчитывалось значение переменной sf;
- охватить курсором все выражение при помощи клавиши «Пробел»

$$\int_{10}^{9.7} \frac{\frac{-Vg}{\left(\frac{V_m}{m} \cdot \frac{T}{T_0} \cdot P_0\right)}}{ukr} dp$$

$$\frac{\frac{V_m}{m} \cdot \frac{Tkr}{T_0} \cdot \frac{P_0}{\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}}}{\frac{1}{p}}$$

- скопировать выделенное выражение в буфер обмена;
- перевести курсор в незаполненный шаблон в выражении для вычисления τ_k и вставить из буфера обмена скопированное выражение;
- вывести курсор за пределы выражения.

11. Ниже вывести рассчитанное значение величин τ_k

$$\tau_k = 1.006 \times 10^4.$$

12. Сохранить документ под именем **Azot** и закрыть его.



8. ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ В MATHCAD

Для нахождения производных функции или выражения используется шаблон панели *Математический анализ (Calculus)*. Панель имеет шаблоны:

$$\frac{d}{d\blacksquare} \quad \text{для производных первого порядка, инструмент } \frac{d}{dx};$$
$$\frac{d^n}{d\blacksquare^n} \quad \text{для производных более высоких порядков, инструмент } \frac{d^n}{dx^n};$$

В шаблонах необходимо указать:

- переменную дифференцирования, находящуюся в нижней части шаблона;
- для производной высших порядков – порядок производной в нижней части шаблона;
- выражение или функцию, от которой берется производная.

Mathcad может вычислять при помощи шаблона $\frac{d^n}{d\blacksquare^n}$ производные не выше 5 порядка. Для вычисления производной более высокого порядка можно последовательно вычислить производные более низких порядков, используя вложение шаблонов производных друг в друга.

Mathcad может вычислять частные производные функций и выражений. Для нахождения частной производной используются шаблоны обычных производных, поскольку визуальное представление шаблона не влияет на вычисления. Для принятого в математике представления частной производной можно изменить ее написание командой **Отображать производную как/Частную производную (View Derivative As/Partial Derivative)** контекстного меню выражения.

В численном дифференцировании применяется алгоритм метода Рундера, вычисляющий производную с точностью до 7–8 знака после запятой. Погрешность дифференцирования определяется алгоритмом и не изменяется пользователем.

Задание «Вычисление производной от функции»

Найти значение производной функции

$$f(x) = 2 \cdot x^2 + 5 \cdot x - 8$$

в точке $x=5$.



1. Создать новый документ.
2. Задать вид функции
 $f(x) := 2 \cdot x^2 + 5 \cdot x - 8$
3. Ввести имя функции с аргументом $f(x)$, шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, число 2, нажать клавишу с «*», ввести имя x , нажать клавишу с «^», ввести число 2, нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить все выражение $2 \cdot x^2$, ввести оставшуюся часть выражения.
4. Ввести значение точки, в которой нужно найти значение производной
 $x := 5$
5. Ввести имя x , шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, число 5.
6. В следующей строке вставить шаблон первой производной из панели **Математический анализ (Calculus)**, ввести имя переменной дифференцирования x , указать имя функции, для которой нужно найти производную, ввести знак «=»
 $\frac{d}{dx} f(x) = 25$
7. Сохранить документ под именем **diff**.



9. РЕШЕНИЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В MATHCAD

9.1. Решение задач в обычной математической постановке

Mathcad предлагает функцию **odesolve** для решения краевых задач и задач Коши в привычной математической постановке. Эти задачи для уравнения вида

$$a(x)y^{(n)} + F(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) = f(x)$$

определяются одним из видов условий:

– для задачи Коши – начальные условия

$$y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y_{0,1}, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_{0,n-1},$$

– для краевой задачи – граничные условия в виде значений функции на концах отрезка [a;b]

$$y^{(k)}(a) = y_{a,k}, y^{(m)}(b) = y_{b,m}, k = \overline{0, n-1}, m = \overline{0, n-1}.$$

Число условий должно быть равно порядку указанного дифференциального уравнения.

Вид записи функции:

Odesolve(x,b,step), аргументы функции:

x – переменная интегрирования (аргумент искомой функции);

b – конец интервала интегрирования; поиск решения будет проводиться на интервале, где начальная точка задается условиями, а конечная – параметром b;

step – число шагов, может отсутствовать. По умолчанию step=1000.

Обращаясь к функции **odesolve**, необходимо сформировать блок поиска решения, начинающийся со слова **Given** и включающий в себя записи уравнений в общепринятой математической постановке, а также начальные либо граничные условия.

Завершает блок вызов функции Odesolve в виде

«имя»:=Odesolve(x,b,step),

где «имя» – любое имя переменной.

При записи уравнений для задания производных первой степени

$$\frac{d}{dx}$$

вида $\frac{d}{dx}$ используются шаблоны панели *Математический анализ (Calculus)*, при задании знака производной в виде штриха используется сочетание клавиш [Ctrl]+[F7].



Для задания знака равенства используется шаблон «=» панели **Булева алгебра (Boolean)**. При упоминании имени функции в записи задачи необходимо указывать ее с аргументами, например $y(x)$.

Обратите внимание, что использование других математических блоков в построенном блоке Given...Odesolve нельзя.

Таким образом, в документе появляется функция с именем «имя», зависящая от переменной интегрирования. Аналитическую запись такой функции увидеть нельзя, но можно получить ее значения в различных точках, вызвав эту функцию с нужным значением параметра. Просмотреть вид функции можно также в графическом виде.

Используемые математические методы. По умолчанию функция **Odesolve** использует **Метод Адамса(BDF) (Adams (BDF))**. Функция **Odesolve** подключает один из методов: для нежестких задач используется метод Адамса, если алгоритм функции **Odesolve** выявил жесткость решаемой задачи, то будет автоматически подключен метод **BDF (Backward Differential Formula)** Однако этот метод не рекомендуется использовать для решения задач с высокой жесткостью.

Можно, используя команды контекстного меню функции **Odesolve**, подключать методы:

- Рунге-Кутта с автоматической адаптацией размера шага – команда **Адаптивный метод (Adaptive)**;
- Рунге-Кутта с фиксированным шагом – команда **С постоянным шагом (Fixed)**;
- метод решения жестких систем – команда **Метод RADAUS (RADAUS)**. Метод хорошо решает задачи с высокой жесткостью.

Приступая к решению, функция **Odesolve** проводит попытку привести дифференциальное уравнение к виду, когда производная наивысшей степени в уравнении стоит в левой части и приравнена к оставшейся части:

$$a(x)y^{(n)} = f(x) - F(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}).$$

В том случае, если попытка такого преобразования завершилась неудачно, функция прекращает работу.

Объединение обыкновенных дифференциальных уравнений с помощью оператора условия. Если вид дифференциального уравнения изменяется с изменением аргумента, например, уравнение содержит ступенчатую разрывную функцию, то такое уравнение можно записать с использованием функции условия **if**, что позволит записать несколько уравнений в виде одного выражения. В этом случае в запись



уравнения в блоке **Given...Odesolve** вставляются выражения, построенные на основе функции **if**.

Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений функцией Odesolve. Функция **Odesolve** может решать и системы обыкновенных дифференциальных уравнений. В этом случае в перечень аргументов функции **Odesolve** добавляется еще один аргумент, представляющий собой вектор, элементы которого представляют собой искомые функции. Этот аргумент должен стоять на первом месте в перечне аргументов функции **Odesolve**.

Замечание. Функция **Odesolve** не может использоваться внутри пользовательских программ **Mathcad**. При необходимости решения дифференциальных уравнений в пользовательской программе следует использовать функции **Rkfixed**, **Rkadapt**, **Bulstoer**, описанные ниже.

9.2. Задание «Решение дифференциального уравнения первого порядка функцией odesolve»

Решить дифференциальное уравнение, учтя начальное приближение для искомой функции

$$y'(x) = 2x^2 - 2$$

$$y(0) = 10$$

Найти решение задачи на интервале $[0;1]$ за 150 шагов. Вывести значение функции в точках 0 и 1.

1. Создать новый документ **Mathcad**.
2. Задача поставлена в форме задачи Коши. Сформировать блок поиска решения:

given

$$y'(x) = 2 \cdot x^2 - 2$$

$$y(0) = 10$$

$Y := \text{odesolve}(x, 1, 150)$

Для этого:

- a) В первой строке документа ввести слово **given**.
- b) В строке ниже записать дифференциальное уравнение в представленной форме:
 - ввести имя функции **y**;
 - нажать сочетание клавиш **[Ctrl]+[F7]**, получив знак производной;
 - ввести открывающуюся скобку, аргумент функции **x** и закрывающуюся скобку;



- ввести знак равенства при помощи шаблона « \Rightarrow » панели **Булева алгебра (Boolean)**;
 - в образовавшийся шаблон ввести правую часть уравнения: число 2, знак умножения и имя аргумента x ;
 - для задания степени при x нажать клавишу « \wedge » и в образовавшийся шаблон ввести значение 2, затем для перехода на уровень всего выражения нажать клавишу «Пробел» и ввести оставшуюся часть выражения.
3. В строке ниже ввести начальное условие:
- ввести имя функции y , открыть скобку, ввести 0, закрыть скобку;
 - вставить знак равенства при помощи шаблона « \Rightarrow » панели **Булева алгебра (Boolean)**. ввести число 10.
4. В строке ниже задать вызов функции в виде
 $Y := \text{odesolve}(x, 1, 150)$
 Для этого:
- ввести имя переменной Y , шаблон « \Rightarrow » из панели **Калькулятор (Calculator)**;
 - вызвать **Мастер функций** кнопкой **Стандартной** панели инструментов;
 - в списке **Категории функций (Function Category)** выбрать категорию **Differential Equation Solving**, в списке **Имя функции (Function name)** – имя функции **odesolve**, щелкнуть по кнопке **ОК**;
 - в полученные в выражении шаблоны проставить аргументы функции:
 x – переменную интегрирования;
 1 – конечную точку интервала $[0; 1]$;
 150 – число шагов интегрирования.
 - вывести курсор за пределы выражения.
 В переменной Y будет храниться вид функции $y(x)$.
5. Получить значения функции Y в точках $x=0$ и $x=1$
 $Y(0) = 10 \quad Y(1) = 8.667$.
 Для этого:
- в строке ниже вызова функции **odesolve** ввести имя Y , открыть скобку, ввести значение правой точки – 0 и закрыть скобку.
 - ввести знак « \Rightarrow ». Mathcad выведет значение. Проверить, совпадает ли значение с заданным в условии.
 - перевести курсор в строке правее и вывести аналогичным способом значение функции в точке 1.
6. Сохранить документ под именем **Diff1**, закрыть его.



9.3. Задание «Решение дифференциального уравнения высшего порядка функцией odesolve»

Решить задачу

$$\frac{d^3}{dx^3} y(x) + x^2 \frac{d}{dx} y(x) + xy(x) = e^x \cos(x)$$

$$y(0) = -8; \quad \frac{d}{dx} y(0) = 3; \quad \frac{d^2}{dx^2} y(0) = 3;$$

$$x \in [0;5].$$

Найти решение задачи на заданном интервале.

Представить на двумерной диаграмме искомую функцию, а также ее первую производную и первообразную на заданном интервале.

1. Открыть документ Mathcad **Diff1**.
2. Задача поставлена в форме задачи Коши. Переместить курсор ниже последнего введенного блока и сформировать блок поиска решения аналогичный приведенному ниже (сохранение полученных значений проводится в переменную Y, число шагов выбрано заданным по умолчанию):

given

$$y'''(x) + x^2 \cdot y'(x) + x \cdot y(x) = e^x \cdot \cos(x)$$

$$y(0) = -8$$

$$y'(0) = 3$$

$$y''(0) = 3$$

$$Y := \text{Odesolve}(x, 5)$$

3. Ввести ранжированную переменную X, задающую набор точек, в которых будем проводить построение функции Y:

$$X := 0, 0.1..5$$

4. Вывести на двумерную диаграмму вид полученной функции, ее первой производной и первообразной на заданном интервале:
 - вставить шаблон двумерной диаграммы из панели **График (Graph)**;
 - в шаблон переменной рядом с осью абсцисс вставить имя X;
 - в шаблон функции рядом с осью ординат – имя функции Y(X) и выражения через запятую, согласно рис. 9.1. Для формирования производной и определенного интеграла использовать шаблоны из панели **Математический анализ (Calculus)**.



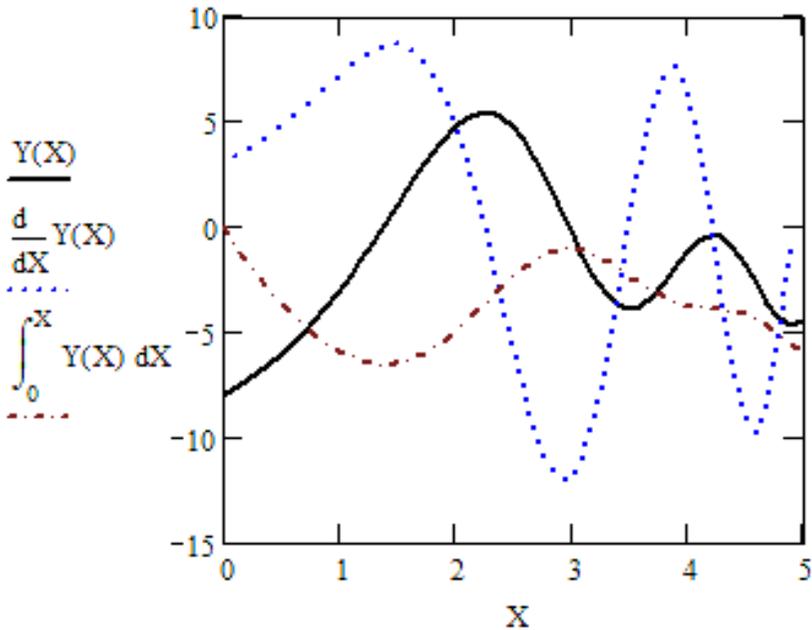


Рис. 9.1. Диаграмма со значениями искомой функции и ее производной и первообразной

5. Сохранить документ **Diff1**, закрыть его.

9.4. Задание «Решение дифференциального уравнения с разрывными функциями»

Решить задачу

$$\frac{d^2}{dx^2} y(x) + g(x) \frac{d}{dx} y(x) = f(x)$$

$$y(0) = 1.5; \quad y(2.2) = -0.5;$$

$$x \in [0; 4];$$

если $x < 1.5$, то $g(x) = x^2$, иначе $g(x) = -2 + x^{0.4}$;

если $x < 1$, то $f(x) = \sin(2x)$, иначе $f(x) = 4$.

Найти решение задачи на заданном интервале. Представить на двумерной диаграмме искомую функцию и ее первую производную на заданном интервале.



1. Открыть документ Mathcad **Diff1**. Переместить курсор ниже последнего введенного блока.
2. Сформировать блок поиска решения:
given

$$y''(x) + y'(x) \cdot \text{if}(x < 1.5, x^2, -2 + x^{0.4}) = \text{if}(x < 1, \sin(2 \cdot x), 4)$$

$$y(0) = 1.5 \quad y(2.2) = -0.5$$

$$Y := \text{Odesolve}(x, 4)$$

3. Ввести переменную X, задающую набор точек, в которых будем выводить значения функции Y:
X := 0, 0.1..4
4. Вывести на двумерную диаграмму вид полученной функции и ее первой производной на заданном отрезке аналогично предыдущему заданию, получив диаграмму согласно рис. 9.2. Отформатировать диаграмму согласно приведенному рисунку.

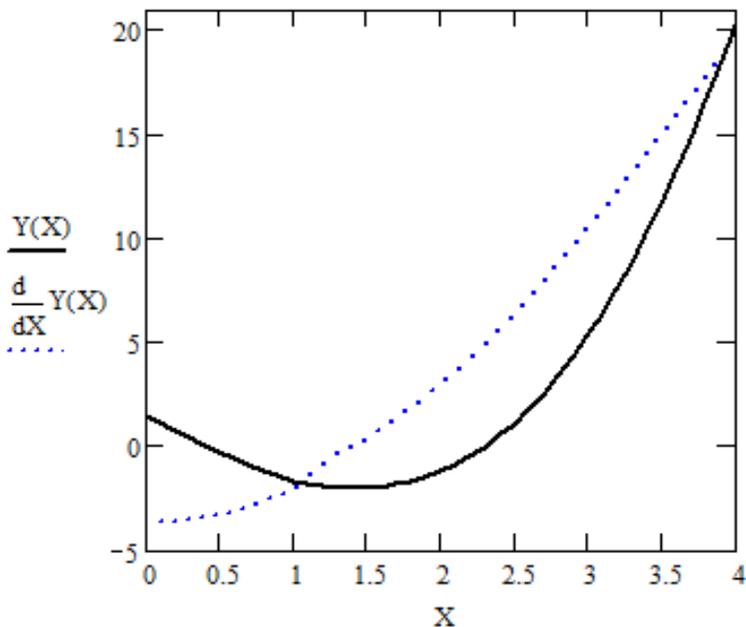


Рис. 9.2. Диаграмма со значениями искомой функции и ее производной

5. Сохранить документ **Diff1**, закрыть его.



9.5. Задание «Решение системы дифференциальных уравнений функцией Odesolve»

Решить систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$0.6 \frac{d}{dt} x(t) - 4 \frac{d}{dt} y(t) = 0.1$$

$$\frac{d}{dt} y(t) - t \cdot x(t) = 1$$

$$y(1.2) = 8; \quad x(0) = 1;$$

$$x \in [0; 2].$$

1. Открыть документ Mathcad **Diff1**.
2. Переместить курсор ниже последнего введенного блока и сформировать блок поиска решения аналогичный приведенному ниже. Сохранение полученных значений переменных x и y

проводится в вектор $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$, число шагов выбрано заданным по умолчанию.

given

$$0.6x'(t) - 4 \cdot y'(t) = 0.1$$

$$y'(t) - t \cdot x(t) = 1$$

$$x(0) = 1$$

$$y(1.2) = 8$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left[\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, t, 2 \right]$$

3. Введем переменную t , задающую набор точек, в которых будем выводить значения функции Y
 $t := 0, 0.1..3$
4. Вывести на двумерную диаграмму вид полученной функции и ее первой производной на заданном отрезке: вставить шаблон двумерной диаграммы из панели **График (Graph)**.
5. В шаблон переменной y оси абсцисс вставить имя t , в шаблон функции y оси ординат – имена функций через запятую, согласно рис. 9.3.
6. Отформатировать диаграмму согласно приведенному рисунку.



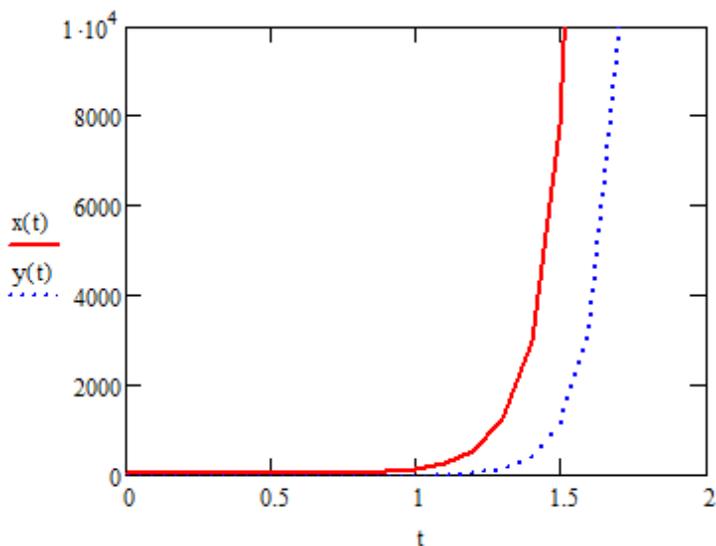


Рис. 9.3. Диаграмма со значениями искомых функций

7. Сохранить документ **Diff1**, закрыть его.

9.6. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений в виде задачи Коши с понижением порядка

Ряд следующих функций решает отдельные дифференциальные уравнения и системы дифференциальных уравнений, сформированные в виде задачи Коши, записанные в стандартной для Mathcad форме:

- система уравнений состоит из n дифференциальных уравнений первого порядка;
- каждое из n уравнений первого порядка приведено к виду

$$\frac{d}{dx} f_i(x) = F(x, f_1(x), \dots, f_n(x)), \quad i = \overline{1, n}.$$

- для каждой из функций, участвующей в левой части дифференциального уравнения, задано начальное условие.

Легко показать, что обычное дифференциальное уравнение порядка n может быть сведено к системе таких уравнений путем использования подстановки.

Для полученной системы уравнений создается вектор-столбец, каждый из элементов которого является правой частью соответст-



вующего дифференциального уравнения полученной системы. Начальные условия записываются также в виде вектора-столбца.

Рассмотрим встроены функции MathCad:

– **rkfixed(y,x1,x2,npoints,D)** – функция реализует метод Рунге-Кутты с фиксированным шагом.

Функция использует параметры:

x1, x2 – начальная и конечная точки интервала интегрирования, соответственно;

y – вектор начальных условий задачи Коши. Значения элементов вектора равны правым частям уравнений, задающих начальные условия в начальной точке интервала интегрирования. В случае системы дифференциальных уравнений вектор y содержит первыми начальные условия для первой переменной, затем для второй и т.д.;

npoints – число точек разбиения интервала, в которых необходимо выдать значения искомых функций;

D – вектор-функция размера n, каждый элемент которой представляет правую часть одного из дифференциальных уравнений системы, записанных в стандартной для Mathcad форме. Вектор-функция имеет два аргумента: переменную интегрирования и вектор для обозначения искомых функций;

Функция возвращает матрицу, в которой число столбцов на 1 больше, чем число уравнений в системе, а число строк матрицы равно (1+npoints).

Первый столбец матрицы результатов соответствует значениям переменной интегрирования, остальные столбцы соответствуют значениям полученного решения в этих точках.

Аналогична запись следующих функций, которые возвращают матрицу, значения и размерность которой определяются аналогично функции rkfixed:

– **Rkadapt(y,x1,x2,npoints,D)** – функция реализует метод Рунге-Кутты с автоматическим выбором шага. Функцию можно использовать для медленно изменяющихся функций.

– **Bulstoer(y,x1,x2,npoints,D)** – функция реализует метод Булирша-Штера, работающий точнее метода Рунге-Кутты. Функцию можно использовать для систем дифференциальных уравнений, имеющих гладкое решение.

– **Adams(y,x1,x2,npoints,D,tol)** – функция реализует метод Адамса с автоматическим выбором шага. Здесь tol – число, задающее точность решения.



В том случае, если пользователь может записать аналитический вид частных производных правых частей уравнений в виде вектор-функции J , то можно использовать следующие функции и методы решения обыкновенных систем дифференциальных уравнений:

– **AdamsBDF(y,x1,x2,npoints,D[,J][,tol])** – функция реализует метод Адамса с автоматическим выбором шага. Возвращает матрицу, значения и размерность которой определяются аналогично функции `rkfixed`.

В том случае, если матрица коэффициентов правых частей системы уравнений является жесткой, т.е. близка к сингулярной матрице, лучше использовать следующие функции:

– **Stiffb(y,x1,x2,npoints,D,J)** – реализация метода Булирша-Штера для жестких систем;

– **StiffR(y,x1,x2,npoints,D,J)** – реализация метода Розенброка для жестких систем;

– **Radau(y,x1,x2,npoints,D[,J][,M][,tol])** – реализация метода RADAU5, основанная на трехстадийном полностью неявном методе Рунге-Кутты пятого порядка точности для жестких систем;

J – вектор-функция, возвращающая матрицу размера $n \times (n+1)$, ее первый столбец содержит выражения для частных производных элементов вектора D по переменной интегрирования, остальные столбцы – выражения соответствующие элементам матрицы Якоби для системы дифференциальных уравнений. Вектор-функция имеет два аргумента: переменную интегрирования; вектор начальных условий y ;

M – матрица связи переменных в форме $M \left(\frac{dy}{dx} \right) = f(x, y)$. При записи

элементов вектор-функции следует имена искомых функций заменять соответствующими именами элементов вектора y .

Для перечисленных функций в версиях Mathcad до 13 включительно реализованы дополнительные алгоритмы, при использовании которых можно влиять на точность полученного решения.

bulstoer(y,x1,x2,acc,D,kmax,s) – аналог функции `Bulstoer`;

rkadapt(y,x1,x2,acc,D,kmax,s) – аналог функции `Rkadapt`;

stiffb(y,x1,x2,acc,D,J,kmax,s) – аналог функции `Stiffb`;

stiffR(y,x1,x2,acc,D,J,kmax,s) – аналог функции `StiffR`.

В этих функциях нет возможности задания точного числа шагов, поэтому число строк в получаемой матрице предсказать невозможно. Целесообразно применять их в том случае, когда интересуют значения



искомых функций в конечной точке интервала, это позволит значительно сократить время вычисления.

Функции используют следующие дополнительные параметры: acc – точность поиска решения, положительное действительное число; kmx – максимальное число точек, в которых оценивается решение, положительное целое число. Это число является верхней границей для числа проделанных алгоритмом шагов и верхней границей числа строк в матрице решения;

s – минимальный размер шага алгоритма, для которого будет записываться полученное решение в матрице решения. Если вычисленный алгоритмом шаг меньше заданного, вычисления будут проведены, но полученная точка не будет занесена в результирующую матрицу.

9.7. Задание «Решение системы дифференциальных уравнений с использованием понижения порядка производных»

Решить задачу

$$z'' = -z' + 2z$$
$$z(0) = 1, \quad z'(0) = 3$$

на интервале $[0; 1]$.

Подготовка к решению

Задача имеет вид задачи Коши. Найдем значения функции z в 100 точках заданного интервала при помощи функции `rkfixed`.

Представим дифференциальное уравнение в виде системы из двух дифференциальных уравнений первого порядка. Введем новую переменную y :

$$z' = y$$

Тогда дифференциальное уравнение можно переписать в виде уравнения первого порядка

$$y' = -y + 2z$$

Получили два уравнения первого порядка

$$z' = y$$

$$y' = -y + 2z$$

Для решения двух уравнений первого порядка потребуется два начальных условия. Поскольку функция y является первой производной от z , то для функции y начальное условие имеет вид

$$y(0) = 3$$



Для функции z начальное условие известно:

$$z(0) = 1$$

Задача примет вид

$$z' = y$$

$$y' = -y + 2z$$

$$z(0) = 1$$

$$y(0) = 3$$

Выполнение задания

1. Создать новый документ Mathcad.
2. Задать вектор начальных условий v , первым элементом которого будет значение функции z в начале интервала, а вторым – значение функции y в той же точке:

$$v := \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Для этого:

- ввести имя v , шаблон «:=», шаблон матрицы панели **Матрица (Matrix)**, задать число строк 2 и число столбцов 1.
- В качестве первого элемента вектора задать число 1 (это начальное условие для функции z), в качестве второго – число 3 (это начальное условие для функции y).

Вывести курсор за пределы блока.

3. Создадим в следующей строке вектор-функцию d правых частей дифференциальных уравнений, обозначив ее аргументы как t и v , то есть $d(t,v)$.

Поскольку в п. 2 при формировании вектора v начальных значений первым элементом поставили начальное значение для функции z , то везде при формировании задачи на первое место в векторах следует ставить информацию о функции z . Поэтому информация о функции y будет всегда идти на втором месте во всех векторах.

Итак, первым уравнением в векторе-функции d будет правая часть уравнения, соответствующего первой производной функции z

$$z' = y$$

Для записи правой части уравнения необходимо ввести обозначение для функции y .



Для обозначения искомых функций z и y при формировании информации о дифференциальных уравнениях в векторе-функции d используется ее второй аргумент, обозначен в п. 3 как v .

Поскольку информация о функции y идет на втором месте во всех векторах, то функцию y следует обозначать вторым по порядку элементом вектора v . Значит это элемент v_1 .

Соответственно, правая часть уравнения $z' = y$ примет вид v_1 .

На втором месте в векторе функции d будет стоять описание уравнения, соответствующего первой производной функции y :

$$y' = -y + 2z .$$

Используем следующие обозначения: для y ранее мы показали, что это v_1 , а для z следует использовать первый по счету элемент вектора v , это v_0 .

Правая часть уравнения примет вид

$$-v_1 + 2 \cdot v_0 .$$

4. Вектор-функция $d(t,v)$ примет вид

$$d(t,v) := \begin{pmatrix} v_1 \\ -v_1 + 2 \cdot v_0 \end{pmatrix}$$

Для ее ввода:

- ввести имя d , открывающую скобку, имя t – имя для переменной интегрирования, затем имя v и закрывающую скобку;
- ввести шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, шаблон матрицы панели **Матрица (Matrix)**;
- задать число строк 2 и число столбцов 1;
- в качестве первого элемента вектора ввести выражение v_1 , для этого ввести имя v , нажать клавишу с «[» и набрать число 1;
- в качестве второго элемента вектора-функции набрать выражение $-v_1 + 2 \cdot v_0$
коэффициенты элементов векторов задавать при помощи клавишу с «[».

5. Решить систему уравнений при помощи функции `rkfixed`, получив значения переменных z и y в 100 точках интервала $[0; 1]$:

$$Z = \text{rkfixed}(v, 0, 1, 100, d),$$

для чего: ввести имя Z , шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, вызвать **Мастер функций** из **Стандартной** панели инструментов, в списке **Категории функций (Function Category)** выбрать категорию **Решение дифференциального уравнения**



(Differential Equation Solving), в списке **Имя функции (Function name)** – имя функции **rkfixed**.

Проставить аргументы в шаблоны функции.

6. Вывести полученные значения матрицы Z . Для этого в следующей строке ввести имя Z и нажать клавишу « \Rightarrow » (рис. 9.4).

$Z =$

	0	1	2
0	0	1	3
1	0.01	1.03	2.99
2	0.02	1.06	2.981
3	0.03	1.09	2.973
4	0.04	1.119	2.966
5	0.05	1.149	2.959
6	0.06	1.178	2.952
7	0.07	1.208	2.947
8	0.08	1.237	2.942
9	0.09	1.267	2.937
10	0.1	1.296	2.934
11	0.11	1.325	2.93
12	0.12	1.355	2.928
13	0.13	1.384	2.926
14	0.14	1.413	2.925
15	0.15	1.443	2.924

Рис. 9.4. Значения матрицы Z

В блоке выведено 15 строк. Для просмотра остальных строк можно использовать линейки прокрутки, которые появляются после установки курсора в блок.

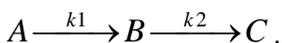
Расположение информации в матрице Z следующее:

- первый по счету столбец (с номером 0) содержит информацию о значениях переменной интегрирования t ;
 - второй (с номером 1) – информацию о той функции, которая во всех векторах шла на первой по счету. В нашем случае это z ;
 - третий – информация о той функции, которая во всех векторах шла на второй по счету. В нашем случае это y .
7. Сохранить документ под именем **Zadanie2**.



9.8. Задание «Моделирование кинетики последовательно протекающих реакций»

Рассмотрим химическую реакцию, протекающую согласно схеме



Пусть известны константы скоростей протекания реакций $k_1=0.134 \text{ ч}^{-1}$, $k_2=0.139 \text{ ч}^{-1}$. Время протекания реакций

$$t = \begin{cases} 10/k_1, & \text{если } k_1 \leq k_2; \\ 10/k_2, & \text{иначе.} \end{cases} .$$

В начальный момент времени количество вещества А равно 90 моль, вещества В равно 0 моль, вещества С равно 9 моль.

Найти количества веществ В и С по окончании реакции.

Сравнить найденные значения со значениями, рассчитанными по формулам

$$A = A_0 \cdot e^{-k_1 t}$$

$$B = \frac{A_0 \cdot k_1}{(k_2 - k_1)} \cdot (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t})$$

$$C = C_0 + A_0 - (A + B) .$$

Здесь A_0 – количество вещества А в начальный момент времени, t – точка по времени, в которой проводится расчет количества веществ А, В и С.

Подготовка к решению

Для веществ А, В и С верны уравнения

$$\frac{dA}{dt} = -k_1 \cdot A$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1 \cdot A - k_2 \cdot B$$

$$\frac{dC}{dt} = k_2 \cdot B .$$

Поскольку в стационарном состоянии концентрация вещества В не изменяется, то $k_1 \cdot A = k_2 \cdot B$, откуда $\frac{dC}{dt} = k_1 \cdot A$.



Решим задачу методом Рунге-Кутты, для чего будем использовать функцию **Rkadapt**. Дифференциальные уравнения уже записаны в стандартной форме.

Для использования функции **Rkadapt** необходимо иметь вектор с начальными условиями, вектор с записью правых частей дифференциальных уравнений, знать начальную и конечную границы интервала интегрирования.

Выполнение задания

1. Открыть новый документ.
2. Задать значения переменным k_1 и k_2 без размерностей согласно заданию.
3. В строке ниже ввести вектор x , содержащий начальные значения концентраций веществ. Поскольку веществ 3, то вектор будет иметь три элемента:

$$x := \begin{pmatrix} 90 \\ 0 \\ 9 \end{pmatrix}.$$

Элемент вектора x_0 соответствует количеству вещества А в начальный момент времени, x_1 – количеству вещества В, x_2 – количеству вещества С.

4. Используя элементы вектора x , записать ниже вектор-функцию D , содержащую правые части дифференциальных уравнений

$$D(t, x) := \begin{pmatrix} -k_1 \cdot x_0 \\ k_1 \cdot x_0 - k_2 \cdot x_1 \\ k_2 \cdot x_1 \end{pmatrix}$$

Для этого:

- ввести имя вектора-функции D , далее в скобках указать через «,» аргументы: функции: t – переменная интегрирования, x – вектор с начальными значениями;
- ввести шаблон «:=» из панели **Калькулятор (Calculator)** и шаблон матрицы из панели **Матрица (Matrix)**; в окне создания матрицы указать число строк равное 3 и число столбцов равное 1;
- в полученный шаблон вектора ввести выражения, соответствующие правым частям дифференциальных уравнений. При этом, вместо обозначений веществ А, В и С использовать соответствующие элементы вектора x .



Для ввода первого элемента набрать знак «-», имя k_1 , нажать клавишу с «*», ввести имя x , нажать клавишу с «[», ввести индекс 0.

Аналогичным образом ввести оставшиеся элементы.

5. Чтобы задать интервал времени протекания реакции, необходимо знать начальную и конечную точки интервала по времени.

Начало интервала соответствует точке $t=0$.

Задать в строке ниже значение переменной $t1:=0$.

6. Конец интервала зададим как

$$t_2 = \begin{cases} 10/k_1, & \text{если } k_1 \leq k_2; \\ 10/k_2, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Вычислим значение переменной t_2 . Для этого воспользуемся функцией Mathcad

if(«условие», «действие1», «действие2»).

В том случае, если значение «условие» истинно, функция вычисляет «действие1», в противном случае вычисляется «действие2».

В нашем случае запись функции примет вид

$$t_2 := \text{if}\left(k_1 \leq k_2, \frac{10}{k_1}, \frac{10}{k_2}\right)$$

Для ввода выражения:

- ввести имя переменной t_2 , шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**;
- вызвать **Мастер функций** при помощи соответствующей кнопки **Стандартной** панели инструментов, выбрать категорию функций **All (Все)**;
- указать имя функции **if**, после чего щелкнуть по кнопке **OK**.

7. В полученный шаблон функции ввести слева направо: условие $k_1 \leq k_2$, первое выражение для вычисления переменной $\frac{10}{k_1}$,

затем второе выражение $\frac{10}{k_2}$. Для ввода знака «≤» использовать соответствующий шаблон панели **Булева алгебра (Boolean)**.

8. Для решения задачи нужно определить число точек npoints, в которых алгоритм метода будет проводить вычисления.



Пусть $npoints$ – ближайшее целое для значения, вычисляемого по правилу: если скорость протекания первой реакции k_1 больше или равна скорости протекания второй реакции k_2 , то значение равно

$$100 + 5 \cdot \frac{k_1}{k_2}, \text{ иначе равно } 100 + 5 \cdot \frac{k_2}{k_1}.$$

Используем функцию $\text{floor}(a)$, вычисляющую ближайшее целое к числу, заданному аргументом a .

В качестве аргумента функции **floor** используем уже известную функцию **if**, которая вычислит нужное число.

В нашем случае запись функции примет вид

$$npoints := \text{floor} \left(\text{if} \left(\frac{k_1}{k_2} \geq 1, 100 + 5 \cdot \frac{k_1}{k_2}, 100 + 5 \cdot \frac{k_2}{k_1} \right) \right)$$

Для ввода выражения:

- ввести имя $npoints$, шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, вызвать **Мастер функций** при помощи соответствующей кнопки **Стандартной** панели инструментов, выбрать категорию функций **All (Все)** и указать имя функции **floor**, после чего щелкнуть по кнопке **ОК**;
- установить курсор в полученный шаблон функции и снова вызвать **Мастер функций**, выбрать категорию функций **All (Все)** и указать имя функции **if**, после чего щелкнуть по кнопке **ОК**;
- в полученный шаблон функции ввести слева направо: условие $\frac{k_1}{k_2} \geq 1$, первое выражение $100 + 5 \cdot \frac{k_1}{k_2}$, затем второе выражение $100 + 5 \cdot \frac{k_2}{k_1}$.

9. Теперь можно получить решение, вызвав функцию **Rkadapt**:

$$Z := \text{Rkadapt}(x, t_1, t_2, npoints, D).$$

Матрица Z содержит в первом столбце значения точек отрезка времени, а во втором, третьем и четвертом столбцах – значения количеств веществ A , B и C соответственно в этих точках.

10. Получить значения количеств веществ.

Поскольку матрица Z содержит соответствующие значения в столбцах, создадим для каждого из веществ A , B и C вектора A_n , B_n , и C_n , в которые занесем данные из матрицы Z , соответствующие количествам веществ.



В каждом столбце матрицы Z содержится $(n \text{ points} + 1)$ элементов. Для извлечения данных необходимо ввести ранжированную переменную n ,

$n := 0..n \text{ points}$

Ввести имя переменной, шаблон «:=» панели *Калькулятор (Calculator)*, значение 0, знак «;» для получения шаблона ранжированной переменной, и ввести имя переменной $n \text{ points}$.

