МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЧНІЙ ІНЖЕНЕРІЇ:

ПРИКЛАДНІ РОЗРАХУНКИ ТА МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для здобувачів ступеня бакалавра
за освітньою програмою «Хімічні технології та інженерія»
спеціальності G1 «Хімічні технології та інженерія»

Укладачі: А. М. Шахновський, О. О. Квітка, С. Г. Бондаренко, О. В. Сангінова

Електронне мережеве навчальне видання

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2025

УДК 66.012.1:004.4(075.8)

Ш31

Укладачі: *Шахновський Аркадій Маркусович*, канд. техн. наук, доц.
Квітка Олександр Олександрович, канд. хім. наук, доц.
Бондаренко Сергій Григорович, канд. техн. наук, доц.
Сангінова Ольга Вікторівна, канд. техн. наук, доц.

Рецензент *Джигирей, І.М.,* к.т.н., доц., в.о. зав. кафедри штучного інтелекту Навчально-наукового інституту прикладного системного аналізу КПІ ім. Ігоря Сікорського

Відповідальний редактор *Феденко Ю.М.*, канд. техн. наук, ст.викл.

Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
(протокол № 2 від 06.11.2025 р.)
за поданням вченої ради хіміко-технологічного факультету
(протокол № 10 від 29.09.2025 р.)

Ш31 **Моделювання в хімічній інженерії:** Прикладні розрахунки та моделювання хіміко-технологічних процесів [Електронний ресурс] : навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавра за освіт. програмою «Хімічні технології та інженерія» спец. G1 Хімічні технології та інженерія / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: А. М. Шахновський, О. О. Квітка, С. Г. Бондаренко, О. В. Сангінова. – Електрон. текст. дані (1 файл). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2025. – 145 с.

Навчальний посібник розроблено відповідно до освітньої програми підготовки бакалаврів за спеціальністю G1 «Хімічні технології та інженерія». Навчальна дисципліна «Моделювання в хімічній інженерії» належить до дисциплін вільного вибору і представляє основні принципи, підходи та теоретичні основи дослідження, розрахунку та застосування комп'ютерних моделей типових хіміко-технологічних процесів, насамперед, тепло- та масообмінних процесів та процесів хімічного перетворення, а також сучасні програмні засоби для комп'ютерного моделювання хіміко-технологічних процесів. У посібнику подано необхідні теоретичні відомості та рекомендації до виконання дев’яти лабораторних робіт, спрямованих на формування практичних навичок застосування програмного середовища MathCAD у моделюванні процесів хімічної інженерії. Кожна лабораторна робота містить завдання, приклади розрахунків та питання для самопідготовки. Посібник буде корисним для освоєння сучасних методів комп’ютерного моделювання у хімічній технології й інженерії, а також під час виконання курсових проектів та робіт, запланованих у дисциплінах професійного циклу, та у дипломному проектуванні.

УДК 66.012.1:004.4(075.8)

Реєстр. № НП 25/26-058. Обсяг 6,86 авт. арк.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
проспект Берестейський, 37, м. Київ, 03056
https://kpi.ua
Свідоцтво про внесення до Державного реєстру видавців, виготовлювачів
і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 5354 від 25.05.2017 р.

Зміст

ПЕРЕДМОВА

Навчальний посібник розроблено відповідно до освітньої програми підготовки бакалаврів за спеціальністю G1 «Хімічні технології та інженерія». Дисципліна «Моделювання в хімічній інженерії» є важливою складовою підготовки фахівців хіміків-технологів, оскільки забезпечує аналітичну основу для розуміння, проектування й оптимізації хімічних процесів. Вона дозволяє відтворювати складні технологічні явища за допомогою математичних моделей, що істотно знижує витрати на експериментальні дослідження та прискорює інженерні розробки. Моделювання сприяє прийняттю обґрунтованих технічних рішень, зокрема при масштабуванні процесів, доборі обладнання, контролі якості продукції й підвищенні енергоефективності виробництва. Освоєння цієї дисципліни формує у майбутніх фахівців системне інженерне мислення, здатність працювати з чисельними методами та сучасними програмними засобами. Отже, моделювання виступає незамінним інструментом для підвищення науково-технічного рівня та конкурентоспроможності хімічного виробництва.

Навчальна дисципліна «Моделювання в хімічній інженерії» належить до дисциплін вільного вибору і представляє основні принципи, підходи та теоретичні основи дослідження, розрахунку та застосування комп'ютерних моделей типових хіміко-технологічних процесів, насамперед, тепло- та масообмінних процесів та процесів хімічного перетворення, а також сучасні програмні засоби для комп'ютерного моделювання хіміко-технологічних процесів.

Робота студента над учбовим матеріалом з дисципліни: «Моделювання в хімічній інженерії» передбачає: вивчення матеріалу по навчальних посібниках і підручниках; відвідування лекцій; виконання комп’ютерних лабораторних практикумів; написання модульної контрольної роботи; індивідуальні консультації та здачу заліку; значна частина часу відводиться на самостійну роботу. Вивчення дисципліни передбачає поєднання теоретичних знань із практичними навичками, які набуваються під час виконання лабораторних робіт у середовищі MathCAD. Кількість часу, рекомендованого для аудиторної та позааудиторної роботи над кожним із практикумів, відповідає силабусу дисципліни «Моделювання в хімічній інженерії».

Представлені матеріали мають за мету закріплення знань та набуття вміння застосовувати навички роботи із текстовими документами та хімічними структурами при роботі з хіміко-технологічними системами. Начальний посібник містить завдання для комп'ютерних практикумів, вимоги до оформлення звіту і контрольні питання для самопідготовки студентів. Посібник сприятиме засвоєнню сучасних методів комп'ютерного моделювання у хімічній інженерії, а також буде корисним під час виконання курсових проектів та робіт, запланованих у дисциплінах професійного циклу, та у дипломному проектуванні.

1 ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ

Сутність і класифікація моделей у хімічній інженерії

Моделювання у хімічній інженерії – це процес створення формалізованого опису хіміко-технологічної системи або окремого процесу з метою дослідження його властивостей, оптимізації параметрів і прогнозування поведінки без проведення дорогих і тривалих експериментів. Модель виступає інструментом, що дозволяє інженеру відтворювати складні технологічні явища у вигляді математичних залежностей, алгоритмів чи комп'ютерних програм.

Сутність моделі полягає в абстрагуванні реального об'єкта: замість безлічі деталей і випадкових факторів розглядають лише найбільш суттєві характеристики процесу. Це дозволяє зберегти адекватність опису при зниженні його складності.

Наприклад, при моделюванні ректифікаційної колони може враховуватись лише рівновага між фазами та тепловий баланс, тоді як турбулентні пульсації або мікронерівності поверхні контактних пристроїв не включаються в модель.

Моделювання дає можливість:

- Виконувати віртуальні експерименти, що значно швидше та дешевше за реальні.
- Аналізувати вплив параметрів на процес (чутливісний аналіз).
- Оптимізувати роботу системи, підбираючи найкращі режими.
- Прогнозувати поведінку у нештатних ситуаціях, що підвищує безпеку.

Сучасні обчислювальні можливості відкрили шлях до розробки складних динамічних моделей, що дозволяють враховувати багатофакторні залежності та нелінійні ефекти.

У XXI столітті моделювання є основою цифрових двійників технологічних процесів, що застосовуються для:

- керування в реальному часі,
- оптимізації енергоспоживання,
- зменшення викидів шкідливих речовин,
- прогнозування залишкового ресурсу обладнання.

Використання таких підходів дозволяє компаніям відповідати сучасним вимогам сталого розвитку та екологічних стандартів. Крім того, цифрові моделі інтегруються з системами автоматизації (SCADA, DCS) і забезпечують розширені можливості моніторингу та діагностики.

Класифікація моделей. У хімічній інженерії використовуються різні типи моделей, які можна класифікувати за кількома ознаками.

1. За методом побудови:

- Теоретичні (аналітичні) моделі – базуються на законах фізики, хімії та термодинаміки. Вони формулюються у вигляді диференційних або алгебраїчних рівнянь. Наприклад, рівняння теплопередачі Фур'є для розрахунку теплообмінників, рівняння Нав'є–Стокса для гідродинаміки, кінетичні моделі хімічних реакцій.
- Емпіричні моделі – створюються на основі експериментальних даних. Застосовуються тоді, коли неможливо або складно побудувати точний теоретичний опис (наприклад, поліноміальне рівняння для в'язкості складних розчинів).
- Гібридні моделі – поєднують теоретичні основи з емпіричними залежностями, що дозволяє підвищити точність при розумній складності (модель ректифікаційної колони, де фазова рівновага описується теоретично, а коефіцієнти масообміну – за емпіричними кореляціями).

2. За рівнем деталізації:

- Макромоделі – відображають систему на агрегованому рівні. Наприклад, баланс маси та енергії для усього апарата або технологічної лінії.

- Мезомоделі – описують окремі частини обладнання або вузли (наприклад, один тарілковий елемент у колоні).
- Мікромоделі – враховують молекулярний чи атомний рівень процесів, що характерно для кінетики хімічних реакцій або молекулярної динаміки.

3. За характером змінних:

- Детерміновані моделі – передбачають точне значення параметрів у кожен момент часу (наприклад, температурний профіль у реакторі).
- Стохастичні моделі – враховують випадкові впливи, статистичні коливання або ймовірнісний характер подій (наприклад, процеси полімеризації).

4. За способом подання:

- Аналітичні моделі (система рівнянь).
- Імітаційні моделі (комп’ютерна програма, що відтворює динаміку системи).
- Графічні моделі (схеми, блок-діаграми, PFD або P&ID).

Приклади застосування моделей:

- Проектування обладнання – моделі теплообмінників, реакторів, колон.
- Оптимізація енергоспоживання – розрахунок теплообміну для мінімізації втрат.
- Симуляція аварійних ситуацій – моделі викидів, займання, вибухів.
- Дослідження механізмів реакцій – мікромоделі для каталізу, полімеризації.

Правильний вибір типу моделі залежить від поставленої задачі: для швидких розрахунків оптимізації підходять макромоделі, а для дослідження механізму реакції потрібні мікромоделі. У сучасній хімічній інженерії поєднуються різні підходи, що забезпечує баланс між точністю і швидкодією.

Чисельні методи та алгоритми розв’язання моделей

У хімічній технології й інженерії значна частина моделей являють собою системами нелінійних алгебраїчних або диференціальних рівнянь, аналітичний розв’язок яких є складним або неможливим. Для їх вирішення застосовують чисельні методи [2], що дозволяють наближено обчислити значення шуканих величин із заданою точністю. Вибір методу залежить від типу задачі, складності рівнянь і вимог до швидкодії.

Основні групи чисельних методів. Чисельні методи можна класифікувати за типом задачі, яку вони розв’язують (рис. 1.1):

1. Розв’язання нелінійних алгебраїчних рівнянь і систем

- Метод ітерацій (послідовних наближень) – простий алгоритм для рівнянь виду $x=\varphi(x)$.
- Метод Ньютона (Ньютона–Рафсона) – базується на розкладанні функції в ряд Тейлора та використанні похідної. Широко застосовується для обчислення складу сумішей за рівнянням стану, розрахунку рівноважних концентрацій.
- Методи січних та хорд – різновиди методів для випадків, коли похідна важко обчислюється.

2. Розв’язання звичайних диференціальних рівнянь (ЗДР)

- Хімічні реактори, тепло- та масообмінні процеси часто описуються системами ОДР. Основні методи:
- Метод Ейлера – найпростіший, але з низькою точністю.
- Методи Рунге–Кутта (2-го, 4-го порядку) – забезпечують високу точність і стійкість при моделюванні кінетики реакцій.
- Адаптивні методи (Фельберга, Мерсона) – автоматично змінюють крок інтегрування залежно від похибки.

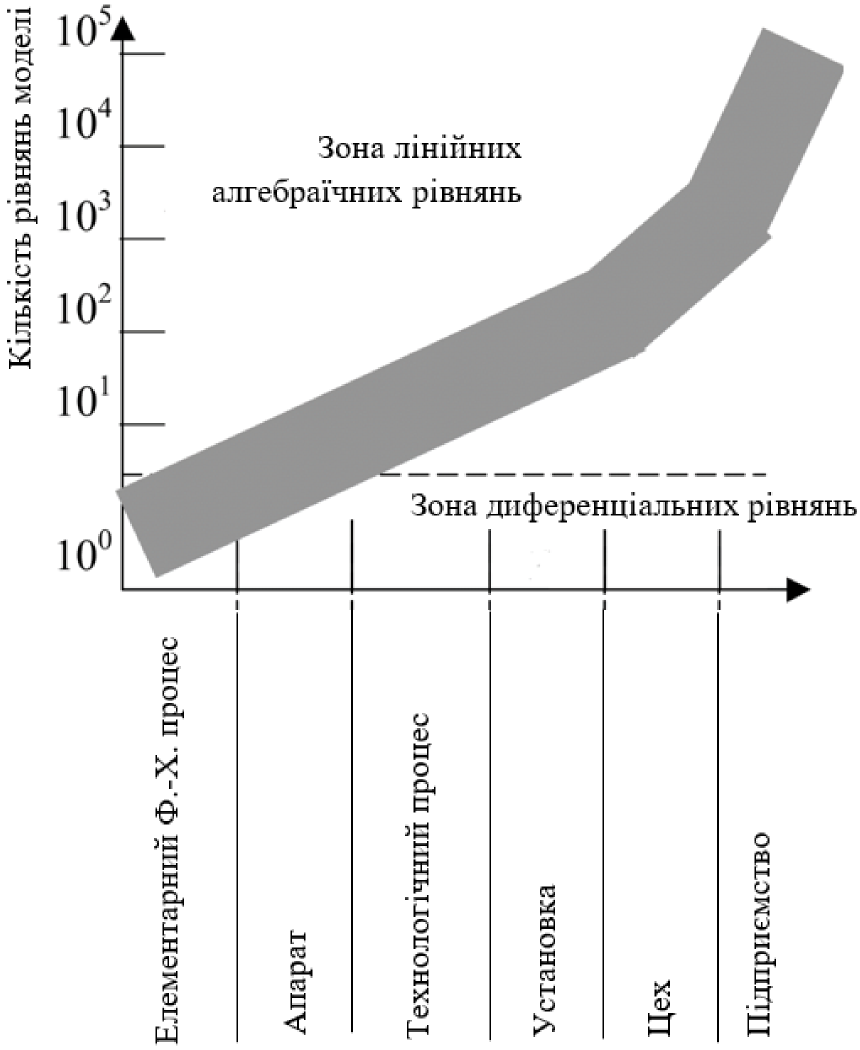


Рисунок 1.1 – Діаграма зв’язку кількості рівнянь математичної моделі з масштабом об’єкту моделювання

3. Розв’язання рівнянь у частинних похідних

Для моделювання розподілу температури, концентрації або тиску застосовуються:

- Метод кінцевих різниць – апроксимація похідних різницевими схемами (явні, неявні).
- Метод кінцевих елементів – розбиття області на елементи та побудова апроксимаційних функцій (використовується в ANSYS, COMSOL).
- Метод кінцевих об’ємів – застосовується насамперед в системах CFD для обчислення потоків.

CFD (Computational Fluid Dynamics) – це галузь обчислювальної механіки, яка займається моделюванням та аналізом руху рідин і газів (флюїдів), а також пов’язаних із цим процесів тепло- та масообміну, хімічних реакцій тощо, за допомогою чисельних методів та комп’ютерних технологій.

Розшифрування та сутність абревіатури: C – Computational (обчислювальний): використання комп’ютерних алгоритмів і чисельних методів. F – Fluid: рідини та гази, які розглядаються як неперервне середовище. D – Dynamics (динаміка): вивчення руху та взаємодії потоків.

Комп’ютерні системи CFD дають змогу:

- розраховувати розподіл швидкостей, тиску, температури у потоках;
- аналізувати турбулентні потоки, хімічні реакції, теплопередачу, масоперенесення;
- моделювати поведінку рідин і газів у складних геометріях (трубопроводи, апарати, реактори).

4. Методи оптимізації

Хімічні технології вимагають оптимізації енерговитрат, виходу продукту, безпеки. Використовуються:

- Градієнтні методи – метод найшвидшого спуску, Ньютона.
- Методи без похідних – Нелдера–Міда для складних моделей.
- Еволюційні алгоритми – генетичні алгоритми, NSGA-II для багатокритеріальної оптимізації.

5. Методи статистичного моделювання. Метод Монте-Карло – імітація випадкових процесів, наприклад, у полімеризації або сорбції.

Чисельні методи реалізуються у вигляді алгоритмів, що включають:

- дискретизацію (розбиття безперервної області на кінцеву кількість точок або кроків часу);
- ітераційний процес для уточнення розв'язку;
- оцінку похибки та умову зупинки (критерій збіжності).

Для зручності реалізації чисельних методів у хімічній інженерії широко застосовують MathCAD, MATLAB, Python, де доступні вбудовані функції інтегрування, оптимізації та симуляції.

Програмне забезпечення для моделювання

Моделювання хіміко-технологічних процесів неможливе без застосування сучасного програмного забезпечення, яке дозволяє виконувати як аналітичні, так і чисельні розрахунки, будувати математичні моделі, проводити оптимізацію та аналіз систем. Програмні засоби для моделювання можна умовно поділити на кілька груп: системи комп'ютерної математики, пакети процесного моделювання, CFD-системи для моделювання гідродинаміки та теплообміну, а також мультіфізичні платформи.

1. Системи комп'ютерної математики

Ці середовища дозволяють працювати з аналітичними й чисельними моделями, розв'язувати системи рівнянь, інтегрувати, диференціювати та будувати графіки. Найбільш популярні:

– MathCAD – одне з базових середовищ для інженерів.

  Програма MathCAD дозволяє реалізовувати повний цикл розв'язання інженерних задач – від постановки математичної моделі до аналізу отриманих даних.

  Основною перевагою MathCAD є можливість роботи з математичними формулами у звичному для інженера вигляді. Програма підтримує натуральний запис рівнянь, що робить її особливо зручною для навчального процесу. Студенти можуть бачити вирази саме так, як вони подані в підручниках чи на лекціях, без необхідності перекодування їх у спеціальний синтаксис, як це робиться в мовах програмування. Такий підхід зменшує кількість помилок і прискорює процес розрахунків.

MathCAD забезпечує широкі можливості для роботи з диференціальними рівняннями, системами рівнянь, задачами оптимізації, апроксимації та інтерполяції експериментальних даних, що є критично важливим у хімічній технології. Наприклад, при моделюванні процесів теплопередачі, масообміну або кінетики хімічних реакцій, часто виникає необхідність у чисельному інтегруванні або розв’язанні нелінійних рівнянь. MathCAD має вбудовані функції для реалізації методів Рунге–Кутти, Ньютона та інших алгоритмів.

Однією з унікальних особливостей MathCAD є можливість поєднання аналітичних розрахунків із чисельними методами. Наприклад, інженер може спочатку вивести аналітичну залежність для певного показника, а потім дослідити її поведінку на конкретному діапазоні параметрів за допомогою чисельних розрахунків та побудови графіків. Це дозволяє швидко перевірити правильність аналітичних висновків і оцінити вплив змінних на результат.