11. Теперь можно провести присвоение элементам векторов данных из матрицы Z

$$t_n := (Z^{(0)})_n \quad A_n := (Z^{(1)})_n \quad B_n := (Z^{(2)})_n \quad C_n := (Z^{(3)})_n$$

Извлечем данные для точек по времени в вектор t .

Перевести курсор в строку ниже и ввести имя переменной t , после чего нажать клавишу с «[» и в образовавшийся шаблон индекса элемента вектора ввести имя ранжированной переменной n , она задаст количество элементов в векторе t .

Далее ввести шаблон «:=» панели *Калькулятор (Calculator)*, имя матрицы Z , затем шаблон извлечения столбца матрицы « $M^{< >}$ » панели *Матрица (Matrix)* и в образовавшийся шаблон ввести номер столбца, в котором находятся значения точек по времени, это 0.

Далее нажать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил выражение $Z^{(0)}$, нажать клавишу с «[» и в образовавшийся шаблон индекса элемента вектора ввести имя ранжированной переменной n .

Аналогично ввести выражения для извлечения данных в вектора

A_n из столбца с номером 1 матрицы Z ;

B_n из столбца с номером 2 матрицы Z ;

C_n из столбца с номером 3 матрицы Z .

12. Вывести значения количеств веществ в различных точках времени.

Для этого перевести курсор в следующую свободную строку и ввести имя вектора, содержащего точки по времени, t , ввести знак «=». Правее будут выведены значения элементов вектора. Блок с данными вектора будет занимать часть документа выше места вывода данных вектора. Он будет закрывать часть документа с введенными данными.

Перетащить блок с данными вектора t ниже по документу, пока все выведенные значения вектора не будут располагаться в свободном месте документа. Аналогичным образом правее вывести рассчитанные значения количества вещества A из вектора A , количеств веществ B и C из векторов B , C (рис. 9.5).



	0
0	0
1	0.711
2	1.421
3	2.132
4	2.843
5	3.554
6	4.264
7	4.975
8	5.686
9	6.397
10	7.107
11	7.818
12	8.529
13	9.24
14	9.95
15	10.661

 $t =$

	0
0	90
1	81.824
2	74.391
3	67.633
4	61.489
5	55.903
6	50.825
7	46.208
8	42.01
9	38.194
10	34.724
11	31.569
12	28.702
13	26.094
14	23.724
15	21.569

 $A =$

	0
0	0
1	7.779
2	14.119
3	19.221
4	23.259
5	26.385
6	28.735
7	30.425
8	31.557
9	32.219
10	32.49
11	32.435
12	32.112
13	31.572
14	30.858
15	30.005

 $B =$

	0
0	9
1	9.397
2	10.49
3	12.146
4	14.252
5	16.712
6	19.44
7	22.367
8	25.433
9	28.587
10	31.786
11	34.996
12	38.186
13	41.334
14	44.419
15	47.426

 $C =$

Рис. 9.5. Значения векторов t , A , B , C

13. Сравним полученные значения количества веществ с рассчитанными по предложенными формулам. Предварительно рассчитаем их. Задать в следующей свободной строке документа начальное значение концентрации вещества $A_0 := x_0$. Здесь x_0 – элемент вектора x .
14. Ввести вектора для расчета количества веществ по формулам

$$A1_n := A_0 \cdot e^{-k1t_n}$$

$$B1_n := \frac{A_0 \cdot k1}{k2 - k1} \cdot (e^{-k1t_n} - e^{-k2t_n})$$

$$C1_n := A_0 - (A1_n + B1_n) + x_2$$

Здесь x_2 – количество вещества C в начальный момент времени.

Для ввода выражений в следующей свободной строке ввести имя переменной $A1$, нажать клавишу со «[» и ввести имя ранжированной переменной n . Далее ввести шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, имя A_0 , знак умножения при помощи клавиши «*», букву «e», нажать клавишу с «^» и ввести выражение для степени:



-k1, знак умножения при помощи клавиши «*», имя t, нажать клавишу «[», в полученный шаблон ввести имя n.

В следующей свободной строке аналогичным способом ввести два оставшихся выражения.

15. Сравним значения полученных векторов A и A1, B и B1, а также C и C1.

Для этого введем функцию, вычисляющую среднеквадратическое отклонение двух векторов, обозначив их Y и Y1

$$\text{ot}(Y, Y1) = \frac{1}{\text{npoints}} \cdot \sqrt{\sum_n \frac{(Y_n - Y1_n)^2}{(Y1_n)^2}}$$

Ввести имя функции с указанием имен аргументов $\text{ot}(Y, Y1)$! шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, далее ввести 1, нажать клавишу «/» для получения шаблона дроби и ввести в знаменатель npoints, затем нажать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил всю дробь, и ввести знак умножения, нажав клавишу «*». Далее ввести шаблон «√» из панели **Калькулятор (Calculator)** и шаблон суммирования по ранжированной переменной \sum_n из панели **Вы-**

числение (Calculus).

В нижний шаблон ранжированной переменной, по которой ведется суммирование, ввести имя n, а в шаблон после знака суммы ввести

выражение $\frac{(Y_n - Y1_n)^2}{(Y1_n)^2}$.

Для этого ввести открывающуюся скобку, далее имя Y, нажать клавишу с «[», в полученный шаблон вставить имя индекса n, нажать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил выражение Y_n , ввести знак «-» и выражение $Y1_n$ аналогично предыдущему.

Далее нажать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил разность, и ввести закрывающуюся скобку; нажать клавишу с «^» и ввести показатель степени 2, нажать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил все выражение в скобках. Затем нажать клавишу «/» для получения дроби, и в знаменатель ввести $Y1_n$, нажать пробел, чтобы курсор охватил знаменатель, и нажать клавишу «^» для получения шаблона степени, куда ввести число 2. Вывести курсор из блока.

16. Вывести значения отклонения для каждого из веществ $\text{ot}(A,A1)$ $\text{ot}(B,B1)$ $\text{ot}(C,C1)$.



Для этого в следующей свободной строке ввести имя функции ot и в скобках в качестве аргументов указать через запятую имена A и $A1$. Далее ввести знак « \Leftarrow ». Mathcad выдаст

$$ot(A, A1) = 1.887 \times 10^{-11}$$

В строках ниже аналогичным образом получить значения отклонений для веществ B и C

$$ot(B, B1) = 1.086 \times 10^{-11}$$

$$ot(C, C1) = 7.261 \times 10^{-12}$$

Если получены не все значения или выдается сообщение об ошибке, проанализируйте причину.

17. Сохранить документ под именем **Diff2**.

18. Решить ту же задачу, используя функцию **Bulstoer**. Сравнить полученные значения, выведя результаты с большим числом значащих цифр.

Запись вызова функции **Bulstoer** аналогична записи для функции **Rkadapt**. Функция имеет то же количество аналогичных аргументов. Для записи новой функции перевести курсор в строку ниже и ввести

$$Z1 := \text{Bulstoer}(x, t1, t2, \text{npoints}, D).$$

В строке ниже ввести полученные значения в вектора

$$t3_n := (Z1^{(0)})_n \quad A3_n := (Z1^{(1)})_n \quad B3_n := (Z1^{(2)})_n \quad C3_n := (Z1^{(3)})_n$$

Ниже вывести рядом значения векторов A и $A3$, правее – B и $B3$, правее – C и $C3$.

19. Получить в следующей строке значения отклонений для новых значений

$$ot(A3, A1) \quad ot(B3, B1) \quad ot(C3, C1)$$

Ввести имя функции ot и в скобках в качестве аргументов указать через запятую имена A и $A3$. Далее ввести знак « \Leftarrow ». Mathcad выдаст

$$ot(A3, A1) = 9.362 \times 10^{-9}$$

В строках ниже аналогичным образом получить значения отклонений для веществ B и C

$$ot(B3, B1) = 5.091 \times 10^{-9}$$

$$ot(C3, C1) = 2.761 \times 10^{-9}$$

20. Сохранить документ под именем **Diff2**.

21. Решить эту же задачу при помощи функции **Odesolve**. Переместить курсор ниже последнего введенного выражения и ввести слово **given** для формирования блока решения.



22. Ниже ввести дифференциальные уравнения, описывающие протекание реакций. Для обозначения функций будем использовать названия веществ. Ввести уравнения, используя для обозначения производной сочетания клавиш <Ctrl> и <F7>:

$$A'(t) = -k_1 \cdot A(t)$$

$$B'(t) = k_1 \cdot A(t) - k_2 \cdot B(t)$$

$$C'(t) = k_2 \cdot B(t)$$

23. Ниже ввести начальные условия для функций, используя сведения о количестве веществ в начале реакции

$$A(0) = 90$$

$$B(0) = 0$$

$$C(0) = 9$$

24. Завершить блок решения вводом функции **Odesolve**

$$\begin{pmatrix} A2 \\ B2 \\ C2 \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left[\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix}, t, t2 \right]$$

25. Проверим, какова точность решения задачи методами, встроенными в алгоритм функции **Odesolve**. По умолчанию выбирается метод Адамса (BDF).

Ввести дополнительную переменную

$$j := 0.. \text{npoints} - 1$$

26. Извлечь результаты вычислений в массивы

$$A3_j := A2(t_j)$$

$$A3_{\text{npoints}} := A2(t_2)$$

$$B3_j := B2(t_j)$$

$$B3_{\text{npoints}} := B2(t_2)$$

$$C3_j := C2(t_j)$$

$$C3_{\text{npoints}} := C2(t_2)$$

27. Рассчитать отклонения

$$\text{ot}(A3, A1) = 2.222 \times 10^{-6}$$

$$\text{ot}(B3, B1) = 8.039 \times 10^{-7}$$

$$\text{ot}(C3, C1) = 8.788 \times 10^{-9}$$

Сравнить со значениями отклонений, полученными при решении задачи функциями `rkadap` и `Bulstoer`.



Используя контекстное меню функции Odesolve переключайте возможные методы решения задачи и найдите наиболее точный. Какой это метод?

28. Сохранить документ.

9.9. Задание «Моделирование кинетики химических реакций на основе жестких систем уравнений»

Рассмотрим химическую реакцию, в которой вещество А медленно превращается в В со скоростью 0.1 ч^{-1} , вещество В при каталитическом воздействии самого себя очень быстро, со скоростью 10^3 ч^{-1} превращается в вещество С. Подобным образом, но со скоростью 10^2 ч^{-1} реагируют вещества С и В.

Для веществ А, В и С верны уравнения

$$\frac{dA}{dt} = -0.1A + 10^2 BC$$

$$\frac{dB}{dt} = 0.1A - 10^2 BC - 10^3 B$$

$$\frac{dC}{dt} = 10^3 B$$

В начальный момент времени количество вещества А равно 100 моль, вещества В равно 0 моль, вещества С равно 0 моль.

Проанализировать изменения концентраций веществ в течение 50 часов. Найти количества веществ В и С по окончании реакции.

Рассматриваемая система дифференциальных уравнений является жесткой. Для ее решения сначала используем функцию **Stiffr**, а затем функцию **Radau**.

Выполнение задания

1. Открыть новый документ. Задать без размерностей значения переменным k1, k2 и k3, определяющим скорости реакций
 $k1 := 0.1 \quad k2 := 100 \quad k3 := 1000$
2. В строке ниже ввести вектор v, содержащий начальные значения концентраций веществ:

$$v := \begin{pmatrix} 100 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$



3. Для использования функций решения систем уравнений необходимо сформировать вектор-функцию D, содержащую правые части дифференциальных уравнений

$$D(t, x) := \begin{pmatrix} -k1 \cdot x_0 + k2 \cdot x_1 \cdot x_2 \\ k1 \cdot x_0 - k2 \cdot x_1 \cdot x_2 - k3 \cdot x_1 \\ k3 \cdot x_1 \end{pmatrix}$$

4. Рассмотрим использование функции **Stiff**. Она требует подготовки матрицы Якоби от правых частей уравнений. Построим ее, используя средства символьного дифференцирования.

Вычислим сначала элементы первой строки матрицы Якоби. Для этого нужно вычислить первые производные по переменным x_0, x_1, x_2 от выражения, записанного в первой строке вектор-функции D. Вычислим производную по переменной x_0 .

Поскольку эта переменная является аргументом функции, будем использовать для ее указания другое имя – имя y. Ввести ниже выражение

$$\frac{d}{dy} D \left[t, \begin{pmatrix} y \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right]_0$$

Для его построения ввести шаблон первой производной, указать в качестве переменной дифференцирования y, в позицию для функции ввести имя D, открыть скобку, ввести имя t, ввести «,», вставить шаблон вектора из 3 строк, заполнить его соответствующим выражению образом.

Ввести закрывающую скобку функции и нажать клавишу с «[» для ввода индекса. В полученную позицию ввести число 0. Далее ввести знак \rightarrow , используя соответствующий инструмент панели **Вычисления (Evaluation)**. Mathcad выдаст

$$\frac{d}{dy} D \left[t, \begin{pmatrix} y \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right]_0 \rightarrow -.1$$



Получить значение первой производной по x_1 от выражения в первой строке вектор-функции D следующим образом

$$\frac{d}{dy} D \left[t, \begin{pmatrix} x_0 \\ y \\ x_2 \end{pmatrix} \right]_0 \rightarrow 100x_2$$

5. Получить значение первой производной по x_2 от выражения в первой строке вектор-функции D следующим образом:

$$\frac{d}{dy} D \left[t, \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ y \end{pmatrix} \right]_0 \rightarrow 100x_1$$

Аналогичным образом получить три выражения производных от второй строки вектор-функции D , указав в индексе матрицы номер строки 1. Mathcad выдаст

$$\frac{d}{dy} D \left[t, \begin{pmatrix} y \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right]_1 \rightarrow .1$$

$$\frac{d}{dy} D \left[t, \begin{pmatrix} x_0 \\ y \\ x_2 \end{pmatrix} \right]_1 \rightarrow (-100) \cdot x_2 - 1000$$

$$\frac{d}{dy} D \left[t, \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ y \end{pmatrix} \right]_1 \rightarrow (-100) \cdot x_1$$

6. Аналогично получить производные от выражения в последней строке вектор-функции D .
7. Собрать полученные выражения в вектор-матрицу Якоби, обозначив ее буквой J . Ввести имя матрицы, аргументы t, x в скобках, знак присвоения «:=» и шаблон матрицы из 3 строк и 4 столбцов.



В первый столбец ввести нули, т.к. производные от выражений вектор-функции D по переменной t равны 0. В позиции элементов остальных столбцов матрицы ввести полученные выражения. Вы должны получить матрицу:

$$J(t, x) := \begin{bmatrix} 0 & -0.1 & 100x_2 & 100x_1 \\ 0 & 0.1 & (-100) \cdot x_2 - 1000 & (-100) \cdot x_1 \\ 0 & 0 & 1000 & 0 \end{bmatrix}$$

8. Решить задачу, вызвав функцию **Stiff** следующим образом:

$$X := \text{Stiff}(v, 0, 50, 50, D, J)$$

В матрице X расположены значения переменной t , а также концентраций веществ A, B, C . Вывести значения матрицы X , а также отобразить изменение концентраций веществ на диаграмме. Mathcad выдаст, аналогичные приведенным на рис. 9.6, 9.7.

	0	1	2	3
0	0	100	0	0
1	1	92.904	5.411·10 ⁻³	7.091
2	2	88.246	4.026·10 ⁻³	11.75
3	3	84.585	3.314·10 ⁻³	15.412
4	4	81.505	2.854·10 ⁻³	18.492
5	5	78.82	2.524·10 ⁻³	21.178
6	6	76.423	2.274·10 ⁻³	23.575
7	7	74.25	2.076·10 ⁻³	25.748
8	8	72.257	1.913·10 ⁻³	27.741
9	9	70.412	1.778·10 ⁻³	29.586
10	10	68.693	1.662·10 ⁻³	31.305
11	11	67.081	1.563·10 ⁻³	32.917
12	12	65.563	1.475·10 ⁻³	34.436

Рис. 9.6. Значения векторов t, A, B, C

9. Получим решение заданной системы обыкновенных дифференциальных уравнений при помощи функции **Radau**. Для этой функции не нужно формирование матрицы Якоби, поэтому ниже последнего блока в документе можно ввести выражение
- $$X1 := \text{Radau}(v, 0, 50, 100, D)$$



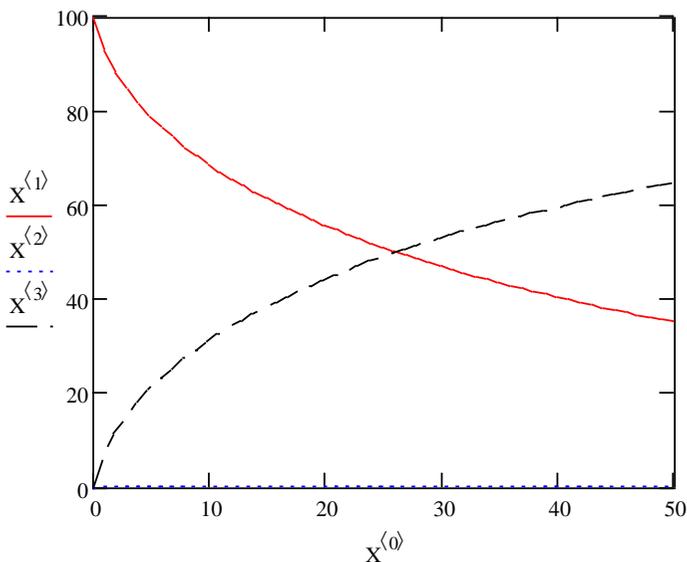


Рис. 9.7. Изменение концентраций веществ А, В, С во времени

10. Выдать значения, полученные функцией **Radau**, и сравнить их со значениями, полученными функцией **Stiff**. При сравнении отформатировать результаты, выдав 6 значащих цифр после десятичной точки.
11. Сохранить документ под именем **Stiff**.

9.10. Решение краевой задачи

Поскольку в Mathcad реализованы в виде отдельных функций алгоритмы численного дифференцирования, позволяющие решать только задачи Коши, то решение краевых задач возможно при использовании этих алгоритмов, если краевая задача сведена к виду задачи Коши.

В том случае, если такое сведение сложно, можно получить на основе известных граничных условий начальные условия, используя функцию **sbval**. Функция реализует метод «стрельбы».

Запись функции

sbval(v1,x1,x2,D,load1,score)

здесь:

x_1 , x_2 – конечные точки интервала, на котором проводится решение задачи.



$\text{load1}(x,v)$ – создаваемая пользователем вектор-функция двух переменных для граничной точки x_1 . Функция возвращает вектор значений условий на левой границе отрезка.

Параметром x для вектор-функции **load1** является переменная интегрирования, параметром v – неизвестный вектор. Размерность вектор-функции соответствует числу требуемых условий на левой границе отрезка. Формируемый как выражение вектор-функции вектор должен содержать известные значения условий на соответствующих им местах, на места неизвестных компонент ставятся элементы вектора v .

v_1 – созданный ранее вектор оценок для неизвестных условий на левой границе, которые нужно найти. Содержит числа. Размер вектора равен числу требуемых неизвестных условий на левой границе.

$\text{score}(x,v_1)$ – создаваемая пользователем вектор-функция двух переменных.

Параметр x – переменная интегрирования, v_1 – вектор оценок для неизвестных условий на левой границе, которые нужно найти. Для этих условий должны быть известны значения на правой границе.

Возвращаемое значение вектор-функции **score** показывает, насколько вычисленное в результате поиска недостающих условий значение на правой границе x_2 отличается от известного значения соответствующего условия в точке x_2 . Возвращаемое значение должно стремиться к 0. Функция формируется как вектор, размерность которого равна числу граничных условий на правой границе отрезка. Элементами вектора служат разности между известным значением выражения на правой границе и компонентом вектора v_1 , соответствующего этому выражению.

В некоторых случаях бывает, что, кроме граничных условий в двух точках, задано условие и в некоторой третьей точке внутри интервала интегрирования. В этом случае необходимо использовать функцию **bvalfit**, которая, как и **sbval**, вычисляет недостающие начальные условия для последующего решения задачи Коши.

Обращение к функции **bvalfit**:

bvalfit(Z1, Z2, X1, X2, Xf, D, load1, load2, score)

здесь:

Z_1 – вектор, содержащий начальное приближение для начальных условий, незаданных в точке X_1 ;

Z_2 – то же самое для граничных условий, не заданных в точке X_2 ;

X_1 и X_2 – точки интервала, где заданы граничные условия;

X_f – некоторая точка между X_1 и X_2 . В этой точке решения, начинающиеся в точках X_1 и X_2 , должны быть равны;



$D(x,y)$ – функция, содержащая в виде вектора первые производные неизвестных функций;

$load1(X1,Z1)$ – векторная функция, возвращающая значения начальных условий в точке $X1$.

Формируемый как выражение вектор-функции вектор состоит из n элементов, которые соответствуют вектору начальных условий в точке $X1$. Некоторые из этих условий будут константами, определяемыми начальными условиями.

Другие элементы неизвестны и в дальнейшем будут определены функцией **bvalfit**;

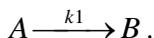
$load2(X2,Z2)$ – функция, аналогичная **load1**, для значений в точке $X2$;
 $score(Xf,y)$ — векторная функция, возвращающая вектор из n элементов. Он определяет, насколько значения решений, начинающихся из точек $X1$ и $X2$, соответствуют друг другу в точке Xf .

Если необходимо, чтобы решения совпали, определите $score(Xf,y)=y$. Этот метод нужно использовать, когда производные имеют разрыв где-либо на интервале поиска решения.

Нужно помнить, что решение краевых задач возможно функцией **Odesolve**. При решении задачи с разрывными функциями можно использовать функцию **if**.

9.11. Задание «Моделирование кинетики последовательно протекающих реакций на основе краевой задачи»

Рассмотрим химическую реакцию, протекающую согласно уравнению



Пусть известны константа скорости протекания реакции $k_1=0.35 \text{ ч}^{-1}$ и время протекания реакции $t=10 \text{ ч}$. В начальный момент времени количество вещества A равно 90 моль, количество вещества B неизвестно. Количество вещества B по окончании реакции равно 97.282 моль. Найти количество вещества A по окончании времени t .

Рассматриваемой реакции соответствуют дифференциальные уравнения

$$\frac{dA}{dt} = -k_1 \cdot A$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1 \cdot A$$



Для решения задачи методом Рунге-Кутта не хватает значения количества вещества В в начальный момент времени. Найдем его, используя функцию sbval.

1. Открыть новый документ.
2. Задать значение переменной k1
k1 := 0.35
3. Задать временной отрезок [t1,t2]
t1 := 0 t2 := 10.
4. Задать начальное приближение для количества вещества В в момент времени t1:=0 для использования в функции sbval. Оно задается элементом вектора
b₀ := 0.

Ввести имя b, нажать клавишу с «[», ввести индекс 0, указать шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, ввести число 0.

5. Ввести функцию для задания начальных условий

$$\text{load1}(t, w) := \begin{pmatrix} 90 \\ w_0 \end{pmatrix}$$

Для этого ввести имя функции load1(t,w), шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, вставить шаблон матрицы при помощи инструмента панели **Матрица (Matrix)**, задав число строк 2 и число столбцов 1. Затем ввести элементы массива. Для ввода элемента w₀ нужно ввести имя w, нажать клавишу с «[» и ввести 0. Элемент w₀ задает неизвестное значение начального условия для вещества В.

6. Сформировать функцию, задающую правые части дифференциальных уравнений:

$$\text{dd}(t, s) := \begin{pmatrix} -k1 \cdot s_0 \\ k1 \cdot s_0 \end{pmatrix}$$

Ввод выражения проводить аналогично предыдущему заданию.

7. Сформируем функцию score

$$\text{score}(t, v) := v_1 - 97.282$$

Она вычисляет отклонение найденного в результате расчетов значения количества вещества В на правой границе от известного значения.

8. Теперь можно приступить к поиску значения неизвестного начального условия. Ввести выражение
ss := sbval(b, t1, t2, dd, load1, score)



Для этого ввести имя *ss*, шаблон «:=» панели **Calculator**, вызвать **Мастер функций**, выбрать категорию All, выбрать функцию *sbval*. Заполнить шаблоны.

9. Ниже выдать полученное значение переменной *ss*:
 $ss = (10)$

10. Ввести вектор начальных приближений *ix*:

$$ix := \begin{pmatrix} 90 \\ 10 \end{pmatrix}$$

11. Теперь можно решить задачу при помощи функции *rkfixed*, задав 100 точек для расчета,

$$A := rkfixed(ix, t1, t2, 100, dd)$$

12. Получим количества веществ А и В в момент времени $t=10$ ч. Поскольку было задано 100 точек на отрезке, нужные значения находятся в 100 строке, для вещества А в столбце с номером 1, а для вещества В – с номером 2.

Вывести полученные значения

$$A_{100,1} = 2.718 \quad A_{100,2} = 97.282$$

13. Сохранить документ под именем **Diff3**.

9.12. Задание «Уравнения с разрывными функциям»

Рассмотрим решение дифференциального уравнения

$$y''(x) = \begin{cases} y(x), & x < 0 \\ -y(x), & x \geq 0 \end{cases}$$

$$y(1) = 2 \quad y(-1) = 1$$

Точка $x=0$ – точка стыковки двух частей функции.

Для решения задачи будем использовать функцию **Odesolve**.

1. Открыть новый документ. Ввести слово *given*.
2. Сформировать ниже дифференциальное уравнение. Ввести левую часть, используя для указания производной клавиши <Ctrl> и <F7>, ввести знак равенства «:=» с панели **Булева алгебра (Boolean)**

$$y''(x) = \blacksquare$$

Правая часть уравнения представлена разрывной функцией, для ее формирования используем функцию **if**. Ввести выражение

$$if(x < 0, y(x), -y(x))$$



3. В строке ниже ввести граничные условия, используя для ввода знака « \Leftarrow » инструмент панели **Булева алгебра (Boolean)**
 $y(-1) = 1 \quad y(1) = 2$
4. Завершить блок функцией **Odesolve**
 $Y := \text{Odesolve}(x, 1)$
5. Ввести ниже ранжированную переменную X , задав ей диапазон, на котором определена функция Y
 $X := -1, -0.9..1$
6. Вывести функцию на диаграмме, получив вид согласно рис. 9.8.

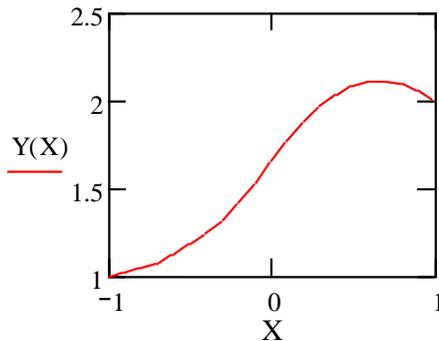


Рис. 9.8. Вид искомой функции Y

7. Сохранить документ под именем **Diff4**.



10. РЕШЕНИЕ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В MATHCAD

10.1. Решение одного уравнения

Для решения одного уравнения одной переменной вида

$$f(x)=0 \quad (10.1)$$

используется функция

root(f(x, y,...),x,a,b),

здесь:

$f(x, y, \dots)$ – функция, задающая левую часть уравнения (10.1). Функция может иметь больше одного аргумента, но тогда значения аргументов, отличных от искомого, должны быть заданы до использования функции **root**.

x – имя переменной, используемой в качестве искомого аргумента функции f , может стоять на любом месте в перечне аргументов;

a – левая граница отрезка, на котором будет проводиться поиск корня, может отсутствовать.

b – правая граница отрезка, может отсутствовать.

Функция **root** используется в двух вариантах:

– заданы все четыре параметра. Поиск корня проводится на заданном отрезке. При задании границ отрезка $[a;b]$ нужно учитывать, что функция должна иметь разные значения на концах отрезка, причем функция может иметь не один корень на таком отрезке. В этом случае функция реализует метод Риддера или метод Брента.

– заданы первые два параметра. Тогда перед вызовом функции должно стоять выражение, задающее начальное приближение для переменной. В этом случае функция реализует метод секущих или Мюллера и возвращает первый найденный корень.

Функция завершает работу, если найдено такое x_n , что

$$|f(x_n)| \leq \text{TOL},$$

где переменная **TOL** задает точность решения. Значение переменной **TOL** задается опцией **Допуск сходимости (Tolerance (TOL))** на вкладке **Встроенные переменные (Built-In-Variables)** окна команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/Worksheet Options)**. Значение переменной по умолчанию 0.001. Также новое значение переменной **TOL** можно присвоить в документе.

Функцию **root** можно вставлять в программы Mathcad.



10.2. Задание «Поиск корня функции»

Найти ближайший к 1 корень функции

$$f(x) = x \cdot \sin(x).$$

1. Создать новый документ. Объявить в нем функцию $f(x)$ заданного вида.
2. Задать начальное приближение для x . Ввести блок $x:=1$
3. Найдем ближайший корень, вызвав функцию **root**
 $a:=\text{root}(f(x),x)$
Перевести курсор в следующую строку, ввести имя a , знак «:=» и вызвать **Мастер функций** из *Стандартной* панели инструментов, выбрать категорию **All**, найти имя функции **root** и вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **OK**. В полученном шаблоне функции указать имя функции $f(x)$ и переменную x .
4. Вывести ниже значение найденного корня. Ввести в следующей строке имя a , нажать клавишу «=», правее будет выведен результат
 $a = 1.019 \times 10^{-5}$.
5. Увеличим число выводимых знаков, для чего установить курсор в выданный результат, вызвать команду **Формат/ Результат (Format/Result...)**, на вкладке **Формат числа (Number Format)** в списке **Формат (Format)** выбрать **Десятичный (Decimal)**, указать число выводимых знаков в поле **Число десятичных знаков (Number of decimal places)**, равное 6, щелкнуть по кнопке **OK**. Результат примет вид
 $a = 1.019233 \times 10^{-5}$.
6. Найдем значение функции в этой точке
 $f(a) = 1.039 \times 10^{-10}$.
7. Увеличим точность поиска решения, изменив значение переменной **TOL**. Для этого установить курсор левее и выше вызова функции **root** и нажать несколько раз клавишу **Enter**, чтобы получить свободную строку. Ввести в строку выражение
 $\text{TOL}:=10^{-10}$
В следующей строке получить решение и вывести результат. Значение найденного решения изменится
 $a = 1.590588 \times 10^{-10}$
 $f(a) = 0$.



Очевидно, что значение переменной TOL влияет в данном случае только на работу функции **root**.

8. Заданная функция является периодической, рассмотрим ее поведение вблизи найденной точки на интервале $[-1; 3]$.

Для этого в строке ниже вставить шаблон двумерной диаграммы **График X-Y** панели **График (Graph)**, указать в шаблоне у оси абсцисс имя вектора X , в шаблоне у оси ординат – функцию $f(X)$.

9. Отформатировать диаграмму, изменив диапазон изменения оси абсцисс. Для этого установить курсор в нижний левый шаблон у оси абсцисс и ввести число -1 , в правый шаблон ввести 3 , вывести курсор за пределы блока. Задать количество линий в сетке по обеим осям по 4 , сами линии сеток не выводить. Рисунок должен принять вид согласно рис. 10.1.

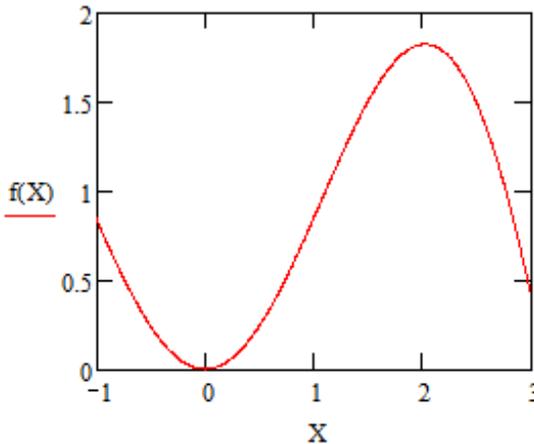


Рис. 10.1. Значения функции f на заданном интервале

10. Сохранить документ под именем **Zadanie4**.

10.3. Задание «Расчет воздухоподогревателя парогенератора»

Дымовые газы, входящие в воздухоподогреватель парогенератора, имеют объемный состав в %:

CO_2 10.8; O_2 6.6; N_2 80.7; H_2O 1.9.

Нагревая воздух, газы охлаждаются от 350 до 160 °C. Воздухоподогреватель теряет в окружающую среду 4 % теплоты, отнимае-



мой у газов. Присосом атмосферного воздуха в газоходе воздухоподогревателя пренебречь.

Определить температуру нагретого воздуха, если известны: расход дымовых газов, приведенных к нормальным условиям $V_{\text{дн}} = 53000 \text{ м}^3/\text{ч}$; расход воздуха $m_{\text{вк}} = 51000 \text{ кг/ч}$; температура воздуха на входе в воздухоподогреватель $t = 45 \text{ }^\circ\text{C}$.

Подготовка к решению

Нагревание воздуха и охлаждение газов происходит в процессе их движения, имеет место поток вещества. Поэтому теплота Q_r , отданная газами, и теплота Q_b , принятая воздухом, равна убыванию (и приращению) энтальпии:

$$Q_r = H_{1r} - H_{2r}, \quad Q_b = H_{2b} - H_{1b} \quad (10.2)$$

Баланс тепла при теплообмене

$$0.96(H_{1r} - H_{2r}) = H_{2b} - H_{1b}.$$

Через удельную энтальпию

$$0.96V_{\text{дн}}(H_{1r} - H_{2r}) = m_{\text{вк}}(H_{2b} - H_{1b}) \quad (10.3)$$

где H_{2b}, H_{1b} – энтальпии воздуха, отнесенные к 1 кг; H_{1r}, H_{2r} – энтальпии дымовых газов, отнесенные к 1 м^3 при нормальных условиях.

Энтальпия смеси газов вычисляется как

$$h_r = \sum_i (\phi_i \rho_i h_{ir}), \quad (10.4)$$

где ϕ_i – объемная доля газа в смеси; ρ_{Hi} – плотность газа; h_{ir} – энтальпия; i – номер компонента смеси (1 – CO_2 ; 2 – O_2 ; 3 – N_2 ; 4 – H_2O).

Известны значения плотности газов и энтальпии компонентов дымовой смеси в начальный и конечный моменты времени (табл. 10.1). Кроме того, известны значения энтальпии воздуха для ряда температур (табл. 10.2).

Таблица 10.1

Значения плотности газов и энтальпии

Величина	Компоненты смеси			
	CO_2	O_2	N_2	H_2O
ϕ	0.108	0.066	0.807	0.019
ρ	1.977	1.429	1.251	0.804
h_{1r} в начальный момент времени t_1	531.1	582.7	651.7	1179.1
h_{2r} в конечный момент t_2	335.34	396.45	449.96	804.27



Таблица 10.2

Значения энтальпии воздуха при разной температуре

<i>t</i>	0	10	20	30	40	50
<i>h</i>	273.32	283.35	293.39	303.43	313.48	323.53
<i>t</i>	60	70	80	90	100	110
<i>h</i>	333.59	343.66	353.73	363.82	373.92	384.02
<i>t</i>	120	130	140	150	160	170
<i>h</i>	394.14	404.28	414.42	424.58	434.75	444.94
<i>t</i>	180	190	200	210	220	230
<i>h</i>	455.15	465.37	475.61	485.86	496.14	506.43
<i>t</i>	240	250	260	270	280	290
<i>h</i>	516.74	527.08	537.43	547.80	558.20	568.61
<i>t</i>	300	310	320	330	340	350
<i>h</i>	579.05	589.51	599.99	610.50	621.03	631.58

Выполнение задания

1. Создать новый документ.
2. Для удобства работы с массивами изменить порядок нумерации элементов в массивах. Ввести новое значение переменной ORIGIN
ORIGIN:=1.

Ниже ввести текстовый блок согласно рис. 10.2.

Объемный состав дымовых газов, %		
CO ₂	10.8	$\phi_1 := 10.8 \cdot 10^{-2}$
O ₂	6.6	$\phi_2 := 6.6 \cdot 10^{-2}$
N ₂	80.7	$\phi_3 := 80.7 \cdot 10^{-2}$
H ₂ O	1.9	$\phi_4 := 1.9 \cdot 10^{-2}$
Нагревая воздух, газы охлаждаются		
от $t_1 := 350$ до $t_2 := 160$		
Расход дымовых газов, приведенный к нормальным условиям		
$V_{дг} := 53000$		
Расход воздуха, приведенный к нормальным условиям		
$m_{в} := 51000$		
Температура воздуха на входе в воздухоподогреватель		
$t := 45$		
Потери тепла в окружающую среду 4%.		

Рис. 10.2. Вид текстового блока



Внутри текстового блока все блоки с присвоением значений переменным вводить в качестве математических блоков, для чего вызывать команду **Вставка/Регион формул (Insert/Math Region)**.

У переменных $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, t_1, t_2$ индексы числовые и задаются путем вставки шаблона индекса клавишей «[».

У переменных $V_{тн}$ и $m_{тв}$ индексы представляют собой нижний уровень имени и задаются после нажатия клавиши с «.».

- Значения долей газа в смеси вводятся в вектор ϕ . Для этого необходимо выставить символ ϕ из палитры **Греческий (Greek)**, нажать клавишу со знаком «[» и ввести индекс. Затем вставить шаблон «:=» и ввести значение. Поскольку элементы вектора содержат значение долей, указанные значения для процентного состава уменьшаются в 100 раз.

Ввести вектора с табличными данными:

$$\rho := \begin{pmatrix} 1.977 \\ 1.429 \\ 1.251 \\ 0.804 \end{pmatrix} \quad h1r := \begin{pmatrix} 531.1 \\ 582.7 \\ 651.7 \\ 1179.1 \end{pmatrix} \quad h2r := \begin{pmatrix} 335.34 \\ 396.45 \\ 449.96 \\ 804.27 \end{pmatrix}$$

Для ввода векторов нужно: ввести имя вектора, шаблон «:=» и вставить шаблон матрицы панели **Матрица (Matrix)**, где указать число строк 4 и число столбцов 1, после чего щелкнуть по кнопке **ОК**. В полученный шаблон ввести значения элементов вектора.

- Из таблицы значений энтальпии воздуха при разных температурах видно, что температура изменяется с постоянным шагом, равным 10, в пределах от 0 до 350. Всего в таблице 36 значений температуры. Следовательно, значения температур для таблицы энтальпий можно задать в виде рекуррентной формулы.