MathCAD забезпечує графічну інтерпретацію даних у вигляді дво- та тривимірних графіків, що є важливим для розуміння складних процесів. Наприклад, при аналізі швидкості хімічної реакції як функції концентрацій реагентів можна побудувати 3D-графік, який демонструє вплив кількох факторів одночасно. Це не лише полегшує аналіз результатів, але й формує у студентів інженерне мислення, орієнтоване на пошук оптимальних рішень.

MathCAD широко застосовується не лише у навчанні, але й у промисловій практиці. Багато компаній використовують його для проектування апаратів, розрахунку технологічних схем, аналізу енергетичних балансів. Знання MathCAD підвищує конкурентоспроможність випускника на ринку праці, оскільки він володіє універсальним інструментом для вирішення реальних інженерних задач.

У порівнянні з ручними обчисленнями або класичними табличними процесорами (наприклад, Excel), MathCAD забезпечує більш високу точність, гнучкість у зміні параметрів та автоматичне оновлення результатів при зміні вихідних даних. Це знижує ймовірність помилок і дозволяє швидко виконувати багатоваріантні розрахунки, що особливо важливо при моделюванні складних хімічних процесів.:

– MATLAB – потужне середовище чисельних обчислень, що включає розширення (Toolbox) для моделювання хімічних процесів, оптимізації та контролю. MATLAB використовується для складних обчислень, аналізу великих масивів даних, реалізації алгоритмів оптимізації.
– Maple, Wolfram Mathematica – орієнтовані на символьні обчислення та аналітичні розв'язки, що важливо на етапі розробки теоретичних моделей.

2. Пакети для процесного моделювання

Це спеціалізовані програми для створення та оптимізації технологічних схем хімічних виробництв:

– Aspen Plus – моделювання хіміко-технологічних процесів, розрахунок фазових рівноваг, енергетичних балансів, підбір обладнання, економічний аналіз виробництва.
– Aspen HYSYS (Honeywell UniSim Design) – розрахунок, оптимізація, проєктування процесів та систем, переважно у нафтохімічній та газопереробній галузях.
– CHEMCAD – моделювання апаратів, тепло- та масообмінних процесів, економічний аналіз виробництва.

Ці системи використовуються для створення PFD (Process Flow Diagram) і виконання what-if аналізу для прогнозування поведінки технологічних схем при зміні параметрів.

3. CFD (Computational Fluid Dynamics)-системи

Для моделювання руху рідин, газів і процесів теплообміну застосовують, зокрема:

– ANSYS Fluent – чисельний аналіз гідродинаміки, теплообміну, масообміну.
– OpenFOAM – відкрите середовище для CFD-розрахунків.

4. «Мультіфізичні» платформи

До таких належить, зокрема, COMSOL Multiphysics – універсальне середовище для розв’язання задач, що поєднують кілька фізичних полів: теплопровідність, дифузію, хімічні реакції, електропровідність.

5. Мови програмування та універсальні інструменти

– Python (бібліотеки NumPy, SciPy, SymPy, Matplotlib) – для створення власних чисельних алгоритмів і візуалізації.
– MS Excel з надбудовами (Solver) – для простих інженерних розрахунків і оптимізації.

Вибір програмного забезпечення залежить від завдань:

– для навчання та базових розрахунків – Mathcad;
– для оптимізації промислових схем – Aspen Plus;
– для аналізу гідродинаміки – ANSYS Fluent;
– для комплексних мультифізичних моделей – COMSOL.

Важливість сучасних технологій моделювання

Сучасні технології моделювання відіграють ключову роль у розвитку хімічної інженерії, оскільки вони забезпечують аналітичні інструменти для дослідження, проектування, оптимізації та управління складними хіміко-технологічними процесами. У сучасному виробництві, яке орієнтоване на високу ефективність, безпеку та екологічність, використання моделей і чисельних методів стає обов’язковою умовою конкурентоспроможності.

Моделювання дозволяє інженеру передбачити поведінку системи без необхідності проведення великої кількості дорогих та тривалих експериментів. Це особливо важливо при розробці нових процесів або оптимізації існуючих. Наприклад, під час масштабування процесу з лабораторних умов до промислових моделей можна використовувати для передбачення впливу параметрів (температури, тиску, концентрації реагентів) на ефективність процесу.

Сучасні моделі забезпечують:

– Зниження витрат на експерименти – за рахунок імітаційного тестування сценаріїв.
– Підвищення безпеки – можливість прогнозування аварійних ситуацій та відпрацювання заходів реагування.
– Оптимізацію процесів – вибір оптимальних параметрів для досягнення максимальної продуктивності та енергоефективності.
– Прогнозування якості продукції – контроль параметрів для отримання продукту із заданими властивостями.

Основні напрями використання моделювання

У хімічній інженерії сучасні технології моделювання застосовуються у таких напрямах:

– Процесне моделювання – створення математичних моделей для теплообміну, масообміну, хімічних реакцій, гідродинаміки потоків.
– Оптимізація технологічних схем – мінімізація витрат енергії та сировини, зменшення викидів.
– Імітаційне моделювання – дослідження поведінки складних систем при зміні зовнішніх і внутрішніх факторів.
– Моделювання апаратів – проектування реакторів, теплообмінників, колон.
– Розрахунок екологічних показників – аналіз впливу процесу на довкілля.

Сучасні технології моделювання поєднують:

– Математичні методи – розв'язання систем диференційних рівнянь, лінійної та нелінійної алгебри, оптимізаційних задач.
– Обчислювальні алгоритми – чисельні методи інтегрування, методи кінцевих елементів, статистичне моделювання (метод Монте-Карло).
– Програмне забезпечення – спеціалізовані пакети для хіміко-технологічних розрахунків.

Використання комп'ютерного моделювання забезпечує:

– Високу точність розрахунків завдяки можливості враховувати складні залежності та багатофакторні взаємодії.
– Економію часу і ресурсів у порівнянні з експериментальними дослідженнями.
– Можливість роботи з великими даними та аналізу сценаріїв у режимі реального часу.
– Інтеграцію з іншими технологіями, такими як системи керування виробництвом, цифрові двійники, хмарні сервіси.

Моделювання стало основою концепції «Індустрія 4.0» та цифрових двійників у хімічній промисловості. Це дозволяє створювати віртуальні копії виробничих об'єктів і процесів для прогнозування їх поведінки, оптимізації та автоматизації. Завдяки цьому підвищується ефективність і стійкість виробництва, зменшуються ризики аварій та екологічні наслідки.

У перспективі розвиток штучного інтелекту, машинного навчання та хмарних обчислень ще більше розширить можливості моделювання, забезпечуючи адаптивні моделі, здатні самонавчатися та працювати в реальному часі.

2 Організація обчислень та комп’ютерне моделювання в середовищі MathCAD

Найбільш поширені версії MathCAD

MathCAD – це інтегроване середовище, математичний пакет, призначений для виконання фундаментально-математичних, інженерних і наукових розрахунків.

Пакет включає наступні функціональні компоненти: систему меню різних рівнів вкладеності; контекстно-залежні меню; набір панелей інструментів; текстовий редактор; редактор формул; редактор графіків (включаючи тривимірні); обчислювальну систему, що полегшує виконання математичних операцій, як у чисельному, так і в аналітичному (символьному) вигляді; набір шаблонів, що забезпечують зручну й ефективну систему введення інформації; систему перевірки правильності написання математичних виразів; вбудовану систему виведення результатів розрахунку.

Версії MathCAD в зв'язку із поступовим зростанням функціонального інструментарію, мають обмежену зворотну сумісність документів із попередніми версіями, але можуть у більшості випадків відкривати документи, створені у старих версіях.

В сучасній практиці, в залежності від вимог до програми та наявних обчислювальних потужностей найчастіше використовуються версії MathCAD 15.M050, MathCAD Prime 5-11.

На відміну від MathCAD 15 (і попередніх версій), у MathCAD Prime розробниками принципово змінено інтерфейс користувача. Тепер він виконаний у вигляді стрічок (ribbons), робочий документ представлено у вигляді аркушів, як у текстових редакторах.

Файли Mathcad Prime зберігаються у форматі .mcdx, але різні версії програми мають різний рівень сумісності. Важливо розуміти, що повної «сумісності вниз» у Mathcad Prime немає, тобто новіші версії можуть відкривати файли старіших версій, але навпаки — не завжди.

Найновіша нині версія MathCAD – MathCAD Prime 11.0, була представлена у квітні 2025 року.

Сумісність вгору (upward compatibility) — нова версія відкриває файли старіших версій без проблем.

Сумісність вниз (downward compatibility) — стара версія може відкрити файли, створені в новішій версії. У Mathcad Prime ця можливість обмежена або відсутня.

Mathcad Prime 1–6: не мали функції експорту у старіші версії.

Mathcad Prime 7: підтримує лише власний формат, але може відкрити файли з Prime 1–6.

Mathcad Prime 8: у перших релізах була можливість зберегти у форматі Prime 7 (через «Save As»).

Mathcad Prime 9–11: не підтримує «Save As» у старішу версію. Файл, створений у Prime 9, відкривається тільки у Prime 9 або новішій.

Головні елементи інтерфейсу MathCAD

Після запуску системи MathCAD на екрані з'являється вікно програми. Програма MathCAD Prime поєднує традиційний функціонал попередніх версій MathCAD та сучасне компонування інтерфейсу (рис. 2.1), базується на використанні стрічки (ribbon) як у Microsoft Office (починаючи з версії 2007).

Кнопка ***PTC MathCAD Prime*** міститься в рядку заголовка і містить такі елементи:

- Створити (New), Відкрити (Open), Зберегти (Save), Зберегти як (Save As), Закрити (Close) – команди для роботи з файлами.
- Друк (Print) – команда для друку поточного документа.

- Опції (Options) – відкриває діалогове вікно Опції PTC MathCAD (PTC MathCAD Options) та надає доступ до вкладок Ліцензія (License) та Опції (Options).
- Про програму (About) – відкриває діалогове вікно Про програму PTC MathCAD Prime (About PTC MathCAD Prime) з інформацією про продукт, версію, мовне налаштування та посилання на документ із захисту авторського права.
- Вихід (Exit) – вихід із PTC MathCAD Prime, якщо не потрібне збереження жодного з відкритих документів. Інакше відкривається вікно запиту з опцією, яка дозволяє зберегти або не зберігати кожний незбережений документ.
- Нещодавно використовувані документи (Recently Used Worksheets) – список останніх документів, що використовуються.

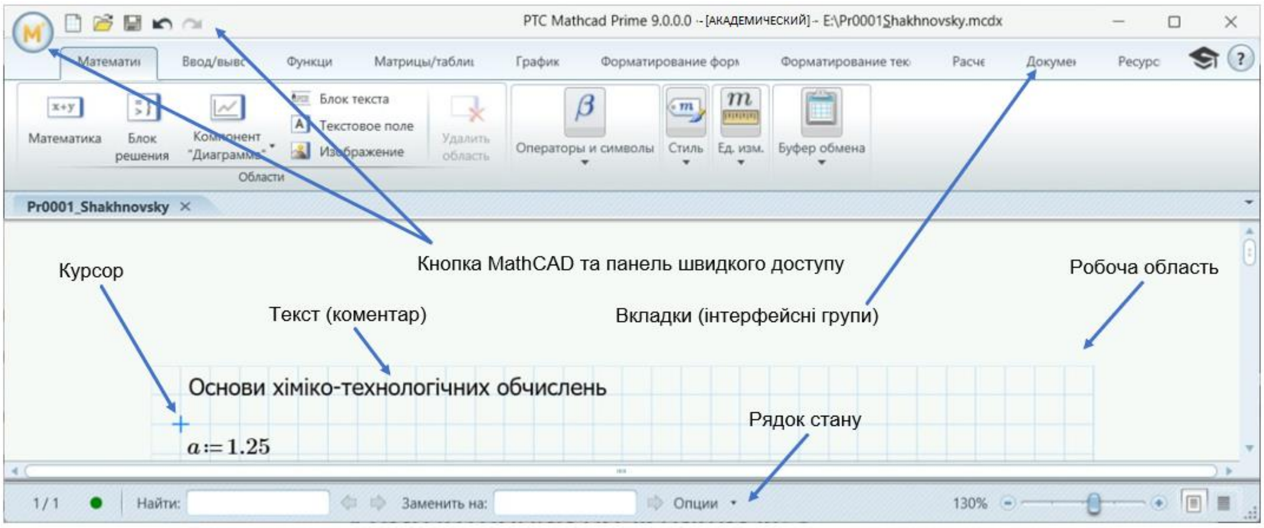
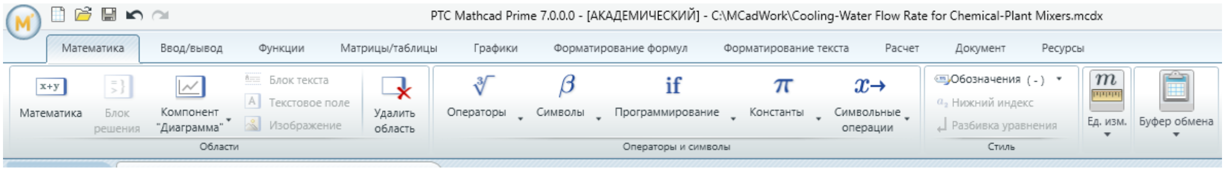


Рисунок 2.1 – Інтерфейс програми MathCAD Prime

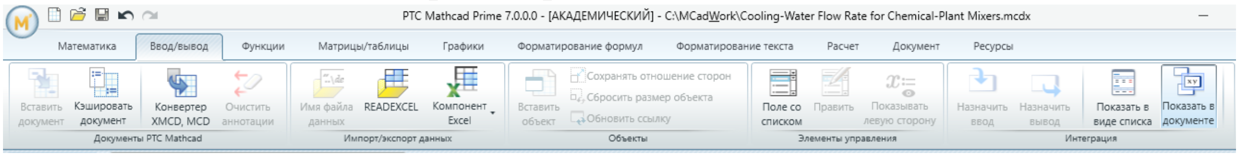
Стрічка, як і в інших сучасних програмах, складається з вкладок (інтерфейсних груп), на яких згруповані відповідні команди. На вкладках Стрічки відображаються кнопки, призначені для виконання тих чи інших команд, причому багато кнопок зібрані в контекстно-залежні меню.

MathCAD Prime містить такі вкладки:

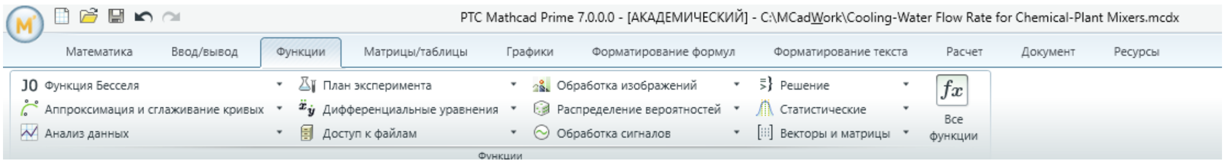
– Математика (Math);



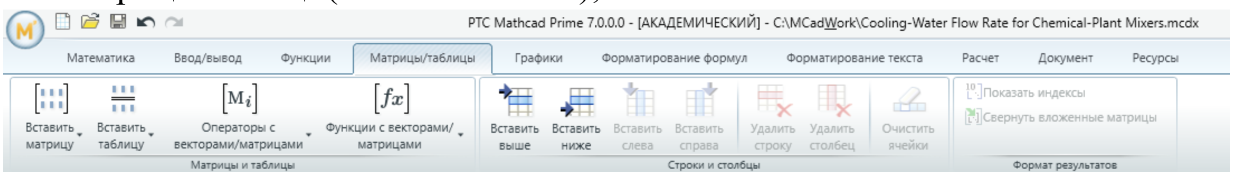
– Введення/виведення (Input/Output);



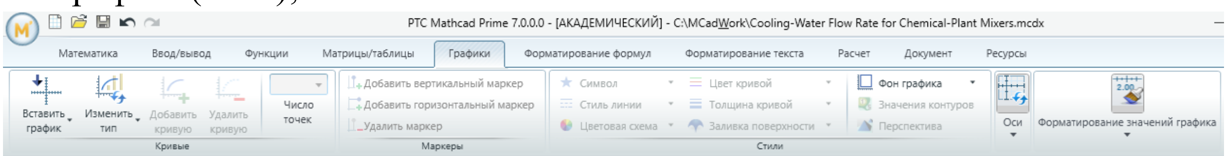
– Функції (Functions);



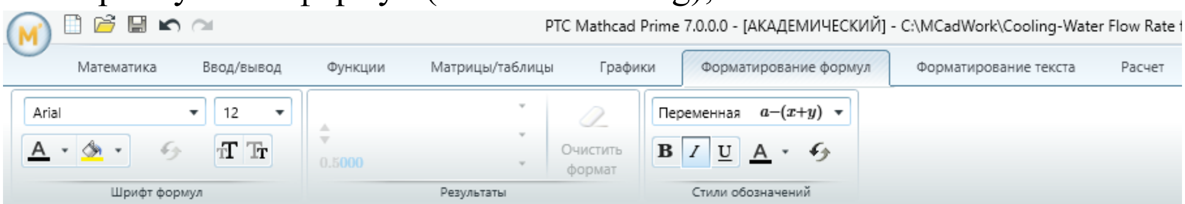
– Матриці/таблиці (Matrices/Tables);



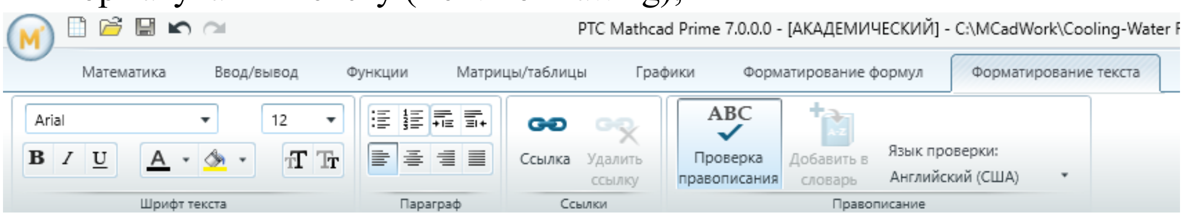
– Графіки (Plots);



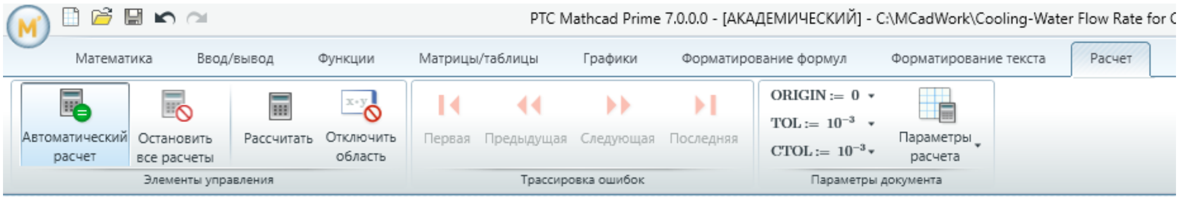
– Форматування формул (Math Formatting);



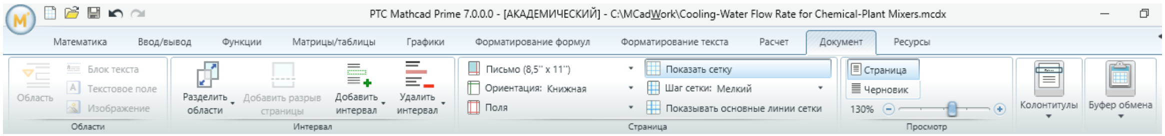
– Форматування тексту (Text Formatting);



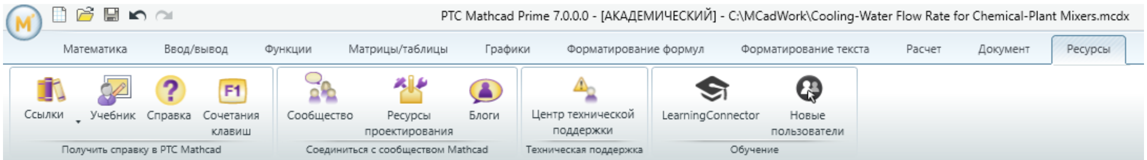
– Розрахунок (Calculation);



– Документ (Document);



– Ресурси (Resources)



Стрічку можна приховати, залишивши на екрані одні вкладки (що грають роль заголовків меню). Для цього слід клацнути правою кнопкою миші десь в області Стрічки і вибрати в контекстному меню команду Згорнути стрічку. Аналогічно для повторного розгортання Стрічки достатньо в тому ж меню вибрати команду Розгорнути стрічку.