Задать начальное значение температуры

$$T1_1 := 0$$

- Ввести ранжированную переменную для задания рекуррентной формулы

$$i := 1..35$$

- Определить вектор T , элементы которого будут вычисляться по формуле

$$T1_{i+1} := T1_i + 10$$

Для ввода индексов нажать клавишу с «[», ввести индекс.



Для ввода ранжированной переменной после набора первого значения нажать клавишу с «;» для получения шаблона ввода последнего значения.

7. Значения энтальпий h ввести в виде вектора $H1$, состоящего из 36 строк и 1 столбца.

Для этого ввести имя вектора $H1$, шаблон «:=» палитры **Калькулятор (Calculator)**, вставить шаблон матрицы из панели **Матрица (Matrix)**, указать число строк 36, число столбцов 1.

Затем ввести данные в вектор из табл. 10.2.

8. Найти значение удельной энтальпии воздуха при температуре $t=45^\circ\text{C}$, используя функцию линейного интерполирования:

$$H1b:=\text{linterp}(T1,H1,45)$$

Для этого ввести имя переменной $H1b$, шаблон «:=» палитры **Калькулятор (Calculator)**, вызвать **Мастер функций** из **Стандартной** панели инструментов, выбрать категорию **Все**, найти имя функции **linterp**, вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **ОК**.

В полученном шаблоне функции указать имена массивов $T1$ и $H1$, по значениям которых будет проводиться интерполяция, и число 45 – точку, для которой нужно найти значение.

9. Рассчитать значения энтальпии смеси $H1g$ и $H2g$ в начальный и конечный моменты времени соответственно:

$$H1g := \sum_{j=1}^4 (\rho_j \cdot h1r_j \cdot \phi_j) \quad H2g := \sum_{j=1}^4 (\rho_j \cdot h2r_j \cdot \phi_j)$$

Для чего ввести имя переменной $H1g$, шаблон «:=», вставить шаблон суммы с определенным верхним и нижним пределом панели **Вычисления (Evaluation)**, задать для нижнего предела выражение $j=1$, для верхнего – ввести число 4, ввести выражение для суммирования.

Аналогично ввести значение для переменной $H2g$.

10. Найдем значение энтальпии воздуха из уравнения теплового баланса.

Для этого на основе уравнения теплового баланса построим функцию одной переменной fh и используем встроенную функцию **root** для поиска корня функции fh .

Предварительно заменим переменные с мнемоническими индексами, поскольку функция **root** с ними не работает.



В следующей строке ввести выражения

$$Vt:=V_{тН} \quad mt:=m_{тВ} .$$

Далее ввести выражение для функции

$$fh(x):=0.96 \cdot Vt \cdot (H1r-H2r) - mt \cdot (x-H1b)$$

для чего нужно ввести имя функции fh, затем в скобках указать имя аргумента x, ввести шаблон «:=» и ввести выражение.

11. Ниже задать начальное приближение
 $x:=0$.

12. Найти значение энтальпии, используя функцию root

$$H2b:=\text{root}(fh(x),x)$$

для чего ввести имя переменной H2b, шаблон «:=» и вызвать **Мастер функций** из *Стандартной* панели инструментов, выбрать категорию **Все**, найти имя функции **root**, вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **ОК**.

В полученном шаблоне функции указать имя функции fh(x) и переменную x.

13. Для полученного значения H2b найти по табличным данным значение температуры, используя интерполяцию:

$$T2:=\text{linterp}(H1,T1,H2b)$$

14. В строке ниже вывести полученное значение температуры воздуха, для чего в следующей свободной строке ввести имя переменной T2 и знак «:=»

$$T2=307.247$$

15. Сохранить документ под именем **Gase** и закрыть его.

10.4. Поиск корней полинома

Если левая часть уравнения (10.1) – это полином n-й степени, то для поиска его корней (всех, включая комплексные) предназначена функция

polyroots(<вектор коэффициентов>)

Функция не требует начального приближения, в качестве аргумента задается вектор коэффициентов в явном или неявном виде: нулевой элемент вектора – это свободный член, первый – коэффициент при x, второй – при x² и т.д.

Можно выбирать метод поиска корней полинома.

Для настройки функции нужно установить курсор в документе в название функции и вызвать ее контекстное меню.



10.5. Задание «Определение корней полинома»

Найти корни полинома

$$x^4 + 9x^5 + 31x^2 + 59x + 60$$

1. Создать новый документ. Ввести вектор-столбец коэффициентов полинома. Для этого ввести имя вектора c , шаблон «:=», шаблон матрицы из панели **Матрица (Matrix)**, указать число строк 5, число столбцов 1, щелкнуть по кнопке **ОК**.

$$c := \begin{pmatrix} 60 \\ 59 \\ 31 \\ 9 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Далее ввести значения элементов вектора.

2. Получить значения корней в векторе $x1$

$$x1 := \text{polyroots}(c).$$

Ввести имя $x1$, ввести шаблон «:=», вызвать **Мастер функций** из **Стандартной** панели инструментов, выбрать категорию Все (All), найти имя функции `polyroots`, вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **ОК**.

В полученном шаблоне указать имя вектора, содержащего коэффициенты, это имя c .

3. Вывести значения корней. Для этого ввести имя вектора $x1$, знак «:=» и вывести курсор из выражения

$$x1 = \begin{pmatrix} -4 \\ -3 \\ -1 - 2i \\ -1 + 2i \end{pmatrix}.$$

4. Сохранить документ под именем **Poly** и закрыть его.

10.6. Решение систем уравнений и неравенств

Решение систем уравнений. Численное решение систем уравнений и неравенств в Mathcad проводится при использовании так



называемого блока поиска решения. Построение блока проводится следующим образом:

- перед блоком (левее или выше) задаются начальные значения искомых переменных;
- ниже или правее вводится слово Given – «Дано», которое служит началом блока поиска решения;
- задается система уравнений и неравенств;
- ниже или правее вводится одна из функций решения систем нелинейных уравнений, которая служит завершением блока поиска решения.

Левые и правые части уравнений связываются между собой шаблоном «Эквивалентно» « \Leftrightarrow » из панели **Булева алгебра (Boolean)**. Для формирования неравенств также используются инструменты панели **Булева алгебра (Boolean)**.

Блок поиска решения не должен включать ранжированные переменные, логическую операцию «не равно», другой блок поиска решения. Блок поиска решения нельзя вставлять в программы Mathcad.

При решении систем нелинейных уравнений в Mathcad можно выбирать численные методы при помощи контекстного меню функций. Меню содержит следующие команды выбора численных методов:

- a. AutoSelect** – использовать метод и настройки по умолчанию;
- б. Linear** – использовать методы линейного программирования при решении систем линейных уравнений и неравенств;
- с. Nonlinear** – использовать нелинейные методы;
 - **Conjugate Gradient** – метод сопряженных градиентов, используется по умолчанию;
 - **Levenberg-Marquardt** – метод наискорейшего спуска;
 - **Quasi-Newton** – квазиньютоновский метод.

Нелинейные методы можно также настраивать, выбрав в контекстном меню команду **Nonlinear/Advanced Options**. Окно команды содержит три опции:

- **Derivative estimation** – оценка производных – может проводиться при помощи центральных разностей (**Central**) – установлена по умолчанию, либо разностей вперед (**Forward**).
- **Variable estimation** – оценка шага по градиенту – может проводиться тангенциальная (**Tangent**) – установлена по умолчанию, либо квадратичная (**Quadratic**) оценка.
- **Linear variable check** – режим проверки линейных компонент функции. В том случае, если проводится поиск решения для функции, содержащей линейные слагаемые, можно не учитывать их влияние,



задав опцию **Yes**, что ускорит работу алгоритма. По умолчанию установлено **No**.

При численном решении систем уравнений и неравенств на качество найденного решения, кроме значения переменной **TOL**, влияет значение переменной **CTOL** – точность соблюдения выполнения ограничений, которая задается опцией **Допуск ограничения (Constraint Tolerance (CTOL))** на вкладке **Встроенные переменные (Built-In-Variables)** окна команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/Worksheet Options)**. Значение переменной по умолчанию 0.001. Также новое значение переменной **CTOL** можно присвоить в документе.

Функции поиска решения систем нелинейных уравнений. Для поиска существующего решения системы уравнений и неравенств, имеющих нелинейности, можно использовать функции **Find** и **MinErr**.

Для использования функции необходимо задать переменным начальные приближения и определить блок поиска решения, завершать который должна будет функция **Find** или **MinErr**.

При использовании функций **Find** и **MinErr** вычисляется системная переменная **ERR**, используемая алгоритмами для проверки выполнения условия окончания процедуры решения. Переменная **ERR** вычисляется как корень квадратный из суммы квадратов разности между вычисленным и требуемым значением для каждого из ограничений в блоке поиска решения.

Синтаксис записи функции **Find**:

Find(переменная1, переменная2,..., переменнаяN)

где переменная1, переменная2,..., переменнаяN – имена переменных, для которых проводится поиск значения.

Если в качестве параметров функции указан один параметр, то функция возвратит скаляр, если задано более одного, то возвращаемым значением будет вектор, в котором первый элемент соответствует первому параметру и т.д.

Функция **Find** может использоваться только как завершение блока поиска решения и анализирует блоки, расположенные выше или левее ее месторасположения до слова **Given**, а также проводит поиск места определения начальных значений искомых переменных.

Функция проводит поиск решения до тех пор, пока не выполнится условие $ERR \leq TOL$ и не будут выполнены ограничения с точностью **CTOL**.



Перед поиском решения с помощью функции **Find** бывает полезно оценить начальное приближение графическим методом.

Синтаксис записи функции **MinErr**:

MinErr(переменная1, переменная2,..., переменнаяN)

где переменная1, переменная2,..., переменнаяN – имена искоемых переменных.

Критерий окончания работы функции **MinErr** аналогичен критерию функции **Find**. Отличие функции **MinErr** от **Find** состоит в том, что если решение не может быть найдено с указанной точностью, то функция **MinErr** вернет последнее найденное решение, а функция **Find** выдаст сообщение о том, что решение не найдено.

Функции поиска решения систем линейных уравнений. При решении системы линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \dots + a_{1,m}x_m = b_1 \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + \dots + a_{2,m}x_m = b_2 \\ \dots \\ a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 + \dots + a_{n,m}x_m = b_n \end{cases}$$

можно использовать обе указанные выше функции. В этом случае необходимо построить блок поиска решения, вызвать функцию и настроить метод решения, выбрав в контекстном меню опцию **Linear**.

В то же время в Mathcad имеется функция **lsolve** – решения системы линейных алгебраических уравнений, приведенных к матричному виду

$$Ax = B,$$

где A – матрица действительных или комплексных коэффициентов правой части; x – вектор-столбец неизвестных; B – вектор-столбец правых частей.

Синтаксис функции:

lsolve(A,B)

Функция возвращает вектор, умножение матрицы A на который приводит к получению вектора B .

10.7. Задание «Решение системы линейных уравнений»

Решить систему линейных уравнений, используя разные возможности Mathcad. В случае использования функции **Find** в качестве



начального приближения для искоемых переменных использовать значения (0; 0; 0).

$$100x_1 + 6x_2 - 2x_3 = 100$$

$$6x_1 + 200x_2 - 10x_3 = 600$$

$$x_1 + 2x_2 + 100x_3 = 500$$

1. Создать новый документ.
2. Ввести текст заголовка «Решение системы линейных уравнений с применением функции find».
3. Задать в строке ниже начальные приближения переменным x_1 , x_2 , x_3
 $x_1 := 0$ $x_2 := 0$ $x_3 := 0$.
4. В строке ниже ввести слово
Given
оно откроет блок поиска решений.
5. Ниже ввести указанную систему из трех линейных уравнений, используя шаблон « \Rightarrow » из панели **Булева алгебра (Boolean)** для связи левой и правой частей уравнений.
6. Завершая блок поиска решения, в следующей строке вызвать функцию
 $X := \text{Find}(x_1, x_2, x_3)$.

Для этого ввести имя новой переменной X , которая получит в качестве значения решение системы, вставить шаблон « \Rightarrow » панели **Калькулятор (Calculator)**, вызвать **Мастер функций** из **Стандартной** панели инструментов, найти имя функции **Find** и вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **OK**. В полученном шаблоне функции указать в качестве аргументов имена искоемых переменных x_1 , x_2 , x_3 .

7. Получить решение, выведя значение вектора X . Для этого в следующей строке ввести имя X и знак « \Rightarrow »

$$X = \begin{pmatrix} 0.905 \\ 3.219 \\ 4.927 \end{pmatrix}.$$

8. Используя контекстное меню функции **Find**, попробовать применить для решения системы другие методы.
9. Решим систему линейных уравнений, используя функцию **lsolve**. Ввести в следующей строке текст заголовка «Решение системы линейных уравнений с применением функции lsolve».



10. Сформируем в строке ниже матрицу коэффициентов системы А и вектор свободных членов В

$$A := \begin{pmatrix} 100 & 6 & -2 \\ 6 & 200 & -10 \\ 1 & 2 & 100 \end{pmatrix} \quad B := \begin{pmatrix} 100 \\ 600 \\ 500 \end{pmatrix}.$$

Ввести имя А, вставить шаблон «:=» панели *Калькулятор (Calculator)* и шаблон матрицы из панели *Матрица (Matrix)*. Указать число строк и столбцов. Щелкнуть по кнопке **ОК**. Ввести значения в полученный шаблон матрицы. Ввод вектора В провести аналогично, указав число строк 3, число столбцов 1.

11. Получить решение при помощи функции `Isolve(A,B)`.

Для этого вызвать **Мастер функций** из *Стандартной* панели инструментов, найти имя функции `Isolve` и вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **ОК**. В полученном шаблоне функции указать имя матрицы А и вектора В. Ввести знак «=», чтобы получить решение

$$\text{Isolve}(A, B) = \begin{pmatrix} 0.905 \\ 3.219 \\ 4.927 \end{pmatrix}.$$

12. Сохранить документ под именем **Equation**.

10.8. Задание «Решение системы нелинейных уравнений»

Решить систему нелинейных уравнений, используя в качестве начальных значений (-0.3;1.2)

$$\sin(x) + 2 \cdot y = 2$$

$$\cos(y - 1) + x = 0.7$$

1. Создать новый документ. Ввести текст заголовка «Решение системы нелинейных уравнений при помощи функции `find`».
2. Задать в строке ниже начальные приближения переменным $x := -0.3$ $y := 1.2$
3. В строке ниже ввести слово `Given`.
4. Ниже ввести указанную систему нелинейных уравнений, используя шаблон «`=>`» из панели *Булева алгебра (Boolean)* для связи левой и правой частей уравнений.



5. В строке ниже, завершая блок поиска решения, ввести выражение $X := \text{find}(x, y)$

Ввести имя новой переменной X , которая получит в качестве значения решение системы, вставить шаблон «:=» палитры *Calculator*, вызвать **Мастер функций** из *Стандартной* панели инструментов, найти имя функции `find` и вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **ОК**. В полученном шаблоне функции указать в качестве аргументов имена искомых переменных x и y , для чего установить курсор в шаблон первого аргумента, ввести имя x , передвинуть курсор к следующему шаблону аргумента и ввести имя y .

6. Получить решение, выведя значение X .

Для этого в следующей строке ввести имя X и знак « \Leftarrow »

$$X = \begin{pmatrix} -0.29 \\ 1.143 \end{pmatrix}.$$

7. Сохранить документ под именем **Equation1**.



11. ОПТИМИЗАЦИЯ В MATHCAD

11.1. Постановка задачи оптимизации

Пусть $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ – некоторая функция, для которой проводится поиск экстремума на множестве $X \subset R^n$.

Точку x^* называют точкой глобального минимума функции f , если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех $x \in X$. Аналогично, меняя знак \leq на \geq , определяется точка максимума.

Точку \tilde{x} называют точкой локального минимума функции f , если существует такая окрестность U точки \tilde{x} , что $f(\tilde{x}) \leq f(x)$ для всех $x \in U$. Аналогично, меняя знак \leq на \geq , определяется точка максимума.

В точке локального минимума дифференцируемая функция удовлетворяет необходимому условию экстремума

$$\nabla f(x) = 0.$$

Достаточным условием того, чтобы точка была точкой локального минимума функции f , является условие положительной определенности ее матрицы Гессе G :

$$G = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}.$$

Матрица $A = (a_{ij})_{n \times n}$ называется положительно определенной, если для всех $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$, $\xi \neq 0$ ее квадратичная форма соответствует условию

$$a(\xi) \equiv \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \xi_i \xi_j > 0.$$

Здесь функция $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ называется целевой функцией задачи оптимизации, а переменные (x_1, x_2, \dots, x_n) – поисковыми переменными задачи.

Если в задаче отсутствуют ограничения, то говорят о задаче безусловной оптимизации. Если присутствует хотя бы одно ограничение,



то говорят о задаче условной оптимизации. Ограничения в задаче оптимизации могут принимать вид

– равенств

$$g_j(x) = 0, \quad g_j(x) = g_j(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad j = 1, \dots, m;$$

– неравенств

$$h_j(x) \leq 0, \quad h_j(x) = h_j(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad j = 1, \dots, k;$$

– диапазона изменения поисковой переменной

$$a_i \leq x_i \leq b_i, \quad i \in \{1, \dots, k\}, \quad a_i, b_i \text{ – константы.}$$

В общем случае задача безусловной оптимизации имеет вид

$$\min_x f(x), \quad (11.1)$$

$$x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$$

Задача условной оптимизации в общем случае имеет вид

$$\min_x f(x), \quad (11.2)$$

$$g_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, m,$$

$$h_j(x) \leq 0, \quad j = 1, \dots, k,$$

$$a_i \leq x_i \leq b_i, \quad i \in \{1, \dots, k\},$$

$$x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}.$$

Для задачи условной оптимизации необходимое условие минимума имеет вид условий Куна-Таккера. Для задачи (11.2) они имеют вид

$$\frac{\partial L(x, \lambda, \mu)}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n;$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda, \mu)}{\partial \lambda_j} = 0, \quad j = 1, \dots, m;$$

$$u_j \mu_j = 0, \quad u_j \geq 0, \quad \mu_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, k,$$

здесь $L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{j=1}^m \lambda_j g_j(x) + \sum_{j=1}^k \mu_j (h_j(x) + u_j)$ – функция Лагранжа.

В том случае, если задача оптимизации включает только линейные функции, говорят о задаче линейного программирования. Если задача содержит нелинейности, говорят о задаче нелинейного программирования. В случае, когда на какие-либо параметры задачи наложено условие целочисленности, говорят о задаче смешанного программирования.



Если целевая функция задачи оптимизации содержит линейные и квадратичные члены, т.е. члены, представляющие собой вторую степень какой-либо переменной или произведение переменных в первой степени, а ограничения задачи полностью линейны, то говорят о задаче квадратичного программирования.

В Mathcad введены функции, позволяющие решать задачи локальной условной и безусловной линейной и нелинейной оптимизации. Несмотря на то, что с математической точки зрения задача максимизации всегда может быть сведена к задаче минимизации и наоборот, в Mathcad для решения задачи минимизации предлагается функция **minimize**, для максимизации – **maximize**.

11.2. Функции для решения задач оптимизации

Решение задач безусловной оптимизации. В Mathcad введены функции **maximize** и **minimize**, позволяющие решать задачи локальной безусловной линейной или нелинейной оптимизации вида (11.1).

При формировании задачи безусловной оптимизации выполняются следующие этапы:

- формируется функция пользователя, задающая вид целевой функции $f(x)$;
- задаются начальные приближения всех поисковых переменных x_1, x_2, \dots, x_n ;
- вызывается функция поиска оптимального значения **maximize** или **minimize**. В качестве параметров функции указываются имена целевой функции и поисковых переменных.

Синтаксис использования функций **minimize** и **maximize**:

minimize (f, переменная1, переменная2, ..., переменнаяN)

maximize (f, переменная1, переменная2, ..., переменнаяN),

где переменная1, переменная2, ..., переменнаяN – имена переменных, для которых проводится поиск значения, $f=f(\text{переменная1, переменная2, ..., переменнаяN})$ – целевая функция, для которой проводится поиск экстремума.

На качество получаемого решения влияет значение переменной TOL. Значения переменной TOL задается в поле **Допуск сходимости (Tolerance (TOL))** на вкладке **Встроенные переменные (Built-In-Variables)** окна команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/Worksheet Options)**. Значение переменной по



умолчанию 0.001. Новое значение переменной можно присваивать в документе.

Решение задач условной оптимизации. Для решения задач условной оптимизации вида (11.2) следует использовать блок поиска решения, начинающийся со слова `given` и завершаемый функциями **maximize**, **minimize**.

Формирование задачи условной оптимизации проводится следующим образом:

- формируется функция пользователя, задающая вид целевой функции $f(x)$;
- задаются начальные приближения всех поисковых переменных x_1, x_2, \dots, x_n ;
- формируется блок поиска решения, начинающийся со слова `given` и включающий в себя ограничения в виде равенств и неравенств. Формирование ограничений проводится с использованием инструментов « $=$ », « \leq », « \geq », « $<$ », « $>$ » панели инструментов **Булева алгебра (Boolean)**;
- вызывается функция поиска оптимального значения `maximize` или `minimize`. В качестве параметров функции указываются имена целевой функции и поисковых переменных.

Синтаксис использования функций **minimize** и **maximize** аналогичен описанному выше.

На качество решения, получаемого при помощи функций **minimize** и **maximize**, влияют значения переменных `TOL` и `CTOL`. Значения переменным `TOL` и `CTOL` задаются в полях **Допуск сходимости (Tolerance (TOL))** и **Допуск ограничения (Constraint Tolerance (CTOL))** на вкладке **Встроенные переменные (Built-In-Variables)** окна команды **Инструменты/Параметры документа (Tools/Worksheet Options)**. Значение переменных по умолчанию 0.001. Значения переменным можно присвоить в документе.

Перед решением оптимизационной задачи с ограничениями полезно решить ее сначала не с функциями **minimize** или **maximize**, а с функцией **find** для того, чтобы оценить область существования решений.

11.3. Задача нелинейного программирования

При решении задач нелинейного программирования проводится настройка функций поиска экстремума на использование методов нелинейного программирования.



Для указания метода вызывается контекстное меню функции, где отмечается опция **Нелинейные (Nonlinear)**. Затем выбирается один из методов – Левенберга-Марквардта (**Levenberg-Marquardt**), Сопряженных градиентов (**Conjugate Gradient**), Квази-Ньютоновский (**Quasi-Newton**) и выбирается команда **Нелинейные/Дополнительные параметры (Nonlinear/Advanced Options)**.

В качестве дополнительных параметров пользователь может указать следующие:

- какого типа разностную аппроксимацию следует использовать для вычисления производных в ходе определения направления спуска: разность вперед – опция **Прямой (Forward)**, центральная разность – опция **Центральный (Central)**;
- как проводить аппроксимацию функции цели в текущей точке при движении по направлению спуска: тангенциальная аппроксимация – опция **Тангенц. (Tangent)**, аппроксимация квадратичным полиномом – **Квадратичный (Quadratic)**;
- указать близость к линейным функциям ограничений по поисковым переменным можно при помощи опции **Линейная проверка (Linear variable check)**. В этом случае не будет проводиться вычисление производных по ограничениям в каждой точке определения направления.

11.4. Задача линейного программирования

При решении задач линейного программирования проводится настройка функций оптимизации на использование методов линейного программирования. Для этого вызывается контекстное меню функции, в котором отмечается опция **Линейные (Linear)**.

11.5. Задание «Оптимизация плана выпуска продукции»

Для изготовления продукции 4 видов А1, А2, А3, А4 необходимо сырье С1, С2, С3, С4, С5. Запасы сырья ограничены и составляют 100, 120, 110, 150, 140 условных единиц, соответственно. Количество сырья, необходимое для изготовления единицы каждого из видов продукции приведено в табл. 11.1.

Прибыль, получаемая от реализации единицы каждого из видов продукции, составляет 5, 4, 3, 1 для видов А1, А2, А3, А4 соответственно.

Составить план выпуска продукции, при котором прибыль от ее реализации была бы максимальна.



Таблица 11.1

Затраты сырья на производство единицы продукции

Сырье	Виды продукции			
	A1	A2	A3	A4
C1	2	1	1	2
C2	3	2	1	0
C3	2	1	2	1
C4	3	1	2	2
C5	1	2	1	0

Подготовка к решению

Сформулированная задача является задачей условной оптимизации. Для ее решения необходимо сформировать целевую функцию, выделить поисковые переменные, сформулировать ограничения.

Введем для каждого из видов продукции вектора A1, A2, A3, A4, содержащие в качестве элементов количества сырья C1, C2, C3, C4, C5, необходимые для изготовления соответствующего вида продукции.

Обозначив как x_1, x_2, x_3, x_4 плановое количество видов продукции A1, A2, A3, A4, соответственно, запишем целевую функцию, которую нужно максимизировать:

$$R=5 \cdot x_1+4 \cdot x_2+3 \cdot x_3+x_4.$$

Переменные x_1, x_2, x_3, x_4 являются поисковыми.

Ограничения примут вид

– для веществ C1, C2, C3, C4, C5

$$A1_1 \cdot x_1+ A2_1 \cdot x_2+ A3_1 \cdot x_3+ A4_1 \cdot x_4 \leq 100$$

$$A1_2 \cdot x_1+ A2_2 \cdot x_2+ A3_2 \cdot x_3+ A4_2 \cdot x_4 \leq 120$$

$$A1_3 \cdot x_1+ A2_3 \cdot x_2+ A3_3 \cdot x_3+ A4_3 \cdot x_4 \leq 110$$

$$A1_4 \cdot x_1+ A2_4 \cdot x_2+ A3_4 \cdot x_3+ A4_4 \cdot x_4 \leq 150$$

$$A1_5 \cdot x_1+ A2_5 \cdot x_2+ A3_5 \cdot x_3+ A4_5 \cdot x_4 \leq 140 ,$$

– для плановых количеств видов продукции x_1, x_2, x_3, x_4

$$x_1 \geq 0$$

$$x_3 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

$$x_4 \geq 0 .$$

Поставленная задача является задачей линейного программирования в силу линейности целевой функции и ограничений. Решим ее, применив функцию **maximize**.



Выполнение задания

1. Создать новый документ. Для удобной работы с векторами сменим номер первого элемента. Ввести переменную
 $\text{ORIGIN}:=1$
2. В следующей строке ввести вектора A1, A2, A3, A4: ввести имя вектора, вставить шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, шаблон матрицы панели **Матрица (Matrix)**, задать число строк 5, число столбцов 1, щелкнуть по кнопке **ОК**, заполнить шаблон вектора значениями. Для перемещения курсора между элементами вектора использовать клавиши со стрелками.

$$A1 := \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix} \quad A2 := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad A3 := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad A4 := \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

3. Ниже ввести выражение для целевой функции
 $R(x_1, x_2, x_3, x_4) := 5 \cdot x_1 + 4 \cdot x_2 + 3 \cdot x_3 + x_4$
4. Ввести в строке ниже начальные приближения для поисковых переменных
 $x_1 := 13 \quad x_2 := 10 \quad x_3 := 10 \quad x_4 := 10$
5. В следующей строке ввести слово given и в последующих строках ввести выражения для ограничений. Для ввода знаков « \geq » и « \leq » использовать шаблоны панели **Булева алгебра (Boolean)**
given

$$A1_1 \cdot x_1 + A2_1 \cdot x_2 + A3_1 \cdot x_3 + A4_1 \cdot x_4 \leq 100$$

$$A1_2 \cdot x_1 + A2_2 \cdot x_2 + A3_2 \cdot x_3 + A4_2 \cdot x_4 \leq 120$$

$$A1_3 \cdot x_1 + A2_3 \cdot x_2 + A3_3 \cdot x_3 + A4_3 \cdot x_4 \leq 110$$

$$A1_4 \cdot x_1 + A2_4 \cdot x_2 + A3_4 \cdot x_3 + A4_4 \cdot x_4 \leq 150$$

$$A1_5 \cdot x_1 + A2_5 \cdot x_2 + A3_5 \cdot x_3 + A4_5 \cdot x_4 \leq 140$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

$$x_3 \geq 0$$

$$x_4 \geq 0$$



6. Завершить блок поиска решения вызовом функции **Maximize**, сохранив полученные значения в переменной S1
S1: = Maximize (R, x1, x2, x3, x4).

Проверим, используются ли для решения задачи методы линейного программирования. Установить курсор в имя функции **Maximize** и вызвать контекстное меню блока. В меню должна быть отмечена опция **Linear**.

7. Вывести ниже полученные значения

$$S1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 48 \\ 24 \\ 14 \end{pmatrix}.$$

8. Сохранить документ под именем **Optim_line**.

11.6. Задание «Поиск минимума нелинейной функции»

Найти минимум функции Розенброка

$$f(x, y) = 8(y - x^2)^2 + (5 - x)^2.$$

Задача представляет собой задачу безусловной оптимизации, где функция $f(x,y)$ является целевой функцией, а переменные x и y – поисковыми переменными.

Решение задачи проведем при помощи встроенной функции **minimize**, а затем проверим найденные значения и проанализируем поведение функции графически.

1. Создать новый документ.
2. Задать целевую функцию следующим образом: ввести имя функции $f(x,y)$, вставить шаблон «:=» ввести выражение функции.
3. Задать начальные приближения поисковым переменным, введя в следующей строке блока

$$x := 1 \quad y := 0$$

4. Проведем поиск минимума функции и сохраним координату минимума в переменной a.

Для этого ввести в следующей строке имя переменной a, вставить шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, вызвать **Мастер функций**, в списке категорий выбрать **Solving**, в списке имен функций – имя **Minimize**, вставить шаблон функции, щелкнув по



кнопке **OK**. Указать в шаблоне имя функции f , имена поисковых переменных x и y

$a := \text{Minimize}(f, x, y)$

Вывести курсор за пределы блока.

Переменная a является вектором, где первый элемент хранит оптимальное значение x , а второй – значение y .

5. Вывести правее полученные значения: ввести имя a и знак « \Leftarrow »

$$a = \begin{pmatrix} 5 \\ 25 \end{pmatrix}$$

6. Ниже получить значение функции в полученных точках: ввести блок $f(a_0, a_1)$ и знак « \Leftarrow »

$$f(a_0, a_1) = 4.863 \times 10^{-13}$$

7. Увеличим точность проводимых расчетов, изменив значение встроенной переменной TOL на 10^{-14} , для чего выполнить команду (**Tools/Worksheet Options**), на вкладке (**Build-in Variables**) в поле (**Convergence Tolerance (TOL)**) ввести значение $1e-014$, щелкнуть по кнопке **OK**.

8. Проверим полученную точку. Известно, если функция обладает точкой экстремума, то ее первые производные обращаются в этой точке в 0. Найдем эту точку при помощи функции **minerr**.

Ввести в следующей свободной строке слово **given**, ниже ввести систему уравнений

$$\frac{d}{dx} f(x, y) = 0$$

$$\frac{d}{dy} f(x, y) = 0$$

Для чего вставить шаблон первой производной панели **Калькулятор (Calculator)**, указать имя переменной дифференцирования, ввести имя дифференцируемой функции, охватить все выражение курсором, используя клавишу «Пробел», вставить знак « \Leftarrow » панели **Булева алгебра (Boolean)**, ввести число 0.

9. Завершить блок поиска решений вызовом функции

$c := \text{minerr}(x, y)$

10. Вывести ниже полученные значения

$$c = \begin{pmatrix} 5 \\ 25 \end{pmatrix}$$



11. Найти значение функции в найденной точке

$$f(c_0, c_1) = 1.623 \times 10^{-13}$$

Решение, найденное функцией `minimize` ближе к точке минимума, чем решение функции `minerr`.

12. Проанализируем графически поведение функции вблизи найденной точки.

Для этого в строке ниже вызовем функцию `CreateMesh`

$$F := \text{CreateMesh}(f, 4.5, 5.5, 24.5, 25.5, 150, 150).$$

13. Выведем результаты работы функции на диаграмму.

В следующей строке вставить шаблон поверхности панели **График (Graph)**, в шаблон для имени матрицы ввести имя `F`, вывести курсор за пределы блока (рис. 11.1).

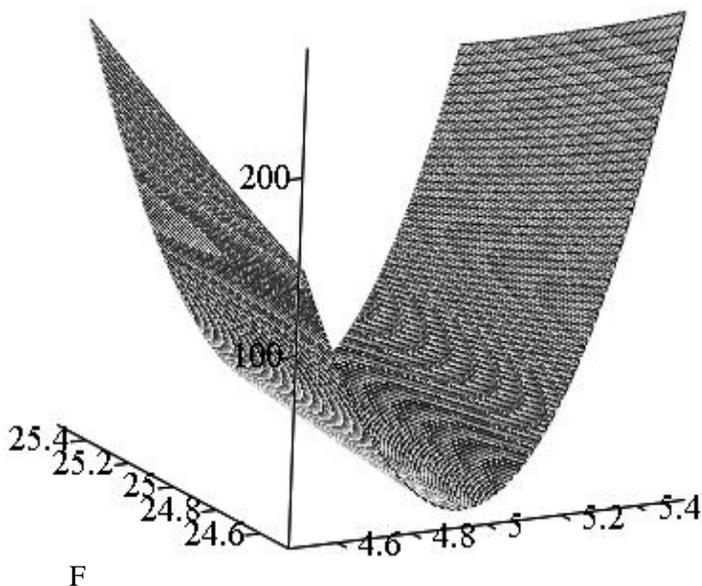


Рис. 11.1. Диаграмма функции `f`

Полученную поверхность можно рассмотреть с различных сторон, схватив мышью за один из углов и развернув поверхность нужной стороной.

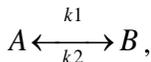
Из рисунка видно, что область минимума приходится на точку с координатами $x=5$, $y=25$.

14. Сохранить документ под именем **Optim1**.



11.7. Задание «Оптимизация режима работы реактора»

Для обратимой реакции первого порядка



найти оптимальные условия (температуру в реакторе T и объем реактора V), минимизирующие стоимость потерь P при заданных нагрузке по сырью и составе сырья. Потери складываются из стоимости непрореагировавшего сырья A и потерь катализатора K . Реакция может протекать при температуре

$$0 \leq T \leq 800. \quad (11.3)$$

Время протекания реакции

$$0 \leq t \leq 50. \quad (11.4)$$

Относительно протекающей реакции известны энергии активации $E_1 = 700$, $E_2 = 1100$, факторы частотности $k_1 = 4$, $k_2 = 3$. Стоимости единицы сырья и катализатора известны и равны 1 и 0.1, соответственно, нагрузка реактора по сырью и концентрация вещества A в сырье равны 1.

Подготовка к решению

Потери складываются из стоимости непрореагировавшего сырья A и потерь катализатора K пропорционально объему реактора V :

$$P = S_A \cdot v \cdot C_A + S_K \cdot V, \quad (11.5)$$

где S_A , S_K – стоимость единицы сырья и катализатора соответственно; C_A – концентрация вещества A после реакции.

Распишем баланс веществ реакции

$$C_{A0} + C_{B0} = C_A + C_B,$$

где C_{A0} , C_{B0} – концентрации веществ A и B в сырье; C_A , C_B – концентрации веществ A и B после реакции.

Поскольку $C_{B0} = 0$, имеем

$$C_B = C_{A0} - C_A. \quad (11.6)$$

Для скорости протекания реакции верно

$$w = -k_1 \cdot C_A + k_2 \cdot C_B = -k_1 \cdot C_A + k_2 \cdot (C_{A0} - C_A), \quad (11.7)$$

а также с учетом (11.6) верно

$$vC_{A0} + wV = vC_A. \quad (11.8)$$



Объем реактора

$$V = tv, \quad (11.9)$$

где v – нагрузка реактора по исходному сырью; t – время пребывания вещества в реакторе.

Подставив (11.9) в (11.8), получим

$$C_{A0} + wt = C_A.$$

Отсюда, учтя (11.7), получим

$$C_A = C_{A0}(1 + k_2 \cdot t) / (1 + k_1 \cdot t + k_2 \cdot t).$$

Для скорости реакции верно

$$k_1 = k_1 e^{-E_1/RT}, \quad k_2 = k_2 e^{-E_2/RT}.$$

Стоимость потерь (11.5) примет вид

$$P = v \left[S_A C_{A0} \frac{1 + k_2 \cdot t}{1 + k_1 \cdot t + k_2 \cdot t} + S_K t \right]. \quad (11.10)$$

Задачу можно сформулировать следующим образом: найти минимум функции (11.10) при заданных ограничениях (11.3–11.4). В этой задаче функция (11.10) является целевой функцией, а переменные t , v – поисковыми переменными. Поставленная задача является задачей нелинейного программирования, так как функция (11.10) содержит нелинейные компоненты.

Решим задачу, применив функцию **minimize**.

Выполнение задания

1. Создать новый документ.

2. Ввести известные данные

$$R := 8.314 \quad SA := 1 \quad SK := 0.1$$

$$k_1 := 4 \quad k_2 := 3 \quad E_1 := 700 \quad E_2 := 1100$$

$$v := 1 \quad CA_0 := 1$$

3. В следующей строке ввести выражение для целевой функции. Сначала задать имя функции и ее аргументы

$$P(T, t) := v \cdot \left(SA \cdot CA_0 \cdot \frac{1 + k_2 \cdot e^{\frac{-E_2}{R \cdot T}} \cdot t}{1 + k_1 \cdot e^{\frac{-E_1}{R \cdot T}} \cdot t + k_2 \cdot e^{\frac{-E_2}{R \cdot T}} \cdot t} + SK \cdot t \right)$$

4. Ниже задать начальные приближения поисковым переменным

$$t := 0 \quad T := 100$$



5. Выдать ниже значение функции цели в стартовой точке
 $P(T, t) = 1$
6. Увеличить точность проводимых расчетов, изменив значение встроенной переменной TOL на 10^{-9} , для чего выполнить команду **Инструменты/Параметры документа (Tools/Worksheet Options)**, на вкладке **Встроенные переменные (Built-In-Variables)** в поле **Допуск сходимости (Tolerance (TOL))** ввести значение $1e-009$, в поле **Допуск ограничения (Constraint Tolerance (CTOL))** ввести значение $1e-009$, щелкнуть по кнопке **ОК**.
7. Сформировать блок поиска решения. Для этого в следующей строке ввести слово given, ниже ввести неравенства (11.3), (11.4), задающие ограничения для поисковых переменных. При вводе неравенств для ввода знаков « \geq » и « \leq » использовать соответствующие шаблоны панели **Булева алгебра (Boolean)**.

$$0 \leq t \leq 50$$

$$0 \leq T \leq 800$$

8. Закрывать блок поиска решения, введя в строке ниже функцию **minimize** и сохранив результат в переменных T и t: ввести шаблон матрицы из двух строк и одного столбца, указать в качестве элементов матрицы имена переменных T и t, вставить шаблон «:=», вызвать **Мастер функций**, выбрать категорию **Solving** и функцию с именем **minimize**. Вставить функцию щелчком по кнопке **ОК**. Ввести в шаблон имена функции и поисковых переменных

$$\begin{pmatrix} T \\ t \end{pmatrix} := \text{Minimize}(P, T, t)$$

9. Вывести ниже полученные значения поисковых переменных. Введем большее число цифр после запятой, для чего установить курсор в блок с выводом значения a, вызвать команду **Формат/Результат (Format/Result)**, на вкладке **Формат числа (Number Format)** выбрать режим Scientific, в поле **Число десятичных знаков (Number of decimal places)** ввести число 7. В результате получим

$$\begin{pmatrix} T \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.9820075 \times 10^2 \\ 9.0908893 \times 10^{-1} \end{pmatrix}$$

10. Вывести оптимальное значение потерь

$$P(T, t) = 5.9164973 \times 10^{-1} .$$



11. Вычислить в строке ниже значение объема реактора V:

$$V := v \cdot t$$

12. Вывести полученное значение, также задав вывод 7 цифр после запятой

$$V = 9.0908893 \times 10^{-1} .$$

13. Исследуем функцию потерь в окрестности полученного решения. Для этого, используя функцию **CreateMesh**, построим линии равного уровня функции вблизи найденной точки. Рассмотрим, не потеряли ли глобальный минимум в ходе решения задачи. Для этого в переменной U1 сохраним значения функции в допустимом пространстве

$$U1 := \text{CreateMesh}(P, 0.001, 800, 0, 50, 100, 100)$$

14. Построить трехмерную поверхность на основе полученных значений, отформатировать поверхность, задав на вкладке **Оформление (Appearance)** в области **Параметры заливки (Fill Options)** заливку контуров, а на вкладке **Специальная (Special)** в области **Параметры контура (Contour Options)** указать, что нужно провести заливку. Указать, что должна использоваться цветовая гамма **Радуга (Rainbow)** на вкладке **Дополнительные (Advanced)**. Диаграмма должна принять вид, представленный на рис. 11.2.

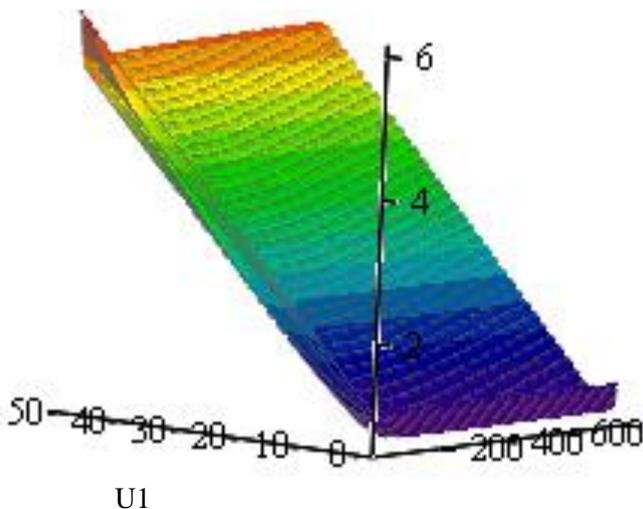
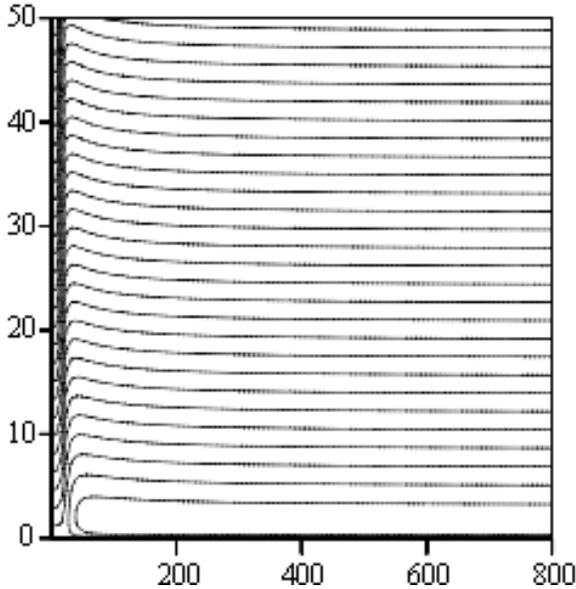


Рис. 11.2. Вид поверхности функции потерь



Видно, что минимум функции приходится на область, соответствующую найденной в пункте 9 точке. При этом видно, что поверхность имеет только один минимум.

15. Представить поверхность в виде линий равного уровня, указав на вкладке **Общие (General)** опцию **Линии уровня (ContourPlot)**. Диаграмма примет вид, представленный на рис. 11.3. Вид линий уровня подтверждает единственность минимума в допустимом пространстве.



U1

Рис. 11.3. Вид линий уровня функции потерь

16. Рассмотрим более подробно область вблизи точки оптимума. Для этого построим новую диаграмму на основе значений функции потерь вблизи точки оптимума, сохранив их в переменной U. Ввести

```
U := CreateMesh(P, 250, 350, 0.85, 1.0, 100, 100)
```

17. Вывести полученные значения на диаграмму, представив ее в виде линий уровня, аналогично предыдущему пункту. Видно (рис. 11.4), что минимум функции находится в точке, найденной решением задачи.



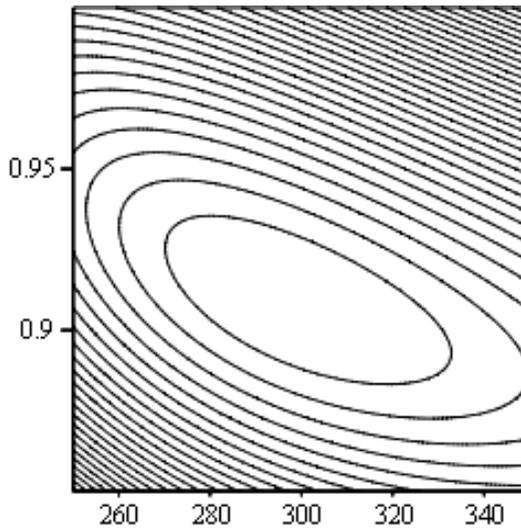


Рис. 11.4. Вид линий уровня функции потерь вблизи точки оптимума

18. Сохранить документ под именем **Optim_nonline**.



12. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ И АППРОКСИМАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

12.1. Интерполяция данных

Известно, что в соответствии с теоремой Вейерштрасса непрерывная на отрезке функция может быть как угодно хорошо описана совокупностью многочленов. На этом построен подход построения интерполяционного многочлена. В Mathcad имеются встроенные функции, позволяющие при интерполяции проводить через экспериментальные точки кривые различной степени гладкости.

Для линейной интерполяции используется функция **linterp(x,y,t)** – аргументами функции являются:

x – вектор экспериментальных значений аргументов, расположенных в порядке возрастания;

y – вектор векторных значений функций;

t – значение аргумента, при котором вычисляется значение функции.

Широкое распространение имеет интерполяция сплайнами. При этом строится интерполяционный полином третьей степени, проходящий через все заданные точки $\{x_i; y_i\}$, $i = 1, \dots, N$, и имеющий непрерывные первую и вторую производные. На каждом интервале $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, \dots, N - 1$, интерполирующая функция является полиномом третьей степени

$$S_i(x) = a_{0,i} + \sum_{k=1}^3 [a_{k,i} (x - x_i)^k],$$

$$S_i(x) = y_i.$$

В Mathcad включены функции, позволяющие строить интерполяционные сплайны с различными условиями на поведение сплайна на концах интервала. Построение сплайна проводится функцией

interp(vs,x,y,t) – аргументами функции являются:

vs – вектор вторых производных, созданный встроенной функцией Mathcad, характеризующей поведение сплайна на концах отрезка;

x,y – массив с координатами точек интерполяции;

t – значение аргумента, в котором вычисляется значение интерполяционного сплайна.

Для вычисления вектора vs используется одна из функций:

lspline(x,y) создает вектор коэффициентов кривой, которая линейна на концах отрезка;



pspline(x,y) создает вектор коэффициентов кривой, которая имеет квадратичный вид на концах отрезка;

cspline(x,y) создает вектор коэффициентов кривой, которая имеет кубический вид на концах отрезка.

Функции **interp**, **lspline**, **pspline**, **cspline** можно использовать для интерполяции двумерных функций. В этом случае в качестве x используется матрица размером $N \times 2$, а в качестве y – квадратная матрица размером $N \times N$. Аргумент t должен быть представлен столбцом из двух элементов, задающих координату точки, в которой вычисляется значение сплайн-поверхности.

12.2. Аппроксимация данных

При построении интерполяционных кривых полученные кривые проходят через все точки, заданные в качестве узлов полинома. Однако, в результатах эксперимента могут быть включены ошибки, которые повлияют на качество полученной кривой. В этом случае следует строить кривые, наименее отклоняющиеся от заданных точек. Такой подход называется аппроксимацией экспериментальных данных.

Наиболее распространенным методом аппроксимации экспериментальных данных является метод наименьших квадратов. Метод позволяет использовать аппроксимирующие функции произвольного вида.

Критерием близости в методе наименьших квадратов является требование минимальности суммы квадратов отклонений от значений аппроксимирующей функции до экспериментальных точек:

$$\min_A \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i, A))^2,$$

где $f(x_i, A)$ – значение аппроксимирующей функции в заданной точке x_i ; A – набор коэффициентов аппроксимирующей функции.

Важной особенностью метода является то, что аппроксимирующая функция может быть произвольной. Ее вид определяется особенностями решаемой задачи, например, физическими соображениями, если проводится аппроксимация результатов физического эксперимента.

Наиболее часто встречаются аппроксимация прямой линией (линейная регрессия), аппроксимация полиномом (полиномиальная регрессия), аппроксимация линейной комбинацией произвольных функций.

Аппроксимация полиномами. Для получения аппроксимирующей функции в виде полиномов второй степени и выше использу-



ются функция **interp** и одна из функций, вычисляющих коэффициенты полинома:

regress(x,y,n) функция возвращает коэффициенты полинома заданной степени. Здесь:

x,y – массив с координатами точек аппроксимации;

n – порядок аппроксимирующего полинома.

loess(x,y,s) функция возвращает коэффициенты для совокупности полиномов второго порядка. Параметр s регулирует размер окрестности для локальной регрессии. Рекомендуемое значение $s = 0.7-0.8$.

Для функций число точек данных должно удовлетворять соотношению

$$N > \frac{(n+k-1)!}{(n-1)!k!} \frac{n+k}{n},$$

где n – число независимых переменных; k – степень полинома.

Аналогично интерполяции, функции могут использоваться для двумерной регрессии.

Аппроксимация математическими функциями произвольного вида. В случае, если вид аппроксимирующей кривой описывается функциями, отличными от полиномов, Mathcad предлагает следующие встроенные функции:

expfit(x,y,vg) вычисляет коэффициенты экспоненциальной функции $a \cdot e^{bx+c}$, вектор vg должен содержать начальные приближения искоемых коэффициентов;

lgsfit(x,y,vg) вычисляет коэффициенты логистической функции $\frac{a}{1+b \cdot e^{cx}}$, вектор vg должен содержать начальные приближения искоемых коэффициентов;

line(x,y) вычисляет коэффициенты линейной функции $ax+b$, вектор начальных приближений не нужен;

linfit(x,y,F) вычисляет коэффициенты линейной комбинации функций, заданных в F , значения массива x должны быть отсортированы по возрастанию, вектор начальных приближений не нужен;

lnfit(x,y) вычисляет значения параметров для логарифмической функции, вектор начальных приближений не нужен;

logfit(X,Y,vg) вычисляет коэффициенты логарифмической функции $a \cdot \ln(x+b)+c$, вектор vg должен содержать начальные приближения искоемых коэффициентов;



pwrfit(X,Y,vg) вычисляет коэффициенты степенной функции вида $ax^b + c$, вектор **vg** должен содержать начальные приближения искоемых коэффициентов;

sinfit(X,Y,vg) вычисляет коэффициенты синусоидальной функции $a \cdot \sin(x + b) + c$, вектор **vg** должен содержать начальные приближения искоемых коэффициентов.

Особо следует отметить встроенную функцию, которая позволяет аппроксимировать данные на основе любой заданной пользователем функции:

genfit(x,y,vg,F) находит коэффициенты аппроксимирующей функции пользователя **F**, где

x,y – массив с координатами точек аппроксимации;

vg – вектор начальных приближений искоемых коэффициентов;

F(x,k) – функция пользователя, задающая вид аппроксимирующей зависимости. Аргументы функции: **x** – аргумент аппроксимирующей зависимости; **k** – вектор коэффициентов аппроксимирующей зависимости. При формировании выражения для функции **F** следует указывать в качестве коэффициентов имена элементов вектора **k**.

12.3. Задание «Интерполяция экспериментальных данных»

По экспериментальным данным, отражающим зависимость плотности сухого воздуха, кг/м^3 , от температуры, $^{\circ}\text{C}$, приведенным в табл. 12.1, построить интерполяционные сплайны: линейный и кубические с различными условиями на концах отрезка.

Таблица 12.1

Экспериментальные данные

Температура	0	2	6	8	10	14
Плотность	1.293	1.284	1.266	1.257	1.247	1.23
Температура	16	20	22	24	26	30
Плотность	1.221	1.205	1.197	1.189	1.181	1.165
Температура	100	200	300	500	800	1000
Плотность	0.946	0.746	0.615	0.456	0.329	0.277



1. Создать новый документ Mathcad.
2. Ввести переменные

$$n := 18 \quad k := 0..n - 1$$
3. Ввести согласно данным таблицы значения температуры в вектор t , задав вектор как матрицу, состоящую из 18 строк и 1 столбца.
4. Далее следует сформировать набор номеров точек, через которые будет проходить расчетная кривая.
Задать количество таких точек больше, чем число экспериментальных, что позволит визуально оценить качество интерполяции. Для этого задать диапазон изменения номера точек в виде

$$i := 0..100 \quad tr_i := i \cdot \frac{t_0 + t_{n-1}}{100}$$

5. Ввести значения вектора Ro , задав вектор как матрицу, состоящую из 18 строк и 1 столбца.
6. Ввести значения плотности согласно данным таблицы.
7. Ввести формулы для вычисления координат точек каждого из типов сплайнов

$$Ro_lin(tr) := linterp(t, Ro, tr)$$

$$s1 := lspline(t, Ro)$$

$$Ro_lsp(tr) := interp(s1, t, Ro, tr)$$

$$s2 := pspline(t, Ro)$$

$$Ro_psp(tr) := interp(s2, t, Ro, tr)$$

$$s3 := cspline(t, Ro)$$

$$Ro_csp(tr) := interp(s3, t, Ro, tr)$$

8. Отобразить кривые на диаграмме.
Для этого вставить шаблон двумерной диаграммы с панели **Графика (Graph)**, ввести в шаблон имена переменных и отформатировать диаграмму согласно рис. 12.1.
Для отображения нескольких кривых на одной диаграмме следует вводить вдоль оси ординат имена соответствующих кривым функций, разделяя имена **запятой**.
Какой из видов сплайнов дает лучшее качество описания? Какой из видов сплайнов дает худшее качество описания? Обоснуйте свой ответ.
9. Сохранить документ под именем **Interp**.



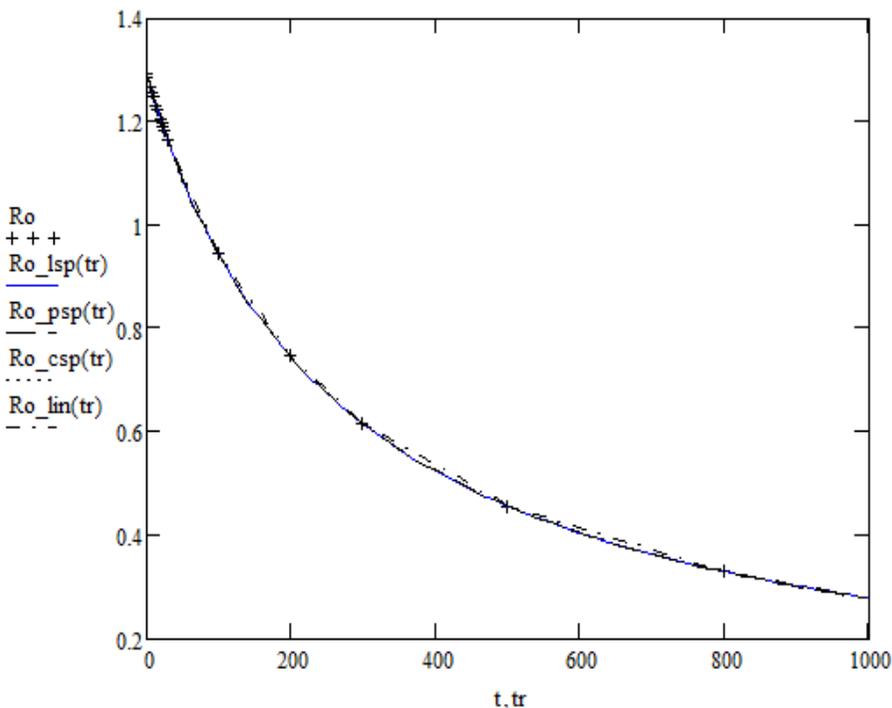


Рис. 12.1. Интерполяция экспериментальных данных

12.4. Задание «Решение обратной задачи кинетики»

Для последовательной химической реакции второго порядка, протекающей по схеме



известно, что зависимость концентрации конечного продукта от времени выражается зависимостью

$$C_P(t) = C_{A0} C_{B0} (C_{A0} - C_{B0})^2 k_1 k_2 I,$$

где $I = \int_0^t \exp(-k_2 u) \int_0^u \frac{\exp[(k_2 + k_1(C_{A0} - C_{B0}))u]}{C_{A0} \exp(k_1(C_{A0} - C_{B0})u) - C_{B0}} du du.$

Определить кинетические константы по данным об изменении концентрации P конечного вещества во времени (t), приведенным в табл. 12.2, если известно, что $C_{A0} = 1,5$, $C_{B0} = 2$.



Таблица 12.2

Экспериментальные данные (приведены значения $P \cdot 10^3$)

t	0	0.12	0.13	0.14	0.23	0.45	0.65	1.1	1.5	2.4
P	0	2.1	2.9	3.4	8.6	29	55	128	202	377
t	3	4.02	4.4	5	5.9	6.12	7.43	8.99	9.15	10
P	500	667	726	813	928	953	1063	1199	1211	1259

1. Создать новый документ Mathcad.
2. Ввести в переменные t и P как массивы, состоящие из одного столбца, согласно табличным данным.
3. Ввести ниже блок, приводящий значения P к истинным значениям $P := P \cdot 10^{-3}$
4. Ввести функцию пользователя, которая соответствует зависимости концентрации конечного продукта от времени

$$f(x, z) := \frac{3}{4} \cdot z_0 \cdot z_1 \cdot \int_0^x \int_0^u \frac{e^{\left(\frac{-z_0}{2} + z_1\right) \cdot u}}{\left(\frac{3}{2} \cdot e^{\frac{-z_0}{2} \cdot u} - 2\right)^2} du \cdot e^{-z_1 \cdot u} du$$

5. Ввести вектор v начальных приближений для значений констант скоростей

$$v := \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.2 \end{pmatrix}$$
6. Вычислить значения констант скоростей реакций, при которых экспериментальные данные наилучшим образом описываются выбранной функциональной зависимостью

$$S := \text{genfit}(t, P, v, f)$$
7. Выдать значения констант

$$S = \begin{pmatrix} 0.558 \\ 0.237 \end{pmatrix}$$



8. Рассчитаем коэффициент корреляции для полученной зависимости. Для этого введем функцию, которая будет рассчитывать значения зависимости при различных значениях времени

$$\text{Pr}(t) := f(t, S)$$

Теперь рассчитаем коэффициент корреляции

$$\text{corr}(\overrightarrow{\text{Pr}(t)}, P) = 1$$

9. Выведем на диаграмму экспериментальные и расчетные данные по концентрации конечного продукта, как показано на рис. 12.2.

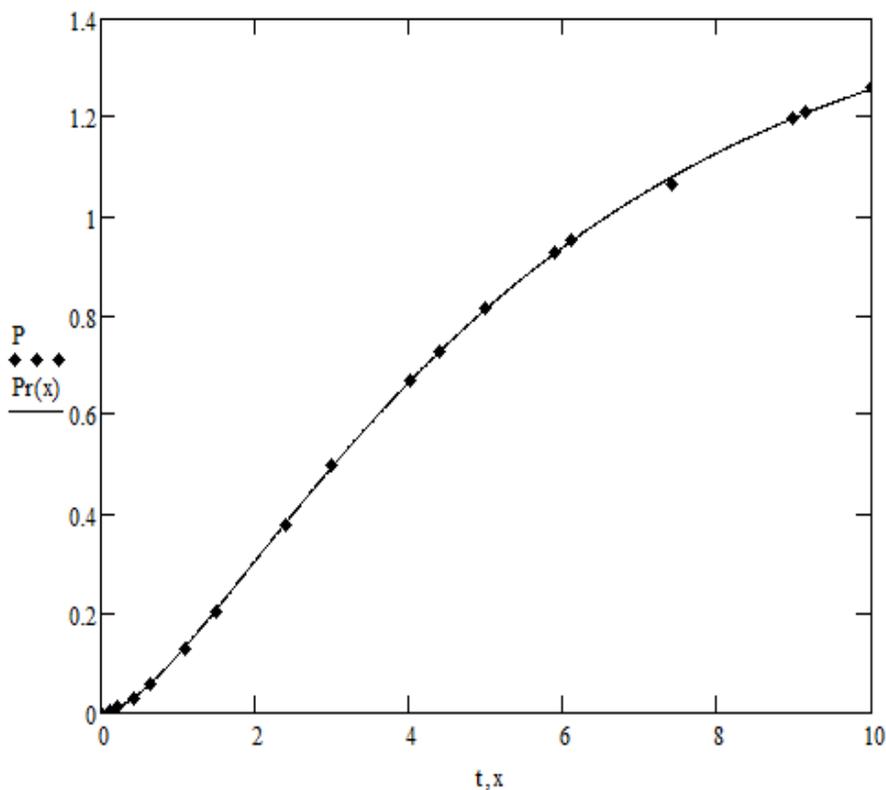


Рис. 12.2. Аппроксимация экспериментальных данных

10. Сохранить документ под именем **Approximation**.



12.5. Задание «Двумерная интерполяция экспериментальных данных»

Энтальпия влажного воздуха зависит от теплоемкости сухого воздуха, кДж/(кг*К), энтальпии перегретого водного пара, кДж/кг; температуры воздуха, К; абсолютного влагосодержания воздуха, кг/кг. В свою очередь теплоемкость сухого воздуха и энтальпия перегретого водного пара зависят от температуры.

Провести интерполяцию экспериментальных данных зависимости энтальпии влажного воздуха от температуры и абсолютного влагосодержания воздуха, приведенных в табл. 12.3.

Таблица 12.3

Экспериментальные данные

Температура	Влажность				
	0.002	0.004	0.006	0.008	0.01
273	5	10	10	10	10
278	10	15	20	20	20
283	15	20	25	30	30
288	20	25	30	35	40
293	25	30	35	40	45

1. Создать новый документ Mathcad. Ввести массивы Td и E

$$Td := \begin{pmatrix} 273 & 0.002 \\ 278 & 0.004 \\ 283 & 0.006 \\ 288 & 0.008 \\ 293 & 0.01 \end{pmatrix} \quad E := \begin{pmatrix} 5 & 10 & 10 & 10 & 10 \\ 10 & 15 & 20 & 20 & 20 \\ 15 & 20 & 25 & 30 & 30 \\ 20 & 25 & 30 & 35 & 40 \\ 25 & 30 & 35 & 40 & 45 \end{pmatrix}$$

2. Провести интерполяцию по экспериментальным точкам, используя кубический сплайн, концы которого подчиняются кубической зависимости

$$Er(T, d) := \text{interp} \left[\text{cspline}(Td, E), Td, E, \begin{pmatrix} T \\ d \end{pmatrix} \right]$$

3. Отобразить поверхность на диаграмме, используя для построения функцию CreateMesh. Для этого ввести

$$\text{Surf} := \text{CreateMesh}(Er, 273, 293, 0.002, 0.01, 10, 10)$$

Затем отобразить поверхность экспериментальных данных, как показано на рис. 12.3.



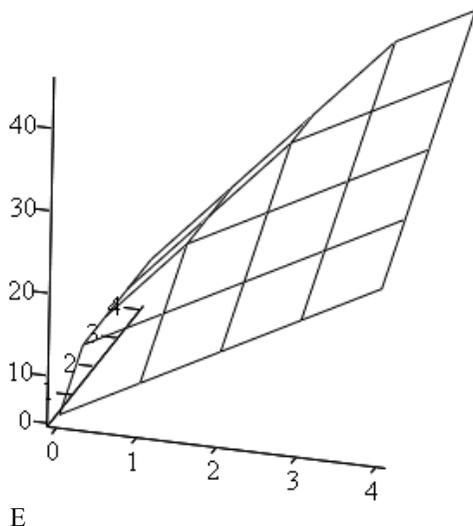


Рис. 12.3. Экспериментальные данные

Рядом отобразить полученную интерполяционную поверхность, как показано на рис. 12.4.

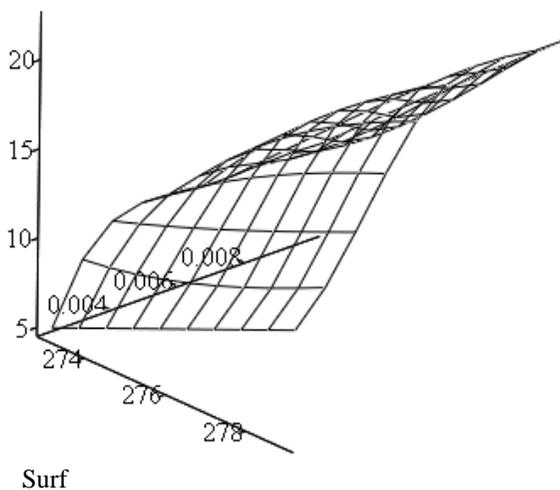


Рис. 12.4. Экспериментальные данные

4. Сохранить документ под именем **Interp1**.



13. СИМВОЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

13.1. Символьное вычисление выражений

Проводится при помощи команды **Символьные операции/Вычислить** либо при использовании инструмента → панели **Символьные (Symbolic)**. Для выполнения вычислений необходимо указать, какое выражение нужно вычислить.

При помощи этой команды можно получить результат вычисления выражения в разном виде:

– символьном, для чего используется команда **Символьные операции/Вычислить/Символически (Symbolics/Evaluate/Symbolically)**. Результат будет иметь символьный вид, встречающиеся числа будут выданы в виде целых чисел и простых дробей;

– комплексном, для чего используется команда **Символьные операции/Вычислить/В комплексных числах (Symbolics/Evaluate/Complex)**;

– числами с плавающей десятичной точкой, для чего используется команда **Символьные операции/Вычислить/С плавающей точкой (Symbolics/Evaluate/Floating Point...)**. Результат будет иметь символьный вид, встречающиеся числа будут выданы в виде с плавающей десятичной точкой. При выполнении такого типа вычислений система запрашивает в окне точность представления числовых значений. Ниже в окне указаны допустимые пределы задаваемой величины. Величина вычисляемой точности ограничена только размерами оперативной памяти компьютера.

Упрощение выражений. Проводится при помощи команды **Символьные операции/Упростить (Symbolics/Simplify)** либо инструмента **simplify** панели **Символьные (Symbolic)**. Для выполнения вычислений необходимо указать, какое выражение нужно упростить.

Раскрытие скобок в выражениях. Проводится при помощи команды **Символьные операции/Развернуть (Symbolics/Expand)** либо инструмента **expand** панели **Символьные (Symbolic)**. Действие команды обратно по смыслу действию команды **Символьные операции/Упростить**. Для выполнения вычислений необходимо указать, какое выражение нужно обработать.

Разложение на множители. Проводится при помощи команды **Символьные операции/Факторизовать (Symbolics/Factor)** либо инструмента **factor** панели **Символьные (Symbolic)**. Для выполнения вычислений необходимо указать, какое выражение нужно обработать.



Группировка относительно выделенного выражения. Проводится при помощи команды **Символьные операции/Сборка (Symbolics/Collect)** либо инструмента **collect** панели **Символьные (Symbolic)**. Для выполнения вычислений необходимо указать, относительно какой переменной проводить группировку. После шаблона **collect** допускается задание нескольких переменных через запятую. В этом случае приведение подобных слагаемых выполняется последовательно сначала по первой, затем по второй и так далее переменным.

Подстановка переменной в выражение. Проводится при помощи команды **Символьные операции/Переменная/Подставить (Symbolics/Variable/Substitute)** или инструмента **substitute** панели **Символьные (Symbolic)**. Для выполнения команды меню нужно:

- подготовить выражение, которое будет подставляться;
- поместить его в буфер обмена командой **Правка/Копировать**;
- указать в основном выражении, вместо какой переменной нужно проводить подстановку;
- выполнить команду.

При использовании инструмента панели **Символьные (Symbolic)** в шаблоне после названия операции указывается имя заменяемой переменной, шаблон « \Leftarrow » из панели **Булева алгебра (Boolean)** и выражение для замены.

Разложение на элементарные дроби. Проводится при помощи команды **Символьные операции/Переменная/Преобразовать к дробно-рациональному виду (Symbolics/Variable/Convert to Partial Fraction)** или инструмента **parfac** панели **Символьные (Symbolic)**. Для выполнения вычислений необходимо указать, относительно какой переменной проводить преобразования.

Разложение в ряд Тейлора. Проводится при помощи команды **Символьные операции /Переменная/Разложить в ряд (Symbolics/Variable/Expand to Series...)** или инструмента **series** панели **Символьные (Symbolic)**.

В случае использования команды меню нужно указать, относительно какой переменной проводить разложение и вызвать команду. Затем в окне указать число членов ряда, которое по умолчанию равно 6.

Используя инструмент панели **Символьные (Symbolic)**, в шаблоне после имени операции указать имя переменной, затем число членов ряда.

При выводе результата Mathcad указывает остаточную погрешность разложения.



13.2. Задание «Символьные вычисления и преобразования»

Выполнить следующие вычисления:

- проинтегрировать выражение $\ln(x)$, проверить результат дифференцированием;
- раскрыть скобки в выражении $(x - 9) \cdot (x + 6)$, а затем проверить результат, разложив его на множители.

1. Создать новый документ.
2. Выполнить первую часть задания – проинтегрировать заданное выражение и проверить правильность вычислений.

Вставить шаблон неопределенного интеграла панели *Математический анализ (Calculus)*, ввести подынтегральное выражение в шаблон для функции и имя x в шаблон для переменной интегрирования

$$\int \ln(x) dx.$$

3. Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором полученное выражение.

Вызвать команду **Вычислить/Аналитически** из меню **Символьные операции (Symbolics/Evaluate/Symbolically)**.

В следующей строке будет выдан результат:

$$x \cdot \ln(x) - x.$$

4. Проверить правильность полученного результата. Скопировать в буфер обмена полученный результат, используя инструмент копирования *Стандартной* панели.
5. Перевести курсор в следующую строку и вставить шаблон производной первого порядка из панели *Математический анализ (Calculus)*.

В качестве переменной дифференцирования указать имя x , в шаблон для функции вставить выражение из буфера обмена, используя инструмент вставки *Стандартной* панели. MathCad выдаст выражение

$$\frac{d}{dx}(x \cdot \ln(x) - x).$$

6. Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором все полученное выражение, ввести инструмент \rightarrow панели *Символьные (Symbolic)*.



Вывести курсор за пределы введенного выражения.

Результат примет вид

$$\frac{d}{dx}(x \cdot \ln(x) - x) \rightarrow \ln(x).$$

7. Выполнить вторую часть задания – провести раскрытие скобок в заданном выражении, а затем проверить правильность проведенных вычислений.

В следующей строке ввести выражение

$$(x - 9) \cdot (x + 6).$$

Для ввода знака умножения использовать клавишу «*».

Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором все полученное выражение, вставить инструмент expand панели **Символьные (Symbolic)**.

В шаблоне рядом с именем expand указать имя x

$$(x - 9) \cdot (x + 6) \text{ expand, } x.$$

8. Вывести курсор за пределы выражения. MathCad выдаст

$$(x - 9) \cdot (x + 6) \text{ expand, } x \rightarrow x^2 - 3 \cdot x - 54.$$

9. Проверить правильность полученного результата. Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором результирующее выражение и скопировать его в буфер обмена, используя инструмент копирования **Стандартной** панели.

Вставить выражение из буфера обмена в следующую строку, используя инструмент вставки **Стандартной** панели

$$x^2 - 3 \cdot x - 54,$$

вызвать команду **Символьные операции/Факторизовать (Symbolics/Factor)** панели **Символьные (Symbolic)**.

10. В следующей строке будет выдан результат

$$(x - 9) \cdot (x + 6).$$

11. Сохранить документ под именем **Symbolica**.

13.3. Операции над матрицами

Транспонирование матриц. Проводится при помощи команды **Символьные операции/Матрица/Транспонировать (Symbolics/-Matrix/Transpose)** или инструмента $M^T \rightarrow$ панели **Символьные (Symbolic)**. Матрица, над которой будет проводиться операция, должна быть выделена.



Вычисление обратной матрицы. Проводится при помощи команды **Символьные операции/Матрица/Обратить (Symbolics/Matrix/Invert)** или инструмента $M^{-1} \rightarrow$ панели **Символьные (Symbolic)**. Матрица, над которой будет проводиться операция, должна быть выделена. Аналитическое обращение доступно в Mathcad только для матриц размером не более 3×3 .

Вычисление определителя матрицы. Проводится при помощи команды **Символьные операции / Матрица /Определитель (Symbolics/Matrix/Determinant)** или инструмента $|M| \rightarrow$ панели **Символьные (Symbolic)**. Матрица, над которой будет проводиться операция, должна быть выделена.

13.4. Задание «Символьные вычисления с матрицами»

Найти транспонированную, обратную матрицы и определитель для матрицы

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ b & c & a \\ a & c & b \end{pmatrix}.$$

1. Открыть документ **Symbolica**.
2. Сначала ввести матрицу.
Перевести курсор в последнюю незанятую строку и вставить шаблон матрицы панели **Матрица (Matrix)**. Указать число строк и столбцов равное 3, щелкнуть по кнопке **ОК**. Ввести в полученный шаблон элементы матрицы.
Для перемещения курсора между элементами матрицы использовать клавиши со стрелками.
3. Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором всю матрицу и поместить ее в буфер обмена, используя инструмент копирования **Стандартной** панели. Это позволит не вводить матрицу заново при вычислении обратной матрицы и определителя.
4. Найдем матрицу, транспонированную по отношению к заданной. Вставить инструмент $M^T \rightarrow$ панели **Символьные (Symbolic)**. Вывести курсор за пределы блока.



Результат примет вид

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ b & c & a \\ a & c & b \end{pmatrix}^T \rightarrow \begin{pmatrix} a & b & a \\ b & c & c \\ c & a & b \end{pmatrix}.$$

5. Найдем обратную матрицу для заданной.

Вставить матрицу из буфера обмена в следующую строку, используя инструмент вставки **Стандартной** панели.

Ввести инструмент M^{-1} → панели **Символьные (Symbolic)** и вывести курсор за пределы блока.

Результат примет вид, представленный на рис. 13.1 (представлен в 2 строки ввиду нехватки места для отображения)

Результат может быть представлен в иной степени упрощения выражения, в зависимости от версии используемого пакета.

6. Найдем определитель для заданной матрицы.

Вставить матрицу из буфера обмена в следующую строку, используя инструмент вставки **Стандартной** панели.

Ввести инструмент $|M|$ → панели **Символьные (Symbolic)** и вывести курсор за пределы блока.

Результат примет вид

$$\left| \begin{pmatrix} a & b & c \\ b & c & a \\ a & c & b \end{pmatrix} \right| \rightarrow a \cdot c \cdot b - a^2 \cdot c - b^3 + b \cdot c^2 + b \cdot a^2 - a \cdot c^2.$$

7. Сохранить документ и закрыть его.

13.5. Вычисление пределов функций

Шаблоны для вычисления пределов функций находятся в панели **Математический анализ (Calculus)**. Это шаблоны:

- вычисления предела функции при стремлении аргумента к некоей точке, когда функция определена в этой точке;
- вычисления предела функции при стремлении аргумента к некоей точке справа или слева, когда функция может быть не определена в этой точке.

После формирования выражения с шаблонами пределов для получения результата необходимо использовать инструмент → панели **Символьные (Symbolic)**.



$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ b & c & a \\ a & c & b \end{pmatrix}^{-1} \rightarrow \begin{bmatrix} -c & -(b+c) & (b \cdot a - c^2) \\ \frac{(a+b)}{(b \cdot a - a \cdot c + b^2 - c^2)} & \frac{a}{(-b^2 - c \cdot b + a \cdot c + a^2)} & \frac{-(a^2 - c \cdot b)}{(a \cdot c \cdot b - a^2 \cdot c - b^3 + b \cdot c^2 + b \cdot a^2 - a \cdot c^2)} \\ -c & \frac{a}{(-b^2 - c \cdot b + a \cdot c + a^2)} & \frac{(a \cdot c - b^2)}{(a \cdot c \cdot b - a^2 \cdot c - b^3 + b \cdot c^2 + b \cdot a^2 - a \cdot c^2)} \end{bmatrix}$$

Рис. 13.1. Результат символического обращения матрицы в Mathcad

13.6. Поиск производных и первообразных

Проводится при помощи команд **Символьные операции/Переменная/Дифференцировать** (**Symbolics/Variable/Differentiate**) и **Символьные операции/Переменная /Интегрировать** (**Symbolics/-Variable/Integrate**). Шаблоны для записи выражения с производными либо интегралами берутся из панели **Математический анализ** (**Calculus**). После формирования выражения с шаблонами интегралов либо производных необходимо указать, относительно какой переменной проводить преобразования, и вызвать соответствующую команду.