Ще один характерний елемент стрічкового інтерфейсу – панель швидкого доступу, призначена для швидкого здійснення найбільш частих операцій. За замовчуванням вона містить кілька кнопок, але може бути доповнена іншими командами. Щоб додати нову кнопку на панель швидкого доступу:

1. Відкрийте на Стрічці інтерфейсну групу, що містить потрібну кнопку.

2. Викличте з області кнопки контекстне меню.

3.Оберіть пункт Додати до панелі швидкого доступу. У результаті нова кнопка з'явиться на панелі швидкого доступу

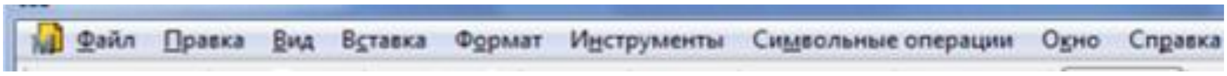
Щоб приховати кнопку з панелі швидкого доступу, достатньо викликати з області цієї кнопки контекстне меню та вибрати команду Видалити з панелі швидкого доступу.

Розглянемо також елементи вікна Mathcad попередніх версій (до версії 15 включно).

Mathcad попередніх версій має ієрархічну систему меню, що складається з головного меню і системи спадаючих, спливаючих і контекстно-залежних меню (підменю).

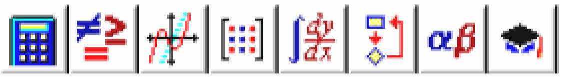
- **Головне меню**

Головне меню – це набір пунктів для виклику спадаючих меню, розташований у другому рядку робочого столу системи.

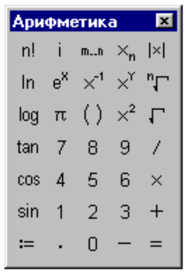


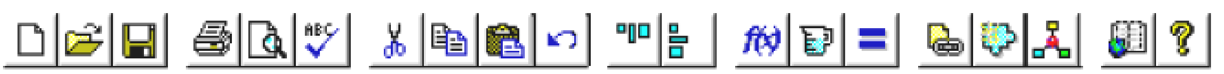
- **Панелі інструментів**

Панелі інструментів значною мірою дублюють команди головного меню.



Математична панель (Math) надає можливість швидкого введення математичних операторів. При натисканні кнопок на панелі ви одержите палітри (підпорядковані панелі інструментів) для вибору конкретних операторів. При натисканні на символ відповідного оператора на панелі інструментів він переноситься у ваш робочий аркуш.

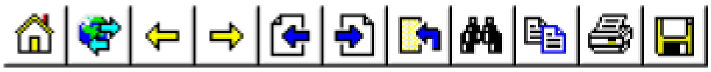




Стандартна панель інструментів (Standard) надає можливість швидкого виконання багатьох схожих для більшості програм процедур, таких як відкриття нового або існуючого робочого аркушу, його збереження та друкування, редагування, перевірка правопису тощо.

Панель форматування (Formattaing) дозволяє здійснювати оформлення робочого аркуша системи MathCAD, зокрема, обирати шрифти для тексту та математичних виразів або стилів.

Панель навігації в електронній книзі MathCAD з'являється завжди, коли відкривається електронна книга.



Ви можете знайти відповідний розділ або тему, що цікавлять вас, переміститися до попереднього, наступного аркушів книги.

Принципи обчислень у MathCAD

Робота з системою MathCAD зводиться до підготовки у вікні редагування завдання на обчислення та встановлення форматів для їх результатів. У даному вікні математичні вирази вводяться у вигляді, у якому зазвичай записуються інженерами на аркуші паперу.

MathCAD інтегрує у собі три редактори: формульний, текстовий та графічний. Текстові блоки дозволяють створювати у документі пояснення, тобто робити документ MathCAD більш зрозумілим. Для введення тексту необхідно клацнути в документі місце вставки тексту, яке позначиться синім перехрестям. Текст можна вставити у вигляді:

– текстового блоку, який розтягується по ширині сторінки, та її область не перекривається з іншими областями документа;

– текстового поля із змінною шириною, яке можна переміщати за документом, і може перекриватися іншими областями.

Обидві команди знаходяться на вкладці Математика (Math) у групі Області (Regions). Після введення або вставки через буфер обміну тексту натисніть клавішу Enter для переміщення на новий рядок або натисніть за межами текстової області для припинення набору тексту. Якщо змінити налаштування стилю шрифту та абзацу, задані на вкладці Форматування (Formatting) у групах Шрифт (Font) та Параграф (Paragraph), то вони будуть застосовуватися або до виділених, або до всіх нових текстових областей у документі.

Для вставки в документ зображення необхідно вибрати команду на вкладці Математика у групі Області та вибрати зображення у вікні Відкрити.

Клацнувши в документі будь-де, можна ввести математичні вирази (цифри, літери та математичні оператори).

В результаті створюється область формул. Для введення формули також можна вибрати команду Математика на вкладці Математика в групі Області.

Перш ніж, починати роботу з MathCAD необхідно пам'ятати такі правила:

1. Усі обчислення, оголошення змінних проводяться в строго визначеному порядку, за правилом *зверху вниз і зліва направо*.

2. Набір формул проводиться за тими же принципами, як і в редакторі формул Microsoft Word, тобто за допомогою шаблонів формул.

Алфавіт системи MathCAD містить: рядкові і прописні латинські і грецькі літери; арабські цифри від 0 до 9; системні змінні; оператори; імена вбудованих функцій; спецзнаки; рядкові та прописні букви кирилиці (при роботі з русифікованими документами); укрупнені елементи мови: типи даних, оператори, функції користувача і керуючі структури. До типів даних відносяться числові константи, звичайні і системні змінні, масиви (вектори і матриці) і дані файлового типу.

Числові константи задаються за допомогою арабських цифр, десяткового дробу (<u>а не комою</u>) і знака – (мінус). Наприклад: 123 – цілочисельна десяткова константа;

12.3 – десяткова константа з дробовою частиною;

12.3 * 10.5 – десяткова константа з мантиси (12.3) і порядком 5.

Знак множення * при виведенні числа на екран змінюється на звичну математикам точку, а операція піднесення до ступеня (із застосуванням спецзнаку ^) відображається шляхом подання порядку у вигляді надрядкового елемента.

Більшість обчислень система виконує як з дійсними, так і з комплексними числами, які зазвичай подаються в алгебраїчному вигляді:

$$Z = ReZ + i * ImZ$$

або

$$Z = ReZ + j * ImZ$$

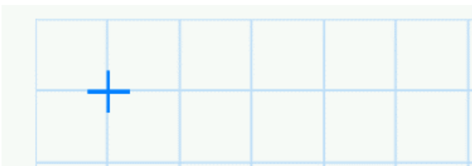
Тут ReZ – дійсна частина комплексного числа Z, ImZ – його уявна частина, а символи i чи j позначають уявну одиницю, тобто корінь квадратний з -1. Таке уявлення характерно і для системи MathCAD (за винятком того, що знак рівності не є знак присвоювання). Перед використанням будь-яких операцій з комплексними числами, корисно спочатку визначити i або j як уявну одиницю (тобто присвоїти їм значення квадратного кореня з -1).

Імена змінних (ідентифікатори) в системі MathCAD можуть мати практично будь-яку довжину, і в них можуть входити будь-які латинські і грецькі літери, а також цифри. Однак починатися вони можуть тільки з букви, наприклад: x, xl, alpha, X, coordinate. Крім того, ідентифікатор не повинен містити пробілів.

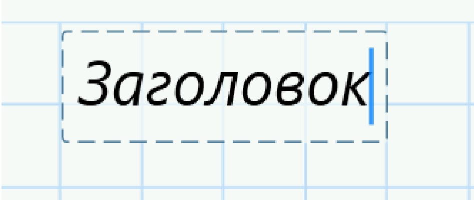
Слід пам’ятати, що рядкові і прописні літери в іменах різняться! Ім'я не повинно збігатися з іменами вбудованих функцій.

Для набору + і – використовуються відповідні клавіші клавіатури. Розподіл набирається клавішею /.

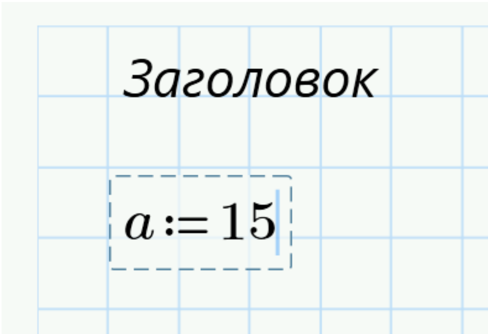
Після входу в MathCAD на екрані з'являється блакитний хрестик (візир), який позначає місце, де проводитиметься запис.



При введенні будь-якого символу на місці хрестика з'являється пунктирна рамка – шаблон.



При переході до наступного запису перший шаблон зникає. Якщо підвести курсор до запису без шаблону і натиснути на клавішу миші, шаблон з'явиться знову.



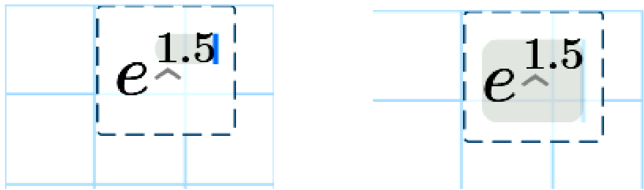
Видалення записів в MathCAD можна робити декількома способами.

1. Для видалення одного або кількох виразів одночасно можна, натиснувши ліву кнопку миші, обвести весь вираз, що видаляються, і потім натиснути **del** або **backspace**.

2. Для видалення одного виразу можна, підвівши курсор до виразу, активізувати його і, пересунувши куточок в крайнє праве положення, натиснути **del**.

3. Для видалення одного виразу можна також, підвівши до нього курсор, активізувати його, а потім виділити («зачорнити») і натиснути **del**.

Велику роль при наборі чисел відіграє розташування курсора та області виділення (на рис. 2.2 – вертикальна риска та «виділення»). Наприклад, якщо курсор та виділення розташовані, як показано на рис. 2.2, а, то будь-які знаки операцій (додавання, віднімання і т.п.) будуть додаватися до показника ступеня; якщо ж курсор та виділення розташовані, як показано на рис. 2.2, б, то вони будуть додаватися до *всього виразу*.



а) б)

Рисунок 2.2 – Розташування курсора

В інтегрованому середовищі MathCAD є низка вбудованих математичних і системних сталих (табл. 2.1 та табл. 2.2).

Таблиця 2.1 – Деякі математичні константи, що використовуються в системі MathCAD

Стала	**Призначення**
∞	Системна нескінченність (10^{307})
π	Число π (3.14...)
e	Основа натурального логарифма (2.71...)
i	Уявна одиниця
j	Уявна одиниця
%	Відсоток (0.01)

Введення і редагування виразу

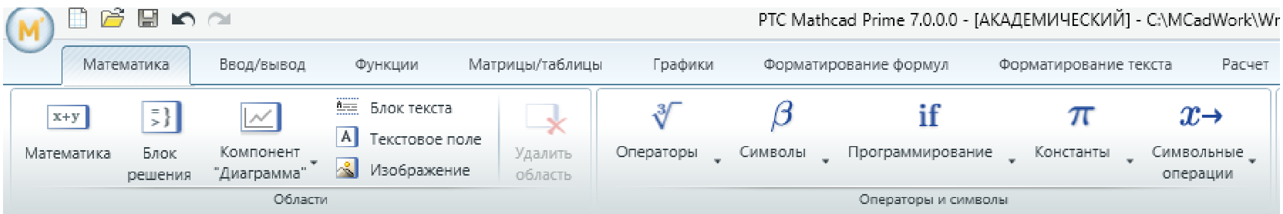
Хоча MathCAD призначений для складних математичних обчислень, його легко можна використовувати і *для найпростіших розрахунків*.

Для того, щоб виконати найпростіші розрахунки, можна ввести символи, константи та знаки операцій з клавіатури, а також скористатися інструментами групи Оператори та символи вкладки Математика (у старших версіях програми – на панелі меню «Математика» натиснути лівою клавішею миші на піктограму калькулятора, після чого з’явиться панель арифметичних інструментів).

Таблиця 2.2 – Деякі системні сталі, що використовуються в системі MathCAD

Стала	**Значення**	**Призначення**
TOL	0.001	Похибка чисельних методів
ORIGIN	0	Нижня границя індексації
PRNPRECISION	4	Кількість значимих цифр у функції
PRNCOLWIDTH	8	Кількість десяткових знаків у стовпчику

Для того, щоб виконати найпростіші розрахунки, можна ввести символи, константи та знаки операцій з клавіатури, а також скористатися інструментами групи Оператори та символи вкладки Математика (у старших версіях програми – на панелі меню «Математика» натиснути лівою клавішею миші на піктограму калькулятора, після чого з’явиться панель арифметичних інструментів).

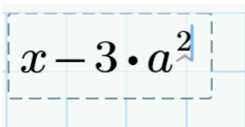


Принципи роботи з формулами в MathCAD подібні принципам роботи редактора формул у Microsoft Word, однак, існує особливість: після того, як формула була набрана і після неї був поставлений знак обчислення (=), система MathCAD відразу ж обчислює вираз.

Ключовим кроком в редагуванні виразів в MathCAD є розміщення відповідної частини виразу у виділяючу рамку.

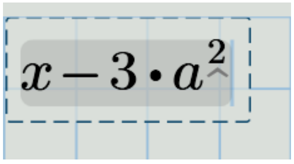
Наприклад, треба ввести вираз $\dfrac{x-3\cdot a^2}{-4+\sqrt{y+1}}$

• Надрукуйте **x-3*a^2.**

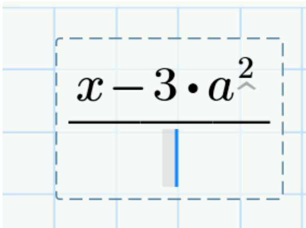


До цих пір правила старшинства дозволяли нам просто друкувати символи підряд, далі так продовжувати не можна, оскільки маркер введення знаходиться на 2, і тільки 2 потрапить у чисельник, якщо натиснути /. Оскільки потрібно, щоб вираз **x-3*a^2** цілком став чисельником, слід використовувати виділяючу виділення.

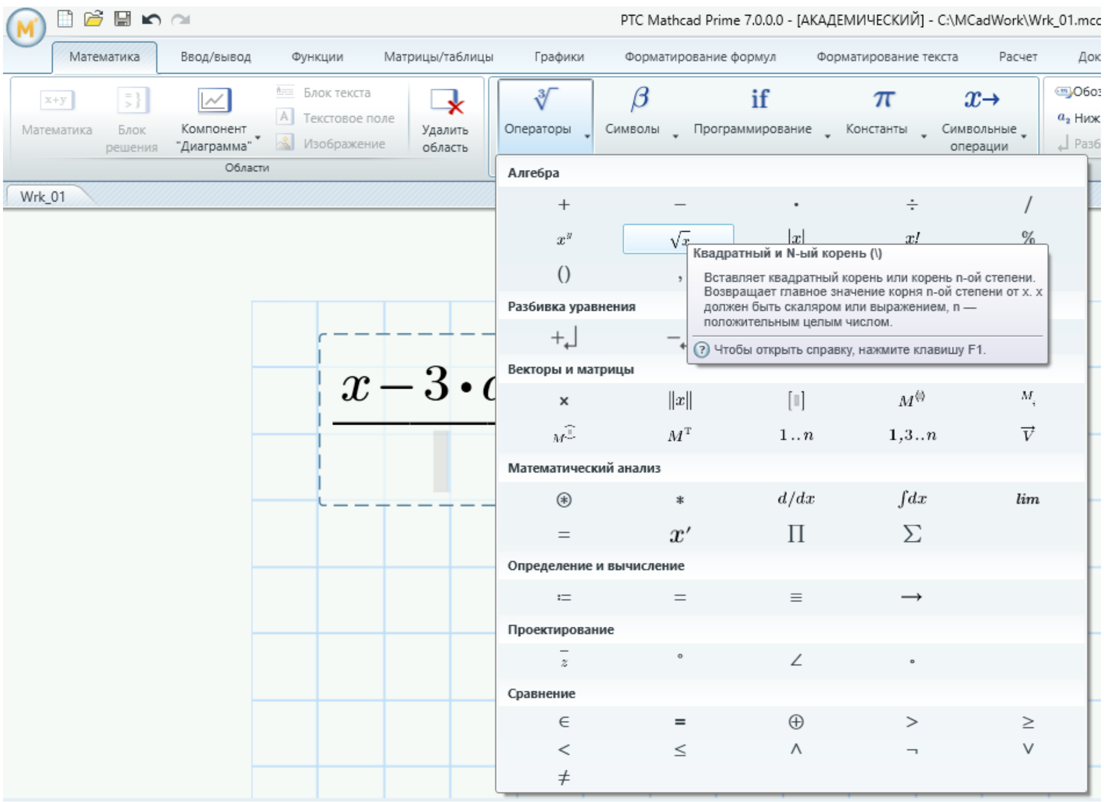
• Щоб виділити весь вираз **x-3*a^2**, послідовно натисніть **[Space]**. Натисніть **[Space]** ще три рази, щоб рамка охопила вираз цілком.



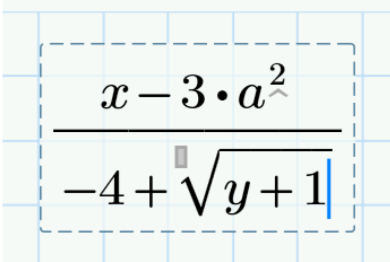
• Натисніть /, щоб створити дріб.



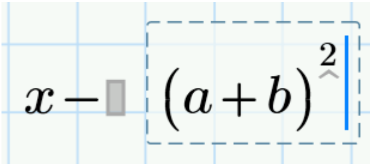
• Тепер надрукуйте -4+ і клацніть на кнопці, поміченій √ у меню Операторы групи Операторы и символы вкладки Математика.



Потім надрукуйте під радикалом **y+1,** щоб завершити введення знаменника.



Примітка: Будь-який введений вираз (формула, рівняння тощо) повинний записуватися **всередині одного шаблону**. Нижче наведено вираз, уведений з помилкою: усередині першого шаблону знаходиться незакінчений вираз «x-»:



Розрахунок за формулою.

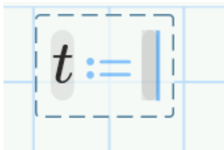
Щоб визначити будь-яку змінну, необхідно:

- Надрукувати ім'я змінної, яку необхідно визначити
- Надрукувати двокрапку, щоб ввести *символ присвоєння*.
- Надрукувати значення, що присвоюється змінній. Значення може бути числом або поєднанням чисел і змінних.

Наприклад, для того, щоб визначити змінні ***t*** і ***acc*** потрібно:

❑ Ввести ***t*:** (символ **t** супроводжується двокрапкою). MathCAD показує символ присвоєння **:=**

Для визначення змінних та функцій використовується **оператор «присвоєння»** (позначається двома символами ":=") , який можна вибрати на вкладці Математика в панелі Оператори або ввести з клавіатури, натиснувши клавішу «двокрапка». Праворуч від знака визначення може стояти або числове значення, або вираз, що обчислюється.



❑ Надрукувати, наприклад, 10 в порожньому полі, щоб завершити визначення t.

$$t := 10$$

❑ Аналогічні дії виконати для змінної ***acc***

$$t := 10$$

$$acc := -9.8$$

Тепер коли змінні визначені, їх значення можуть бути використані в інших виразах.

❑ Помістити покажчик миші на декілька рядків нижче за два попередні визначення

❑ Надрукувати, наприклад, acc/2 * t^2[Space]

❑ Натиснути знак =.

Оператор Обчислення (позначається символом "=") повертає результат обчислення виразу, що знаходиться зліва від нього

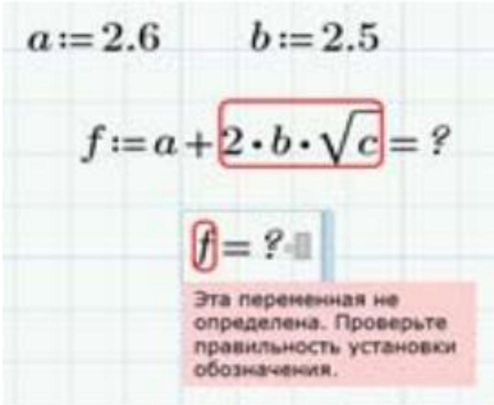
$$t := 10$$

$$acc := -9.8$$

$$\frac{acc}{2} \cdot t^2 = -490$$

Примітка. Оператор присвоєння не повертає значення змінної на відміну оператора обчислення «=». Проте в одному рядку можна поєднувати спочатку оператор присвоєння, а потім праворуч від обчислюваного виразу – оператор обчислення.

Слід також пам'ятати, що змінні, які входять у вираз, що обчислюється, повинні бути раніше визначені (або вище, або лівіше у вікні редагування). Інакше з'явиться повідомлення про помилку. Наприклад:



Задавання діапазону значень

Можна присвоїти змінній діапазон значень, наприклад, всі цілі числа від 0 до 10. Якщо у виразі присутня така змінна (дискретний аргумент), MathCAD обчислює вираз стільки разів, скільки значень містить дискретний аргумент.

Оператор діапазону може бути введений у документ, натиснувши двічі на клавішу «точка», а також вибраний на вкладці стрічки Математика в групі Оператори та символи на панелі Оператори.

Для завдання найпростішого варіанта діапазону (крок змінюється на одиницю) використовується така конструкція:

Ім'я змінної діапазону := Nпоч .. Nкін

де Nпоч – початкове значення змінної;

Nкін - кінцеве значення змінної.

Якщо Nпоч < Nкін, то крок зміни змінної дорівнює +1, а якщо Nпоч > Nкін, то крок зміни змінної дорівнює –1.

Крок зміни можна задати будь-яким, використовуючи іншу конструкцію завдання таких змінних:

Ім'я змінної діапазону := Nпоч, Nслід .. Nкін,

де Nслід – наступне за Nпоч значення змінної. Крок у разі дорівнює Nслід – Nпоч.

Приклад. Для того, щоб обчислити вираз для діапазону значень, спочатку слід визначити дискретний аргумент. Наприклад треба обчислити результати для діапазону значень ***t*** від **10** до **20** з кроком **1**. Це робиться таким чином:

- ❑ Присвоїти початкове значення ***t***. Покажчик введення повинен з'явиться услід за **10**, як показано на малюнку.

$$t := 10$$

- ❑ Надрукувати кб11ому та **11**. Ця дія визначає наступне число в діапазоні як **11**.

$$t := 10, 11 ..$$

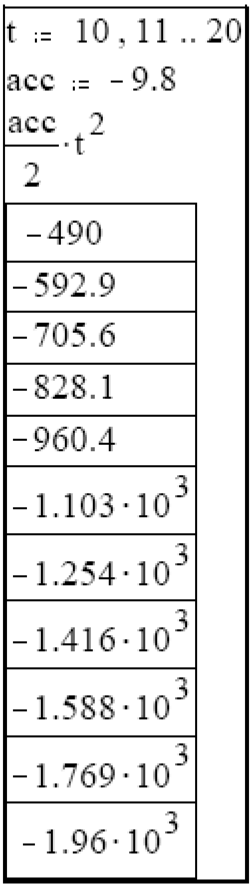
- ❑ Надрукуйте після двох крапок **20**, щоб визначити останнє число в діапазоні як **20**. (у старших версіях MathCAD необхідно увести з клавіатури символ крапки з комою, що інтерпретується як два символи точки підряд).

$$t := 10, 11 .. 20$$

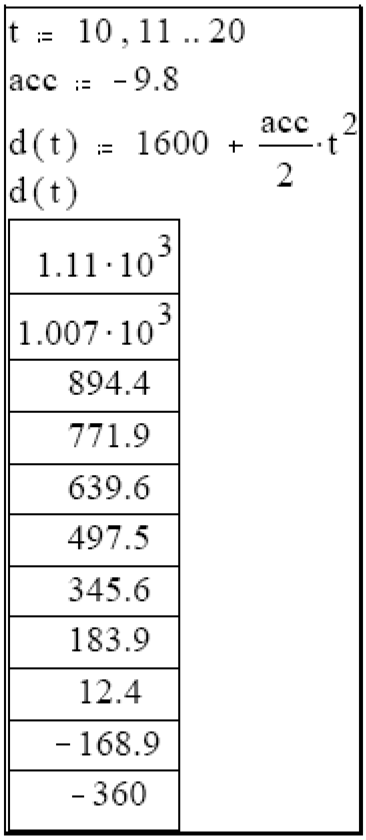
- ❑ Після клацання мишею поза рівністю для ***t*** MathCAD обчислює його для всіх значень ***t***, що входять в діапазон (в нашому випадку – одинадцять значень). Вони відображаються в таблиці, як показано на рис. 2.3-а (старші версії MathCAD) та 2.3-в (MathCAD Prime).

Розрахунок суми, добутку

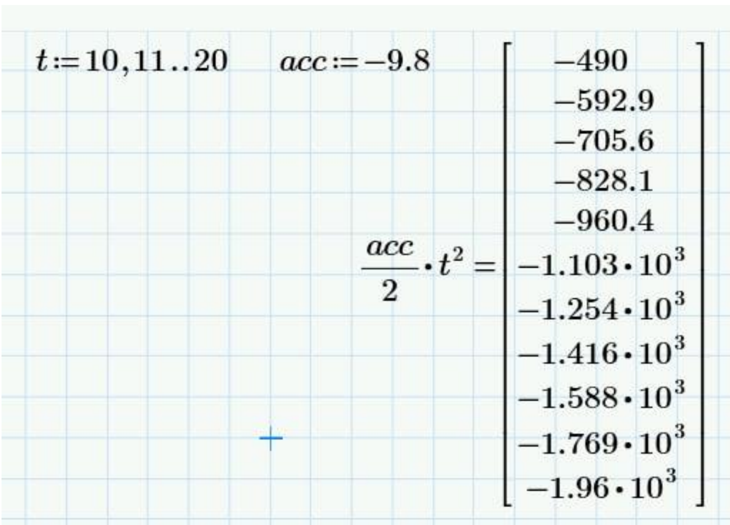
Для знаходження суми, твори членів ряду слід на вкладці стрічки Математика групи Оператори та символи (Operators and Symbols) розкрити панель Оператори, знайти відповідну піктограму та натиснути ліву клавішу миші. В результаті на поле документа виведеться шаблон цієї операції (рис. 2.4.)



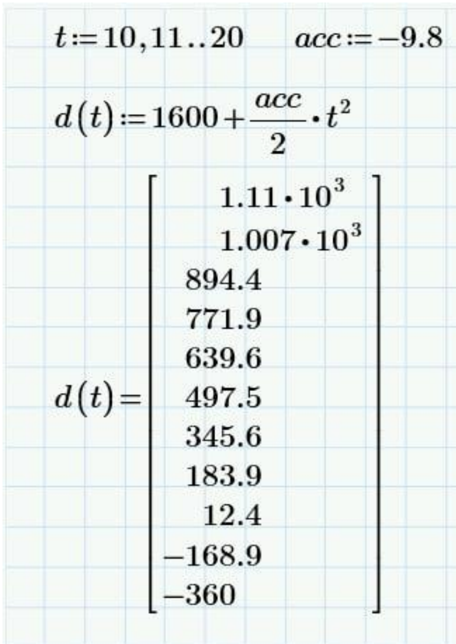
а



б



в



г

Рисунок 2.3 – Приклади використання діапазонів

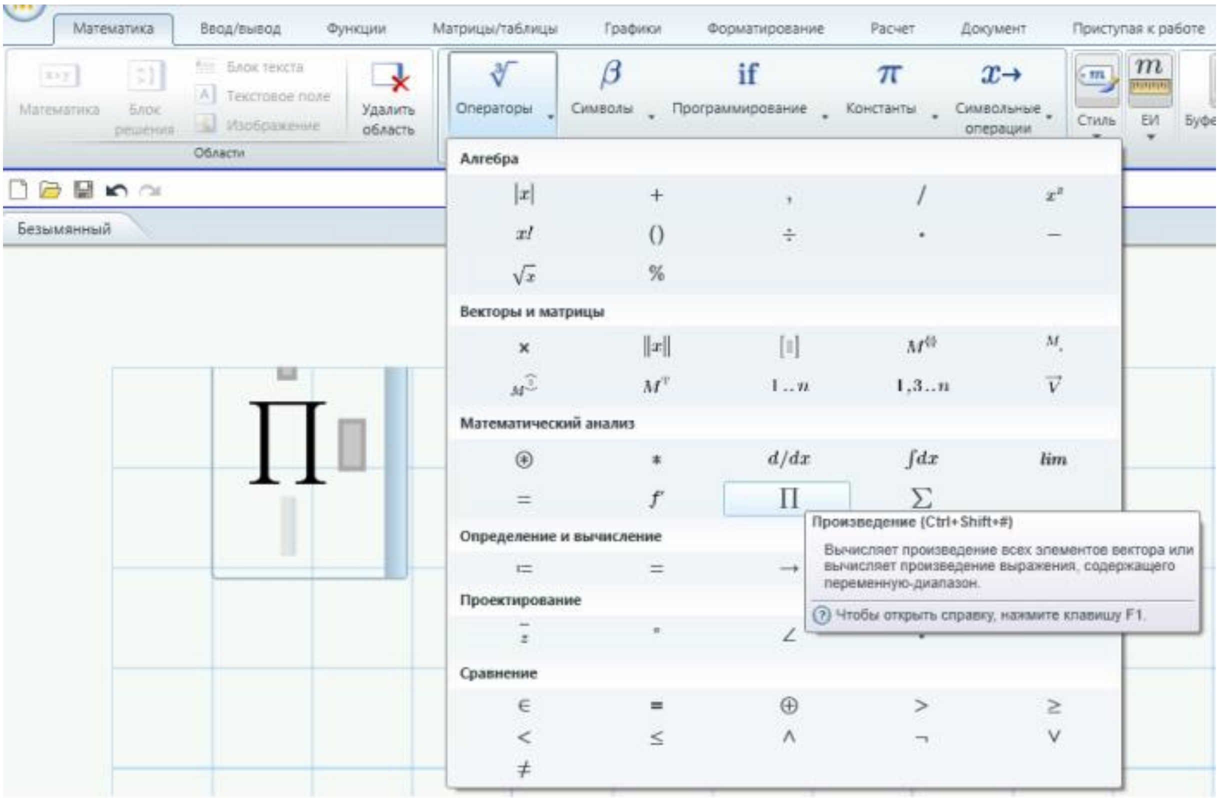


Рисунок 2.4 – Вставлення у документ місцезаповнювача добутку

Після заповнення відповідних позицій шаблону та введення символу «=» отримаємо результат, наприклад:

$$\prod_{x=1}^{20}\left(\sin(x)\cdot\frac{e}{x}\right)=-2.628\cdot 10^{-15}$$

У прикладі вище константа e =2,7 у чисельнику дробу вводиться зі списку Константи (Constants) групи Оператори та символи на вкладці Математика.

Визначення функції користувача

- ❑ Почніть визначення функції користувача **d(t)**, надрукувавши **d(t):**
- ❑ Надрукуйте вираз **1600+acc/2 [Space] *t^2 [Enter]**

$$d(t):=1600+\frac{acc}{2}\cdot t^2$$

Визначення користувацької функції завершене. Ім'я функції – **d**, аргумент функції – **t**. Можна використовувати цю функцію, щоб обчислити значення виразу – її правій частині – для довільних значень **t**. Для цього потрібно підставити замість **t** відповідне число.

Наприклад: $d(12.5) = 834.375$

Тобто, щоб обчислити значення **d** для значення **t = 12,5** досить надрукувати **d(12.5) =**.

MathCAD поверне відповідне значення, як показано на малюнку вище.

Щоб обчислити функцію для кожного значення **t** з діапазону, визначеного раніше, досить клацнути мишею внизу інших рівнянь і ввести **d(t) =**.

MathCAD виведе таблицю значень – рис. 2.3, б (старші версії MathCAD) та 2.3, г (MathCAD Prime). Слід зауважити, що перші два із значень записані в *експоненціальному* вигляді.

Виконання символьних обчислень у середовищі MathCAD

Розрахунки у MathCAD можуть здійснюватися як числовій формі (результатом є число або сукупність чисел), так і в аналітичній формі (результатом є сукупність змінних, математична залежність, тощо).

Система MathCAD забезпечена спеціальним процесором для виконання аналітичних (символьних) обчислень. Він дозволяє вирішити багато задач математики аналітично, без застосування чисельних методів і, відповідно, без похибок обчислень. В результаті, MathCAD дозволяє проводити широкий спектр аналітичних перетворень, таких як алгебраїчні і матричні операції, основні дії математичного аналізу і розрахунки інтегральних перетворень функцій.

Вирази у символьних розрахунках обчислюються за допомогою оператора аналітичного перетворення (→) замість оператора чисельного обчислення (=). Стандартні оператори MathCAD та багато вбудованих функцій можна обчислювати аналітично.

Використання аналітичних перетворень виразів має такі переваги.

• На відміну від числових обчислень, символьні операції дозволяють обчислювати вирази без присвоєння значень змінним.

• Символьні результати можуть виявляти взаємозв'язки змінних, які завжди очевидні з чисельних результатів.

• Символьні розрахунки вільні від помилок округлення, притаманних чисельним розрахункам.

Для символьних обчислень у MathCAD Prime призначено меню Символьные операции групи Операторы и символы вкладки Математика (рис. 2.5):

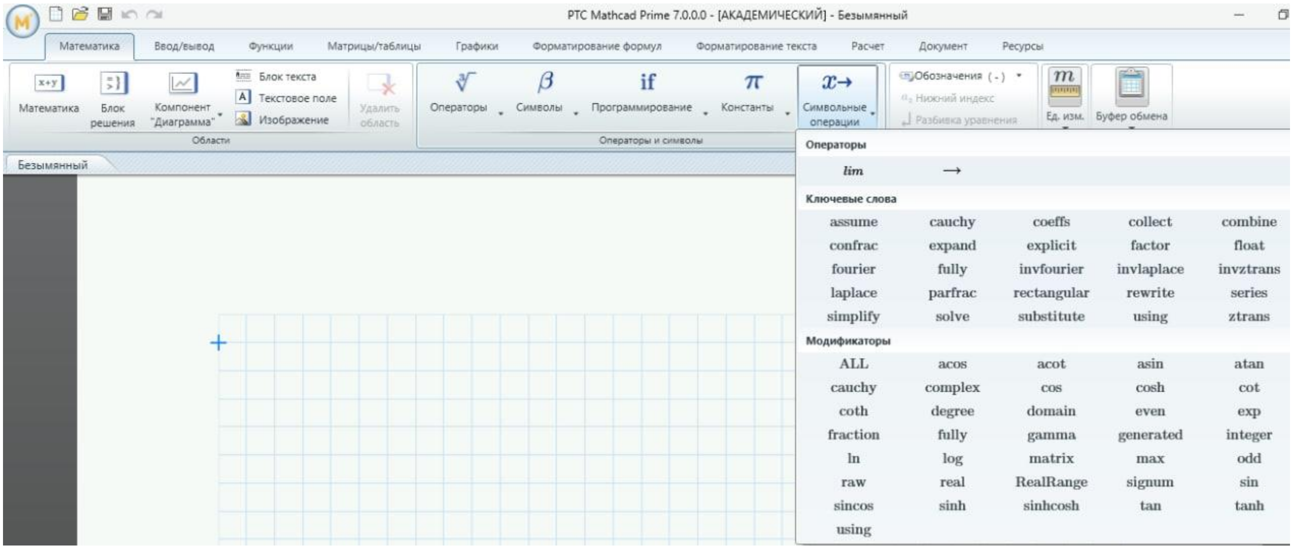
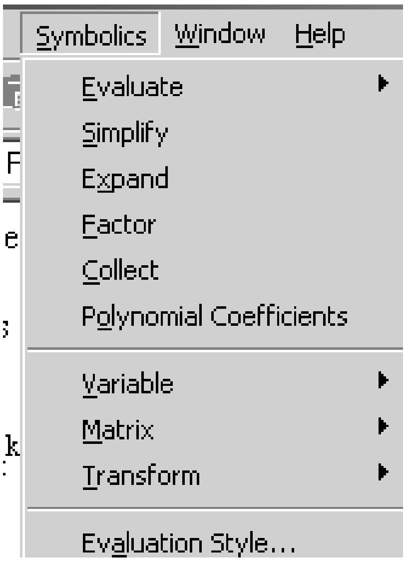


Рисунок 2.5 – Меню **Символьные операции** групи **Операторы и символы** вкладки **Математика** (MathCAD Prime)



Для символьних обчислень у старших версіях MathCAD призначено меню **Symbolics** (Символіка), що об'єднує математичні операції, які MathCAD вміє виконувати аналітично. Також (паралельно, в якості іншого способу) для символьних обчислень у старших версіях MathCAD можуть бути використані ынструменти, придатні для чисельних обчислень (наприклад, панелі **Calculator, Evaluation** і т. д.), і спеціальна математична панель інструментів, яку можна викликати на екран натисненням кнопки **Symbolic Keyword Toolbar** (Панель символіки) на панелі **Math** (Математика). На панелі **Symbolic** (Символіка) знаходяться кнопки, що відповідають специфічним командам символьних перетворень. Наприклад, таким як розкладання виразу на множники, розрахунок перетворення Лапласа і іншими операціями, які в MathCAD не можна проводити чисельно, і для яких, відповідно, не передбачені вбудовані функції.