Подынтегральная функция может зависеть от любого количества переменных.

13.7. Решение алгебраических уравнений и неравенств

Определение коэффициентов полинома. Проводится при помощи команды **Символьные операции /Полиномиальные коэффициенты** (**Symbolics/Polinomial Coefficients**) или инструмента **coeffs** панели **Символьные** (**Symbolic**).

Решение одного уравнения. Проводится при помощи команд **Символьные операции/Переменная/Решить** (**Symbolics/Variable/-Solve**) или инструмента **solve** панели **Символьные** (**Symbolic**). Для выполнения вычислений необходимо указать, относительно какой переменной проводить преобразования.

Решение системы уравнений и неравенств. Проводится следующим образом: строится блок поиска решения как при численном решении систем уравнений и неравенств, но начальные приближения переменным не задают; блок закрывается функцией **Find**, после которой вставляется инструмент → панели **Символьные** (**Symbolic**).

13.8. Задание «Символьное определение точки минимума функции»

Найти минимум функции Розенброка

$$f(x, y) := a \cdot (y - x^2)^2 + (b - x)^2.$$

Необходимым условием наличия минимума заданной функции в точке является условие равенства нулю первой производной заданной функции в этой точке. Для данной задачи это условие будет также достаточным, поскольку заданная функция Розенброка имеет вид параболы, то есть выпукла. Воспользуемся этим условием.



1. Создать новый документ. Задать функцию $f(x,y)$.
2. В следующей строке ввести шаблон производной первого порядка из панели **Математический анализ (Calculus)**, ввести имя переменной дифференцирования x , имя функции $f(x,y)$:

$$\frac{d}{dx} f(x,y)$$

3. Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором все выражение и вставить инструмент → панели **Символьные (Symbolic)**. Вывести курсор за пределы введенного выражения. Результат примет вид

$$\frac{d}{dx} f(x,y) \rightarrow -4 \cdot a \cdot (y - x^2) \cdot x - 2 \cdot b + 2 \cdot x$$

4. Скопировать полученный результат

$$-4 \cdot a \cdot (y - x^2) \cdot x - 2 \cdot b + 2 \cdot x$$

в буфер обмена, используя инструмент копирования **Стандартной** панели.

5. В следующей строке ввести шаблон производной первого порядка и ввести имя переменной дифференцирования y , имя функции $f(x,y)$

$$\frac{d}{dy} f(x,y)$$

6. Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором все выражение и вставить инструмент → панели **Символьные (Symbolic)**. Вывести курсор за пределы введенного выражения. Результат примет вид

$$\frac{d}{dy} f(x,y) \rightarrow 2 \cdot a \cdot (y - x^2)$$

7. Перевести курсор в следующую строку, ввести слово given. Вставить в строку ниже выражение из буфера обмена, используя инструмент вставки **Стандартной** панели given

$$-4 \cdot a \cdot (y - x^2) \cdot x - 2 \cdot b + 2 \cdot x,$$

нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором все выражение и вставить инструмент « \Rightarrow » панели **Булева алгебра (Boolean)**, приравнять выражение к 0 given

$$-4 \cdot a \cdot (y - x^2) \cdot x - 2 \cdot b + 2 \cdot x = 0.$$



8. Установить курсор в выражение, полученное в п. 6:

$$2 \cdot a \cdot (y - x^2).$$

Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором все выражение и скопировать его в буфер обмена, используя инструмент копирования *Стандартной* панели.

Переместить курсор в блок given и вставить выражение из буфера обмена, используя инструмент вставки *Стандартной* панели

given :

$$-4 \cdot a \cdot (y - x^2) \cdot x - 2 \cdot b + 2 \cdot x = 0$$

$$2 \cdot a \cdot (y - x^2),$$

нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором вставленное выражение, вставить инструмент « \Rightarrow » панели *Булева алгебра (Boolean)*, приравнять выражение к 0. Вы получите блоки

given

$$-4 \cdot a \cdot (y - x^2) \cdot x - 2 \cdot b + 2 \cdot x = 0$$

$$2 \cdot a \cdot (y - x^2) = 0$$

9. Поставить курсор в следующую строку, вызвать **Мастер функций**, выбрать категорию «Решение уравнений», функцию find, вставить ее щелчком по кнопке **ОК**, в качестве аргументов указать переменные x и y:

find(x, y),

нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором все выражение, и вставить инструмент \rightarrow панели *Символьные (Symbolic)*.

Вывести курсор за пределы введенного выражения.

Результат примет вид

given

$$-4 \cdot a \cdot (y - x^2) \cdot x - 2 \cdot b + 2 \cdot x = 0$$

$$2 \cdot a \cdot (y - x^2) = 0$$

$$\text{find}(x, y) \rightarrow \begin{pmatrix} b \\ b^2 \end{pmatrix}$$

10. Сохранить документ под именем **Optimum**.



14. ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ

14.1. Лабораторная работа «Оптимальное распределение пара в барабане котла»

Цель работы. Освоение приемов поиска оптимума функции на основе необходимого условия минимума функции с использованием аналитических вычислений.

Постановка задачи. Рассмотрим задачу оптимального распределения пара в барабане котла с трехступенчатым испарением. Необходимо определить доли пара, генерируемые в первом и втором отсеках, при которых концентрация примеси в паре, выходящем из котла, будет минимальна.

Известны: концентрация примеси, поступающей в котел с питательной водой, 10 мг/л, коэффициент продувки 0.01, суммарные коэффициенты выноса примеси для каждого из трех отсеков 10^{-5} ; $2 \cdot 10^{-5}$; $3 \cdot 10^{-5}$ соответственно. Суммарный коэффициент выноса примеси представляет собой отношение концентрации примеси в паре к концентрации примеси в воде. Отложением примеси на стенках котла и вымыванием примеси со стенок пренебречь.

Поступающая в отсек примесь частично уносится паром, остальная часть продувается в соседний отсек. Количество уносимой примеси рассчитывается как произведение концентрации примеси в воде C_w на расход воды.

Подготовка к решению задачи

Составим материальные балансы по примеси для трех отсеков.

Количество поступающей в отсек примеси равно количеству примеси, уносимой с паром, плюс количество примеси, уносимой с водой из отсека. Материальные балансы по трем отсекам имеют вид

$$C_w \cdot (1 + Pr) = K_{p1} \cdot C_{w1} \cdot x + C_{w1} \cdot (1 + Pr - x),$$

$$C_w \cdot (1 + Pr - x) = K_{p2} \cdot C_{w2} \cdot x + C_{w2} \cdot (1 + Pr - x - y),$$

$$C_w \cdot (1 + Pr - x - y) = K_{p3} \cdot C_{w3} \cdot x + C_{w3} \cdot Pr.$$

где Pr – значение продувки из котла; x, y – доли пара в первом и втором отсеках соответственно; K_{p1}, K_{p2}, K_{p3} – суммарные коэффициенты выноса примеси в 1, 2 и 3 отсеках соответственно; C_w, C_{w1}, C_{w2} – концентрации примеси в воде, поступающей в котел во второй и третий отсеки соответственно; C_{w3} – концентрация примеси в воде,



выходящей из котла. Неизвестные x , y – доли пара в первом и втором отсеках соответственно.

Запишем функцию для расчета концентрации примеси в паре.

На выходе из котла концентрация примеси в паре C_p вычисляется как

$$C_p = x \cdot C_{p1} + y \cdot C_{p2} + (1 - x - y) \cdot C_{p3},$$

где C_{p1} , C_{p2} , C_{p3} – концентрации примеси в паре в первом, втором и третьем отсеках котла соответственно.

Концентрация примеси в паре для отсека i вычисляется по формуле

$$C_{p_i} = K_{p_i} \cdot C_{w_i}.$$

Минимум функции соответствует точке, в которой первые производные функции обращаются в нуль, а вторые производные больше нуля.

Найдем для функции концентрации примеси в паре C_p такие точки, где для первых и вторых производных функции по переменным x , y выполняется условие минимума. Тогда получим такие значения долей пара в первом и втором отсеках, при которых значение концентрации примеси в паре на выходе из котла будет минимально.

Выполнение работы

1. Создать новый документ.
2. Задать известные константы и начальные приближения для переменных

$$Pr := 0.01 \quad C_w := 10$$

$$K_{p1} := 10^{-5} \quad K_{p2} := 2 \cdot 10^{-5} \quad K_{p3} := 3 \cdot 10^{-5}$$

3. В строке ниже ввести уравнение материального баланса для первой ступени

$$C_w \cdot (1 + Pr) = K_{p1} \cdot C_{w1} \cdot x + C_{w1} \cdot (1 + Pr - x),$$

для чего установить курсор в свободную строку, ввести имя переменной C_w , нажать клавишу с «*», ввести открывающую скобку, 1, знак «+», имя переменной Pr , закрывающую скобку. Ввести знак «=» палитры **Булева алгебра (Boolean)**, имя переменной K_{p1} , нажать клавишу с «*», ввести имя переменной C_{w1} , нажать клавишу с «*», ввести имя переменной x . Ввести знак «+» и последнее слагаемое $C_{w1} \cdot (1 + Pr - x)$ аналогичным описанному выше образом.

4. Выразим из введенного уравнения концентрацию примеси в воде в первом отсеке C_{w1} , используя средства символьной математики.



Установить курсор в блок с уравнением и при помощи клавиши «Пробел» и клавиш со стрелками передвинуть курсор так, чтобы он охватывал переменную $Cw1$.

Выполнить команду **Символьные операции/Переменная/Решить (Symbolics/Variable/Solve)**.

В строке ниже будет выведен ответ

$$\frac{Cw \cdot (Pr + 1)}{Pr - x + Kp1 \cdot x + 1}$$

5. В выражении осталось одно неизвестное – x .

Представим $Cw1$ как функцию от x .

Установить курсор в полученное выражение. Нажимая клавишу «Пробел» охватить все выражение курсором. Нажать клавишу «Insert», чтобы курсор слева охватывал выражение, и ввести шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**.

В полученный слева шаблон ввести имя функции $Cw1(x)$. Получим выражение

$$Cw1(x) := \frac{Cw \cdot (Pr + 1)}{Pr - x + Kp1 \cdot x + 1}$$

6. Ввести уравнение материального баланса для второго отсека. Концентрацию примеси в воде в первом отсеке $Cw1$ будем вводить как функцию от переменной x . Знак «=» ввести с палитры **Булева алгебра (Boolean)**

$$Cw1(x) \cdot (1 + Pr - x) = Kp2 \cdot Cw2 \cdot x + Cw2 \cdot (1 + Pr - x - y)$$

7. Получим выражение для значения концентрации примеси во втором отсеке.

Для этого установить курсор в блок с уравнением и при помощи клавиши «Пробел» и клавиш со стрелками передвинуть курсор так, чтобы он охватывал переменную $Cw2$.

Выполнить команду **Символьные операции/Переменная/Решить (Symbolics/Variable/Solve)**.

В строке ниже будет выведен ответ

$$\frac{Cw1(x) \cdot (Pr - x + 1)}{Pr - x - y + Kp2 \cdot x + 1}$$

8. В выражении осталось два неизвестных – x и y . Представим $Cw2$ как функцию от x и y .

9. Установить курсор в полученное выражение. Нажимая клавишу «Пробел» охватить все выражение курсором. Нажать клавишу



«Insert», чтобы курсор охватывал выражение слева, и ввести шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**.

В полученный слева шаблон ввести имя функции и аргументы $Cw2(x,y)$. Получим выражение

$$Cw2(x,y) := \frac{Cw1(x) \cdot (Pr - x + 1)}{Pr - x - y + Kp2 \cdot x + 1}.$$

10. Ввести уравнение материального баланса для третьего отсека. Концентрацию примеси в воде во втором отсеке будем описывать как функцию от переменных x и y

$$Cw2(x,y) \cdot (1 + Pr - x - y) = Kp3 \cdot Cw3 \cdot x + Cw3 \cdot Pr.$$

11. Получим выражение для значения концентрации примеси в третьем отсеке. Для этого установить курсор в блок с введенным уравнением так, чтобы он охватывал переменную $Cw3$.

Выполнить команду **Символьные операции/Переменная/Решить (Symbolics/Variable/Solve)**.

В строке ниже будет выведен ответ.

$$\frac{Cw2(x,y) \cdot (Pr - x - y + 1)}{Pr + Kp3 \cdot x}.$$

12. В выражении осталось два неизвестных – x и y . Представим $Cw3$ как функцию от x и y .

Нажать клавишу «Insert», чтобы курсор охватывал выражение слева, и ввести шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**.

В полученный слева шаблон ввести имя функции и аргументы $Cw3(x,y)$. Получим выражение

$$Cw3(x,y) := \frac{Cw2(x,y) \cdot (Pr - x - y + 1)}{Pr + Kp3 \cdot x}.$$

13. Теперь можно определить в строках ниже функции для вычисления концентрации примеси в паре для отсеков:

$$Cp1(x) := Kp1 \cdot Cw1(x),$$

$$Cp2(x,y) := Kp2 \cdot Cw2(x,y),$$

$$Cp3(x,y) := Kp3 \cdot Cw3(x,y).$$

14. Сформировать функцию для вычисления концентрации примеси в паре на выходе из котла

$$Cp(x,y) := x \cdot Cp1(x) + y \cdot Cp2(x,y) + (1 - x - y) \cdot Cp3(x,y).$$

15. Для нахождения точки экстремума определим точки, в которых частные производные функции Cp по переменным x и y обращаются в нуль. Для этого будем далее проводить численный поиск решения.



Ввести в свободной строке начальные значения переменных
 $x := 0.1$ $y := 0$.

Ввести ниже слово `given`. В строках ниже сформировать два уравнения для поиска нулей производных

$$\frac{d}{dx} Cp(x, y) = 0,$$

$$\frac{d}{dy} Cp(x, y) = 0.$$

16. В строке ниже сформировать требование на положительность определителя матрицы вторых производных. При построении левой части выражения нужно ввести шаблон определителя $|M|$ из панели **Матрицы (Matrix)**, вставить в него шаблон матрицы 2×2 , ввести выражения для производных, используя панель инструментов **Математический анализ (Calculus)**

$$\left| \begin{array}{cc} \frac{d^2}{dx^2} Cp(x, y) & \frac{d}{dy} \left(\frac{d}{dx} Cp(x, y) \right) \\ \frac{d}{dy} \left(\frac{d}{dx} Cp(x, y) \right) & \frac{d^2}{dy^2} Cp(x, y) \end{array} \right| \geq 0.$$

17. Поскольку мы ищем доли пара, то значения неизвестных должны изменяться в диапазоне $[0;1]$. Для соблюдения этого условия ввести два неравенства

$$0 \leq y \leq 1,$$

$$0 \leq x \leq 1,$$

после чего закрыть блок поиска решения функцией

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \text{find}(x, y).$$

18. Вывести найденные значения переменных

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.891 \\ 0.091 \end{pmatrix}.$$

19. Получить значение функции в найденной точке, выведя 6 знаков после запятой

$$Cp(x, y) = 0.001956.$$

20. Сохранить файл под именем **Котел**. Закрыть документ.



14.2. Лабораторная работа «Параметрическая идентификация модели теплоемкости вещества»

Цель работы. Освоение приемов параметрической идентификации математической модели для описания экспериментальных данных с использованием необходимого условия минимума функции.

Постановка задачи. Зависимость молярной теплоемкости оксида углерода от температуры выражается следующими экспериментальными данными

$$T := (300 \ 500 \ 700 \ 900 \ 1500 \ 2000),$$

$$c_p := (29.13 \ 29.76 \ 31.10 \ 32.44 \ 34.99 \ 35.96).$$

Используя метод наименьших квадратов, необходимо выбрать зависимость $c_p = f(T)$ наилучшую из следующих:

- линейной, вида $c_p = a + bT$,
- квадратичной, вида $c_p = a + bT + cT^2$.

Проверить точность аппроксимации экспериментальных данных каждой из зависимостей, используя критерий в виде среднеквадратического отклонения расчетных данных от экспериментальных.

Подготовка к решению задачи

Известно, что ошибка минимальна, если сумма квадратов разностей между вычисленными и экспериментальными данными в соответствующих точках минимальна.

Рассмотрим эти выражения для линейной и квадратичной зависимостей, соответственно (i – номер точки в наборе данных)

$$S_L = \sum_i [cp_i - (a + bT_i)]^2,$$

$$S_Q = \sum_i [cp_i - (a + bT_i + c(T_i)^2)]^2.$$

Необходимое условие минимума функции в точке говорит о том, что первые производные минимизируемой функции по аргументам этой функции должны быть равны нулю в этой точке.

Рассмотрим решение задачи для линейной зависимости S_L .

Аргументами функции являются коэффициенты зависимости $c_p = a + bT$, то есть коэффициенты a и b .

Необходимо вычислить производные от минимизируемой функции S_L по коэффициентам a и b . Затем полученные выражения сле-



дует приравнять к нулю, чтобы найти значения коэффициентов a и b , минимизирующих функцию S_L . Это позволит определить коэффициенты зависимости $cp = a + bT$, при которых ее значения наименее отклоняются от экспериментальных данных.

Итак, нужно решить систему уравнений

$$\frac{\partial S_L}{\partial a} = 0,$$

$$\frac{\partial S_L}{\partial b} = 0.$$

Рассмотрим вычисление $\frac{\partial S_L}{\partial a}$ – производной от функции S_L по коэффициенту a .

Для ее вычисления нужно вычислить значение выражения

$$\frac{\partial \left[\sum_{i=0}^6 (cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right]}{\partial a}.$$

Поскольку операция дифференцирования аддитивна, то можно внести операцию дифференцирования под сумму

$$\frac{\partial \left[\sum_{i=0}^6 (cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right]}{\partial a} = \sum_{i=0}^6 \frac{\partial \left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right]}{\partial a}.$$

Тогда необходимо определить выражение для производной

$$\frac{\partial \left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right]}{\partial a}.$$

Зная правила дифференцирования сложной функции, можно записать

$$\frac{\partial \left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right]}{\partial a} = 2(cp_i - (a + b \cdot T_i)) \frac{\partial}{\partial a} [cp_i - (a + b \cdot T_i)].$$

Итак, необходимо вычислить производную в правой части полученного выражения.

Найдем ее значение:

$$\frac{\partial}{\partial a} [cp_i - (a + b \cdot T_i)] = -1.$$



Соберем выражение для $\frac{\partial S_L}{\partial a}$, учтя сделанные преобразования:

$$\frac{\partial S_L}{\partial a} = \sum_{i=0}^6 \left(2 \cdot \left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right] \cdot (-1) \right).$$

Итак, для нахождения нуля производной от функции S_L по коэффициенту a получим уравнение вида

$$\sum_{i=0}^6 \left(2 \cdot \left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right] \cdot (-1) \right) = 0,$$

которое можно сократить на (-1) и на 2. Тогда получим уравнение

$$\sum_{i=0}^6 \left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right] = 0.$$

Аналогично получим вид уравнения, дающего нуль производной от S_L по коэффициенту b :

$$\sum_{i=0}^6 \left(\left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right] \cdot [T_i] \right) = 0.$$

Получим систему линейных уравнений

$$\sum_{i=0}^6 \left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right] = 0,$$

$$\sum_{i=0}^6 \left(\left[(cp_i - (a + b \cdot T_i))^2 \right] \cdot [T_i] \right) = 0.$$

Выполнение работы

1. Создать новый документ.
2. Ввести массивы табличных данных в виде векторов-строк. Для этого ввести имя вектора T , шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, вставить шаблон матрицы из панели **Матрицы (Matrix)**, указать число строк 1, число столбцов 6. Ввести шаблон щелчком по кнопке **OK**. Затем ввести данные в вектор согласно заданию. Аналогичным образом ввести вектор cp .
3. В строке ниже ввести ранжированную переменную
 $i := 0..5$.
4. Ввести в строке ниже начальные приближения для коэффициентов
 $a1 := 0$ $b1 := 0$.
5. В строке ниже ввести слово `given`, открывающее блок поиска решения.



6. В следующей строке ввести решаемые уравнения

$$\sum_i (\text{cp}^{(i)} - a1 - b1 \cdot T^{(i)}) = 0$$

$$\sum_i (\text{cp}^{(i)} - a1 - b1 \cdot T^{(i)}) \cdot (T^{(i)}) = 0.$$

При вводе шаблона суммирования \sum_i по ранжированной переменной i использовать соответствующий шаблон панели *Математический анализ (Calculus)*, далее в шаблон под знаком Σ ввести имя переменной i , а в шаблоне после знака Σ для математического выражения ввести в скобках соответствующее выражение.

Поскольку данные для температуры и теплоемкости введены в вектора-строки, извлекать элементы из векторов нужно, используя шаблон M° панели *Матрицы (Matrix)*, где в шаблоне для номера столбца указать индекс i .

Для продолжения ввода выражения нужно нажимать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил все выражение под суммой вместе со знаком \sum_i , после чего ввести знак равенства и правую часть уравнения.

При вводе знака « \Rightarrow » пользоваться шаблоном « \Rightarrow » из панели *Булева алгебра (Boolean)*.

7. Завершить блок поиска решения вводом функции find.

Поскольку проводится поиск значений двух переменных, функция find вернет вектор из двух элементов. Распределим эти значения по переменным a и b при вызове функции.

Для этого вставить шаблон матрицы из панели *Матрицы (Matrix)*, указать число строк 2, число столбцов 1. Ввести шаблон щелчком по кнопке **ОК**. Затем ввести в вектор имена переменных a и b . Нажать клавишу «Пробел», чтобы охватить курсором весь массив, и вставить шаблон « \Rightarrow » панели *Калькулятор (Calculator)*.

Вызвать **Мастер функций** из *Стандартной* панели инструментов, выбрать категорию *Все*, найти имя функции find и вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **ОК**.

В полученном шаблоне функции указать имена искоемых переменных $a1$ и $b1$, участвующих в записи системы уравнений.



Получим блок

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} := \text{find}(a1, b1).$$

8. Вывести ниже рассчитанные значения переменных a и b :

$$a=28.070806$$

$$b=0.00423.$$

9. Получим значения элементов вектора $cp1$, рассчитанных по линейной зависимости.

Для этого введем ранжированную переменную i с числом элементов np , равным числу элементов массива cp , и рассчитаем значения вектора $cp1$.

Сначала найдем число np элементов в векторе cp .

Для этого ввести имя переменной np , вставить шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)** и вызвать **Мастер функций** из **Стандартной** панели инструментов, выбрать категорию *Все*, найти имя функции **last** и вставить ее в выражение, щелкнув по кнопке **ОК**.

В полученном шаблоне функции указать имя вектора cp , применить к нему шаблон транспонирования из панели **Матрицы (Matrix)**.

$$np := \text{last}(cp^T).$$

В следующей строке ввести имя ранжированной переменной i , вставить шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)**, ввести число 0, нажать клавишу «;» и ввести имя np .

$$i := 0..np.$$

Далее введем выражение для вычисления значений элементов вектора $cp1$.

Для этого нужно ввести имя переменной $cp1$, применить к нему шаблон извлечения столбца $M^{\langle i \rangle}$ из панели **Матрицы (Matrix)**, ввести в шаблон индекс i , вставить шаблон «:=» панели **Калькулятор (Calculator)** и ввести выражение правой части.

Для вектора T также применяется шаблон извлечения столбца $M^{\langle i \rangle}$ из панели **Матрицы (Matrix)**.

В итоге получим блоки

$$np := \text{last}(cp^T)$$

$$i := 0..np$$

$$cp1^{\langle i \rangle} := a + b \cdot T^{\langle i \rangle}.$$



10. Сравним, насколько рассчитанные значения отличаются от табличных.

Введем выражение

$$\sqrt{\sum_{i=0}^{np} \left[(cp^T)_i - (cp1^T)_i \right]^2}$$

np

Для этого ввести шаблон квадратного корня из панели **Калькулятор (Calculator)**, шаблон суммы из панели **Математический анализ (Calculus)**, указать нижний и верхний пределы суммирования, затем ввести выражение под знак суммы:

- ввести имя вектора *cp*, применить к нему шаблон транспонирования МТ из панели **Матрицы (Matrix)**, нажать клавишу с «[», ввести в шаблон индекса имя *i*, нажать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил все выражение под знаком суммы, ввести знак «-» и аналогичным образом ввести $(cp1^T)_i$;
- затем нажать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил все выражение под знаком суммы, нажать клавишу «^» и ввести значение степени 2;
- далее нажать клавишу «Пробел», чтобы курсор охватил все введенное выражение, нажать клавишу «/», ввести в знаменатель *np*;
- после этого ввести знак «=» для получения значения

$$\sqrt{\sum_{i=0}^{np} \left[(cp^T)_i - (cp1^T)_i \right]^2}$$

np

$$= 0.21923$$

11. Сохранить файл под именем **Аппроксимация_1**.

12. Самостоятельно проведите исследования для квадратичной зависимости. Для нее должно быть получено:

$$a=26.685477, \quad b=0.00756, \quad c=-0.000001,$$

$$\sqrt{\sum_{i=0}^{np} \left[(cp^T)_i - (cp2^T)_i \right]^2}$$

np

$$= 0.110488.$$



Следовательно, квадратичная зависимость для полученных экспериментальных данных предпочтительнее.

13. Сохранить документ под именем **Аппроксимация_2**.

14.3. Лабораторная работа «Расчет материально-теплового баланса замкнутой химико-технологической системы»

Цель работы. Освоить приемы сведения материально-теплового баланса замкнутой химико-технологической системы (ХТС) как решение задачи поиска корней системы нелинейных алгебраических уравнений.

Постановка задачи. Провести расчет материально-теплового баланса ХТС реактор-теплообменник (рис. 14.1), состоящей из реактора идеального смешения (1), кожухотрубчатого теплообменника (3) и компрессора (2). В реакторе объемом V протекает экзотермическая реакция вида $A \rightarrow B$.

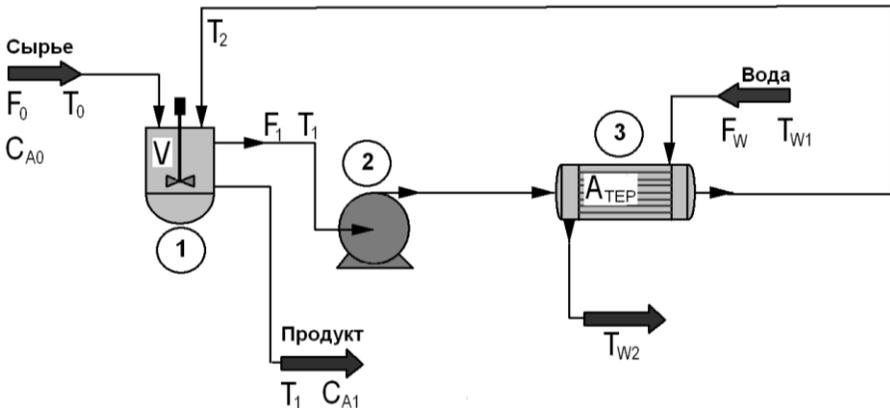


Рис. 14.1. ХТС реактор-теплообменник

Теплообменник с поверхностью теплообмена A_{TEP} служит для поддержания температуры внутри реактора не выше заданной.

Рассматривая математическую модель системы, будем пренебрегать изменениями, вызываемыми компрессором.

Математическая модель ХТС будет включать математические модели реактора и теплообменника с учетом связей между аппаратами, вкладом компрессора можно пренебречь.



Запишем математические модели аппаратов:

– матмодель реактора

$$\frac{F_0(C_{A0} - C_{A1})}{C_{A0}} = V k_R \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) C_{A1}, \quad (14.1)$$

$$\frac{(-\Delta H)F_0(C_{A0} - C_{A1})}{C_{A0}} = F_0 c_p (T_1 - T_0) + Q_{HE}, \quad (14.2)$$

– матмодель теплообменника

$$Q_{HE} = F_1 c_p (T_1 - T_0) = F_w c_{pw} (T_{w2} - T_{w1}), \quad (14.3)$$

$$Q_{HE} = A_{tep} U (\Delta T)_m = A_{tep} U \frac{(T_1 - T_{w2}) + (T_2 - T_{w1})}{2}. \quad (14.4)$$

здесь F_0 , T_0 , C_{A0} – величины входного потока в реактор, его температура и концентрация вещества A в нем соответственно; V , T_1 , C_{A1} – объем реактора, температура реакционной смеси в реакторе, ее температура, концентрация вещества в ней, соответственно; ΔH – теплота реакции; F_1 , T_2 – величина рециклового потока и его температура; A_{tep} – поверхность теплообмена в теплообменнике; U – коэффициент теплопередачи; F_w , T_{w1} , T_{w2} – расход охлаждающей воды, поступающей в теплообменник, ее температура на входе в теплообменник и на выходе соответственно.

Подготовка к решению задачи

Математическая модель ХТС включает 4 уравнения, которые описывают процесс, протекающий в реакторе и теплообменнике, уравнения связи опущены, поскольку внесены в сами модели. Количество переменных в математической модели составляет 18 переменных.

Мы вправе выбрать в качестве неизвестных только 4 переменных. Какие именно – определяется имеющимися исходными данными и постановкой задачи.

Выберем в качестве неизвестных переменных следующие параметры:

- расход рециклового потока в системе, F_1 ;
- температуру этого потока на входе в реактор, T_2 ;
- количество вещества A на выходе из реактора, C_{A1} ;
- расход охлаждающей воды, поступающей в теплообменник, F_w .

Значения остальных параметров задачи представлены в табл. 14.1.

Задачу сведения материального баланса будем решать при помощи функции find.



Таблица 14.1

Исходные данные задачи

F_0	T_0	C_{A0}	V	$A_{тер}$	U	T_{w2}
45.36	333	32.04	5.3	5.9	1635	305
ΔH	c_p	c_{pw}	E/R	k_R	T_{w1}	T_1
-23260	167.4	4.190	560	9.81	300	371

Выполнение работы

1. Создать новый документ.
2. Для удобства использования переименуем переменные, переведем индексы в имени в основную часть имени, и зададим им значения:

$F0 := 45.36$ $CPR := 167.4$ $TW1 := 300$
 $T0 := 333$ $CPRW := 4.190$ $TW2 := 305$
 $CA0 := 32.04$ $ER := 560$ $ATER := 5.9$
 $DH := -23260$ $V := 5.3$ $UU := 1635$
 $KR := 9.81$ $T1 := 371$.

3. Для решения системы уравнений, составляющей математическую модель системы, будем использовать блок Given.....Find.

Перед этим блоком необходимо задать начальные значения неизвестным. Сделаем это:

$FW := 1500$ $T2 := 400$ $F1 := -1$
 $CA1 := 8$.

Ниже сформируем блок решения.

4. Ввести слово Given.
5. Далее в блоке должны идти уравнения математической модели, реализующие материально-тепловой баланс системы.

Блок с уравнениями математической модели примет вид

$$F0 \cdot \frac{CA0 - CA1}{CA0} - V \cdot KR \cdot \exp\left(\frac{-ER}{T1}\right) \cdot CA1 = 0$$

$$\left[(-DH) \cdot F0 \cdot \frac{CA0 - CA1}{CA0} \right] - [F0 \cdot CPR \cdot (T1 - T0) + F1 \cdot CPR \cdot (T1 - T2)] = 0$$

$$[F1 \cdot CPR \cdot (T1 - T2)] - CPRW \cdot FW \cdot (TW2 - TW1) = 0$$

$$[F1 \cdot CPR \cdot (T1 - T2)] - \frac{ATER \cdot UU \cdot [(T1 - TW2) + (T2 - TW1)]}{2} = 0$$

Введите блок. Для записи уравнений знак « $=$ » следует брать из панели **Булева алгебра (Boolean)**.



6. Закройте блок ниже последнего уравнения, введя

$$\begin{pmatrix} F1 \\ FW \\ CA1 \\ T2 \end{pmatrix} := \text{Find}(F1, FW, CA1, T2).$$

7. Выведите в строке ниже вычисленные значения переменных F1, FW, CA1, T2:

$$FW = 31064.95 \quad T2 = 368.932 \quad F1 = 1879.95 \quad CA1 = 3.514.$$

8. В строках ниже проверьте, чему равны левые части уравнений, составляющих математическую модель системы.

9. Сохраните файл под именем **ХТС_Реактор-теплообменник_1**.

10. Самостоятельно вручную подберите новые значения объема реактора V и поверхности теплообмена в теплообменнике АТЕР, при которых количество целевого продукта В увеличится, то есть уменьшится количество непрореагировавшего вещества А.

11. Предъявите результаты преподавателю. Сохраните полученный файл под именем **ХТС_Реактор-теплообменник_2**.

14.4. Лабораторная работа «Условия Куна-Таккера»

Цель работы. Освоение приемов нахождения решения задачи условной нелинейной оптимизации на основе выполнения условий Куна-Таккера.

Постановка задачи. Для заданных задач условной нелинейной оптимизации провести поиск точки минимума на основе необходимых условий минимума Куна-Таккера.

Провести решение для задач условной нелинейной оптимизации с ограничениями следующих типов:

- а) ограничения типа равенств;
- б) ограничения типа неравенств;
- в) ограничения типа равенств и неравенств;

Провести проверку полученных решений задач средствами решения задач условной нелинейной минимизации, встроенными в MathCad.

Проанализировать решения, полученные при использовании условий Куна-Таккера и встроенных средств MathCad. В случае различных решений, полученных при использовании условий Куна-Таккера



и встроенных средств Mathcad, подобрать новые начальные значения искомым переменным в задачах, получающих решение с использованием условий Куна–Таккера.

Задача условной оптимизации в общем виде представима как

$$\min_x f(x) \quad (14.5)$$

$$g_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, p$$

$$g_j(x) \leq 0, \quad j = p+1, \dots, p+q,$$

где первые p ограничений являются равенствами, последние q ограничений относятся к неравенствам. Очевидно, что в задаче могут отсутствовать ограничения типа равенств или типа неравенств.

Для построения условий Куна–Таккера необходимо построить функцию Лагранжа для решаемой задачи. При наличии в задаче ограничений типа неравенств используют дополнительные переменные u_j , $j = p+1, \dots, p+q$, для приведения ограничений-неравенств к виду равенств. Введя дополнительные переменные, получим задачу условной оптимизации

$$\min_{x,u} f(x) \quad (14.6)$$

$$g_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, p$$

$$g_j(x) + u_j = 0, \quad j = p+1, \dots, p+q$$

$$u_j \geq 0, \quad j = p+1, \dots, p+q.$$

Функция Лагранжа для задачи (14.6) имеет следующий вид:

$$L(x, y, \lambda, u) = f(x, y) + \sum_{i=1}^p \lambda_j g_j(x, y) + \sum_{i=p+1}^{p+q} \lambda_j (g_j(x, y) + u_j).$$

Тогда условия Куна–Таккера для задачи (14.6) принимают следующий вид:

$$\frac{\partial L(x, y, \lambda, u)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial L(x, y, \lambda, u)}{\partial y} = 0, \quad (14.7)$$

$$\frac{\partial L(x, y, \lambda, u)}{\partial \lambda_j} = 0, \quad j = 1, \dots, p+q,$$

$$\lambda_j \geq 0, \quad u_j \geq 0, \quad j = p+1, \dots, p+q,$$

$$\lambda_j u_j = 0, \quad j = p+1, \dots, p+q.$$



Выполнение работы

а) Рассмотрим решение задачи условной оптимизации с одним ограничением-равенством, где функция цели имеет вид

$$f(x, y) = 18x^2 - 17x(y - 16)^2 + 12y(x - 3),$$

ограничение имеет вид

$$g1(x, y) = -12x + 2y.$$

В качестве стартовой точки будем использовать точку (1; -10).

Функция Лагранжа для задачи имеет вид

$$L(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda \cdot g1(x, y).$$

1. Ввести функции пользователя, задающую функцию цели:

$$f(x, y) := 18 \cdot x^2 - 17 \cdot x \cdot (y - 16)^2 + 12y \cdot (x - 3),$$

и функцию левой части ограничения

$$g1(x, y) := -12 \cdot x + 2 \cdot y.$$

2. Сформировать функцию Лагранжа, включающую информации об ограничении-равенстве и функции цели

$$L(x, y, \lambda) := f(x, y) + \lambda \cdot g1(x, y).$$

3. Задать стартовую точку для решения условий Куна-Таккера: точку в пространстве поисковых переменных (x; y) исходной задачи

$$x := 1 \quad y := 1,$$

стартовые значения для множителей Лагранжа

$$\lambda := 1.$$

4. Сформировать задачу решения системы уравнений для решения системы уравнений, соответствующих условиям Куна-Таккера. Для этого ввести слово given, ниже ввести следующие уравнения условий Куна-Таккера

$$\frac{d}{dx} L(x, y, \lambda) = 0.$$

$$\frac{d}{dy} L(x, y, \lambda) = 0.$$

$$\frac{d}{d\lambda} L(x, y, \lambda) = 0.$$

5. Завершить задачу функцией find

$$\begin{pmatrix} x1 \\ y1 \\ \lambda \end{pmatrix} := \text{find}(x, y, \lambda),$$



после чего вывести полученные значения параметров задачи

$$\begin{pmatrix} x1 \\ y1 \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.905 \\ 5.432 \\ -150.077 \end{pmatrix}.$$

6. Вывести значения функции цели и ограничения в найденной точке $(x1, y1)$

$$f(x1, y1) = -1.841 \times 10^3$$

$$g1(x1, y1) = 1.421 \times 10^{-14}.$$

7. Проверим полученное решение встроенными средствами MathCad, решив данную задачу при помощи функции minimize.

зададим стартовую точку в пространстве переменных $(x; y)$

$$x := 1 \quad y := -10.$$

ниже ввести слово given, затем ввести ограничение

$$g1(x, y) = 0.$$

Завершить формирование задачи функцией Minimize, введя строку

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \text{Minimize}(f, x, y)$$

и вывести координаты полученной точки минимума

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.905 \\ 5.431 \end{pmatrix}.$$

8. Вывести значения функции цели и ограничения в найденной точке (x, y)

$$f(x, y) = -1.841 \times 10^3,$$

$$g1(x, y) = -2.711 \times 10^{-4}.$$

9. Проверим разницу между значениями функции цели и ограничения, найденными при помощи условий Куна–Таккера и при помощи встроенных средств MathCad.

$$|f(x1, y1) - f(x, y)| = 0.041,$$

$$|g1(x, y) - g1(x1, y1)| = 2.711 \times 10^{-4}.$$

Поскольку задачи решали с точностью, которая в Mathcad установлена по умолчанию, то есть 0.001, то это сказалось найденном значении ограничения.