Щоб символьні операції виконувалися, процесору необхідно вказати, над яким виразом ці операції повинні вироблятися, тобто треба виділити вираз.

Для ряду операцій варто не тільки вказати вираз, до якого вони ставляться, але й намітити змінну, щодо якої виконується та або інша символьна операція. Сам вираз в такому випадку не виділяється.

Таким чином, для виконання операцій із символьним процесором потрібно виділити об'єкт (цілий вираз або його частину).

1. Виконання обчислень з використанням меню (версії MathCAD 15 і раніші)

Якщо в документі є виділений вираз, то з ним можна виконувати різні операції, представлені нижче:

- **Evaluate** (Розрахунки) – перетворити вираз з вибором виду перетворень із підменю;
- **Simplify** (Спростити) – спростити виділений вираз із виконанням таких операцій, як скорочення подібних що складають, приведення до загального знаменника, використання основних тригонометричних тотожностей і т буд.;
- **Expand** (Розширити) – розкрити вираз Наприклад, для (X + Y) (X - Y) одержуємо $X^2 - Y^2$;
- **Factor** (Фактор) – розкласти число або вираз на множники. Наприклад, $X^2 - Y^2$ дасть (X + Y) (X - Y);
- **Collect** (Подібні) – звести подібні, зібрати доданки, подібні до виділеного виразу, що може бути окремої змінної або функцією зі своїм аргументом (результатом буде вираз, поліноміальне щодо обраного виразу);
- **Polynomial Coefficients** (Коефіцієнти полінома) – по заданої змінній знайти коефіцієнти полінома, що апроксимує вираз, у якому ця змінна використана.

Розглянемо приклад: розкладання на співмножники виразу sin(2-x).

Перший спосіб (за допомогою меню).

1. Введіть вираз sin (2-x).

2. Виділіть потрібну для перетворення частину виразу (у даному випадку – вираз цілком).

3. Виберіть у головному меню пункти **Symbolics / Expand** (Символіка / Розкласти).

Після цього результат розкладання виразу з'явиться трохи нижче у вигляді ще одного рядка.

$$\sin(2\cdot x)$$

$$2\cdot\sin(x)\cdot\cos(x)$$

Для ряду операцій треба знати, щодо якої змінної вони виконуються. У цьому випадку необхідно виділити змінну, установивши на ній маркер уведення. Після цього стають доступними наступні операції підміню **Змінні**:

- **Обчислити** – знайти значення виділеної змінної, при яких утримуючий її вираз стає рівним нулю;
- **Заміна** – замінити зазначену змінну вмістом буфера обміну;
- **Диференціали** – диференціювати вираз, що містить виділену змінну, по цієї змінній (інші змінні розглядаються як константи);
- **Інтеграція** – інтегрувати весь вираз, що містить змінну, по цій змінній;
- **Розкласти на складові...** – знайти кілька членів розкладання виразу в ряд Тейлора щодо виділеної змінної;
- **Перетворення в частки** – розкласти на елементарні дроби вираз, що розглядається як раціональний дріб щодо виділеної змінної.

Операції з виділеними матрицями (Matrix). Операції з виділеними матрицями представлені позицією підміню **Матриці**, що має своє підменю з наступними операціями:

- **Транспонування** – одержати транспоновану матрицю;
- **Інвертування** – створити зворотну матрицю;
- **Визначник** – обчислити детермінант (визначник) матриці.

Результати символьних операцій з матрицями часто виявляються надмірно громіздкими й тому погано доступні для огляду.

2. Виконання обчислень з використанням оператора символьного виводу

Оператор символьного обчислення (symbolic evaluation) позначається символом → і в більшості випадків застосовується так само, як оператор чисельного виводу, однак внутрішня різниця між дією цих двох операторів величезна. Якщо чисельний вивід – це розрахунок за формулами і чисельним методам, то символьний вивід – результат роботи системи штучного інтелекту, вбудованого в MathCAD, який має назву символьного процесора.

Етапи символьного обчислення математичного виразу:

1. Введіть потрібний вираз.

2. Введіть оператор символьного виводу за допомогою меню Символьные операции групи Операторы и символы вкладки Математика – рис. 2.5 (у старших версіях програми – за допомогою панелі інструментів Symbolic – рис. 2.2).

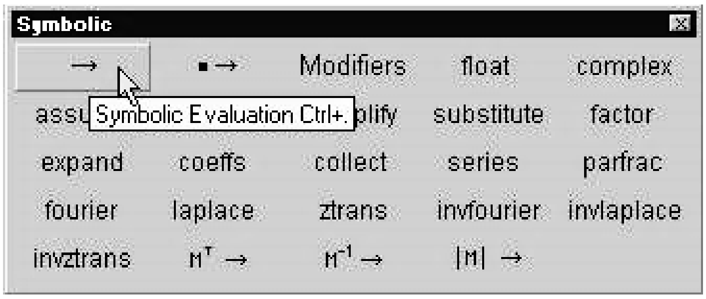


Рисунок 2.2 – Панель інструментів Symbolic (MathCAD 15 та раніше)

3. Після цього праворуч від символу оператора символьного виводу з'явиться аналітичне значення виразу, як показано нижче на прикладах.

$$B \cdot \sin(a\sin(C \cdot x)) \to B \cdot C \cdot x$$

$$x^2 \cdot \cos(x+y) \to x^2 \cdot \cos(x+y)$$

$$f(x) := x^2 \cdot \cos(x+5)$$
$$f(3) = -1.31$$
$$f(3) \to 9 \cdot \cos(8)$$

$$f(x) := x^2 \cdot \cos(x+5)$$
$$a := f(3)$$
$$a \to 9 \cdot \cos(8)$$
$$a = -1.31$$

Слід пам‘ятати, що для символьного виводу не потрібно попередньо визначати змінні, які входять в ліву частину виразу. Якщо ж змінним були привласнені раніше деякі значення, символьний процесор просто підставить їх у спрощену формулу і видасть результат з урахуванням цих значень.

Виконання алгебраїчних перетворень

Нижче описана послідовність виконання алгебраїчних перетворень за допомогою оператора символьного виводу.

Примітка. Слід зауважити, що **вигляд операторів (а дуже часто – також результат)** символьних перетворень у версіях MathCAD 15 і старших **суттєво відрізняється** від перетворень у MathCAD Prime.

Спрощення виразів (Simplify)

Спрощення виразів – найбільш часто застосовувана операція. Символьний процесор MathCAD прагне так перетворити вираз, щоб вираз набув більш просту форму. При цьому використовуються різні арифметичні формули, зведення подібних доданків, тригонометричні тотожності, перерахунок зворотніх функцій, тощо.

Для спрощення виразу за допомогою оператора символьного виводу використовуйте ключове слово **simplify**

Версії MathCAD 15 і старші:

$$(x + 2\cdot y)\cdot z - z^2\cdot(x + 5\cdot y) + z \text{ simplify } \rightarrow z\cdot x + 2\cdot z\cdot y - z^2\cdot x - 5\cdot z^2\cdot y + z$$

MathCAD Prime:

$$(x+2\cdot y)\cdot z-z^2\cdot(x+5\cdot y)+z \xrightarrow{simplify} -(z\cdot((5\cdot y+x)\cdot z-(2\cdot y+x+1)))$$

Слід пам'ятати, що якщо деяким змінним, що входять у вираз, раніше були присвоєні деякі значення, то вони будуть підставлені в нього при виконанні символьного виводу

Версії MathCAD 15 і старші:

$$x := 10 \qquad y := 1$$

$$(x + 2 \cdot y) \cdot z - z^2 \cdot (x + 5 \cdot y) + z \text{ simplify } \rightarrow 13 \cdot z - 15 \cdot z^2$$

MathCAD Prime:

$$x := 10 \qquad y := 1$$

$$(x+2 \cdot y) \cdot z - z^2 \cdot (x+5 \cdot y) + z \xrightarrow{simplify} -(z \cdot (15 \cdot z - 13))$$

Спрощення виразів, що містять числа, проводиться по-різному, в залежності від наявності в числах десяткової точки. Якщо вона є, то виконується безпосереднє обчислення виразу

$$\sqrt{3} \xrightarrow{simplify} \sqrt{3}$$

$$\sqrt{3.01} \xrightarrow{simplify} 1.7349351572897472412$$

Розкладання виразів (Expand)

Операція символьного розкладання, або розширення, виразів протилежна за змістом операції спрощення. В ході розкладання розкриваються всі суми і добутки, а складні тригонометричні залежності розкладаються за допомогою тригонометричних тотожностей. Розкладання виразів проводиться шляхом використання разом з оператором символьного виводу ключового слова expand

Версії MathCAD 15 і старші:

$$\cos(2 \cdot x) \text{ expand}, x \rightarrow 2 \cdot \cos(x)^2 - 1$$

MathCAD Prime:

$$\cos(2 \cdot x) \xrightarrow{expand} 2 \cdot \cos(x)^2 - 1$$

Розкладання на множники (Factor)

Розкладання виразів на прості множники проводиться використанням разом з оператором символьного виводу ключового слова **factor**

Версії MathCAD 15 і старші:

$$x^4 - 16 \text{ factor } \rightarrow (x-2)\cdot(x+2)\cdot\left(x^2+4\right)$$

$$28 \text{ factor } \rightarrow 2^2\cdot 7$$

MathCAD Prime:

$$x^4 - 16 \xrightarrow{factor} (x-2)\cdot(x+2)\cdot\left(x^2+4\right)$$

$$28 \xrightarrow{factor} 2^2\cdot 7$$

Ця операція дозволяє розкласти поліноми на добуток простіших поліномів, а цілі числа – на прості співмножники.

Зведення подібних доданків (Collect)

Щоб звести подібні доданки за допомогою оператора символьного виводу

1. Введіть вираз.
2. Натисніть кнопку **Collect**.
3. Введіть в місцезаповнювач після вставленого ключового слова **collect** ім'я змінної, щодо якої потрібно привести подібні доданки (наприклад, змінна x).
4. Введіть оператор символьного виводу ->.
5. Натисніть клавішу <Enter>.

Версії MathCAD 15 і старші:

$$(x+2\cdot y)\cdot z - z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y) + z \text{ collect}, x \rightarrow \left(z - z^2\cdot y\right)\cdot x + 2\cdot z\cdot y - 5\cdot z^2\cdot y^2 + z$$

$$(x+2\cdot y)\cdot z - z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y) + z \text{ collect}, y \rightarrow -5\cdot z^2\cdot y^2 + \left(2\cdot z - z^2\cdot x\right)\cdot y + z\cdot x + z$$

$$(x+2\cdot y)\cdot z - z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y) + z \text{ collect}, x, y, z \rightarrow \left(z - z^2\cdot y\right)\cdot x + 2\cdot z\cdot y - 5\cdot z^2\cdot y^2 + z$$

MathCAD Prime:

$$(x+2\cdot y)\cdot z-z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y)+z\xrightarrow{collect,x}\left(-\left(y\cdot z^2\right)+z\right)\cdot x+\left((2\cdot y+1)\cdot z-5\cdot y^2\cdot z^2\right)$$

$$(x+2\cdot y)\cdot z-z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y)+z\xrightarrow{collect,y}(x+1)\cdot z+\left(\left(2\cdot z-x\cdot z^2\right)\cdot y-5\cdot z^2\cdot y^2\right)$$

$$(x+2\cdot y)\cdot z-z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y)+z\xrightarrow{collect,x,y,z}x\cdot\left(y\cdot-z^2+z\right)+\left(y\cdot 2\cdot z+z-y^2\cdot 5\cdot z^2\right)$$

Як можна бачити, після ключового слова **collect** допускається завдання кількох змінних через кому. В цьому випадку приведення подібних доданків виконується послідовно по всім змінним.

Коефіцієнти полінома (Polynomial Coefficients)

Якщо вираз є поліномом щодо деякої змінної x, заданим не в звичайному вигляді a0 + aix + a2x2 + ..., а як добуток інших, простіших поліномів, то коефіцієнти a0, ai, a2 ... легко визначаються символьним процесором MathCAD. Коефіцієнти самі можуть бути функціями (часом, досить складними) інших змінних.

Щоб обчислити поліноміальні коефіцієнти за допомогою оператора символьного виводу:

1. Введіть вираз.
2. Натисніть кнопку **Coeffs**.
3. Введіть в місцезаповнювач після вставленого ключового слова **coeffs** аргумент полінома.
4. Введіть оператор символьного виводу ->.
5. Натисніть клавішу <Enter>.

Приклад. Розрахунок коефіцієнтів для різних аргументів:

Версії MathCAD 15 і старші:

$$(x+2\cdot y)\cdot z-z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y)+z \text{ coeffs}, z \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ x+2\cdot y+1 \\ -y\cdot x-5\cdot y^2 \end{pmatrix}$$

$$(x+2\cdot y)\cdot z-z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y)+z \text{ coeffs}, x \rightarrow \begin{pmatrix} 2\cdot z\cdot y-5\cdot z^2\cdot y^2+z \\ z-z^2\cdot y \end{pmatrix}$$

MathCAD Prime:

$$(x+2\cdot y)\cdot z-z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y)+z \xrightarrow{coeffs, z} \begin{bmatrix} 0 \\ 2\cdot y+x+1 \\ -\left(5\cdot y^2\right)-x\cdot y \end{bmatrix}$$

$$(x+2\cdot y)\cdot z-z^2\cdot y\cdot(x+5\cdot y)+z \xrightarrow{coeffs, x} \begin{bmatrix} -\left(5\cdot y^2\cdot z^2\right)+(2\cdot y+1)\cdot z \\ -\left(y\cdot z^2\right)+z \end{bmatrix}$$

Визначення коефіцієнтів можливе не тільки для окремих змінних, але для більш складних виразів, що входять в дану формулу в якості складової частини.

Версії MathCAD 15 і старші:

$$(x-4)\cdot(x-7)\cdot x+99 \text{ coeffs}, x \rightarrow \begin{pmatrix} 99 \\ 28 \\ -11 \\ 1 \end{pmatrix}$$

MathCAD Prime:

$$(x-4)\cdot(x-7)\cdot x+99 \xrightarrow{coeffs, x} \begin{bmatrix} 99 \\ 28 \\ -11 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Слід пам‘ятати, що <u>не всякий вираз піддається аналітичним перетворенням</u>. Якщо це так (через те, що задача зовсім не має аналітичного рішення, або якщо вона виявляється занадто складною для символьного процесора MathCAD), то як результат виводиться сам вираз.

$$\cos(2\cdot x)\xrightarrow{expand,\,x}2\cdot\cos(x)^2-1$$

$$\cos(x)\xrightarrow{expand,\,x}\cos(x)$$

Диференціювання та інтегрування

Операції диференціювання та інтегрування реалізована в MathCAD як у чисельній, так і в аналітичній формі та позначається за допомогою традиційного оператора, тобто відповідними математичними символами (подібно до складання або множення).

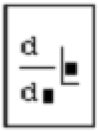
За допомогою MathCAD можна обчислювати похідні скалярних функцій будь-якої кількості аргументів, причому як функції, і аргументи можуть бути і дійсними, і комплексними. При цьому MathCAD дозволяє обчислювати як звичайну похідну, так і похідні вищих порядків, а також часткові похідні.

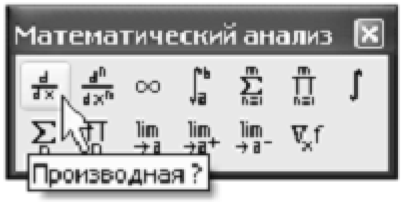
У MathCAD допускається обчислювати інтеграли від скалярних функцій у межах інтегрування, які також мають бути скалярними. Незважаючи на те, що межі інтегрування повинні бути дійсними, підінтегральна функція може мати і комплексні значення, тому значення інтеграла може бути комплексним.

Для того, щоб аналітично знайти похідну функції f(x) в MathCAD:

1. Задайте користувацьку функцію f(x).

2. Введіть оператор диференціювання натисканням кнопки Похідна (Derivative) у меню Операторы групи Операторы и символы вкладки Математика – рис. 2.3 (у старших версіях MathCAD – натисканням кнопки Похідна на панелі Математичний аналіз (Calculus)).





3. У місцезаповнювачах оператора диференціювання введіть функцію, що залежить від аргументу x, тобто f(x), і ім'я самого аргументу x.

4. Введіть оператор символьного виводу ->.

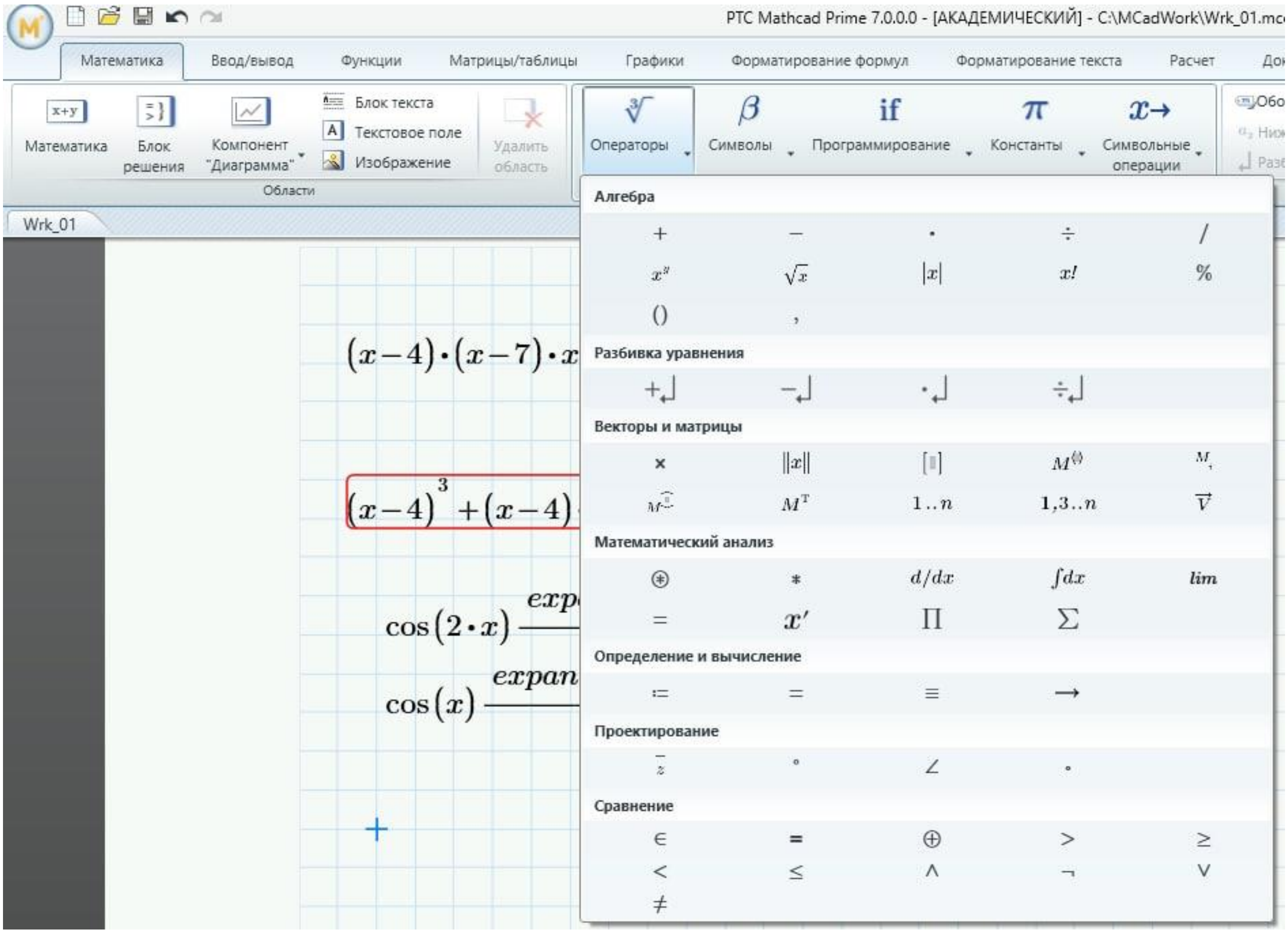


Рисунок 2.3 – Меню **Операторы** групи **Операторы и символы** вкладки **Математика** (MathCAD Prime)

Приклад:

$$f(x) := \cos(2 \cdot x) \cdot \ln(x)$$

$$\frac{d}{dx} f(x) \rightarrow -(2 \cdot \ln(x) \cdot \sin(2 \cdot x)) + \frac{\cos(2 \cdot x)}{x}$$

Примітка. Диференційована функція може залежати не тільки від аргументу x, але і від інших аргументів, наприклад f(x,y,z) і т. п. У цьому випадку диференціювання проводиться у такий самий спосіб, причому стає більш зрозумілою необхідність визначення змінної диференціювання (у нижньому місцезаповнювачі оператора диференціювання). Розрахунки похідних з різних аргументів (у разі говорять про приватних похідних), зрозуміло, будуть давати різні результати.