10. Сохранить файл под именем **Куинн-Таккер_1**.



11. Провести решение задачи условной оптимизации с одним ограничением-равенством, где функция цели имеет вид

$$f(x, y) = 18x^2 - 17x(y - 16)^2 + 12y(x - 3),$$

ограничение имеет вид

$$g1(x, y) = -5y + 4x,$$

в качестве стартовой использовать точку (1; -10).

12. Проверить полученное решение встроенными средствами MathCad, решив данную задачу при помощи функции minimize.

13. Проверить для функции цели и ограничения разность между значениями, найденными при помощи условий Куна-Таккера и при помощи встроенных средств MathCad.

14. Вывести значение разности для функции цели и ограничения.

15. Сохранить файл под именем **Кунн-Таккер_2**.

б) Рассмотрим решение задачи условной оптимизации с двумя ограничениями-неравенствами, где функция цели имеет вид

$$f(x, y) = 18x^2 - 17x(y - 16)^2 + 12y(x - 3),$$

ограничения-неравенства имеют вид

$$g1(x, y) = -12x + 2y,$$

$$g2(x, y) = -5y + 13x.$$

В качестве стартовой точки будем использовать точку (0;0).

Для формирования функции Лагранжа ограничения-неравенства приводятся к виду равенств, для чего используют дополнительные переменные.

Функция Лагранжа для данной задачи имеет вид

$$L(x, y, \lambda1, \lambda2, u1, u2) = f(x, y) + \lambda1 \cdot (g1(x, y) + u1) + \lambda2 \cdot (g2(x, y) + u2)$$

16. Ввести функции пользователя, задающую функцию цели

$$f(x, y) := 18 \cdot x^2 - 17 \cdot x \cdot (y - 16)^2 + 12y \cdot (x - 3)$$

и функции левых частей ограничений

$$g1(x, y) := -12 \cdot x + 2 \cdot y,$$

$$g2(x, y) := -5 \cdot y + 13 \cdot x.$$

17. Сформировать функцию Лагранжа, включающую информацию об ограничениях-неравенствах и функции цели

$$L(x, y, \lambda1, \lambda2, u1, u2) := f(x, y) + \lambda1 \cdot (g1(x, y) + u1) + \lambda2 \cdot (g2(x, y) + u2).$$

18. Задать стартовую точку для решения условий Куна-Таккера:

$$x := 0 \quad y := 0$$



Кроме этого, следует задать стартовые значения остальным аргументам функции Лагранжа:

$$\lambda_1 := 0$$

$$\lambda_2 := 0$$

$$u_1 := 1$$

$$u_2 := 0$$

19. Сформировать задачу решения системы уравнений для решения системы уравнений, соответствующих условиям Куна–Таккера. Для этого ввести слово `given`, ниже ввести следующие уравнения условий Куна–Таккера^

$$\frac{d}{dx}L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, u_1, u_2) = 0$$

$$\frac{d}{dy}L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, u_1, u_2) = 0$$

$$\frac{d}{d\lambda_1}L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, u_1, u_2) = 0$$

$$\frac{d}{d\lambda_2}L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, u_1, u_2) = 0$$

$$u_1 \geq 0 \quad u_2 \geq 0$$

$$\lambda_2 \geq 0 \quad \lambda_1 \geq 0$$

$$u_1 \cdot \lambda_1 = 0$$

$$u_2 \cdot \lambda_2 = 0$$

20. Завершить задачу функцией `find`, сохранив найденные значения переменных `x` и `y` в переменные `x1` и `y1`, найденные значения остальных переменных сохранить в переменных с теми же именами, что использовались в задаче:

$$\begin{pmatrix} x1 \\ y1 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ u1 \\ u2 \end{pmatrix} := \text{find}(x, y, \lambda_1, \lambda_2, u_1, u_2).$$



21. Вывести полученные значения

$$\begin{pmatrix} x1 \\ y1 \\ \lambda1 \\ \lambda2 \\ u1 \\ u2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.981 \\ 5.15 \\ 0 \\ 143.699 \\ 13.47 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

22. Вывести значения функции цели и ограничений в найденной точке $(x1,y1)$

$$f(x1,y1) = -3.956 \times 10^3$$

$$g1(x1,y1) = -13.47$$

$$g2(x1,y1) = -7.105 \times 10^{-15}$$

23. Проверим полученное решение встроенными средствами Mathcad, решив данную задачу при помощи функции minimize.

Ввести значения координат стартовой точки:

$$x := 0 \quad y := 0$$

Далее ввести слово given, ниже ввести ограничения

$$g1(x,y) \leq 0$$

$$g2(x,y) \leq 0$$

24. Завершить формирование задачи функцией Minimize, введя строку

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \text{Minimize} (f, x, y)$$

25. Вывести значения координат точки минимума

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.981 \\ 5.15 \end{pmatrix}$$

26. Вывести значения функции цели и ограничения в найденной точке (x,y)

$$f(x,y) = -3.956 \times 10^3$$

$$g1(x,y) = -13.47$$

$$g2(x,y) = -3.553 \times 10^{-15}$$



27. Проверим для функции цели и ограничений разность между значениями, найденными при помощи условий Куна–Таккера и при помощи встроенных средств MathCad:

$$|f(x, y) - f(x_1, y_1)| = 3.183 \times 10^{-12}$$

$$|g_1(x, y) - g_1(x_1, y_1)| = 1.641 \times 10^{-7}$$

$$|g_2(x, y) - g_2(x_1, y_1)| = 3.553 \times 10^{-15}$$

Видим, что разность между значениями, найденными при помощи условий Куна–Таккера и при помощи встроенных средств MathCad, составила менее 0.000001.

28. Сохранить файл под именем **Куинн-Таккер_3**.

29. Провести решение задачи условной оптимизации с тремя ограничениями-неравенствами, где функция цели имеет вид

$$f(x, y) = 18x^2 - 17x(y - 16)^2 + 12y(x - 3),$$

ограничения-неравенства имеют вид

$$g_1(x, y) = -10x + 2.5y,$$

$$g_2(x, y) = -7y + 1.3x,$$

$$g_3(x, y) = 1.1x - 3.2y.$$

В качестве стартовой использовать точку (0;0).

30. Проверить полученное решение встроенными средствами Mathcad, решив данную задачу при помощи функции minimize.

31. Проверить для функции цели и ограничения разность между значениями, найденными при помощи условий Куна–Таккера и при помощи встроенных средств MathCad.

32. Вывести значение разности для функции цели и для ограничения.

33. Сохранить файл под именем **Куинн-Таккер_4**.

в) Рассмотрим решение задачи условной оптимизации с двумя ограничениями-неравенствами и одним ограничением-равенством, где функция цели имеет вид

$$f(x, y) = 18x^2 - 17x(y - 16)^2 + 12y(x - 3),$$

ограничения-неравенства имеют вид

$$g_1(x, y) = -12x + 2y,$$

$$g_2(x, y) = -5y + 4x,$$

ограничение-равенство имеет вид

$$g_3(x, y) = 25.2x - 31.29y - 0.045xy.$$

В качестве стартовой точки использовать точку (0;0).



Для формирования функции Лагранжа ограничения-неравенства приводятся к виду равенств, для чего используют дополнительные переменные.

Функция Лагранжа для задачи получит вид

$$L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, u_1, u_2) = f(x, y) + \lambda_1 \cdot (g_1(x, y) + u_1) + \lambda_2 \cdot (g_1(x, y) + u_2) + \lambda_3 \cdot g_3(x, y).$$

34. Ввести функции пользователя, задающую функцию цели

$$f(x, y) := 18 \cdot x^2 - 17 \cdot x \cdot (y - 16)^2 + 12y \cdot (x - 3)$$

и функции левых частей ограничений.

Сформировать функцию Лагранжа, включающую информацию об ограничении-равенстве и функции цели.

35. Задать стартовую точку для решения условий Куна–Таккера

$$x := 0 \quad y := 0.$$

Кроме этого, следует задать стартовые значения остальным аргументам функции Лагранжа

$$\lambda_1 := 0 \quad \lambda_2 := 0 \quad \lambda_3 := 0 \quad u_1 := 0 \quad u_2 := 0.$$

36. Сформировать задачу решения системы уравнений для решения системы уравнений, соответствующих условиям Куна–Таккера. Для этого ввести слово given, ниже ввести следующие уравнения условий Куна–Таккера:

$$\frac{d}{dx} L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, u_1, u_2) = 0$$

$$\frac{d}{dy} L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, u_1, u_2) = 0$$

$$\frac{d}{d\lambda_1} L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, u_1, u_2) = 0$$

$$\frac{d}{d\lambda_3} L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, u_1, u_2) = 0$$

$$\frac{d}{d\lambda_2} L(x, y, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, u_1, u_2) = 0$$

$$u_1 \geq 0 \quad u_2 \geq 0$$

$$\lambda_2 \geq 0 \quad \lambda_1 \geq 0$$

$$u_1 \cdot \lambda_1 = 0$$

$$u_2 \cdot \lambda_2 = 0$$



37. Завершить задачу вызовом функции Find с выдачей результатов

$$\begin{pmatrix} x1 \\ y1 \end{pmatrix} := \text{Find}(x, y, \lambda1, \lambda2, \lambda3, u1, u2) = \begin{pmatrix} 4.667 \\ 3.733 \\ 0 \\ 2.935 \times 10^4 \\ -4.596 \times 10^3 \\ 48.533 \\ -1.405 \times 10^{-11} \end{pmatrix}$$

38. Вывести значения функции цели и ограничения в найденной точке (x1,y1)

$$f(x1, y1) = -1.147 \times 10^4$$

$$g1(x1, y1) = -48.533$$

$$g2(x1, y1) = 1.405 \times 10^{-11}$$

$$g3(x1, y1) = 0 .$$

39. Проверить полученное решение встроенными средствами Mathcad, решив данную задачу при помощи функции Minimize.

Для этого ввести стартовую точку

$$x := 0 \quad y := 0$$

ниже ввести слово given, затем ввести ограничения

$$g1(x, y) \leq 0 \quad g2(x, y) \leq 0$$

$$g3(x, y) = 0$$

Завершить формирование задачи функцией Minimize, введя строку

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \text{Minimize}(f, x, y) = \begin{pmatrix} 4.667 \\ 3.733 \end{pmatrix} .$$

40. Вывести значения функции цели и ограничений в найденной точке (x,y)

$$f(x, y) = -1.147 \times 10^4 ,$$

$$g1(x, y) = -48.534 ,$$

$$g2(x, y) = 0 ,$$

$$g3(x, y) = -2.932 \times 10^{-6} .$$



41. Проверить разницу между значениями функции цели и ограничения, найденными при помощи условий Куна–Таккера и при помощи встроенных средств Mathcad:

$$|f(x_1, y_1) - f(x, y)| = 0.013$$

$$|g_1(x_1, y_1) - g_1(x, y)| = 1.815 \times 10^{-4}$$

$$|g_2(x_1, y_1) - g_2(x, y)| = 1.405 \times 10^{-11}$$

$$|g_3(x_1, y_1) - g_3(x, y)| = 2.932 \times 10^{-6}$$

Видим, что разность для значений функции цели, вычисленных разными способами, составила 0,013, что объясняется точностью расчетов MathCad, для ограничений разность также не превысила точность MathCad.

42. Сохранить файл под именем **Кунн-Таккер_5**.

14.5. Лабораторная работа «Оптимизация стационарного режима замкнутой ХТС»

Цель работы. Освоение приемов решения задачи оптимизации стационарного режима работы ХТС встроенными средствами Mathcad как задачи условной оптимизации.

Постановка задачи. Для ХТС, рассмотренной в лабораторной работе 14.3 (рис. 14.1) и заданных значениях конструктивных параметров найти режим ее работы, и при котором будут выполняться предъявляемые к ХТС требования и энергозатраты будут принимать минимальное значение. Математическая модель ХТС задана уравнениями материально-теплового баланса реактора и теплообменника (14.1)–(14.4), приведенными в лабораторной работе 14.3. Режим работы ХТС будет определяться переменными T_1 , T_{w2} .

Провести решение задачи для вариантов значений конструктивных параметров, заданных в табл. 14.2.

Таблица 14.2

Варианты значений параметров

№ варианта	$A_{теп}$	V
1	9	6
2	11	8
3	6	9
4	6	5



Критерий энергозатрат имеет вид

$$FUN = 1.76 \cdot F_w + 7.056 \cdot F_1. \quad (14.8)$$

Требования к работе ХТС имеют вид

- требования на степень конверсии сырья:

$$0.9 \leq \frac{C_{A0} - C_{A1}}{C_{A0}} \leq 1; \quad (14.9)$$

- требования на поддержание температуры в реакторе

$$T_2 - T_1 \leq 0; \quad (14.10)$$

$$311 \leq T_1 \leq 389; \quad (14.11)$$

$$311 \leq T_2 \leq 389; \quad (14.12)$$

- требования на реализуемость процесса теплопередачи и пределы на температуру воды на выходе из теплообменника

$$T_2 - T_{w1} \geq 11.1; \quad (14.13)$$

$$T_{w1} - T_{w2} \leq 0; \quad (14.14)$$

$$T_1 - T_{w2} \geq 11.1; \quad (14.15)$$

$$301 \leq T_{w2} \leq 365. \quad (14.16)$$

Значения параметров модели приведены в табл. 14.3.

Таблица 14.3

Исходные данные

F_0	T_0	C_{A0}	U	T_{w1}
45136	333	32104	1635	300
ΔH	c_p	c_{pw}	E/R	k_R
-23260	16714	41190	560	9.81

Подготовка к решению задачи

Поскольку при решении задачи оптимизации стационарного режима работы ХТС на каждом шаге нужно сводить материально-тепловой баланс системы, то на каждом шаге оптимизации нужно решать систему нелинейных уравнений (11.1)–(11.4).

Для того чтобы избежать решения системы нелинейных уравнений (11.1)–(11.4) на каждой итерации процедуры оптимизации, выразим из уравнений (11.1)–(11.4) лабораторной работы 14.3 значения для параметров ХТС: конверсии сырья $CONV = (C_{A0} - C_{A1}) / C_{A0}$, температуры рециклового потока T_2 , расхода рециклового потока F_1 , расхода холодной воды F_w .



Выражения, записанные в MathCad, примут вид:

а) для конверсии сырья

$$\frac{\frac{-ER}{T_1}}{V \cdot KR \cdot CA_0 \cdot e^{\frac{-ER}{T_1}}} ; \quad (14.17)$$

$$F_0 + V \cdot KR \cdot CA_0 \cdot e^{\frac{-ER}{T_1}}$$

б) для температуры T_2 рециклового потока на входе в реактор

$$\frac{2 \cdot (-\Delta H) \cdot F_0 \cdot CONV}{ATEP_{UU}} - \frac{2 \cdot F_0 \cdot CPR \cdot (T_1 - T_0)}{ATEP_{UU}} - T_1 + TW_2 + TW_1; \quad (14.18)$$

в) для расхода рециклового потока F_1

$$\frac{ATEP_{UU} \cdot [(T_1 - TW_2) + (T_2 - TW_1)]}{CPR \cdot 2 \cdot (T_1 - T_2)} ; \quad (14.19)$$

г) для расхода холодной воды F_w

$$\frac{ATEP_{UU} \cdot [(T_1 - TW_2) + (T_2 - TW_1)]}{2 \cdot CPRW \cdot (TW_2 - TW_1)} . \quad (14.20)$$

Подставим полученные выражения в ограничения. Ограничения, записанные в MathCad, примут вид, представленный на рис. 14.2, 14.3.

$$0.9 \leq \frac{\frac{-ER}{T_1}}{V \cdot KR \cdot CA_0 \cdot e^{\frac{-ER}{T_1}}} \leq 1$$

$$F_0 + V \cdot KR \cdot CA_0 \cdot e^{\frac{-ER}{T_1}}$$

$$\frac{2 \cdot F_0}{ATEP_U} \cdot \left[\frac{\frac{-ER}{T_1}}{F_0 + V \cdot KR \cdot CA_0 \cdot e^{\frac{-ER}{T_1}}} - CP \cdot (T_1 - T_0) \right] - 2 \cdot T_1 + TW_2 + TW_1 \leq 0$$

$$311 \leq \frac{2 \cdot F_0}{ATEP_U} \cdot \left[\frac{\frac{-ER}{T_1}}{F_0 + V \cdot KR \cdot CA_0 \cdot e^{\frac{-ER}{T_1}}} - CP \cdot (T_1 - T_0) \right] - T_1 + TW_2 + TW_1 \leq 389$$

Рис. 14.2. Часть 1 ограничений задачи, записанных в MathCad



$$\frac{2 \cdot F_0}{ATEP \cdot U} \cdot \left[\frac{(-\Delta H) \cdot V \cdot KR \cdot CA_0 \cdot e^{-\frac{ER}{T_1}}}{F_0 + V \cdot KR \cdot CA_0 \cdot e^{-\frac{ER}{T_1}}} - CP \cdot (T_1 - T_0) \right] - T_1 + TW_2 \geq 11.1$$

$$TW_1 - TW_2 \leq 0$$

$$T_1 - TW_2 \geq 11.1$$

$$311 \leq T_1 \leq 389$$

$$301 \leq TW_2 \leq 365$$

Рис. 14.3. Часть 2 ограничений задачи, записанных в MathCad

Выполнение работы для варианта 1

1. Создать новый документ. Задать исходные данные

$$\begin{array}{ll} F_0 := 45.36 & T_0 := 333 \\ CA_0 := 32.04 & ER := 500 \\ TW_1 := 300 & \Delta H := -23260 \\ CP := 167.4 & CPRW := 4.19 \\ KR := 9.81 & U := 1635 \end{array}$$

Задать значения конструктивных параметров для варианта 1

$$V := 6 \quad ATEP := 9$$

2. На каждом шаге процедуры оптимизации должны вычисляться значения целевой функции и ограничений задачи в каждой новой точке, формируемой новыми значениями поисковых переменных T_1, T_{W_2} .

Значения ограничений, приведенных на рис. 14.2, 14.3, могут быть вычислены при заданных значениях поисковых переменных T_1, T_{W_2} . Однако целевая функция в виде (14.8) зависит от поисковых переменных T_1, T_{W_2} косвенно, а зависит от параметров F_1 и F_W , которые зависят от переменных $CONV$ и T_2 .

Для получения в каждой новой точке, формируемой новыми значениями поисковых переменных T_1, T_{W_2} , значений целевой функции FUN нужно знать значения переменных $CONV, T_2, F_1$ и F_W , вычисленные в каждой новой точке.

Сформируем для вычисления значения целевой функции FUN одноименную функцию пользователя с аргументами, соответствующую



щими выбранным режимным поисковым переменным. Пользовательская функция $FUN(T1, TW2)$ при каждом изменении аргументов $T1, TW2$ будет вычислять значения переменных $CONV, T_2, F_1$ и F_w на основе выражений (14.17)–(14.20). Это позволит вычислить значение самой функции цели FUN по формуле (14.8).

Функция $FUN(T1, TW2)$ представляет собой программу, приведенную на рис. 14.4.

$$\begin{array}{l}
 FUN(T1, TW2) := \left\{ \begin{array}{l}
 CONV \leftarrow \frac{V \cdot KR \cdot CA0 \cdot e^{\frac{-ER}{T1}}}{F0 + V \cdot KR \cdot CA0 \cdot e^{\frac{-ER}{T1}}} \\
 T2 \leftarrow \frac{2 \cdot F0}{ATEPU} \cdot [(-\Delta H) \cdot CONV - CP \cdot (T1 - T0)] - T1 + TW2 + TW1 \\
 F1 \leftarrow \frac{ATEPU \cdot [(T1 - TW2) + (T2 - TW1)]}{CP \cdot 2 \cdot (T1 - T2)} \\
 FW \leftarrow \frac{ATEPU \cdot [(T1 - TW2) + (T2 - TW1)]}{2 \cdot CPW \cdot (TW2 - TW1)} \\
 r \leftarrow 1.76FW + 7.056F1 \\
 r
 \end{array} \right.
 \end{array}$$

Рис. 14.4. Вид целевой функции

При построении функции для добавления новых строк в программе следует использовать шаблон **Add Line** панели инструментов *Программирование (Programming)*.

Для вставки оператора присвоения использовать шаблон \leftarrow панели инструментов *Программирование (Programming)*.

3. Зададим начальные значения поисковым переменным
 $TW2 := 305 \quad T1 := 309.$

Выведите ниже значение функции цели FUN при начальных значениях поисковых переменных $T1, TW2$

$$FUN(T1, TW2) = 9.223 \times 10^4$$

4. Ввести ниже слово Given.
5. Ввести ограничения задачи, представленные на рис. 14.2, 14.3. Для формирования неравенств использовать шаблоны знаков сравнения из панели **Булева алгебра (Boolean)**.



6. Закрыть блок неравенств функцией Minimize

7. $\begin{pmatrix} T1 \\ TW2 \end{pmatrix} := \text{Minimize}(\text{FUN}, T1, TW2).$

8. Вывести полученные значения поисковых переменных T1, TW2, задающих оптимальный режим работы системы

$$\begin{pmatrix} T1 \\ TW2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 389 \\ 365 \end{pmatrix}.$$

9. Вывести значение целевой функции FUN при оптимальных значениях поисковых переменных T1, TW2

$$\text{FUN}(T1, TW2) = 3.995 \times 10^3.$$

Сравните значение целевой функции, найденное в оптимальной точке, заданной оптимальными значениями поисковых переменных, и значение, полученное при начальных значениях поисковых переменных. Совпадают ли эти значения?

Увеличилось или уменьшилось значение целевой функции в результате решения задачи? Почему?

Изменились ли значения поисковых переменных в результате решения задачи оптимизации?

10. Вывести в строках ниже значения всех ограничений при найденных значениях поисковых переменных T1, TW2.

Все ли ограничения выполнены?

Какие ограничения стали активными (значение ограничения в оптимальной точке легло на правую либо на левую границу)?

11. Сохранить документ под именем **Оптимизация ХТС_1**.

12. Найдите оптимальный режим работы системы для значений конструктивных параметров, заданных в вариантах 2-4, сохраняя результаты для каждого варианта в отдельном файле с соответствующими именами **Оптимизация ХТС_2**, **Оптимизация ХТС_3**, **Оптимизация ХТС_4**.

13. Проанализируйте полученные значения критерия и ограничений.

Для всех ли вариантов значений конструктивных параметров удалось найти оптимальный режим работы системы?

Какой вариант дает наилучшее решение в смысле заданного критерия? Обоснуйте свой ответ.

Для каких вариантов не найден оптимальный режим? Почему?

Что можно сделать для получения решения для варианта, где оптимальный режим не был найден?



14.6. Лабораторная работа «Оптимальное проектирование и распределение нагрузки для ХТС параллельной структуры»

Цель работы. Освоение приемов решения задачи проектирования оптимальной ХТС с оптимизацией распределения нагрузки на нее встроенными средствами Mathcad как задачи условной оптимизации.

Постановка задачи. Для узла разделения, представленного на рис. 14.5, найти способ распределения нагрузки между аппаратами и значения конструктивных характеристик аппаратов, при которых будет максимален критерий прибыли.

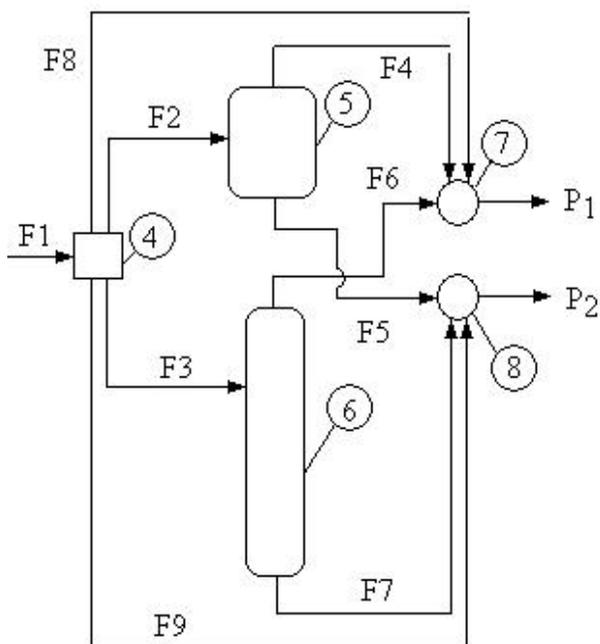


Рис. 14.5. ХТС узла разделения

Сырьевой поток, включающий вещества А и В, с расходом F_1 поступает на узел разделения, который включает сепаратор (5) и колонну (6). В качестве продуктивных потоков рассматриваемой ХТС выступают потоки P_1 и P_2 , качество которых должно быть не ниже заданного.



Рассматриваемый узел предусматривает возможность вывода части поступающей смеси в продуктовые потоки в обход колонны или сепаратора.

Математические модели аппаратов ХТС приведены ниже:

$$F1_A = F1 \cdot C_A, \quad F1_B = F1 \cdot C_B; \quad (14.21)$$

– материальный баланс делителя (4):

$$F2_A = S_1 F1_A, \quad F2_B = S_1 (F1 - F1_A); \quad (14.22)$$

$$F8_A = S_2 F1_A, \quad F8_B = S_2 (F1 - F1_A); \quad (14.23)$$

$$F9_A = S_3 F1_A, \quad F9_B = S_3 (F1 - F1_A); \quad (14.24)$$

$$F3_A = S_4 F1_A, \quad F3_B = S_4 (F1 - F1_A); \quad (14.25)$$

$$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 1; \quad (14.26)$$

– материальный баланс сепаратора (5):

$$F4_A = 0.9 \cdot F2_A, \quad F4_B = (1 - k_F) \cdot F2_B; \quad (14.27)$$

$$F5_A = 0.1 \cdot F2_A, \quad F5_B = k_F \cdot F2_B;$$

– материальный баланс колонны (6):

$$F6_A = 0.97 \cdot F3_A, \quad F6_B = (1 - k_C) \cdot F3_B; \quad (14.28)$$

$$F7_A = 0.03 \cdot F3_A, \quad F7_B = k_C \cdot F3_B;$$

– материальные балансы смесителей:

– смеситель (7):

$$P1_A = F4_A + F6_A + F8_A, \quad P1_B = F4_B + F6_B + F8_B; \quad (14.29)$$

– смеситель (8):

$$P2_A = F5_A + F7_A + F9_A, \quad P2_B = F5_B + F7_B + F9_B; \quad (14.30)$$

где F_1, F_2, \dots, F_9 – расходы потоков, м³/ч; k_C, k_F – коэффициенты деления в сепараторе и колонне по компоненту B, C_A, C_B – концентрации веществ А и В соответственно, кмоль/м³; S_1, S_2, S_3, S_4 – коэффициенты деления делителя (4).

Необходимо найти значения размерных характеристик сепаратора и колонны D_F, D_C , а также коэффициенты распределения сырьевого потока S_1, S_2, S_3, S_4 при которых критерий прибыли

$$\begin{aligned} f = & \{25 \cdot (P1_A + P1_B) + 75 \cdot (P2_A + P2_B)\} - \\ & - \{10(D_F)^2 + (10 + 0.3 \cdot Np)(D_C)^2\} - \\ & - \{0.2 \cdot (F2_A + F2_B) + 2.0 \cdot (F3_A + F3_B)\} \end{aligned} \quad (14.31)$$



примет **максимальное** значение, и будут выполнены следующие ограничения:

– требования на качество получаемых продуктов:

$$8.5P_{1B} - P_{1A} \leq 0, \quad (14.32)$$

$$3P_{2A} - P_{2B} \leq 0, \quad (14.33)$$

– требования на пропускную способность сепаратора и колонны:

$$D_F^2 \geq \frac{1.27 \cdot M \cdot (F2_A + F2_B)}{45 \cdot \nu \cdot \rho_V}, \quad (14.34)$$

$$D_C^2 \geq \frac{1.27 \cdot M \cdot (F3_A + F3_B)}{35 \cdot \nu \cdot \rho_V}, \quad (14.35)$$

$$\nu = 0.064 \sqrt{(\rho_L - \rho_V) / \rho_V}, \quad (14.36)$$

– ограничения на конструктивные параметры:

$$1.0 \leq D_F \leq 25.5, \quad (14.37)$$

$$1.0 \leq D_C \leq 25.5, \quad (14.38)$$

где D_F , D_C – размерные характеристики сепаратора и колонны, соответственно, м; M – усредненная молекулярная масса смеси, кг/кмоль; ρ_L, ρ_V – усредненные плотности жидкой и паровой фаз смеси, соответственно, кг/м³; Np – число тарелок в колонне.

Значения параметров модели приведены в табл. 14.4.

Таблица 14.4

Исходные данные

F_1		M	
45.36	м ³ /ч	92	кг/кмоль
ρ_V		ρ_L	
3.0	кг/м ³	883.0	кг/м ³
k_F	k_C	Np	
0.85	0.91	20	

Провести решение задачи для вариантов значений концентраций веществ в сырьевом потоке, заданных в табл. 14.5.

Таблица 14.5

Варианты значений концентраций веществ в сырьевом потоке

№ варианта	C_A , кмоль/м ³	C_B , кмоль/м ³
1	7.42	3.32
2	6.15	4.45
3	2.8	8.9
4	5.25	6.55



Подготовка к решению задачи

Подготовим вид ограничений и функции цели для задачи.

Исходя из постановки задачи поисковыми переменными должны быть $D_F, D_C, S_1, S_2, S_3, S_4$. Учитывая уравнения (14.21), материальные балансы делителя 4 (уравнения (14.22)–(14.26)), а также материальные балансы сепаратора, колонны, смесителей (уравнения (14.27)–(14.30)) запишем для вычисления целевой функции пользовательскую функцию FUN, в качестве аргументов функции использовать имена поисковых переменных. Удобно формировать функцию цели, используя средства программирования Mathcad, как показано на рис. 14.6.

$$\text{FUN}(D_F, D_C, S_1, S_2, S_3, S_4) := \begin{array}{l} P1A \leftarrow 0.9 \cdot S_1 + 0.97 \cdot S_4 + S_2 \\ P1A \leftarrow P1A \cdot F1 \cdot CA \\ P1B \leftarrow (1 - KF) \cdot S1 \\ P1B \leftarrow P1B + (1 - KC) \cdot S4 \\ P1B \leftarrow P1B + S2 \\ P1B \leftarrow P1B \cdot F1 \cdot CB \\ P2A \leftarrow (0.1 \cdot S_1 + 0.03 \cdot S_4 + S_3) \\ P2A \leftarrow P2A \cdot F1 \cdot CA \\ P2B \leftarrow (KF \cdot S_1 + KC \cdot S_4 + S_3) \\ P2B \leftarrow P2B \cdot F1 \cdot CB \\ f1 \leftarrow 25 \cdot (P1A + P1B) \\ f1 \leftarrow f1 + 75 \cdot (P2A + P2B) \\ f2 \leftarrow 10 \cdot D_F \cdot D_F + (10 + 0.3 \cdot NP) \cdot D_C \cdot D_C \\ f3 \leftarrow 0.2 \cdot [S_1 \cdot (F1 \cdot CA) + S_1 \cdot (F1 \cdot CB)] \\ f3 \leftarrow f3 + 2 \cdot [S_4 \cdot (F1 \cdot CA) + S_4 \cdot (F1 \cdot CB)] \\ f4 \leftarrow f1 - f2 - f3 \\ r \leftarrow f4 \end{array}$$

Рис. 14.6. Функция пользователя

Учитывая уравнения (14.21), материальные балансы делителя 4 (уравнения (14.22)–(14.26)), а также материальные балансы сепаратора, колонны, смесителей (уравнения (14.27)–(14.30)), запишем в виде ограничений, как показано на рис. 14.7.



$$DF^2 \geq \frac{1.27 \cdot M \cdot S1 \cdot (F1 \cdot CA + F1 \cdot CB)}{45 \cdot ZNAM}$$

$$DC^2 \geq \frac{1.27 \cdot M \cdot S4 \cdot (F1 \cdot CA + F1 \cdot CB)}{35 \cdot ZNAM}$$

$$1 \leq DF \leq 25.5$$

$$1 \leq DC \leq 25.5$$

$$S1 + S2 + S3 + S4 = 1$$

$$S1 \geq 0$$

$$S2 \geq 0$$

$$S3 \geq 0$$

$$S4 \geq 0$$

$$8.5 \cdot F1 \cdot CB \cdot [(1 - KF) \cdot S1 + (1 - KC) \cdot S4 + S2] - F1 \cdot CA \cdot (0.9 \cdot S1 + 0.97 \cdot S4 + S2) \leq 0$$

$$3 \cdot F1 \cdot CA \cdot (0.1 \cdot S1 + 0.03 \cdot S4 + S3) - F1 \cdot CB \cdot (KF \cdot S1 + KC \cdot S4 + S3) \leq 0$$

Рис. 14.7. Вид ограничений задачи

Выполнение работы для варианта 1

1. Создать новый документ. Задать исходные данные:

$$F0 = 45.36$$

$$CA := 7.42$$

$$CB := 3.32$$

$$ER := 560$$

$$M := 92$$

$$NP := 20$$

$$ROL := 883$$

$$ROU := 3$$

$$KC := 0.91$$

$$KF := 0.85.$$

2. Для вычисления значения целевой функции сформировать функцию пользователя $FUN(DF, DC, S1, S2, S3, S4)$ в виде программы, представленной на рис. 14.6.
3. Задать начальные значения поисковым переменным:

$$DF := 1$$

$$DC := 1$$

$$S1 := 0.3$$

$$S2 := 0.0001$$

$$S3 := 0.1$$

$$S4 := 0.1.$$

Вывести значение функции цели FUN при начальных значениях поисковых переменных

$$FUN(DF, DC, S1, S2, S3, S4) = 11534.606$$

4. Сформировать переменную $ZNAM$ для вычисления значения знаменателя в ограничениях (14.34), (14.35):

$$ZNAM := ROU \cdot 0.064 \cdot \sqrt{\frac{ROL - ROU}{ROU}}$$

5. Ввести слово Given.
6. Ввести ограничения задачи, представленные на рис. 14.7.



7. Закрыть блок функцией Maximize

$$\begin{pmatrix} \text{DF} \\ \text{DC} \\ \text{S1} \\ \text{S2} \\ \text{S3} \\ \text{S4} \end{pmatrix} := \text{Maximize}(\text{FUN}, \text{DF}, \text{DC}, \text{S1}, \text{S2}, \text{S3}, \text{S4})$$

8. Вывести оптимальные значения поисковых переменных

$$\begin{pmatrix} \text{DF} \\ \text{DC} \\ \text{S1} \\ \text{S2} \\ \text{S3} \\ \text{S4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 19.289 \\ 1 \\ 0.967 \\ 0 \\ 0.031 \\ 0.002 \end{pmatrix}$$

9. Вывести значение целевой функции FUN при найденных значениях поисковых переменных.

Сравните найденное значение целевой функции и полученное при начальных значениях поисковых переменных.

10. Вывести в строках ниже решения задачи значения всех ограничений при оптимальных значениях поисковых переменных.

Все ли ограничения выполнены?

Какие ограничения стали активными?

Каковы размерные характеристики аппаратов?

Как распределены нагрузки между аппаратами ХТС?

Почему нагрузки распределены таким образом и почему получены такие значения размерных характеристик аппаратов?

11. Сохранить документ под именем **Проектирование ХТС_1**.

12. Найдите оптимальные режимы работы и размерные характеристики ХТС для значений концентраций веществ, заданных в вариантах 2–4, сохраняя результаты каждого варианта в отдельном файле с соответствующими именами **Проектирование ХТС_2**, **Проектирование ХТС_3**, **Проектирование ХТС_4**.

Возможно, придется подбирать начальные значения поисковых переменных.



13. Проанализируйте полученные значения критерия, ограничений и способа распределения нагрузки между аппаратами ХТС.

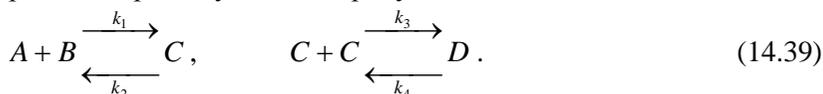
Как происходит распределение нагрузки в различных вариантах и почему?

Каковы оптимальны размерные характеристики аппаратов ХТС? Чем Вы объясните такие их значения?

14.7. Лабораторная работа «Обратная задача кинетики»

Цель работы. Решение обратной задачи кинетики встроенными средствами Mathcad.

Постановка задачи. Определить кинетические параметры для кинетической схемы образования продукта D в результате обратимой диммеризации промежуточного продукта C:



В начальный момент времени реакционная смесь содержит только вещества A и B с концентрациями 2 и 3 ммоль/л соответственно. Экспериментальные данные о зависимости текущих концентраций веществ C и D от времени t представлены в табл. 14.6. Промежуточные значения концентраций веществ A и B неизвестны.

Таблица 14.6

Концентрации веществ C и D

t	0	7	14	21	28	35
C	0	1.065	1.383	0.9793	1.107	0.7289
D	0	0.0058	0.2203	0.4019	0.3638	0.4650
t	42	49	56	63	70	–
C	0.7236	0.4674	0.6031	0.6149	0.3369	–
D	0.5014	0.7150	0.4723	0.7219	0.7294	–

Подготовка к решению задачи

Математическая модель кинетики может быть представлена системой дифференциальных уравнений

$$\frac{dC}{dt} = -k_1AB - k_2C - 2k_3C^2 + 2k_4D, \quad (14.40)$$

$$\frac{dD}{dt} = k_3C^2 - k_4D, \quad (14.41)$$

где A, B, C, D – концентрации веществ A, B, C, D, моль/л.



Выразив промежуточные концентрации веществ А и В через концентрации веществ С и D, получим

$$\frac{dC}{dt} = -k_1(A_0 - C - 2D)(B_0 - C - 2D) - k_2C - 2k_3C^2 + 2k_4D, \quad (14.42)$$

$$\frac{dD}{dt} = k_3C^2 - k_4D. \quad (14.43)$$

Решение будем проводить с использованием функции решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка Rkadapt и средствами оптимизации Mathcad.

Для этого добавим в систему (14.42), (14.43) 4 дифференциальные уравнения, отражающие неизменность констант скоростей во времени.