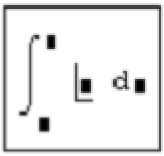
Якщо у робочій області задано значення аргументу, то це значення буде автоматично підставлено в аналітично розраховану похідну:

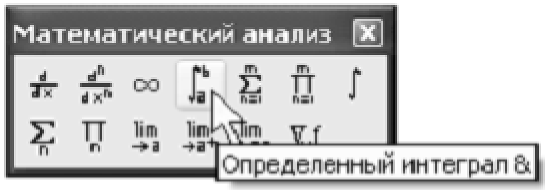
$$f(x) := \cos(2\cdot x)\cdot \ln(x)$$

$$x := \frac{3}{4}\pi$$

$$\frac{d}{dx}f(x) \rightarrow 2\cdot \ln\left(\frac{3\cdot \pi}{4}\right) = 1.714$$

Щоб обчислити інтеграл (невизначений чи визначений), слід вставити до документа знак інтегралу з меню Операторы групи Операторы и символы вкладки Математика – рис. 2.3 (у версіях MathCAD 15 та старших на панелі Математичний аналіз (Calculus) обираються окремо знаки визначеного або невизначеного інтеграла).





З'явиться символ інтеграла з кількома місцезаповнювачами, в які потрібно ввести нижній та верхній інтервали інтегрування, підінтегральну функцію та змінну інтегрування.

Щоб отримати результат інтегрування, слід ввести символ або чисельного обчислення.

Приклад обчислення у MathCAD деяких невизначених інтегралів:

$$\int \frac{x+1}{\sqrt{x}}\,dx \rightarrow \frac{2}{3}\cdot x^{\left(\frac{3}{2}\right)} + 2\cdot\sqrt{x}$$

F(x) := $\frac{2}{3}\cdot x^{\left(\frac{3}{2}\right)} + 2\cdot\sqrt{x}$

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{2}{3}\cdot x^{\left(\frac{3}{2}\right)}+2\cdot\sqrt{x}\right]\to\sqrt{x}+\frac{1}{\sqrt{x}}$$

Нижче наведений фрагмент робочого документа MathCAD з обчисленням визначеного інтеграла засобами символьної математики пакету по формулі Ньютона-Лейбніца.

F(x) := sin(x)·sin(2·x)·sin(3·x)

$$\int f(x)dx\to\frac{-1}{16}\cdot\cos(4\cdot x)-\frac{1}{8}\cdot\cos(2\cdot x)+\frac{1}{24}\cdot\cos(6\cdot x)$$

F(x) := $\frac{-1}{16}\cdot\cos(4\cdot x)-\frac{1}{8}\cdot\cos(2\cdot x)+\frac{1}{24}\cdot\cos(6\cdot x)$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} f(x)dx\to\frac{1}{6}$$

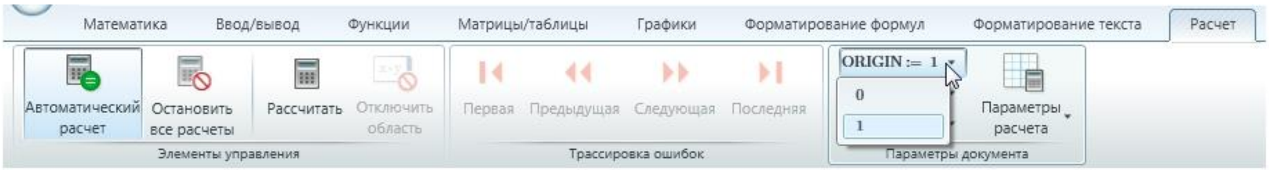
F($\frac{\pi}{2}$)-F(0)=0.167 $\frac{1}{6}$ =0.167

Деякі операції з матрицями у середовищі MathCAD

Операції, що виконуються над векторами і матрицями в MathCAD, можна розбити на дві групи. До першої групи відносяться операції, які застосовуються до окремих векторів та матриць, наприклад, транспонування матриці або обчислення зворотної матриці.

До другої групи належать операції, які виконуються над групою векторів та матриць. Як правило, вони виконуються над двома матрицями або матрицею та вектором. Наприклад, додавання, віднімання матриць, перемноження матриць або множення матриці та вектора. До векторів і матриць MathCAD, при виконанні операцій над ними, можуть пред'являтися певні вимоги відповідно до вимог класичної математики. Наприклад, при перемноженні матриці та вектора, кількість стовпців матриці має дорівнювати кількості рядків вектора.

За умовчуванням, нумерація рядків та стовпчиків у MathCAD починається з з номера «0». Існує можливість встановити довільний номер першого елемента матриці (вектора), наприклад, рівний «1». Це можна зробити за допомогою вкладки Розрахунок -> Параметри документа -> ORIGIN:



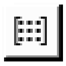
Також це значення "бази відліку індексів" можна встановити безпосередньо в документі, за допомогою системної константи ORIGIN:

$$\mathrm{ORIGIN} := 0 \qquad M := \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \qquad M_2 = 3$$

$$\mathrm{ORIGIN} := 1 \qquad M := \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \qquad M_2 = 2$$

Створення матриці

Оберіть меню Вставить матрицу з групи Матрицы и таблицы вкладки Матрицы / таблицы (рис. 2.6).



(у старших версіях MathCAD – на панелі з основними компонентами натисніть кнопку

Примітка: нумерація рядків і стовпців за умовчанням починається з 0 (стандартне значення константи ORIGIN – нуль).

Вектор задається, так само як і матриця, але кількість колонок = 1.

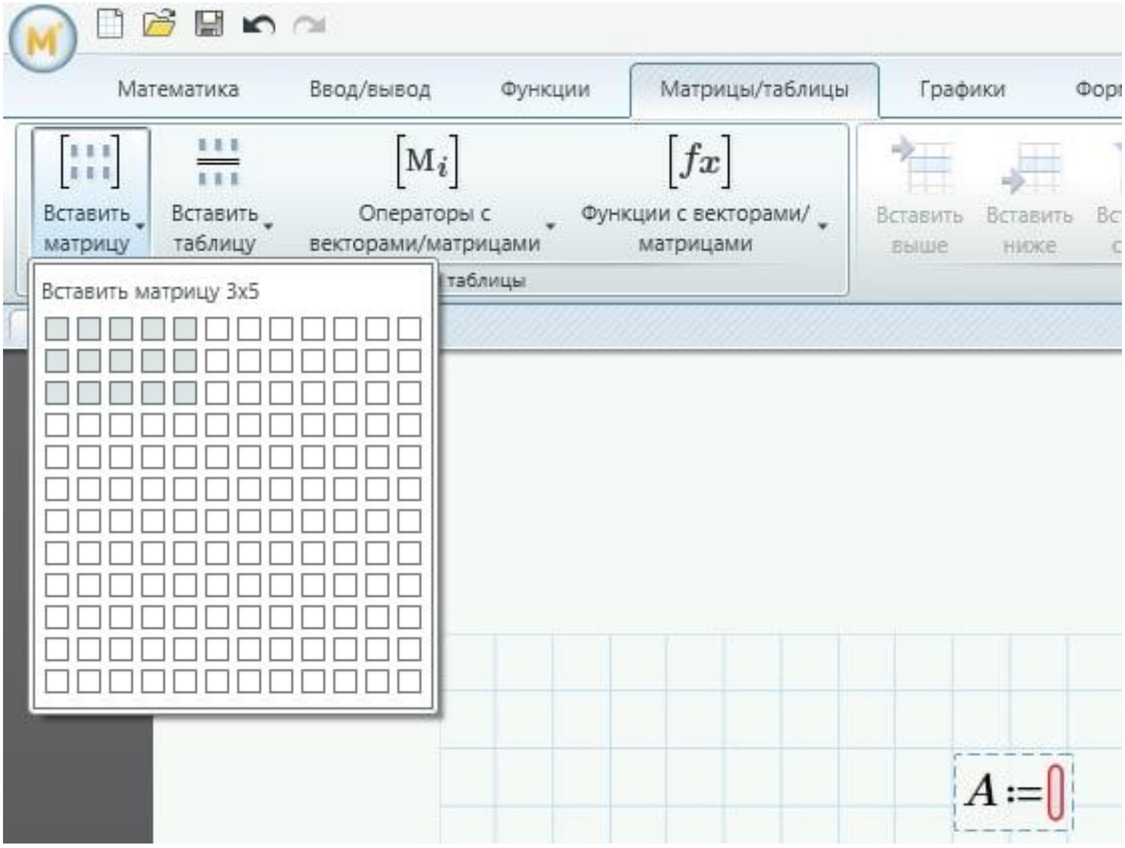
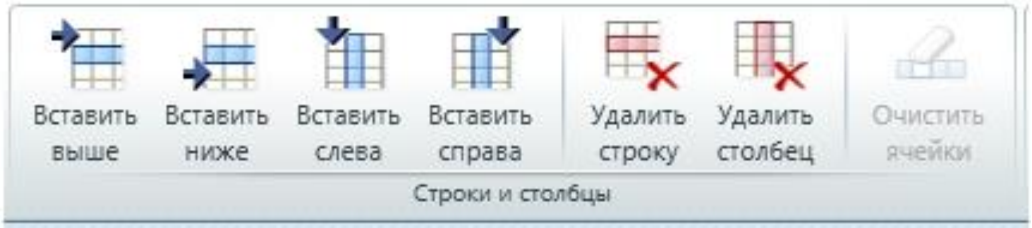


Рисунок 2.6 – Вставка матриці 3x5

Виберіть бажаний розмір матриці (перемістіть вказівник на потрібну кількість клітин сітки). З'явиться порожня матриця, яку заповнюють значеннями.

Матриці можна присвоїти ім'я, клацнувши ліву дужку, натиснувши [:] для оператора привласнення та ввівши ім'я.

Вставку та видалення рядків та стовпців можна здійснювати за допомогою команд з меню «Операторы с векторами/матрицами» на вкладці Матрицы и таблицы:



У старших версіях програми MathCAD реалізована дещо інша можливість видаляти і вставляти будь-яку кількість рядків або стовпців з матриці. Для цього:

1. Виберіть в матриці елемент того рядка або стовпця, який Ви збираєтеся видалити.

2. Натисніть "CTRL-M" або виберіть пункт меню Matrix з меню Insert, в результаті в діалоговому вікні, що з'явилося, виберіть кількість рядків або стовпців які ви збираєтеся видалити.

3. Натисніть кнопку Delete.

4. Натисніть кнопку Close (Якщо натиснути кнопку Ok, то нічого не зміниться)

Для вставки рядків або стовпців у старших версіях програми MathCAD алгоритм приблизно той же, тільки потрібно врахувати, що рядок, що вставляється, розташовуватиметься нижче вибраного елементу, а стовпець — справа. Також в діалоговому вікні слід вибрати кнопку Insert.

Заповнювати вектори і матриці можна, задаючи окремі елементи матриці, а також за допомогою формул. Приклади:

$$x_1 := 1 \quad x_2 := 2 \quad x_4 := 4 \qquad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$i := 1..2 \qquad j := 1..3 \qquad M1_{i,j} := i + j \quad M1 = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

Визначення елементів матриці забезпечує також функція *matrix(M, N, f)* – створення матриці розміру NxM, де кожний елемент, що стоїть на перетині i-го рядка та j-го стовпця є f(i, j),

M – кількість рядків,

N – кількість стовпців,

f(i, j) – функція користувача.

Приклад:

$$f(i,j) := a \cdot i + \sqrt{3} \cdot j \qquad A := \mathrm{matrix}(2,3,f) \qquad A \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 2\cdot\sqrt{3} \\ a & a+\sqrt{3} & a+2\cdot\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

Для створення матриць спеціального виду застосовують функції *identity* та *diag*:

identity(N) – створення одиничної матриці розміру NxN,

diag(V) – створення діагональної матриці, на діагоналі якої знаходяться елементи заданого вектора V.

Приклад:

$$A := \mathrm{identity}(4)$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad V1 := \begin{bmatrix} 37 \\ 1 \\ 19 \\ 45 \end{bmatrix}$$

$$B := \mathrm{diag}(V1) \qquad B = \begin{bmatrix} 37 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 19 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 45 \end{bmatrix}$$

Існує можливість читання матриці даних з файлу. Зокрема, можна вставити матрицю з текстового файлу, з файлу Excel (див. нижче).

Робота з окремими елементами матриці

Щоб дістати доступ до окремого елементу матриці, необхідно набрати ім'я матриці і задати індекси рядка і стовпця.

Індекс елемента можна ввести за допомогою блоку Векторы и матрицы з меню Операторы групи Операторы и символы вкладки Математика (рис. 2.7).

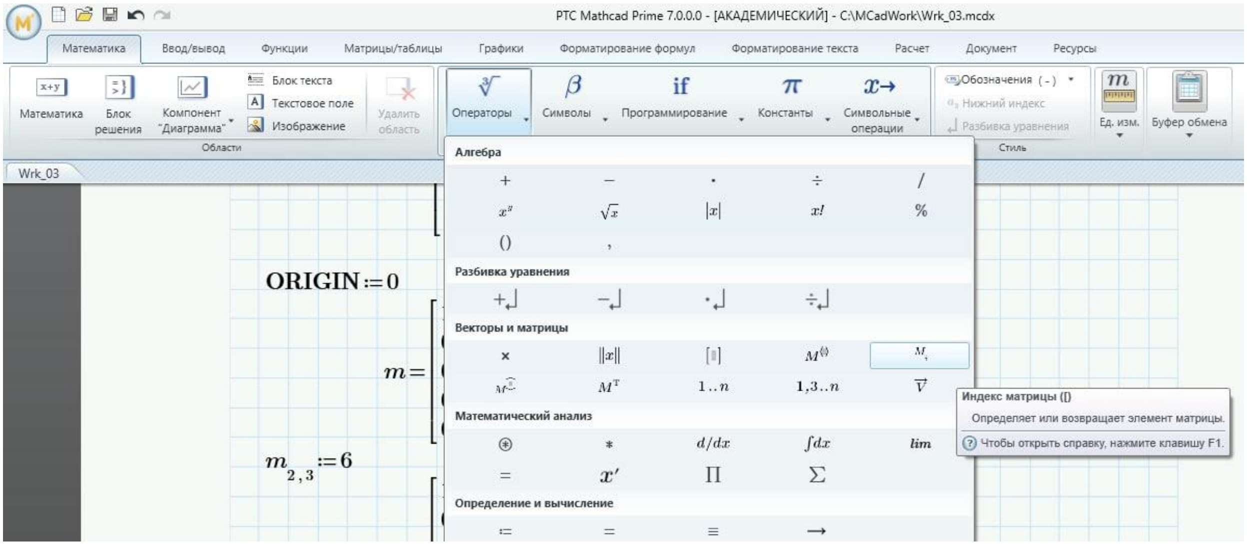
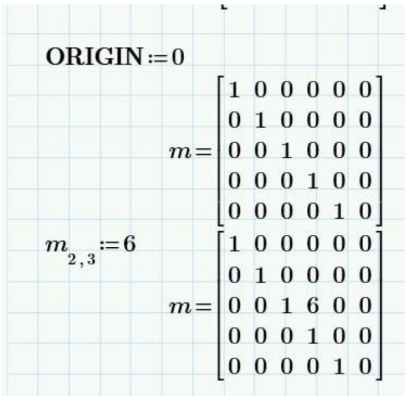


Рисунок 2.7 – Блок **Векторы и матрицы**

Наприклад, команда $m_{2,3} := 6$ надає значення 6 елементу матриці m, який стоїть на перетині третього рядка і четвертого стовпчика (для стандартного випадку ORIGIN=0).



Примітка. Таким способом (поелементно), можна створити нову матрицю наприклад:

$m^{2,3} := 6$ $\qquad$ $m^{3,2} := 5$

$$m = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 5 & 0 \end{bmatrix}$$

Аналогічно можна не тільки присвоювати, а й отримувати значення елемента матриці:

$$m=\begin{bmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&6&0&0\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\end{bmatrix}$$

$$m_{2,3}=6$$

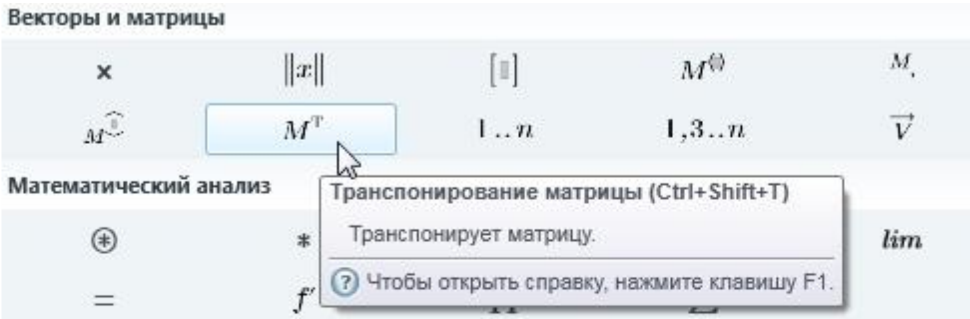
Передбачена можливість також «вирізати» з матриці рядок або стовпчик. Для цього призначені відповідно інструменти «Столбец матрицы» та «Строка матрицы», доступні у блоку Векторы и матрицы з меню Операторы групи Операторы и символы вкладки Математика (рис. 2.7). У старших версіях програми була доступна тільки функція «стовпець матриці», а для доступу до рядків матриці можна слід було попередньо використовувати операцію транспонування.

Приклад:

$$m=\begin{bmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&6&0&0\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\end{bmatrix}$$

$$m^{\widehat{2}}=\begin{bmatrix}0&0&1&6&0&0\end{bmatrix} \qquad m^{\langle 3\rangle}=\begin{bmatrix}0\\0\\6\\1\\0\end{bmatrix}$$

Також у зазначеному блоці Векторы и матрицы з меню Операторы групи Операторы и символы вкладки Математика (рис. 2.7) доступні інструменти «транспонування», «норма матриці», «векторний добуток».



Приклад транспонування:

$$m=\begin{bmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&6&0&0\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\end{bmatrix}$$

$$m^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}1&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&1&0&0\\0&0&6&1&0\\0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}$$

Операції обернення матриці (значення «-1» у верхньому індексі) та обрахунку детермінанта (інструмент «абсолютное значение/определитель» рис. 2.7) застосовуються до квадратних матриць:

$$A:=\begin{bmatrix}1&2&7&-2\\4&5&3&2\\1&1&0&1\\4&3&5&7\end{bmatrix}$$

$$D:=|A|$$

$$D=-12$$

$$AO:=A^{-1}$$

$$AO=\begin{bmatrix}2.25&-4&17.75&-0.75\\-1.583&3&-12.083&0.417\\0.083&0&-0.417&0.083\\-0.667&1&-4.667&0.333\end{bmatrix}$$

Отримання розміру матриць

Для отримання відомостей про характеристики матриць або векторів передбачені такі функції:

rows(A) – число рядків матриці А,

cols(A) – число стовпців матриці А,

length(v) – кількість елементів вектора v,

last(v) – індекс останнього елемента вектора v;

rank(A) – повертає ранг чи число лінійно незалежних стовпців матриці А.

Приклади:

$$A := \begin{pmatrix} a & \sin(a) & 1 \\ -2 & b & -4 \\ a+b & \sqrt{3} & \sqrt{5} \\ 2 & 0 & -6 \end{pmatrix} \qquad \text{rows}(A) \rightarrow 4 \qquad \text{cols}(A) \rightarrow 3$$

$$B := \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 10 \\ 200 \\ 5 \\ 12 \end{bmatrix}$$

$$S1 := \sum B \qquad S2 := \sum_{i=\text{ORIGIN}}^{\text{last}(B)} B_i$$

$$S1 = 231 \qquad S2 = 231$$

Сортування матриць

Для перестановки елементів матриці або вектора (розташування елементів у певному рядку або стовпці в порядку зростання або спадання), використовуються вбудовані функції:

sort(v) – сортування елементів вектора v порядку зростання,

csort(A, i) – сортування рядків матриці А вибудовуванням елементів і-го стовпця в порядку зростання,

rsort(A, i) – сортування стовпців матриці А вибудовуванням елементів і-го рядка в порядку зростання, *reverse(v)* – перестановка елементів вектора v (елементів кожного стовпця матриці v) у зворотному порядку.

Приклад:

$ORIGIN := 1$

$$A := \begin{pmatrix} a & \sin(a) & 1 \\ -2 & b & -4 \\ a+b & \sqrt{3} & \sqrt{5} \\ 2 & 0 & -6 \end{pmatrix} \qquad B := \begin{pmatrix} 4 \\ \sqrt{3} \\ -7 \\ 3 \end{pmatrix} \qquad C := sort(B) \rightarrow \begin{pmatrix} -7 \\ \sqrt{3} \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \qquad reverse(C) \rightarrow \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ \sqrt{3} \\ -7 \end{pmatrix}$$

$$A1 := csort(A,3) \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & -6 \\ -2 & b & -4 \\ a & \sin(a) & 1 \\ a+b & \sqrt{3} & \sqrt{5} \end{pmatrix} \qquad A2 := rsort(A,4) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \sin(a) & a \\ -4 & b & -2 \\ \sqrt{5} & \sqrt{3} & a+b \\ -6 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

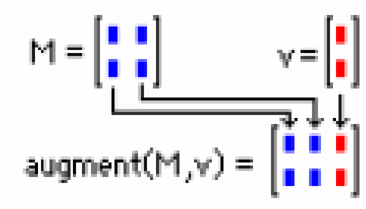
$$reverse(A1) \rightarrow \begin{pmatrix} a+b & \sqrt{3} & \sqrt{5} \\ a & \sin(a) & 1 \\ -2 & b & -4 \\ 2 & 0 & -6 \end{pmatrix}$$

Операції з кількома матрицями

Об'єднання двох матриць, або матриці і вектора можна провести двома способами:

1. Приєднанням до початкової матриці справа, для цього розмірність початкової матриці повинна бути m x п, приєднуваної матриці m x p, результуюча матриця матиме розмірність m x (n+p). Для цього використовується функція augment(A,B).

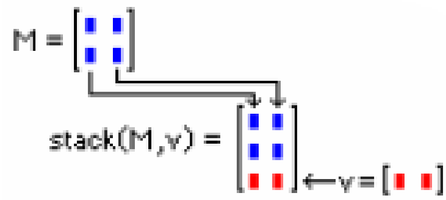
Схематично це виглядає так.



2. Приєднанням до початкової матриці знизу, для цього розмірність початкової матриці повинна бути m x n, приєднуваної матриці p x п,

результуюча матриця матиме розмірність (m+p) x n. Для приєднання до початкової матриці знизу використовується функція stack(A,B).

Схематично це виглядає так.



Приклад:

$$M := \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 5 & 7 \\ 9 & 11 \\ 13 & 15 \end{bmatrix} \qquad N := \begin{bmatrix} 12 & 15 & 19 \\ -2 & -3 & -6 \\ 16 & 18 & 22 \\ -6 & -9 & -1 \end{bmatrix}$$

$$K := \begin{bmatrix} 98 & 56 \\ 87 & 14 \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{augment}(M,N) = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 12 & 15 & 19 \\ 5 & 7 & -2 & -3 & -6 \\ 9 & 11 & 16 & 18 & 22 \\ 13 & 15 & -6 & -9 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{stack}(M,K) = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 5 & 7 \\ 9 & 11 \\ 13 & 15 \\ 98 & 56 \\ 87 & 14 \end{bmatrix}$$

Сумовування елементів по стовпцях

$$\mathbf{D} := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}$$

Crow := (1 1 1)

Crow·D = [12 15 18]

Сумовування елементів по рядках

$$\mathbf{Ccol} := \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{D \cdot Ccol} = \begin{bmatrix} 6 \\ 15 \\ 24 \end{bmatrix}$$

Множення на число, множення на скалярну матрицю

$$2 \cdot \mathbf{D} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 8 & 10 & 12 \\ 14 & 16 & 18 \end{bmatrix} \quad \mathbf{E2} := \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{E2 \cdot D} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 8 & 10 & 12 \\ 14 & 16 & 18 \end{bmatrix}$$

Створення мариць A та B

Створення вектора v

$$A := \begin{pmatrix} 3 & 6 & -3 \\ 4 & -2 & -5 \\ 2 & -5 & 8 \end{pmatrix} \quad B := \begin{pmatrix} -2 & 3 & 7 \\ 3 & 5 & 9 \\ 1 & 2 & 6 \end{pmatrix} \quad v := \begin{pmatrix} 2 \\ -7 \\ 9 \end{pmatrix}$$

Додавання матриць

Множення матриць

Множення на вектор

$$A + B = \begin{pmatrix} 1 & 9 & 4 \\ 7 & 3 & 4 \\ 3 & -3 & 14 \end{pmatrix} \quad A \cdot B = \begin{pmatrix} 9 & 33 & 57 \\ -19 & -8 & -20 \\ -11 & -3 & 17 \end{pmatrix} \quad B \cdot v = \begin{pmatrix} 38 \\ 52 \\ 42 \end{pmatrix}$$

Взаємодія MathCAD із зовнішніми файлами даних

Важливий компонент введення-виведення інформації – це введення-виведення в зовнішні файли. Введення зовнішніх даних у документи MathCAD застосовується частіше виведення, оскільки MathCAD має потужні розвинені можливості представлення результатів розрахунків.

Робота з текстовими файлами

Наведемо вбудовані функції для роботи з текстовими файлами:

- READPRN ("file") – читання даних в матрицю з текстового файлу;
- WRITEPRNC'file ") – запис даних в текстовий файл;
- APPENDPRNC'file") – дозапис даних в існуючий текстовий файл;

(«file» – шлях до файлу).

Приклад запису матриці I до текстового файлу:

$I := \mathrm{identity}(5)$

$I_{3,4} := 99$

Приклад читання даних з текстового файлу в матрицю C

WRITEPRN("datafile.prn") := I

C := READPRN("datafile.prn")

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 99 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Приклад додавання вектора k в існуючий текстовий файл

$k := (1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5)$

APPENDPRN("datafile.prn") := k

Функція READFILE

"Універсальна" функція READFILE повертає матрицю з елементами, зчитаними із зовнішнього файлу даних.

Синтаксис:

READFILE ("file","type",[colwidth,rows,cols,emptyfill]):

"file" – назва файлу (включаючи шлях до нього на диску);

"type" – тип файлу ("delimited" або "Excel");

colwidth – ширина стовпця даних, що зчитується з файлу у разі вибору як попередній параметр типу "fixed", тобто з фіксованою шириною даних;

rows – початковий рядок імпорту даних або двокомпонентний вектор, що задає інтервал імпорту рядків;

cols – початковий стовпець імпорту даних або двокомпонентний вектор, що задає інтервал імпорту стовпців;

emptyfill – значення, яке буде використано для заміни відсутніх даних (пустот у файлі). Для нього можна використовувати значення "Нечисло" (NaN).

Приклади:

З файлу *abc.txt* прочитати у матрицю С1 чотири рядки та п’ять стовпчиків, недостаючі елементи замінити нулем.

$$C1 := \mathrm{READFILE}\left[\text{"E:\textbackslash abc.txt"}, \text{"delimited"}, \begin{pmatrix}1\\4\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\5\end{pmatrix}, 0\right]$$

$$C1 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1.5 & 2 & 3 & 5 & 11 \\ 4 & 0.286 & 7 & 1.091 & 1.35 \\ 6 & 7 & 11 & 13 & 91 \end{pmatrix}$$

З файлу *abc.txt* прочитати рядки з 3 по 5 та стовпці 3 по 5 у матрицю X:

$$X := \mathrm{READFILE}\left[\text{"E:\textbackslash abc.txt"}, \text{"delimited"}, \begin{pmatrix}2\\3\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}3\\5\end{pmatrix}\right]$$

$$X = \begin{pmatrix} 3 & 5 & 11 \\ 7 & 1.091 & 1.35 \end{pmatrix}$$

Робота з графічними файлами

Аналогічно роботі з текстовими файлами, можна організувати читання і запис даних в графічні файли різних форматів.

При цьому дані ототожнюються з інтенсивністю того чи іншого кольору піксела зображення, що знаходиться у файлі. Наведемо основні функції:

- READRGB ("file– читання кольорового зображення;
- READBMP ("file") – читання зображення у відтінках сірого;
- WRITERGB ("file") – запис кольорового зображення;
- WRITEBMP ("fiie") – запис зображення у відтінках сірого;

(«file– шлях до файлу).

Приклад запису матриці I в графічний файл

```
I := identity(100) · 100
I3,9 := 500
WRITEBMP("data.bmp") := I
```

Приклад читання з графічного файлу

```
C := READBMP("data.bmp")
```

Приклад в кольоровий графічний файл

```
R := identity(100) · 100
G := identity(100)
B := identity(100)
WRITERGB("color.bmp") := augment(R, G, B)
```

Створення графіків у середовищі MathCAD

У MathCAD вбудовано декілька різних типів графіків, які можна розбити на дві великі групи, зокрема:

- Двовимірні графіки:

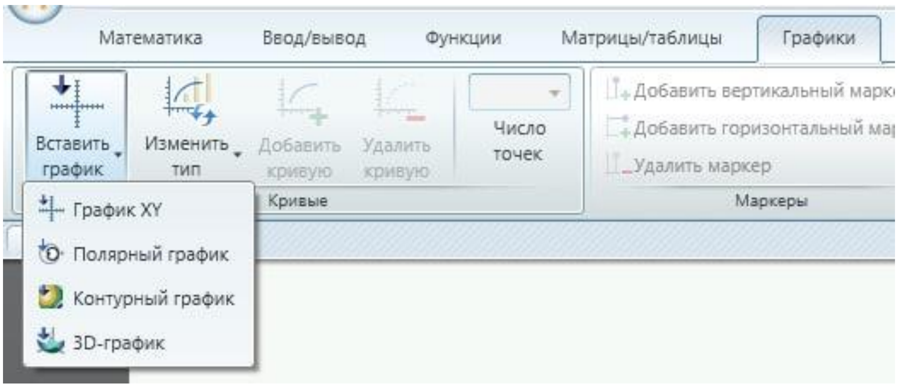
- XY (декартів) графік (XY Plot);
- полярний графік (Polar Plot).

- Тривимірні графіки:

- 3D графік тривимірної поверхні (Surface Plot);
- контурний графік ліній рівня (Contour Plot);

Ділення графіків на типи досить умовне, оскільки управляючи установками параметрів, можна створювати комбінації типів графіків, а також нові типи (наприклад, двовимірна гістограма розподілу є різновидом простого XY-графіка).

Всі графіки створюються однаково, за допомогою меню Вставить график на вкладці Графики в групі Кривые (у старших версіях програми – за допомогою панелі інструментів **Graph** (Графік).



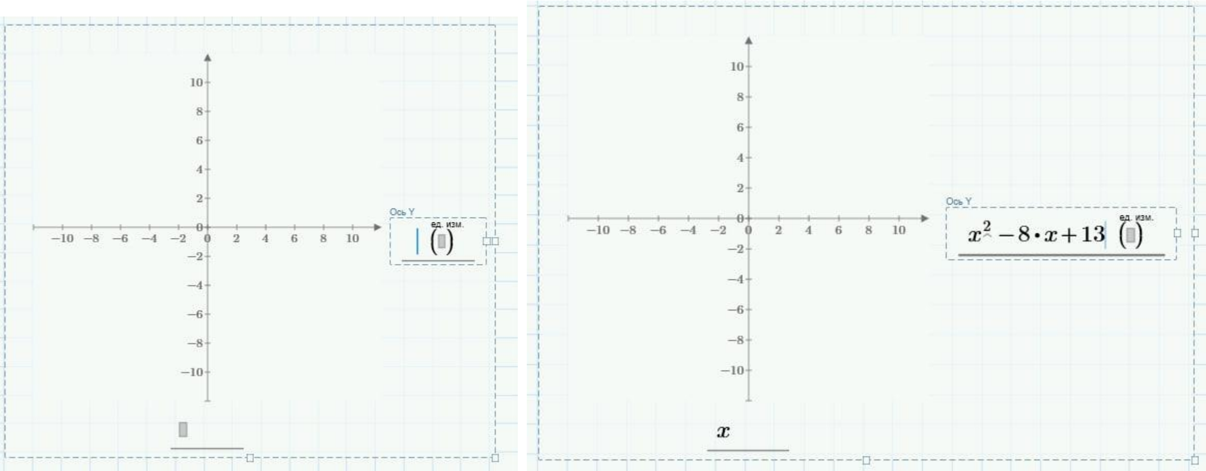
У результаті в документ вставиться шаблон вибраного графіка, у якому необхідно заповнити відповідні позиції X і Y.

Графіки можна масштабувати. Можна змінювати розташування назви осей графіка, а також можна правити та налаштовувати поділки та значення поділів осей. Осі графіка можна задати в лінійному чи логарифмічному масштабі. За умовчанням масштаб осей є лінійним.

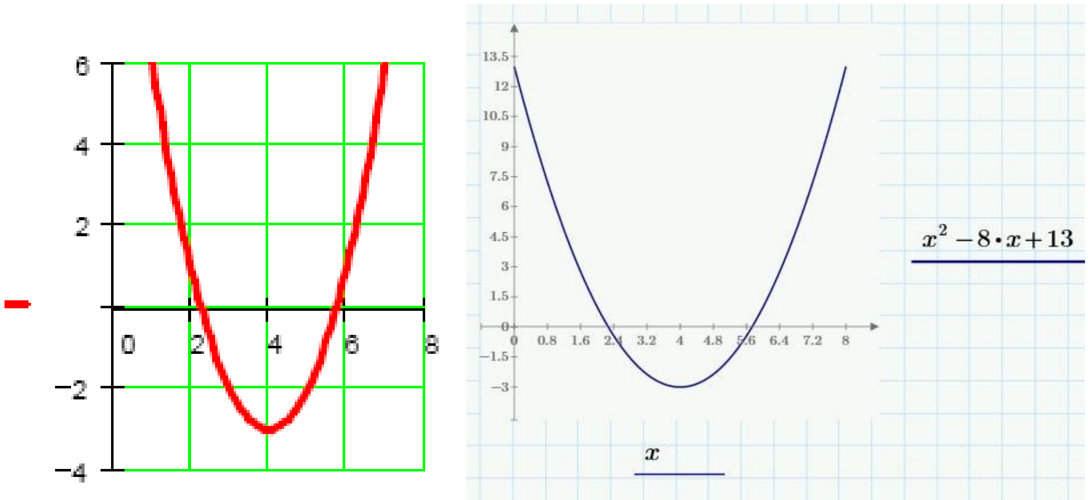
Вигляд графіка можна змінити за допомогою параметрів, які є на вкладці Графики (Plots). Щоб відкрити список Символ (Symbol) або список Стиль линии (Line Style) у групі Стили (Styles), клацніть стрілку праворуч від списку Символ (Symbol) або Стиль линии (Line Style) відповідно. Щоб відкрити список Изменить тип у групі Кривые, виберіть Изменить тип.

Побудова двовимірного графіка

Для побудови графіка функції натисніть кнопку "График XY" у меню Вставить график. Місцезаповнювачі слід заповнити необхідним вмістом, вказавши заздалегідь зміну аргументу.



Результати побудови XY-графіка представлено на рис. 2.8 (а – версії MathCAD 15 та старші, б – MathCAD Prime).

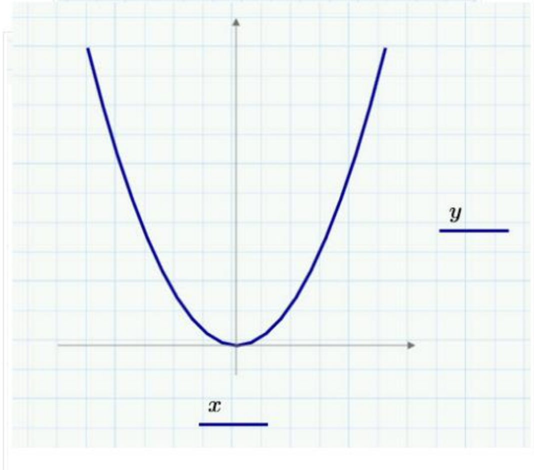


а) б)

Рисунок 2.8 – XY графік.