Получим следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dC}{dt} = -k_1(A_0 - C - 2D)(B_0 - C - 2D) - k_2C - 2k_3C^2 + 2k_4D, \quad (14.44)$$

$$\frac{dD}{dt} = k_3C^2 - k_4D, \quad (14.45)$$

$$\frac{dk_1}{dt} = 0, \quad (14.46)$$

$$\frac{dk_2}{dt} = 0, \quad (14.47)$$

$$\frac{dk_3}{dt} = 0, \quad (14.48)$$

$$\frac{dk_4}{dt} = 0, \quad (14.49)$$

Выполнение работы

1. Создать новый документ. Задать исходные данные
 $A_0 := 2 \quad B_0 := 3$
2. Ввести значения переменным t, C, D согласно табл. 14.6, задав их в виде матрицы из одного столбца.
3. Сформировать начальные значения для логарифмов констант скоростей
 $\ln k_1 := \ln(0.01) \quad \ln k_2 := \ln(0.002) \quad \ln k_3 := \ln(0.02) \quad \ln k_4 := \ln(0.002)$



4. Ввести функцию пользователя $f(t,x)$, которая будет отражать правые части решаемой системы уравнений:

$$f(t, x) := \begin{bmatrix} e^{x_2} \cdot (A_0 - x_0 - 2 \cdot x_1) \cdot (B_0 - x_0 - 2 \cdot x_1) - e^{x_3} \cdot x_0 - 2 \cdot \left[e^{x_4} \cdot (x_0)^2 - x_1 \cdot e^{x_5} \right] \\ e^{x_4} \cdot (x_0)^2 - x_1 \cdot e^{x_5} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Здесь аргумент x представляет собой вектор, элементы которого соответствуют функциям системы (14.44)–(14.49), то есть C, D, k_1, k_2, k_3, k_4 .

Заметим, что в выражениях учитываются не константы скоростей, а их логарифмы.

5. Ниже следует решить систему (14.44)–(14.49) при помощи функции `Rkadapt`.

Результаты решения будут далее использоваться для подбора наилучших значений констант скоростей, поэтому следует сохранить результаты в виде функции от переменных, соответствующих логарифмам констант скоростей.

Поскольку в наличии только 10 экспериментальных точек, потребуем выдавать решение только в этих 10 точках, сформировав соответствующим образом аргументы функции `Rkadapt`:

$$Z(\lnk1, \lnk2, \lnk3, \lnk4) := \text{Rkadapt} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \lnk1 \\ \lnk2 \\ \lnk3 \\ \lnk4 \end{bmatrix}, 0, 70, 10, f \right),$$

здесь первый аргумент задает начальные приближения для искомых переменных, второй и третий аргументы задают начало и конец отрезка интегрирования, четвертый аргумент задает количест-



во точек на этом отрезке, в которых следует выдать значения восстановленных функций, последний аргумент задает функцию, определяющую правые части дифференциальных уравнений.

- Сохранить полученные значения в векторах, отобразить экспериментальные и расчетные данные на диаграмме. Ввести следующие выражения:

$$tt := Z(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4})^{(0)}$$

$$Cn := Z(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4})^{(1)}$$

$$Dn := Z(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4})^{(2)}$$

- Построить диаграмму и отформатировать ее согласно рис. 14.8.

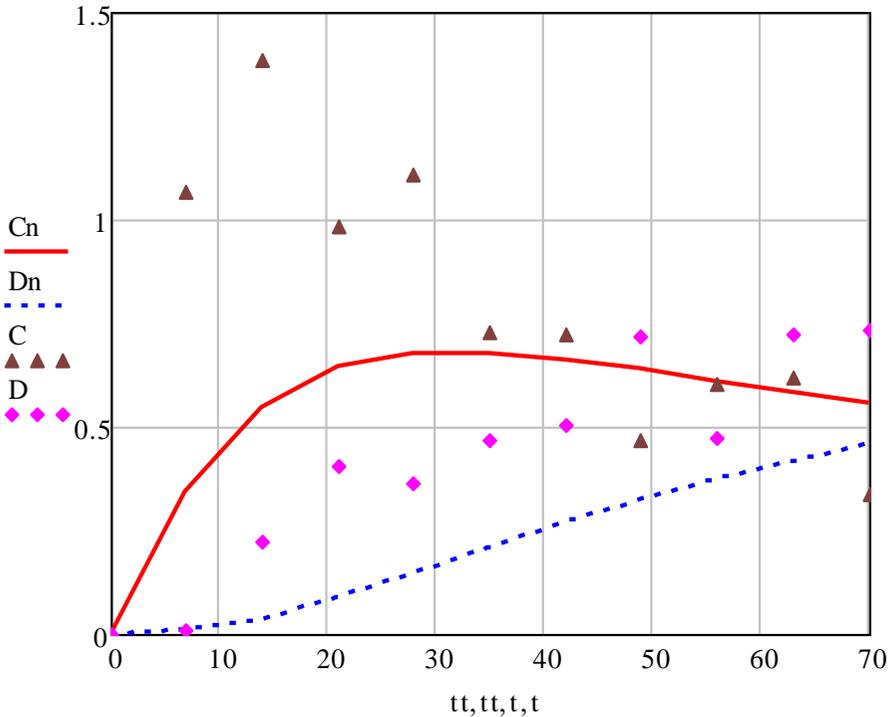


Рис. 14.8. Экспериментальные и расчетные данные

Видно, что заданные нами коэффициенты не позволяют качественно описать экспериментальные данные.



8. Подберем новые значения констант, используя средства минимизации MathCad. Ввести переменную $i := 0.. \text{rows}(t) - 1$.
9. Ввести функцию пользователя, задающую среднеквадратическое отклонение расчетных и экспериментальных данных для концентраций веществ C и D. Значения расчетных данных будем извлекать из столбцов массива Z.
Задание такой функции удобнее сформировать в виде программы:

$$S(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4}) := \begin{cases} a \leftarrow \sum_i (Z(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4})_{i,1} - C_i)^2 \\ a \leftarrow a + \sum_i (Z(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4})_{i,2} - D_i)^2 \\ a \end{cases}$$

10. Вывести значение функции в начальной точке

$$S(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4}) = 2.252$$

11. Решить задачу минимизации

$$\begin{pmatrix} \text{lnk1} \\ \text{lnk2} \\ \text{lnk3} \\ \text{lnk4} \end{pmatrix} := \text{Minimize}(S, \text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4})$$

12. Вывести значение целевой функции

$$S(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4}) = 0.2216501119583884$$

13. Вывести значения логарифмов констант скоростей

$$\begin{pmatrix} \text{lnk1} \\ \text{lnk2} \\ \text{lnk3} \\ \text{lnk4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2.667 \\ -4.626 \\ -4.249 \\ -11.313 \end{pmatrix}$$

14. Рассмотрим, как найденные значения позволяют аппроксимировать экспериментальные данные. Для этого решим систему (14.44)–(14.49), используя найденные значения логарифмов констант скоростей, выдав большее количество точек.



Ввести выражение:

$$Z1(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4}) := \text{Rkadapt} \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \text{lnk1} \\ \text{lnk2} \\ \text{lnk3} \\ \text{lnk4} \end{array} , 0, 70, 100, f \right)$$

15. Сохраним полученные значения в переменных и выведем их на диаграмму вместе с экспериментальными, как сделали это в п.п. 6, 7. Диаграмма должна иметь вид, аналогичный рис. 14.9.

tt := Z1(lnk1, lnk2, lnk3, lnk4)^{<0>}
 C1 := Z1(lnk1, lnk2, lnk3, lnk4)^{<1>}
 D1 := Z1(lnk1, lnk2, lnk3, lnk4)^{<2>}

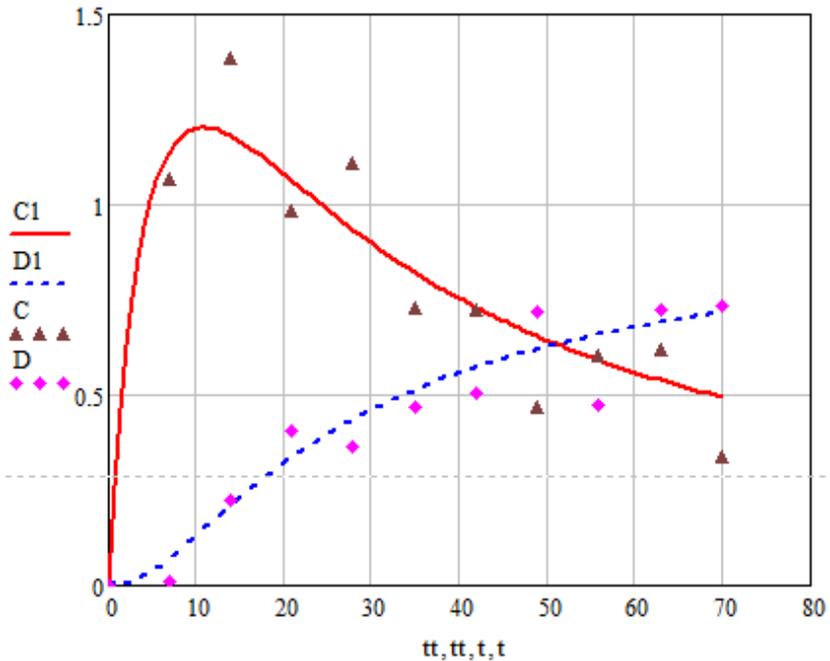


Рис. 14.9. Экспериментальные и расчетные данные



16. Рассмотрим более подробно поведение минимизируемой функции $S(\lnk1, \lnk2, \lnk3, \lnk4)$ вблизи найденной точки.

Зафиксируем первые две переменные $\lnk1$ и $\lnk2$ в значениях, соответствующих найденной точке и проанализируем влияние переменных $\lnk3$ и $\lnk4$.

Для этого ввести новую функцию

$$S1(a3, a4) := S(\lnk1, \lnk2, a3, a4).$$

17. Рассчитать значения функции $S1$ и сохранить их в массиве $Surf$ для дальнейшего отображения его значений на диаграмме.

Ввести

$$Surf := CreateMesh(S1, -5, -3, -15, -6, 50, 50).$$

После чего ниже в документе построить линии уровня функции $S1$, используя шаблон трехмерной диаграммы, отформатировав его согласно рис. 14.10.

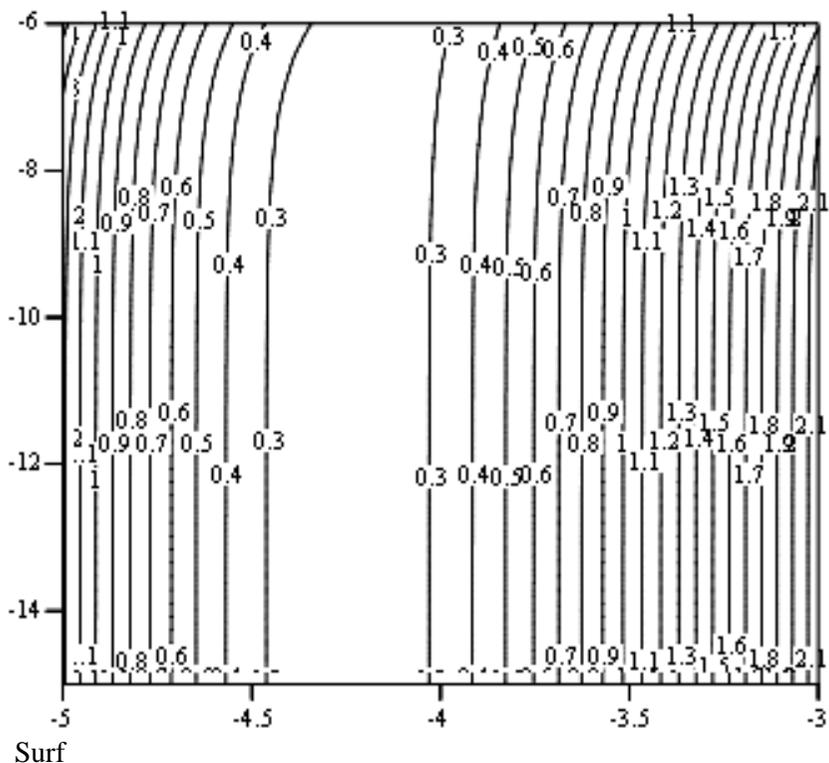


Рис. 14.10. Линии уровня функции $S1$



18. Уточним рассматриваемую область

`Surf := CreateMesh(S1, -4.3, -4.2, -45, -6, 50, 50) .`

Построить новую диаграмму, отформатировав ее так, как показано на рис. 14.11.

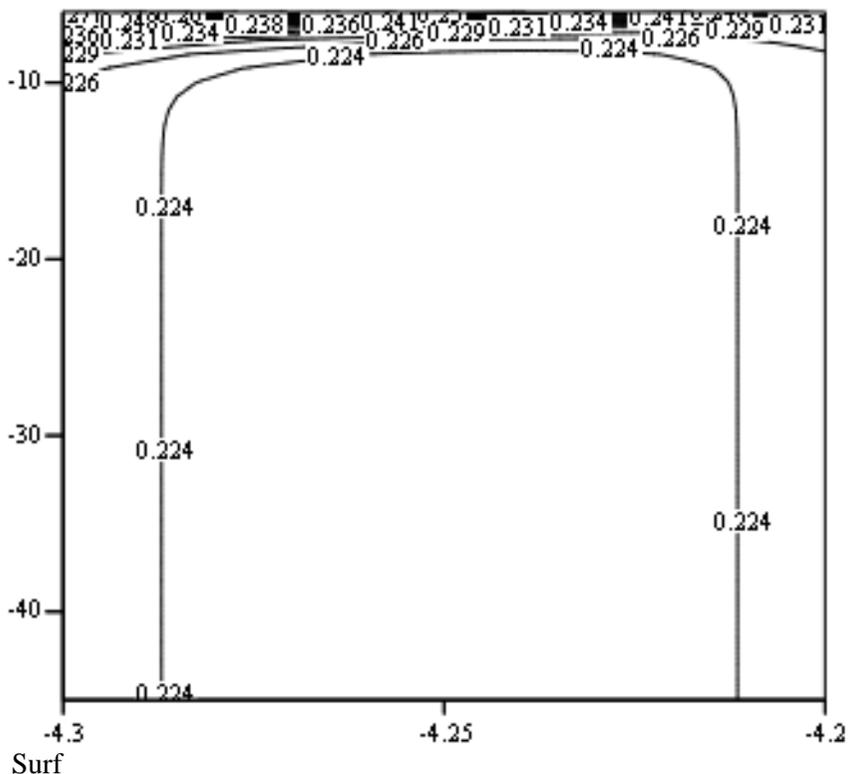


Рис. 14.11. Линии уровня функции S1 в уточненной области

Очевидно, что предпочтительные значения поисковых переменных

`lnk3 = -4.25,`

`lnk4 = -20.`

19. Зададим эти значения как начальные для поисковых переменных

`lnk3 := -4.25 ,`

`lnk4 := -20 .`

20. Решить задачу минимизации с новыми начальными значениями поисковых переменных.



21. Для этого ввести выражение

$$\begin{pmatrix} \text{lnk1} \\ \text{lnk2} \\ \text{lnk3} \\ \text{lnk4} \end{pmatrix} := \text{Minimize} (\text{S}, \text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4})$$

22. Выдать ниже значения поисковых переменных и целевой функции:

$$\text{S}(\text{lnk1}, \text{lnk2}, \text{lnk3}, \text{lnk4}) = 0.2215541678637339$$

$$\begin{pmatrix} \text{lnk1} \\ \text{lnk2} \\ \text{lnk3} \\ \text{lnk4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2.668 \\ -4.616 \\ -4.249 \\ -20 \end{pmatrix}$$

Видно, что значение целевой функции улучшилось.

В том случае, если при решении задачи были получены значения худшие, чем приведены в лабораторной работе, следует повысить точность получаемого решения. Для этого используется команда **Инструменты/Параметры документа (Tools/Worksheet Options)**, где на вкладке **Встроенные переменные (Built-In-Variables)** следует задать меньшие значения переменным TOL и CTOL в полях **Допуск сходимости (Tolerance (TOL))** и **Допуск ограничения (Constraint Tolerance (CTOL))**.

23. Сохранить документ под именем **Обратная задача кинетики**.



15. КОНТРОЛЬНЫЕ РАБОТЫ

15.1. Контрольная работа «Решение отдельных нелинейных алгебраических уравнений»

Цель работы. Проверка навыков решения нелинейных алгебраических уравнений.

Постановка задачи. Решить уравнение, используя функцию `root()`. Вид уравнения задать согласно варианту из табл. 15.1.

Таблица 15.1

Исходные данные контрольной работы

Вариант	Уравнение
1	2
1	$3x^2 - 41x + 12 = 0$
2	$5x^2 + 41x - 12 = 0$
3	$8x^2 - 15x + 19 = 0$
4	$5x^2 + 41x - 115 = 0$
5	$9x^2 - 41x + 4 = 0$
6	$9x^2 - 32x - 12 = 0$
7	$11x^2 - 32x + 11 = 0$
8	$3x^3 + 8x^2 - 5 = 0$
9	$3x^3 - 6x^2 - 9 = 0$
10	$5x^3 - 7x^2 - 2 = 0$
11	$4x^3 + 2x^2 - 210 = 0$
12	$-3x^3 + 6x^2 + 1 = 0$
13	$3x^3 - 4.5x^2 + 12 = 0$
14	$11x^3 - 4.5x^2 + 12 = 0$
15	$11x^3 + 2x^2 - 210 = 0$
16	$11x^3 - 11x + 49 = 0$
17	$11x^3 - 25x - 30 = 0$



1	2
18	$-11x^3 + 10x - 5 = 0$
19	$11x^3 - 1.1x + 4 = 0$
20	$21x^6 - 19x + 9 = 0$
21	$2.1x^6 - 1.9x + 1.9 = 0$
22	$19x^2 - 3x + 14x^3 - 11 = 0$
23	$19x^4 - 9x + 15x^2 - 11 = 0$
24	$1.9x^3 - 9.3x^2 + 1.5x - 11 = 0$
25	$1.9x - 9x^2 + 1.5x^4 - 14 = 0$
26	$1.9x - 9x^2 + 11x^3 - \frac{14}{x+1} = 0$
27	$1.9x^2 - 3x^3 + 1.1x - 6 = 0$
28	$11x^3 - \frac{1.1}{x} + 4 = 0$
29	$2.1x^4 - 19x^2 + 9 = 0$
30	$19x^2 - 3x - 14 = 0$

Отобразить вид функции, представляющей левую часть уравнения, на двумерной диаграмме.

Сохранить файл под именем **Контрольная1_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, Фамилия ИО – данные выполнявшего контрольную работу студента.

15.2. Контрольная работа «Поиск корней уравнений»

Цель работы. Проверка навыков поиска корня уравнения.

Постановка задачи. Решить следующие задачи, используя методику решения уравнения при помощи функции `root()`.

Задача 1. Жидкость по трубе самотеком перетекает из одной емкости в другую только за счет разности давлений в них. Давление в приемной емкости равно атмосферному. Требуется вычислить скорость течения жидкости в трубе w , м/с, при избыточном давлении в первой емкости P , кгс/см².

Значения параметров задачи взять согласно варианту из табл. 15.2.



Значения параметров задачи 1

Вариант	l	d	μ	ρ	P
1	100	0.05	$1 \cdot 10^{-3}$	950	0.5
2	100	0.03	$1.01 \cdot 10^{-3}$	980	0.6
3	100	0.07	$0.98 \cdot 10^{-3}$	990	0.7
4	100	0.04	$1 \cdot 10^{-3}$	1000	0.8
5	100	0.06	$1.01 \cdot 10^{-3}$	970	0.9
6	90	0.05	$0.98 \cdot 10^{-3}$	950	1
7	90	0.03	$1 \cdot 10^{-3}$	980	1.5
8	90	0.07	$1.01 \cdot 10^{-3}$	990	1.4
9	90	0.04	$0.98 \cdot 10^{-3}$	1000	1.3
10	90	0.06	$1 \cdot 10^{-3}$	970	1.2
11	110	0.05	$1.01 \cdot 10^{-3}$	950	1.1
12	110	0.03	$0.98 \cdot 10^{-3}$	980	0.5
13	110	0.07	$1 \cdot 10^{-3}$	990	0.6
14	110	0.04	$1.01 \cdot 10^{-3}$	1000	0.7
15	110	0.06	$0.98 \cdot 10^{-3}$	970	0.8
16	105	0.05	$1 \cdot 10^{-3}$	950	0.9
17	105	0.03	$1.01 \cdot 10^{-3}$	980	1
18	105	0.07	$0.98 \cdot 10^{-3}$	990	1.5
19	105	0.04	$1 \cdot 10^{-3}$	1000	1.4
20	105	0.06	$1.01 \cdot 10^{-3}$	970	1.3
21	95	0.05	$0.98 \cdot 10^{-3}$	950	1.2
22	95	0.03	$1 \cdot 10^{-3}$	980	1.1
23	95	0.07	$1.01 \cdot 10^{-3}$	990	0.5
24	95	0.04	$0.98 \cdot 10^{-3}$	1000	0.6
25	95	0.06	$1 \cdot 10^{-3}$	970	0.7
26	115	0.05	$1.01 \cdot 10^{-3}$	950	0.8
27	115	0.03	$0.98 \cdot 10^{-3}$	980	0.9
28	115	0.07	$1 \cdot 10^{-3}$	990	1
29	115	0.04	$1.01 \cdot 10^{-3}$	1000	1.5
30	115	0.06	$0.98 \cdot 10^{-3}$	970	1.4

Зависимости для расчета скорости потока жидкости:

– разность давлений, Па, $\Delta P = \rho g \eta$;

– потери на трение: $\eta = \lambda \frac{l \cdot w^2}{2dg}$;



– коэффициент трения: $\lambda = \frac{0.316}{\text{Re}^{0.25}};$

– число Рейнольдса: $\text{Re} = wd\rho/\mu;$

где l – длина трубопровода, м; d – внутренний диаметр трубопровода, м; μ – вязкость жидкости, Па с; ρ – плотность жидкости, кг/м³; $g = 9.81$ – ускорение свободного падения, м/с².

Построить уравнение на основе приведенных зависимостей. Найти корень уравнения при помощи функции root().

Сохранить файл под именем **Контрольная 2_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, Фамилия ИО – данные выполнявшего.

Задача 2. Построить график зависимости температуры кипения жидкости от давления для смеси метанол–вода при заданных концентрациях (табл. 15.3). Уравнения Антуана для расчета температуры кипения смеси заданного состава:

$$P_1(t) = \exp\left(18.3036 - \frac{3816.44}{t + 273.15 - 46.13}\right),$$

$$P_2(t) = \exp\left(18.5875 - \frac{3626.55}{t + 273.15 - 34.29}\right),$$

$$P_s(t) = P_1(t)x_1 + P_2(t)x_2,$$

где t – температура, °С; P_1, P_2 – давления, рассчитанные по уравнению Антуана, для метанола и воды, мм рт.ст; P_s – давление, при котором смесь закипит, если имеет температуру t ; x_1, x_2 – мольные доли метанола и воды, соответственно, $x_1 = 1 - x_2$.

Таблица 15.3

Значения параметров задачи 2

Вариант	x_1	Вариант	x_1	Вариант	x_1
1	0.1	2	0.11	3	0.35
4	0.2	5	0.12	6	0.36
7	0.3	8	0.13	9	0.44
10	0.4	11	0.15	12	0.45
13	0.5	14	0.21	15	0.55
16	0.6	17	0.22	18	0.56
19	0.7	20	0.23	21	0.66
22	0.8	23	0.24	24	0.67
25	0.9	26	0.25	27	0.75
28	0.95	29	0.14	30	0.76



На основе данных уравнений построить уравнение зависимости давления от температуры

$$P = P_s(t),$$

после чего построить функцию $dP(P, t)$, которая будет выдавать разницу между левой и правой частями уравнения при заданных t и P :

$$dP(P, t) = P - P_s(t).$$

Тогда для получения значений температуры, откладываемых по оси ординат графика, следует построить функцию $mix(P)$, значениями которой будут нули функции $dP(P, t)$ в заданных точках t . Отложить по оси ординат значения функции $mix(P)$, по оси абсцисс – значения давления P .

Сохранить файл под именем **Контрольная 2_1_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, ФамилияИО – данные выполнявшего.

15.3. Контрольная работа «Символьные вычисления»

Цель работы. Проверка навыков использования средств аналитического решения математических задач.

Постановка задачи. Вычислить аналитически первые и вторые производные функции, вид которой задать согласно варианту из табл. 15.4.

Таблица 15.4

Вид функции	
Вариант	Функция
1	2
1	$x^4 - 13 \sin(x) + 12x$
2	$2 \sin(x) - 12 \sin(x + \pi) \cos(x + \pi / 2) + 12$
3	$x^{4.5} - 13 \cos(x) + 9x - 3$
4	$x^4 - 13 \sin(x - \pi / 2) + 12x^2$
5	$2.5 \tan(x) - 1.2 \cos(x + \pi / 4) + 1.2$
6	$x^2 - 13 \cos(x) + 11x - 3$
7	$5x^4 - 3 \cos(x) + 11x^2 - 3x + 4$
8	$\frac{3x}{\sin(x)} + \frac{2.5x^3}{x^2 + 1.8} - 1.2 \sin(x - \pi) + 1/(x^2 + 2)$
9	$\cos(x) - 12 \sin(x - \pi) \cos(x + \pi / 2) + 18$



1	2
10	$25 \sin(x) - 12 \sin(x) \cos(x + \pi/4) + 12$
11	$x^3 - 101 \sin(x - \pi/8) + 19/x^2$
12	$2.6x^3 + 2.5 \cot(x/2) - 1.2 \sin(x - \pi/4) + 1.2/x$
13	$\frac{3}{\sin(x - \pi)} + \frac{2.5x^3}{x + 1.8} - 1.2 \sin(x) + 1/(x^2 - 10)$
14	$2.6x^2 + 2.5 \cot(x) - 1.2 \sin(x + \pi/4) + 1.2/x$
15	$x^5 - 1.51 \cos(x - \pi/4) + 19x^3$
16	$3x^3 + 2.5 \cos(x)/(x^2 + 1.8) - 1.2 \sin(x) + 1/x$
17	$2.5 \sin(x) - 12x \sin(x) \cos(x + \pi/4) + 12$
18	$\frac{3x^3}{\sin(x)} + \frac{2.5x}{x^2 + 1.8} - 1.2 \sin(x) + 1/(x + 2)$
19	$x^5 - 13 \cos(2x) + 9x^3 - 3x$
20	$12x^2 - 11 \cos(4x) + 11x^3 - 3$
21	$11x^4 - 3/\cos(x) + 1.1x^3 - 3x + 4$
22	$25 \tan(x - \pi) - 1.2 \cos(x + \pi/2) + 1.2x$
23	$x^3 - 11 \sin(x - \pi/4) + 19x^2$
24	$25 \tan(x - \pi) - 1.2 \cos(x) + 1.2x^2$
25	$x^4 - 19 \sin(2x) + 9/x - 3x$
26	$x^3 - 23 \cos(x + \pi) + 11/x - 3x$
27	$5x^4 - 3 \cos(2x) + 11/x^2 - 3x + 4$
28	$25 \tan(x + 2\pi) - 2 \cos(x - \pi/2) + 1.2/x$
29	$3x^2 + 2 \cot(x - \pi/6) - 1.2 \sin(x + \pi/4) + 1.2x$
30	$5x^4 - 3 \cos(x) + 11x - 3/x + 4x^2$

Сохранить файл под именем **Контрольная3_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, ФамилияИО – данные выполнявшего.

Перемножить матрицы, получить вид транспонированной и обратной матриц для каждой.

Вычислить аналитически определитель от произведения матриц.

Вид матриц взять согласно варианту из табл. 15.5.



Вид матриц

Вариант	Матрица М	Матрица К
1	2	3
1	$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 15 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 7 & 8 & 9 \\ 6 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
2	$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 15 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 6 & 5 & 5 & 3 \\ 3 & 17 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
3	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 105 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 6 & 5 & 1 & 3 \\ 3 & 17 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
4	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 4 & 11 \\ 1 & 5 & 1 & 2 \\ 3 & 17 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
5	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 0 & 6 & 8 \\ 3 & 7 & 0 & 1 \\ 0 & 11 & 6 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
6	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 105 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 0 & 6 & 8 \\ 4 & 7 & 0 & 1 \\ 0 & 17 & 6 & 1 \\ 0 & 12 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
7	$M := \begin{pmatrix} 1.9 & 0.1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 6 & 21 \\ 1.4 & 0.2 & 1 & 2 \\ 6 & 1 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 1.2 & 10 & 6.1 & 8 \\ 13 & 7 & 0 & 0.1 \\ 0.3 & 11 & 6.3 & 1 \\ 0 & 1.9 & 2 & 0.23 \end{pmatrix}$



1	2	3
8	$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 15 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 6 & 5 & 1 & 3 \\ 3 & 17 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
9	$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 15 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 0 & 6 & 8 \\ 3 & 7 & 0 & 1 \\ 0 & 11 & 6 & 1 \\ 0 & 1 & 7 & 3 \end{pmatrix}$
10	$M := \begin{pmatrix} 19 & 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 6 & 11 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 4 & 11 \\ 1 & 5 & 1 & 3 \\ 3 & 17 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
11	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 105 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 6 & 5 & 5 & 3 \\ 3 & 17 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
12	$M := \begin{pmatrix} 19 & 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 6 & 11 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 1.2 & 10 & 6.1 & 8 \\ 13 & 7 & 0 & 0.1 \\ 0.3 & 11 & 6.3 & 1 \\ 7 & 1.9 & 2 & 0.23 \end{pmatrix}$
13	$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 15 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 4 & 11 \\ 1 & 5 & 1 & 2 \\ 3 & 15 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
14	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 105 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 7 & 8 & 9 \\ 6 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 0 & 1 & 8 \end{pmatrix}$



1	2	3
15	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 105 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 4 & 11 \\ 1 & 5 & 1 & 2 \\ 3 & 17 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
16	$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 15 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 1.2 & 10 & 6.1 & 8 \\ 13 & 7 & 0 & 0.1 \\ 0.3 & 11 & 6.3 & 1 \\ 0 & 1.9 & 2 & 0.23 \end{pmatrix}$
17	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 7 & 8 & 9 \\ 6 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
18	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 105 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 1.2 & 19 & 6.1 & 8 \\ 13 & 7 & 0 & 0.1 \\ 0.3 & 11 & 6.3 & 1 \\ 0 & 1.9 & 2 & 0.23 \end{pmatrix}$
19	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 6 & 5 & 5 & 3 \\ 3 & 17 & 9 & 2 \end{pmatrix}$
20	$M := \begin{pmatrix} 19 & 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 6 & 11 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 7 & 8 & 9 \\ 6 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 7 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
21	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 6 & 5 & 1 & 3 \\ 3 & 15 & 1 & 2 \end{pmatrix}$



1	2	3
22	$M := \begin{pmatrix} 19 & 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 6 & 11 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 16 & 5 & 1 & 3 \\ 3 & 21 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
23	$M := \begin{pmatrix} 19 & 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 6 & 11 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 6 & 5 & 5 & 3 \\ 3 & 17 & 19 & 2 \end{pmatrix}$
24	$M := \begin{pmatrix} 1.9 & 0.1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 6 & 21 \\ 1.4 & 0.2 & 1 & 2 \\ 6 & 1 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 4 & 11 \\ 1 & 5 & 1 & 2 \\ 3 & 15 & 2 & .23 \end{pmatrix}$
25	$M := \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 11 & 2 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 1.2 & 10 & 6.1 & 8 \\ 13 & 7 & 0 & 0.1 \\ 0.3 & 11 & 6.3 & 1 \\ 0 & 1.9 & 2 & 0.23 \end{pmatrix}$
26	$M := \begin{pmatrix} 19 & 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 6 & 11 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 0 & 6 & 8 \\ 3 & 7 & 0 & 1 \\ 0 & 11 & 6 & 1 \\ 0 & 1 & 17 & 3 \end{pmatrix}$
27	$M := \begin{pmatrix} 1.9 & 0.1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 6 & 21 \\ 1.4 & 0.2 & 1 & 2 \\ 6 & 1 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 7 & 8 & 9 \\ 6 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}$
28	$M := \begin{pmatrix} 1.9 & 0.1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 6 & 21 \\ 1.4 & 0.2 & 1 & 2 \\ 6 & 1 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 0 & 6 & 8 \\ 3 & 17 & 0 & 1 \\ 0 & 11 & 6 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
29	$M := \begin{pmatrix} 1.9 & 0.1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 6 & 21 \\ 1.4 & 0.2 & 1 & 2 \\ 6 & 1 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 12 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 6 & 5 & 7 & 3 \\ 3 & 17 & 9 & 2 \end{pmatrix}$



1	2	3
30	$M := \begin{pmatrix} 1.9 & 0.1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 6 & 21 \\ 1.4 & 0.2 & 1 & 2 \\ 6 & 1 & 1.1 & 0 \end{pmatrix}$	$K := \begin{pmatrix} 0 & 11 & 10 & 1 \\ 2 & 14 & 8 & 11 \\ 1 & 5 & 6 & 2 \\ 3 & 15 & 2 & .3 \end{pmatrix}$

Сохранить файл под именем **Контрольная3_1_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, ФамилияИО – данные выполнявшего.

15.4. Контрольная работа «Решение отдельных дифференциальных уравнений»

Цель работы. Проверка навыков решения отдельных обыкновенных дифференциальных уравнений средствами функции Odesolve.

Постановка задачи. Решить задачу Коши

$$\frac{d^n}{dx^n} y(x) + q(x) \frac{d}{dx} y(x) + v(x)y(x) = f(x)g(x),$$

$$y(a) = y_0; \quad \frac{d}{dx} y(a) = dy_0; \quad \dots \quad \frac{d^{n-1}}{dx^{2n-1}} y(a) = dy_{n0}; \quad x \in [a; b]$$

при помощи функции Odesolve на каждом из заданных диапазонов.

Вид дифференциального уравнения и начальных условий уточнить согласно варианту по табл. 15.6, 15.7. Отобразить вид найденной функции на отдельных графиках для каждого диапазона. Значения границ диапазона $[a; b]$ взять согласно варианту из табл. 15.5.

Таблица 15.6

Исходные данные контрольной работы

Вариант	n	y_0	dy_0	dy_{n0}	a	b
1	2	3	4	5	6	7
1	2	1	-3	-	0	10
2	2	2	-2	-	0	20
3	2	3	-1	-	1	15
4	2	4	-6	-	1	12
5	2	5	6	-	-1	14
6	2	-5	-7	-	-1	18
7	2	-4	7	-	0.5	8
8	3	-3	1	1.5	0.5	10



Окончание табл. 15.6

1	2	3	4	5	6	7
9	3	-2	2	2.5	-0.5	20
10	3	-1	3	3.5	-0.5	15
11	3	-6	-3	-2.5	0	12
12	3	6	-2	-1.5	0	14
13	3	-7	-1	-1.5	1	18
14	3	7	-6	-5	1	8
15	2	1	6	-	-1	10
16	2	2	-7	-	-1	20
17	2	3	7	-	0.5	15
18	2	4	1	-	0.5	12
19	2	5	2	-	-0.5	14
20	2	-5	3	-	-0.5	18
21	3	-4	-3	1.5	0	8
22	3	-3	-2	2.5	0	10
23	3	-2	-1	3.5	1	20
24	3	-1	-6	-2.5	1	15
25	3	-6	6	-1.5	-1	12
26	3	6	-7	-1.5	-1	14
27	3	-7	7	-5	0.5	18
28	3	7	1	-0.5	0.5	8
29	2	8	2	-	-0.5	15
30	2	-8	3	-	-0.5	18

Таблица 15.7

Вид функций дифференциального уравнения

Вариант	$f(x)$	$g(x)$	$q(x)$	$v(x)$
1	2	3	4	5
1	x	$\sin(x)$	x^2	100
2	x	$\sin(x)$	x^2	x
3	x	$\sin(x)$	x^2	1
4	x^2	$\cos(x)$	x	$12x$
5	x	$\cos(x)$	x^2	100
6	e^x	$\sin(x)$	x	x
7	e^x	$\sin(x)$	x	1
8	e^x	$\sin(x)$	x	$12x$
9	e^x	$\cos(x)$	x	100
10	e^x	$\cos(x)$	x	x
11	2^x	$\sin(x)$	x^2	1



1	2	3	4	5
12	2^x	$\sin(x)$	x^2	$12x$
13	2^x	$\sin(x)$	x	100
14	2^x	$\cos(x)$	x	x
15	2^x	$\cos(x)$	x^2	1
16	3^x	$\sin(x)$	x^2	$12x$
17	3^x	$\sin(x)$	x	100
18	3^x	$\sin(x)$	x	x
19	3^x	$\cos(x)$	x^2	1
20	3^x	$\cos(x)$	x^2	$12x$
21	x^3	$\sin(x)$	x	100
22	x^3	$\sin(x)$	x	x
23	x^3	$\sin(x)$	x	1
24	x^3	$\cos(x)$	x^2	$12x$
25	x^3	$\cos(x)$	x	100
26	x^2	$\sin(x)$	x	1
27	x^2	$\sin(x)$	x^2	x
28	x^2	$\sin(x)$	x^2	$12x$
29	x^2	$\cos(x)$	x	1
30	x^2	$\cos(x)$	x	15

Сохранить файл под именем **Контрольная 4_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, Фамилия ИО – данные выполнявшего.

15.5. Контрольная работа «Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений»

Цель работы. Проверка навыков решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений средствами функции Odesolve.

Постановка задачи. Решить систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d^2}{dx^2} y(x) = f(x), \quad \frac{d}{dx} z(x) = g(x),$$

при начальных условиях

$$\frac{d}{dx} y(0) = a, \quad y(0) = b, \quad z(0) = c,$$



используя функцию Odesolve. Исходные, данные задачи взять из табл. 15.8, 15.9 согласно варианту. Вид дифференциальных уравнений и начальных условий взять согласно варианту. Отобразить вид иско-
мых функций на двумерной диаграмме.

Таблица 15.8

Данные для дифференциальных уравнений

Вариант	$f(x)$	$g(x)$
1	2	3
1	$4x+1.8y(x)-6$	$11.2x-6.3y(x)-2.9$
2	$-8x+16y(x)$	$4x+1.8y(x)-6$
3	$1.1x-1.1y(x)+10$	$1.2x-4.3y(x)-2.5$
4	$12x^2+4y(x)$	$1.1x-1.1y(x)+10$
5	$11x-11y(x)+1$	$18x-4y(x)-2$
6	$2x+4y(x)$	$11x-11y(x)+1$
7	$9x-2y(x)+3$	$11x+3y(x)-6$
8	$21x+14y(x)$	$9x-2y(x)+3$
9	$4x+8y(x)$	$2x^2+3y(x)$
10	$4x+1.8y(x)-6$	$4x+8y(x)$
11	$34x-12y(x)$	$2x+3y(x)$
12	$-8x+16y(x)$	$11.2x-6.3y(x)-2.9$
13	$21x+14y(x)$	$x+12y(x)$
14	$11x-11y(x)+1$	$1.2x-4.3y(x)-2.5$
15	$2x+4y(x)$	$3x+2y(x)$
16	$9x-2y(x)+3$	$1.1x-1.1y(x)+10$
17	$12x^2+4y(x)$	$x+4y(x)$
18	$4x+8y(x)$	$11.2x-6.3y(x)-2.9$
19	$-8x+16y(x)$	$11x+y(x)$
20	$34x-12y(x)$	$4x+8y(x)$
21	$11.2x-6.3y(x)-2.9$	$2x+4y(x)$
22	$4x+1.8y(x)-6$	$1.2x-4.3y(x)-2.5$
23	$2x^2+4y(x)$	$1.1x-1.1y(x)+10$
24	$15x+3y(x)-9$	$x+4y(x)$



Окончание табл. 15.8

1	2	3
25	$18x - 4y(x) - 2$	$9x - 2y(x) + 3$
26	$34x - 12y(x)$	$21x - 3y(x)$
27	$11x + 3y(x) - 6$	$4x + 8y(x)$
28	$25x + 41y(x)$	$x + 12y(x)$
29	$2x^2 + 3y(x)$	$-8x + 16y(x)$
30	$x + 9y(x) - 6$	$18x - 4y(x) - 2$

Таблица 15.9

Данные для начальных условий

Вариант	a	b	c
1	6.6	0	2.3
2	6.6	1	3
3	1.6	0	1.3
4	1.6	1	3
5	16	1	1
6	16	0	1
7	3	1	2
8	3	0	1
9	34	12	3
10	34	10	2
11	12	12	1
12	12	11	0
13	1	4	12
14	1	3	1
15	41	2	22
16	41	1	10
17	4	2	2
18	4	1	1
19	12	1	4
20	12	0	3
21	6.6	0	2.3
22	6.6	1	3
23	1.6	1	3
24	16	1	1
25	16	0	1
26	1.6	0	1.3
27	3	1	2
28	3	0	1
29	34	12	3
30	34	10	2



Сохранить файл под именем **Контрольная 5_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, Фамилия ИО – данные выполнявшего.

15.6. Контрольная работа «Расчет ХТС»

Цель работы. Проверка навыков решения задачи сведения материально-теплого баланса химико-технологической системы (ХТС) как решения системы нелинейных алгебраических уравнений.

Постановка задачи. Провести расчет материально-теплого баланса ХТС, состоящей из каскада двух реакторов.

В реакторе 1 протекают реакции превращения вещества A в вещество B со скоростью k_1 и, далее, в вещество C , со скоростью k_3 .

В реакторе 2 протекают реакции превращения вещества A в вещество B со скоростью k_2 и далее в вещество C со скоростью k_4 .

Схема ХТС представлена на рис. 15.1.

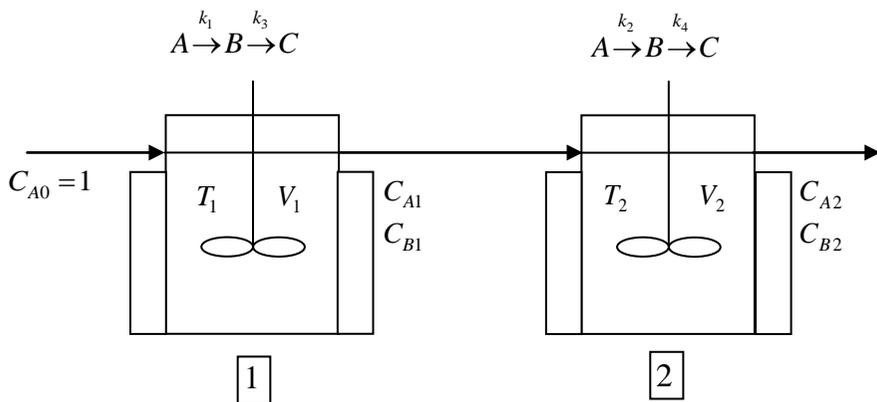


Рис. 15.1. ХТС каскада реакторов

Математическая модель ХТС имеет вид

$$C_{A1} + k_1 C_{A1} V_1 = 1; \quad (15.1)$$

$$C_{B1} + C_{A1} + k_3 C_{B1} V_1 = 1; \quad (15.2)$$

$$k_1 = k_{10} e^{-E_1/RT_1}; \quad (15.3)$$

$$k_3 = k_{20} e^{-E_2/RT_1}; \quad (15.4)$$

$$C_{A2} - C_{A1} + k_2 C_{A2} V_2 = 0; \quad (15.5)$$



$$C_{B2} - C_{B1} + C_{A2} - C_{A1} + k_4 C_{B2} V_2 = 0; \quad (15.6)$$

$$k_2 = k_{10} e^{-E_1/RT_2}; \quad (15.7)$$

$$k_4 = k_{20} e^{-E_2/RT_2}, \quad (15.8)$$

где C_{A1} , C_{B1} , C_{A2} , C_{B2} – концентрации веществ A и B в реакторах 1 и 2 соответственно, моль/м³; V_1 , V_2 – объемы реакторов 1 и 2, м³; T_1 , T_2 – температуры в реакторах; K , k_{10} , k_{20} – предэкспоненциальные множители в уравнениях Аррениуса скорости реакции превращения вещества A в вещество B и реакции превращения вещества B в вещество C соответственно; E_1 , E_2 – энергии активации реакции превращения вещества A в вещество B и реакции превращения вещества B в вещество C соответственно, Дж/моль; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К).

Рекомендации по выполнению работы

1. Ввести исходные данные из табл. 15.10. При вводе имен переменных не использовать индексы, а задавать их как часть имени аналогично тому, как это задано в таблице.

Таблица 15.10

Исходные данные

E_1	E_2	k_{10}	k_{20}	RT_1	RT_2	V_1	V_2
6665.948	7985.248	0.715	0.182	5181	4765	3	4

2. Построить математическую модель системы реакторов на основе уравнений (15.1)–(15.8), при этом выражения для видимых скоростей реакций k_1 , k_2 , k_3 , k_4 подставлять сразу в уравнения материальных балансов (15.1), (15.2), (15.4), (15.6).

Таким образом, для сведения материального баланса следует решать систему из **4 уравнений**.

3. Выделить переменные, значения которых нужно найти для сведения материального баланса системы.
4. Свести материальный баланс системы. Для расчета использовать блок given....find. Выписать полученное содержание вещества B на выходе из второго реактора.
5. Сохранить файл под именем **Контрольная работа 6_1_Фамилия ИО**, где Фамилия ИО – данные выполнявшего.
6. Задать значения переменным RT_1 , RT_2 , k_{10} , k_{20} согласно варианту из табл. 15.11. Выписать полученное содержание вещества B на выходе из второго реактора.



Таблица 15.11

Исходные данные по вариантам

Вариант	RT_1	RT_2	k_{10}	k_{20}
1	5110	4760	0.715	0.182
2	5110	4770	0.715	0.182
3	5110	4780	0.715	0.182
4	5110	4790	0.715	0.182
5	5110	4800	0.715	0.182
6	5210	4810	0.715	0.1825
7	5210	4820	0.715	0.1825
8	5210	4830	0.715	0.1825
9	5210	4840	0.715	0.1825
10	5210	4850	0.715	0.1825
11	5310	4760	0.715	0.181
12	5310	4770	0.715	0.181
13	5310	4780	0.715	0.181
14	5310	4790	0.715	0.181
15	5310	4800	0.715	0.181
16	5410	4810	0.715	0.1815
17	5410	4820	0.715	0.1815
18	5410	4830	0.715	0.1815
19	5410	4840	0.715	0.1815
20	5410	4850	0.715	0.1815
21	5010	4760	0.705	0.181
22	5010	4770	0.705	0.181
23	5010	4780	0.705	0.181
24	5010	4790	0.705	0.181
25	5010	4800	0.705	0.181
26	4900	4810	0.705	0.1815
27	4900	4820	0.705	0.1815
28	4900	4830	0.705	0.1815
29	4900	4840	0.705	0.1815
30	4900	4850	0.705	0.1815

7. Сохранить файл под именем **Контрольная работа 6_2_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта.
8. Изменяя вручную значения объемов реакторов, подобрать такие значения, чтобы содержание C_{B2} повысилось.
9. Сохранить файл с измененными данными под именем **Контрольная работа 6_3_XX_Фамилия ИО**.



15.7. Контрольная работа «Описание экспериментальных данных»

Цель работы. Проверка навыков проведения аппроксимации экспериментальных данных с использованием необходимого условия минимума функции.

Постановка задачи. Зависимость молярной теплоемкости оксида углерода от температуры выражается экспериментальными данными, приведенными согласно варианту в табл. 15.12.

Таблица 15.12

Экспериментальные данные

Варианты 1, 3, 5, 8, 14, 15, 17, 18, 19, 21,							
Т							
1.20	1.50	3.00	3.20	4.00	4.50	6.00	6.50
7.00	9.00	9.50	10.00	11.00	12.00	13.00	
ср							
11	15	30	32	32.3	32.5	33.	33.1
33.2	33.5	33.55	33.6	33.8	34.1	34.5	
Варианты 2, 4, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 16, 20, 22, 23, 24, 25							
Т							
3.00	3.30	5.00	6.30	7.20	9.60	11.30	12.90
13.80	14.30	15.10	15.35	16.10	16.70	17.12	
ср							
11	15	30	32	32.3	32.5	33.	33.1
33.2	33.5	33.55	33.6	33.8	34.1	34.5	

Используя метод наименьших квадратов, найти коэффициенты зависимости

$$c_p = f(T),$$

используя уравнение вида, заданного согласно варианту в табл. 15.13.

Таблица 15.13

Варианты функций

Вариант	$f(T)$
1	2
1	$c_p(T) = a + b \cdot T + c \cdot \ln(T)$
2	$c_p(T) = a + b \cdot T + c \cdot T^2 + d \cdot T^3$
3	$c_p(T) = a + b \cdot T + c \cdot T^2 + d / (T)^3$



1	2
4	$cp(T) = a + b \cdot \ln(T) + c \cdot T^2$
5	$cp(T) = a + b/T^q + c \ln(T) + dT$
6	$cp(T) = a + b \cdot e^{d \cdot T + k} + c \cdot T^2$
7	$cp(T) = a + b/T^q + c \cdot e^{k \cdot T + m} + d \cdot T$
8	$cp(T) = a + b \cdot T + c/T^2 + d \cdot (T + q)^2$
9	$cp(T) = a + b \cdot \log_{10}(T) + c \cdot T^2$
10	$cp(T) = a + b \cdot T + c \cdot T^2 + d / (T + l)$
11	$cp(T) = a + b \cdot 3^{d \cdot T + k} + c \cdot T^2$
12	$cp(T) = a + b/T^q + c \cdot e^{k/(m+T)} + d \cdot T$
13	$cp(T) = a + b/T^q + c \cdot 3^{k/(m+T)} + d \cdot T$
14	$cp(T) = a + b/T^q + c \cdot 3^{k \cdot T + m} + d \cdot T$
15	$cp(T) = a + b/T + c \log_{10}(T + k) + d \cdot T$
16	$cp(T) = a + b \cdot T + c \cdot \log_{10}(T)$
17	$cp(T) = a + b/T + c \cdot T^2$
18	$cp(T) = a + b/T + c \cdot (T + k)^2$
19	$cp(T) = a + b/T + c \cdot T^2 + d \cdot T^4$
20	$cp(T) = a + b/T + c \cdot T^2 + d \cdot \sqrt{T}$
21	$cp(T) = a + b/(T - l) + c \cdot T^2 + d \cdot \sqrt{T}$
22	$cp(T) = a + b/(T - l) + c \cdot T^2 + d \cdot T^4$
23	$cp(T) = a + b \cdot T + c \cdot (T + k)^2 + d \cdot T^4$
24	$cp(T) = a + b/(T - l) + c \cdot \ln(T)$
25	$cp(T) = a + b/(T + r) + c \cdot T^k + d \cdot T^q$

Для определения коэффициентов использовать два способа решения задачи:

1) Используя метод наименьших квадратов, сформулировать критерий среднеквадратического отклонения экспериментальных и расчетных



данных. Построить и решить систему уравнений, соответствующих необходимому условию наличия минимума критерия среднеквадратического отклонения.

Сохранить файл под именем **Контрольная7_XXФамилияИО**, где XX – номер варианта, Фамилия ИО – данные выполнявшего.

2) Использовать функцию `genfit`. В качестве начальных значений коэффициентов зависимости взять значения, найденные в п.1.

Сохранить файл под именем **Контрольная7_1_XXФамилияИО**, где XX – номер варианта, ФамилияИО – данные выполнявшего.

15.8. Контрольная работа «Проектирование оптимальной химико-технологической системы»

Цель работы. Проверка навыков решения задач проектирования оптимальной химико-технологической системы (ХТС) встроенными средствами Mathcad как задачи условной оптимизации.

Постановка задачи. Для ХТС, рассмотренной в контрольной работе 15.6 (рис. 15.1), найти значения конструктивных режимных переменных, при которых будут выполняться предъявляемые к ХТС требования и капитальные затраты будут принимать минимальны.

Математическая модель ХТС задана уравнениями материального баланса реакторов (15.1)–(15.8). Критерий имеет вид

$$f = \sqrt{V_1} + \sqrt{V_2}, \quad (15.9)$$

режим работы ХТС будет определяться переменными T_1, T_2 , конструктивными переменными являются V_1, V_2 , поэтому в качестве поисковых переменных следует выбрать переменные V_1, V_2, RT_1, RT_2 .

Требования к работе ХТС записаны в виде ограничений, заданных в табл. 15.14. Основные исходные данные задачи приведены в табл. 15.15. Значения границ ограничений (15.14), (15.15), (15.16) взять из табл. 15.17 согласно варианту.

Таблица 15.14

Вид ограничений задачи

$0 \leq C_{A1} \leq 1$	(15.10)	$0 \leq C_{B2} \leq 1$	(15.13)	$L_2 \leq RT_2 \leq U_2$	(15.16)
$0 \leq C_{A2} \leq 1$	(15.11)	$C_{B2} \geq CB_{opt}$	(15.14)	$0 \leq V_1 \leq 16$	(15.17)
$0 \leq C_{B1} \leq 1$	(15.12)	$L_1 \leq RT_1 \leq U_1$	(15.15)	$0 \leq V_2 \leq 16$	(15.18)



Таблица 15.15

Исходные данные

E_1	E_2	k_{10}	k_{20}	RT_1	RT_2	V_1	V_2
6665.948	7985.248	0.715	0.182	5181	4765	3	4

Рекомендации по выполнению работы

1. Ввести исходные данные из табл. 15.15.
2. Задать начальные значения поисковым переменным: объемам реакторов и переменным RT_1 , RT_2 .
3. Для решения задачи следует создать **функции пользователя** с именами CA1, CB1, CA2, CB2, выразив эти значения из уравнений (15.1)–(15.8), согласно рекомендациям из табл. 15.16.

Не использовать коэффициенты в именах переменных!

Таблица 15.16

Правила построения функций пользователя

Имя функции	Опорные уравнения	Аргументы функции
CA1	Уравнения 1 и 3	V_1, V_2, RT_1, RT_2
CB1	Уравнения 2, 1, 3, 4	V_1, V_2, RT_1, RT_2
CA2	Уравнения 5, 1, 3, 7	V_1, V_2, RT_1, RT_2
CB2	Уравнения 6, 1, 2, 5, 3, 4, 7, 8	V_1, V_2, RT_1, RT_2

Таблица 15.17

Параметры ограничений задачи

Вариант	L_1	U_1	L_2	U_2	CB_{opt}
1	2	3	4	5	6
1	4000	10000	4000	10000	0.5
2	3900	10100	4000	10000	0.5
3	3800	10200	4000	10000	0.5
4	3700	9900	4000	10000	0.5
5	3500	9800	4000	10000	0.51
6	3400	9700	4000	10100	0.51
7	4000	10000	3900	10200	0.51
8	4000	10000	3800	9900	0.51
9	4000	10000	3700	9800	0.52
10	4000	10000	3500	9700	0.52
11	4000	10000	4000	10000	0.52
12	3900	10100	4000	10000	0.52
13	3500	9800	4000	10000	0.505



Окончание табл. 15.17

1	2	3	4	5	6
14	3400	9700	4000	10100	0.505
15	3800	10200	4000	10000	0.505
16	4000	10000	3700	9800	0.505
17	3900	10100	4000	10000	0.515
18	3800	10200	4000	10000	0.515
19	3400	9700	4000	10100	0.515
20	4000	10000	3900	10200	0.515
21	4000	10000	3700	9800	0.495
22	4000	10000	3500	9700	0.495
23	3500	9800	4000	10000	0.495
24	4000	10000	3800	9900	0.495
25	4000	10000	3600	9900	0.495
26	3850	10200	4000	10000	0.505
27	3950	10050	4000	10000	0.52
28	3950	10150	4000	10000	0.51
29	4050	10000	4000	10000	0.5
30	4050	10000	4000	10000	0.51

4. Задать функцию цели (15.9) как **пользовательскую функцию**. Указать в качестве аргументов переменные V_1, V_2, RT_1, RT_2 .
5. Сформировать блок given...minimize решения задачи (15.9)–(15.19). В блоке сформировать ограничения (15.10)–(15.12), опирающиеся на введенные вами функции пользователя (табл. 15.16). Сформировать ограничение (15.13), выразив СВ2 из уравнения (15.6), используя введенные функции пользователя (табл. 15.16). Аналогично сформировать ограничение (15.14), используя предложенное согласно варианту значение CB_{opt} (табл. 15.17). Задать ограничения (15.15)–(15.18), используя данные табл. 15.17 согласно варианту.
6. Выдать полученные значения поисковых переменных.
7. Сохранить файл под именем **Контрольная8_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, Фамилия ИО – данные выполнявшего.

15.9. Контрольная работа «Условия Куна–Таккера»

Цель работы. Закрепление навыков решения задачи условной оптимизации с ограничениями-неравенствами на основе условий Куна–Таккера.



Постановка задачи. Для заданной задачи оптимизации

$$\min_{x_1, x_2} f(x_1, x_2) \quad (15.20)$$

$$g_j(x_1, x_2) \leq 0, j=1;2,$$

выполнить действия:

- 1) записать вид функции Лагранжа;
- 2) найти решение системы нелинейных уравнений, полученных на основе условий Куна–Таккера. Значение координат стартовой точки подобрать самостоятельно;
- 3) сравнить полученные в п. 2 значения функции цели и ограничений с теми, что можно получить в результате решения задачи (15.20) встроенными в Mathcad средствами минимизации.

Вид функции цели и левых частей ограничений-неравенств:

$$f(x, y) = a \cdot x^b + c \cdot y + n \cdot x \cdot y + h \cdot y^d + c \cdot (x - y)^b$$

$$g1(x, y) = a1 \cdot x + c1 \cdot y$$

$$g2(x, y) = a2 \cdot x + c2 \cdot y$$

Значения коэффициентов взять из табл. 15.18 согласно варианту.

Таблица 15.18

Параметры функций задачи

Вариант	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>n</i>	<i>h</i>	<i>a1</i>	<i>c1</i>	<i>a2</i>	<i>c2</i>
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	35	2	2.7	4	40	0.01	220	-10	-15	350
2	36	2	2.6	4	36	0.02	210	-11	-16	330
3	37	4	2.9	2	36	0.02	190	-15	-17	330
4	38	4	2.7	2	33	0.005	180	-11	-15.5	310
5	37	2	2.8	4	33	0.005	200	-12	-18	310
6	38	2	2.5	4	30	0.015	190	-13	-17	290
7	36	4	2.4	2	40	0.01	200	-14	-18	350
8	34	4	2.6	2	30	0.015	230	-12	-16.5	290
9	34	2	2.4	4	26	0.025	180	-14	-15.5	270
10	33	2	2.9	4	23	0.01	230	-15	-16.5	350
11	35	4	2.5	2	10	0.025	210	-13	-16	270
12	33	4	2.8	2	26	0.025	240	-10	-17.5	270
13	32	2	2.7	4	20	0.02	240	-10	-17.5	330
14	31	2	2.6	4	16	0.005	250	-11	-14.5	310
15	30	2	2.8	4	13	0.015	220	-12	-15	290
16	32	4	2.5	2	23	0.01	250	-11	-14.5	350
17	35	2	2.7	4	13	0.015	200	-14	-18	290
18	36	2	2.6	4	10	0.025	190	-15	-17	270
19	37	2	2.8	4	40	0.01	180	-14	-15.5	350



1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
20	31	4	2.4	2	20	0.02	220	-12	-15	330
21	30	4	2.9	2	16	0.005	210	-13	-16	310
22	38	2	2.5	4	36	0.02	230	-15	-16.5	330
23	34	2	2.4	4	33	0.005	240	-12	-17.5	310
24	33	2	2.9	4	30	0.015	250	-11	-14.5	290
25	34	4	2.5	2	16	0.005	190	-13	-16.5	310
26	32	2	2.7	4	26	0.025	220	-10	-18	270
27	31	2	2.6	4	23	0.01	210	-15	-17	350
28	30	2	2.8	4	20	0.02	200	-14	-15.5	330
29	33	4	2.4	2	13	0.015	180	-12	-17.5	290
30	32	4	2.9	2	10	0.025	230	-11	-14.5	270

Сохранить файл под именем **Контрольная9_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, Фамилия ИО – данные выполнявшего.

15.10. Контрольная работа «Решение задачи условной максимизации на основе условий Куна–Таккера»

Цель работы. Закрепление навыков решения задачи условной оптимизации с ограничениями-неравенствами на основе условий Куна–Таккера.

Постановка задачи. Для заданной задачи оптимизации

$$\max_{x_1, x_2} f(x_1, x_2) \quad (15.21)$$

$$g_j(x_1, x_2) \geq G_j, \quad j=1;2,$$

выполнить следующие действия:

- 1) записать вид функции Лагранжа.
- 2) найти решение системы нелинейных уравнений, полученных на основе условий Куна–Таккера. Значение координат стартовой точки подобрать самостоятельно.
- 3) сравнить полученные в п. 2 значения функции цели и ограничений с теми, что можно получить в результате решения задачи (15.21) встроенными в Mathcad средствами максимизации.

Вид функции цели и левых частей ограничений-неравенств:

$$f(x, y) = a \cdot x^b + c \cdot y + n \cdot x \cdot y + h \cdot y^d + c \cdot (x - y)^b$$

$$g_1(x, y) = a_1 \cdot x + c_1 \cdot y$$

$$g_2(x, y) = a_2 \cdot x + c_2 \cdot y$$

Значения коэффициентов функций взять из табл. 15.19 согласно варианту.



Таблица 15.19

Параметры функций задачи

Вариант	a	b	c	d	n	h	a_1	c_1	a_2	c_2	G_1	G_2
1	-11	2	-2.7	4	40	-0.01	220	-10	-15	350	1	7
2	-15	2	-2.6	4	36	-0.02	210	-11	-16	330	2	8
3	-17	2	-2.9	4	36	-0.02	190	-15	-17	330	3	9
4	-20	2	-2.7	4	33	-0.005	180	-11	-15.5	310	4	10
5	-25	4	-2.8	2	33	-0.005	200	-12	-18	310	5	11
6	-30	4	-2.5	2	30	-0.015	190	-13	-17	290	6	7
7	-35	4	-2.4	2	40	-0.01	200	-14	-18	350	1	8
8	-38	4	-2.6	2	30	-0.015	230	-12	-16.5	290	2	9
9	-11	4	-2.4	2	26	-0.025	180	-14	-15.5	270	3	10
10	-15	4	-2.9	2	23	-0.01	230	-15	-16.5	350	4	11
11	-17	4	-2.5	2	10	-0.025	210	-13	-16	270	5	7
12	-20	4	-2.8	2	26	-0.025	240	-10	-17.5	270	6	8
13	-25	2	-2.7	4	20	-0.02	240	-10	-17.5	330	1	9
14	-30	2	-2.6	4	16	-0.005	250	-11	-14.5	310	2	10
15	-35	2	-2.8	4	13	-0.015	220	-12	-15	290	3	11
16	-38	2	-2.5	4	23	-0.01	250	-11	-14.5	350	4	7
17	-11	2	-2.7	4	13	-0.015	200	-14	-18	290	5	8
18	-15	2	-2.6	4	10	-0.025	190	-15	-17	270	6	9
19	-17	2	-2.8	4	40	-0.01	180	-14	-15.5	350	1	10
20	-20	2	-2.4	4	20	-0.02	220	-12	-15	330	2	11
21	-25	4	-2.9	2	16	-0.005	210	-13	-16	310	3	7
22	-30	4	-2.5	2	36	-0.02	230	-15	-16.5	330	4	8
23	-35	4	-2.4	2	33	-0.005	240	-12	-17.5	310	5	9
24	-38	4	-2.9	2	30	-0.015	250	-11	-14.5	290	6	10
25	-11	2	-2.5	4	16	-0.005	190	-13	-16.5	310	1	11
26	-15	2	-2.7	4	26	-0.025	220	-10	-18	270	2	7
27	-17	2	-2.6	4	23	-0.01	210	-15	-17	350	3	8
28	-20	4	-2.8	2	20	-0.02	200	-14	-15.5	330	4	9
29	-25	4	-2.4	2	13	-0.015	180	-12	-17.5	290	5	10
30	-30	4	-2.9	2	10	-0.025	230	-11	-14.5	270	6	11

Сохранить файл под именем **Контрольная10_XX_Фамилия ИО**, где XX – номер варианта, ФамилияИО – данные выполнявшего.



15.11. Контрольная работа «Решение задачи условной оптимизации с ограничениями типа равенств на основе условий Куна–Таккера»

Цель работы. Закрепление навыков решения задачи условной оптимизации на основе условий Куна–Таккера.

Постановка задачи. Для заданной задачи оптимизации

$$\min_{x_1, x_2} f(x_1, x_2) \quad (15.22)$$

$$g_1(x_1, x_2) = G_1$$

выполнить следующие действия:

- 1) записать вид функции Лагранжа;
- 2) найти решение системы нелинейных уравнений, полученных на основе условий Куна–Таккера. Значение координат стартовой точки подобрать самостоятельно;
- 3) сравнить полученные в п. 2 значения функции цели и ограничений с теми, что можно получить в результате решения задачи (15.22) встроенными в Mathcad средствами минимизации.

Вид функции цели и левых частей ограничений-неравенств:

$$f(x, y) = a \cdot x^b + c \cdot y + n \cdot x \cdot y + h \cdot y^d + c \cdot (x - y)^b$$

$$g_1(x, y) = a_1 \cdot x + c_1 \cdot y$$

Значения коэффициентов функций взять из табл. 15.20 согласно варианту.

Таблица 15.20

Параметры функций задачи

Вариант	a	b	c	d	n	h	a_1	c_1	G_1
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	35	2	2.7	4	40	0.01	220	-10	1
2	36	2	2.6	4	36	0.02	210	-11	2
3	37	4	2.9	2	36	0.02	190	-15	3
4	38	4	2.7	2	33	0.005	180	-11	4
5	37	2	2.8	4	33	0.005	200	-12	5
6	38	2	2.5	4	30	0.015	190	-13	6
7	36	4	2.4	2	40	0.01	200	-14	1
8	34	4	2.6	2	30	0.015	230	-12	2
9	34	2	2.4	4	26	0.025	180	-14	3
10	33	2	2.9	4	23	0.01	230	-15	4



Окончание табл. 15.20

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
11	35	4	2.5	2	10	0.025	210	-13	5
12	33	4	2.8	2	26	0.025	240	-10	6
13	32	2	2.7	4	20	0.02	240	-10	1
14	31	2	2.6	4	16	0.005	250	-11	2
15	30	2	2.8	4	13	0.015	220	-12	3
16	32	4	2.5	2	23	0.01	250	-11	4
17	35	2	2.7	4	13	0.015	200	-14	5
18	36	2	2.6	4	10	0.025	190	-15	6
19	37	2	2.8	4	40	0.01	180	-14	1
20	31	4	2.4	2	20	0.02	220	-12	2
21	30	4	2.9	2	16	0.005	210	-13	3
22	38	2	2.5	4	36	0.02	230	-15	4
23	34	2	2.4	4	33	0.005	240	-12	5
24	33	2	2.9	4	30	0.015	250	-11	6
25	34	4	2.5	2	16	0.005	190	-13	1
26	32	2	2.7	4	26	0.025	220	-10	2
27	31	2	2.6	4	23	0.01	210	-15	3
28	30	2	2.8	4	20	0.02	200	-14	4
29	33	4	2.4	2	13	0.015	180	-12	5
30	32	4	2.9	2	10	0.025	230	-11	6

Сохранить файл под именем **Контрольная11_XX_Фамилия ИО**,
где XX – номер варианта, Фамилия ИО – данные выполнявшего.



16. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Назначение системы Mathcad.
2. Структура окна приложения Mathcad и его элементы.
3. Как проводится отображение панели математических инструментов?
4. Состав и назначение пунктов главного меню Mathcad.
5. Каковы способы редактирования документа?
6. Какие возможности форматирования текстовых блоков вы можете назвать?
7. Назовите основные приемы форматирования математических выражений.
8. Назовите арифметические операторы Mathcad и приведите примеры их применения.
9. Как настраивается точность вычисления в Mathcad?
10. Назовите основные приемы форматирования результатов вычислений.
11. Какие математические панели инструментов используются в Mathcad?
12. Как задаются в Mathcad числовые константы, комплексные числа, строковые константы?
13. Как проводится ввод и редактирование формул и текста?
14. Какие способы присваивания значений переменным имеются в Mathcad?
15. Что такое ранжированные переменные?
16. Каковы возможности системы Mathcad в решении типовых задач химической технологии?
17. Что такое вычислительный блок и какова его структура?
18. Опишите создание и особенности работы в вычислительном блоке.
19. Опишите создание матриц и основные операции с ними.
20. Какие способы создания массивов существуют в Mathcad?
21. Как можно изменить размер созданной матрицы?
22. Что определяет переменная ORIGIN?
23. Как образовать новую матрицу из существующих?
24. Какие функции предназначены для сортировки векторов и матриц?
25. Перечислите основные матричные операторы?
26. Для чего предназначен оператор векторизации?



27. Как вычислить собственные числа и собственные векторы матриц?
28. Какие способы отображения массивов существуют в Mathcad?
29. Как получить доступ к отдельным элементам векторов и матриц?
30. Какие уравнения называются матричными?
31. Как решать матричные уравнения? Назовите способы их решения.
32. Расскажите о способах символьных вычислений в Mathcad.
33. Перечислите особенности подготовки и выполнения символьных преобразований.
34. Как разложить выражение на множители в Mathcad?
35. Как упростить выражение в Mathcad?
36. Перечислите символьные операции преобразования.
37. Каким образом можно вычислить предел в Mathcad?
38. Какой знак равенства используется в блоке решения?
39. Как вставляется в документ знак равенства для использования в блоке решения?
40. Как построить двумерный график в декартовой системе координат?
41. Как построить график в полярной системе координат?
42. Опишите шаблон двумерного графика.
43. Как вывести панель форматирования двумерного графика?
44. Как построить несколько графиков в одной системе координат?
45. Как построить график поверхности?
46. Как изменить масштаб двумерного графика?
47. Как определить координату точки на двумерном графике?
48. Как построить гистограмму?
49. Какие функции используются для построения трехмерных графиков?
50. Как изменить масштаб трехмерного графика?
51. Каковы способы построения графиков в системе Mathcad?
52. Как строится график параметрически заданной функции?
53. Какие типы трехмерных графиков позволяет строить Mathcad?
54. Опишите шаблон трехмерного графика.
55. Какими способами можно вывести шаблон трехмерного графика?



56. Как построить трехмерный график при параметрическом задании функции?
57. Как вывести панель форматирования трехмерного графика?
58. Перечислите условные функции и назовите особенности их ввода в математическое выражение.
59. Какие категории функций имеются в системе Mathcad?
60. Каковы правила применения встроенных функций?
61. Как формируется и используется функция пользователя?
62. Каковы правила задания аргументов функции пользователя?
63. Какие функции встроены в Mathcad для определения параметров матрицы?
64. Какие символьные операции можно выполнять с помощью команд меню?
65. Как находится символьное представление производной аналитически заданной функции?
66. Какая символьная операция позволяет упрощать математические выражения, содержащие алгебраические и тригонометрические функции, а также выражения со степенными выражениями (полиномами)?
67. Как осуществляются символьные вычисления интегралов (или нахождение первообразных) для аналитически заданной функции?
68. Может ли Mathcad находить в аналитическом виде суммы и произведения?
69. В чем отличие команды Simplify от Expand?
70. Что делает команда Factor?
71. Как находятся решения нелинейных уравнений с помощью команды Solve?
72. Как выполнить аналитические вычисления с матрицами с помощью Mathcad?
73. Как можно управлять выводом результатов символьных операций?
74. Как находятся решения алгебраических (и других) уравнений и систем с помощью команды Solve?
75. Особенности решения нелинейных уравнений функцией root.
76. Какое ограничение имеет функция root?
77. Каким образом можно установить корни уравнения?
78. Исходя из чего выбирается интервал для поиска корня?



79. Как изменить точность, с которой функция `root` ищет корень?
80. Как системная переменная `TOL` влияет на решение уравнения с помощью функции `root`?
81. Какие аргументы функции `root` необязательны?
82. Как решается система линейных уравнений?
83. Что такое нелинейное уравнение?
84. Как записывается вычислительный блок для решения систем нелинейных уравнений?
85. Как повлиять на точность решения системы нелинейных уравнений?
86. В чем различие в работе функций `Find` или `Minerr`?
87. Как задаются стартовые условия при решении систем нелинейных уравнений?
88. Как использовать результаты вычислений функции `Find` в дальнейших вычислениях в документе?
89. Каковы ограничения использования вычислительного блока?
90. Какие функции используются для численного решения одночного дифференциального уравнения в `Mathcad`?
91. Что представляет собой результат вычислений функции `Odesolve`?
92. Какие функции применяются для численного решения задачи Коши для дифференциальных уравнений и систем?
93. Какие функции используются для решения жестких дифференциальных уравнений?
94. Как использовать результаты вычислений функции `Odesolve` в дальнейших вычислениях в документе?
95. Как решить дифференциальное уравнение, если функция имеет разрывы?
96. Какие функции применяются для численного решения двухточечных краевых задач?
97. Что такое операторы пользователя и как они создаются?
98. Назовите все операторы программирования в `Mathcad`.
99. Для решения каких задач используются условный оператор `if` и оператор `otherwise`?
100. Какие виды циклов можно создавать с помощью операторов `for` и `while`?



101. Можно ли использовать программный блок как функцию пользователя?

102. Можно ли в программном блоке использовать сложные операторы Mathcad, например вычисления суммы или интеграла?

103. Что такое интерполяция и аппроксимация?

104. Какие функции в Mathcad используются для линейной аппроксимации?

105. С помощью каких встроенных функций можно осуществлять одномерную сплайн-интерполяцию в Mathcad?

106. Какие встроенные функции в Mathcad имеются для проведения линейной регрессии?

107. Какие функции используются для одномерной и многомерной полиномиальной регрессии?

108. Какие функции используются для нелинейной регрессии произвольной функцией?



БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Сборник задач по технической термодинамике: учеб. пособие / Т.Н. Андрианова [и др.]. – 4-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд-во МЭИ, 2000. – 356 с.
2. Ивановский, Р.И. Компьютерные технологии в науке и образовании. Практика применения систем Mathcad 7.0 PrO, Mathcad 8.0 Pro и Mathcad 2000 Pro: учеб. пособие / Р.И. Ивановский. – СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2000. – 201 с.
3. Кирьянов, Д.В. Mathcad 15 / Mathcad Prime 1.0 / Д.В. Кирьянов. – СПб.: БХВ-Петербург, 2012. – 432 с.
4. Коробов, В.И. Химическая кинетика: введение с Mathcad/Maple/MCS / В.И. Коробов, В.Ф. Очков. – М.: Горячая линия-Телеком, 2009. – 384 с.
5. Лаптева, Т.В. Решение задач химической технологии с применением пакета Mathcad: учебное пособие / Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов. – Казань: Изд-во КГТУ, 2004. – 120 с.
6. Лейбович, Л.И. Математические методы и модели расчетов процессов теплообмена: учебное пособие / Л.И. Лейбович. – Николаев: Изд-во Нац. ун-та кораблестроения, 2012. – 120 с.
7. Методические указания к выполнению лабораторных работ по курсу «Применение ЭВМ в химической технологии» / сост. И.А. Семенов. – Ангарск: Изд-во Ангарской гос. техн. академии, 2009. – 70 с.
8. Тарасевич, Ю.Ю. Численные методы на Mathcad'e / Ю.Ю. Тарасевич. – Астрахань: Изд-во Астраханского гос. пед. ун-та, 2000. – 70 с.



УЧЕБНОЕ ИЗДАНИЕ

*Татьяна Владимировна Лаптева
Надир Низамович Зиятдинов
Сергей Александрович Лаптев
Денис Дмитриевич Первухин*

РАСЧЕТЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ
С ПРИМЕНЕНИЕМ MATHCAD

Ответственный за выпуск А. С. Сильвестрова



Подписано в печать 29.12.2018

Бумага офсетная

15,5 уч.-изд. л.

Печать ризографическая

Тираж 100 экз.

Формат 60×84 1/16

14,41 усл. печ. л.

Заказ

Издательство Казанского национального исследовательского
технологического университета

Отпечатано в офсетной лаборатории Казанского национального
исследовательского технологического университета

420015, Казань, К. Маркса, 68