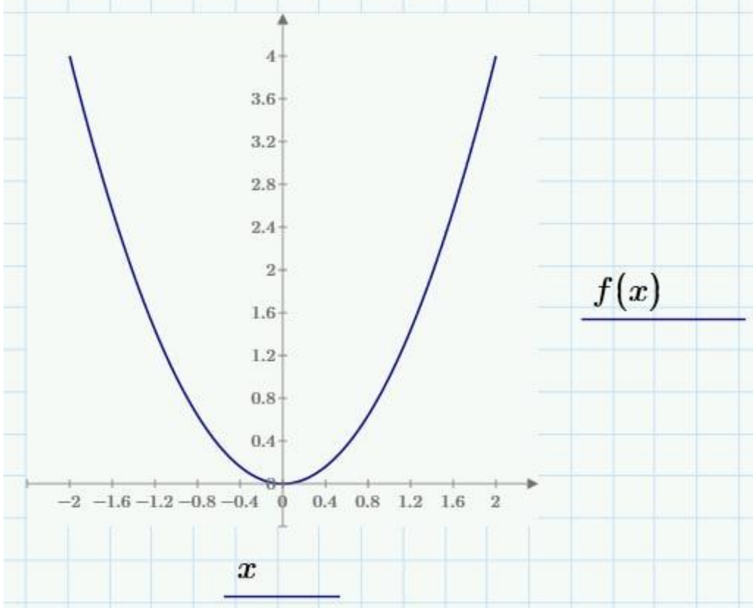
Можна побудувати графік за заданим діапазоном аргументу:

$$i := 0..20 \qquad x_i := -5 + \frac{i}{2} \qquad y_i := x_i^{\,2}$$

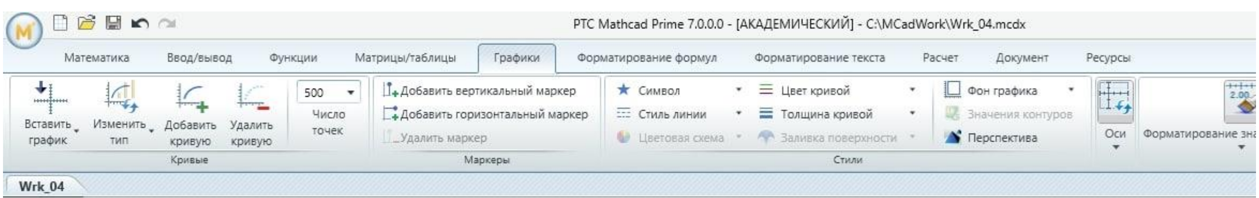


Також можна побудувати графік заданої користувацької функції:

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

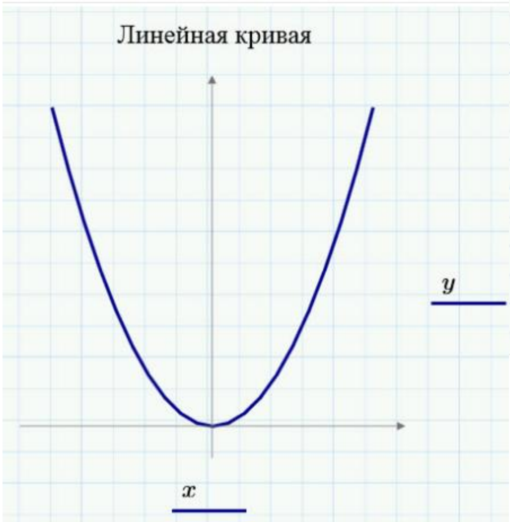


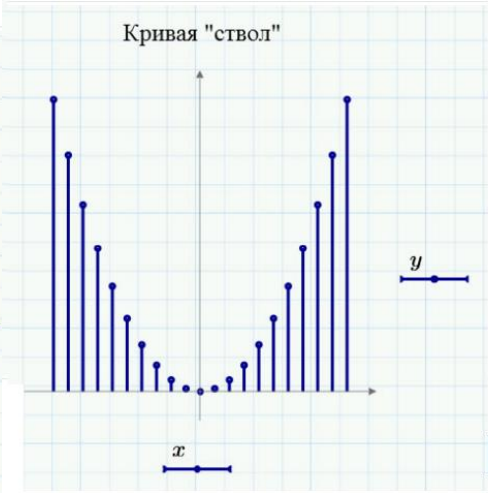
Вкладка Графіки дозволяє налаштувати параметри виділеного графіка:

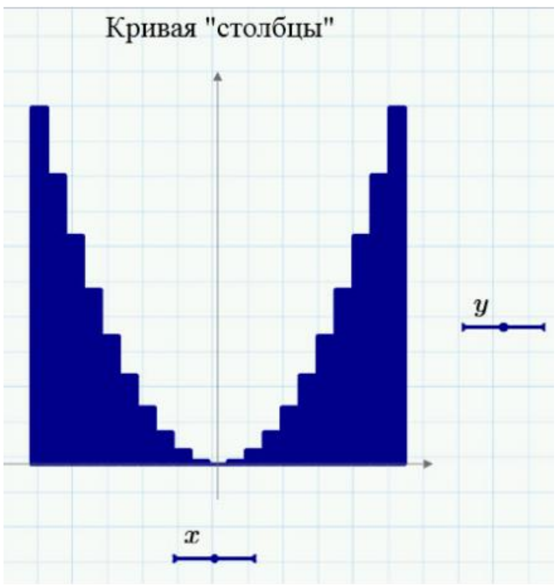


Зокрема, щоб змінити тип графіку, натисніть на нього, а потім виберіть вкладку Графики –> Кривые –> Изменить тип. Нижче представлені рисунки чотирьох типів XY графіків:

$$i := 0..20 \qquad x_i := -5 + \frac{i}{2} \qquad y_i := x_i^{\,2}$$

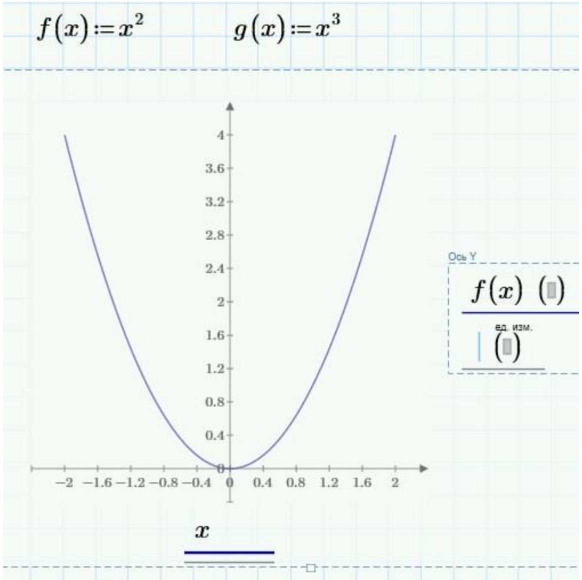


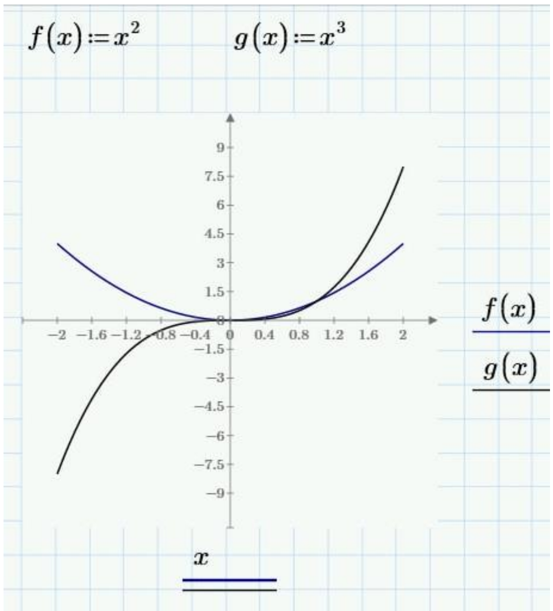




Декілька графіків в одній системі координат.

Щоб додати криву до осі, помістіть курсор після позначення легенди осі Y графіка та натисніть Графики –> Кривые –> Добавить кривую. З'явиться ще один місцезаповнювач для осі Y:



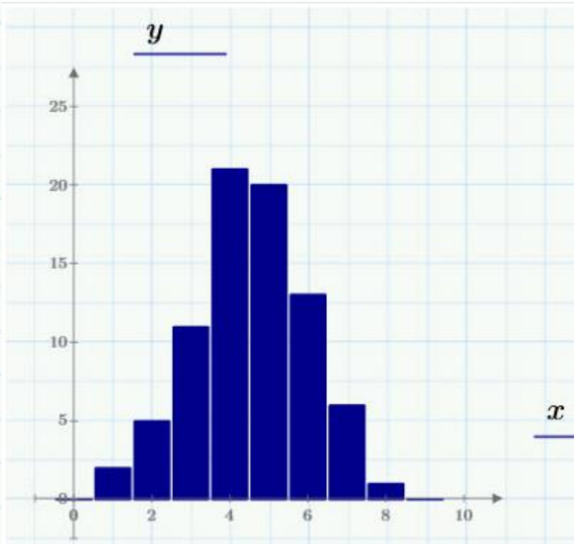


Побудова гістограми.

Використовуємо тип кривої «Столбцы».

Приклад. Попередньо побудуємо таблицю з даними – вкладка Матрицы/таблицы –> Вставить таблицу, таблиця 2x10. Заповнимо таблицю даними, потім вставимо графік XY. Налаштуємо вигляд графіку (розташування легенди, тощо). Після цього змінимо тип графіку, обравши Графики –> Кривые –> Изменить тип –> Кривая «столбцы»:

x	y
0	0
1	2
2	5
3	11
4	21
5	20
6	13
7	6
8	1
9	0



Створення графіків у полярній системі координат

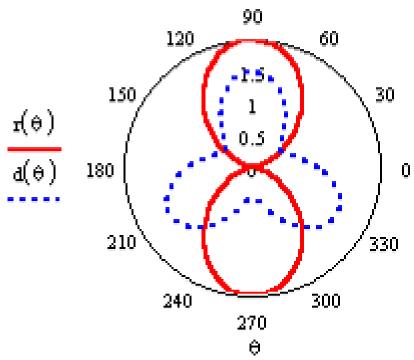
Для створення полярного графіка необхідно обрати Графики –> Кривые –> Вставить график –> Полярный график і вставити імена змінних і функцій, які будуть побудовані в полярній системі координат: кут і радіус-вектор.

Полярний кут q слід визначити заздалегідь як змінну, що приймає значення з проміжку (ранжирувана змінна). Функція радіус-вектора r (q) або задається заздалегідь, або її визначення вводиться безпосередньо в лівий місцезаповнювач.

$$N := 15 \qquad \theta := 0, \frac{1}{N} .. 2 \cdot \pi$$

$$r(\theta) := 1 + \sin\left(2 \cdot \theta + 3 \cdot \frac{\pi}{2}\right)$$

$$d(\theta) := 1 + \frac{\sin(3 \cdot \theta + \pi)}{2}$$

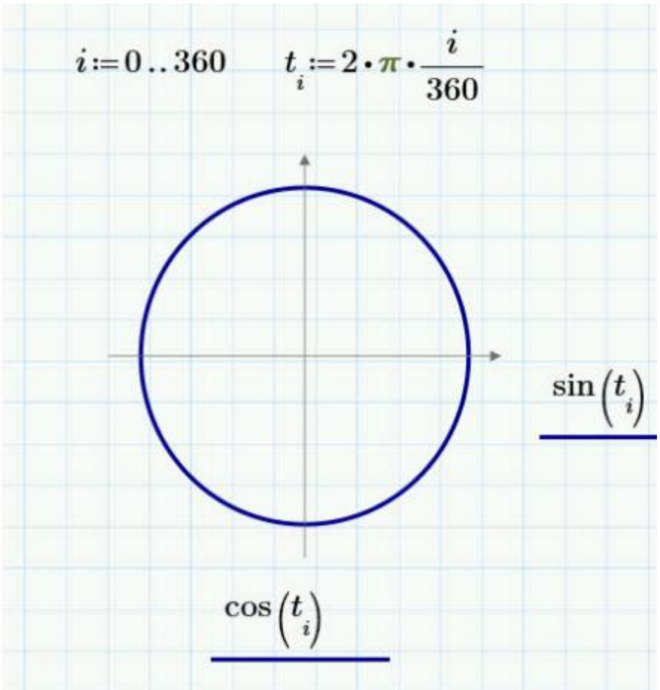


Графік в полярних координатах можна побудувати і за допомогою команди XY Plot. Тільки в цьому випадку необхідно додатково поставити такі функції: x (q) = r (q) cos (q) і y (q) = r (q) sin (q), а для абсцис і ординат вказати відповідно x (q) і y (q).

Так само, як при створенні декартового графіка, по осях можуть бути відкладені два вектори, елементи векторів, а також може бути здійснена швидка побудова графіка функції.

Створення графіків функцій, заданих параметрично

У разі побудови параметрично заданої кривої, замість незалежної змінної x під віссю абсцис необхідно задати індексовану змінну xi. А поруч з віссю ординат необхідно відповідно вказати yi.



Якщо потрібно вивести множину точок, то можна сформувати два вектори, один з яких містить абсциси точок, а інший - їх ординати. У цьому випадку на графіку у відповідних місцях вказуються тільки імена векторів.

Створення тривимірних графіків

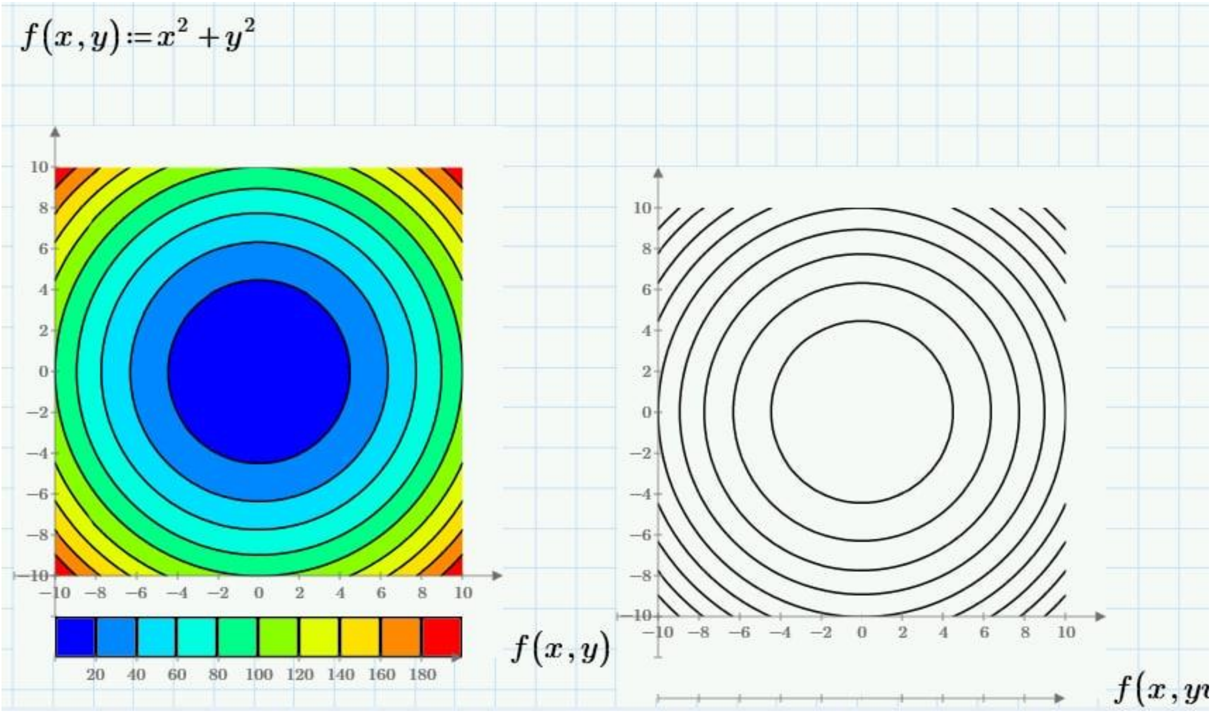
Щоб створити тривимірний графік, потрібно скористатися меню Графики –> Кривые –> Вставить график на вкладці Графики (у старших версіях програми –натиснути кнопку із зображенням будь-якого з типів тривимірних графіків на панелі інструментів Graph). В результаті з'явиться порожня область графіка з трьома осями і єдиним місцезаповнювачем. У цей місцезаповнювач слід ввести або ім'я функції, або ім'я матричної змінної, яка задасть розподіл даних на площині XY.

Контурний графік

Контурний графік відбиває зміну поверхні за висотою. Він є лініями рівних висот. Щоб вставити графік, виберіть Графики –> Кривые –> Вставить график –> Контурный график на вкладці Графики.

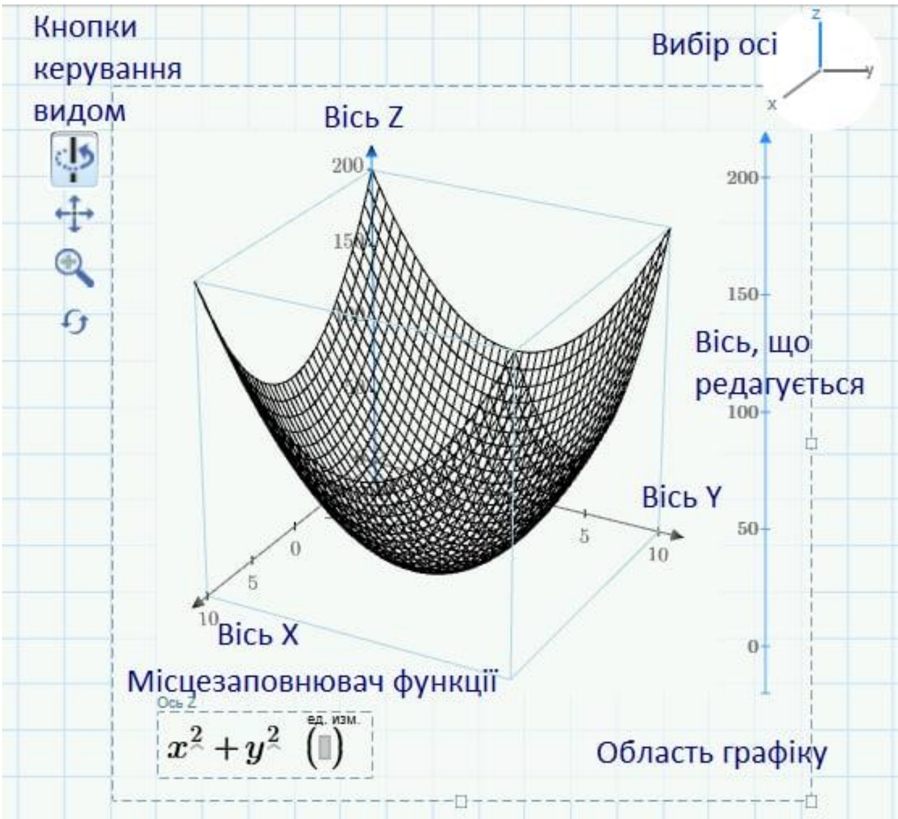
Приклад. Контурний графік функції $z=x^2+y^2$.

Діапазони за замовчуванням: $-10<x<10$, $-10<y<10$. По осі значень (тобто *f(x,y)*) діапазон підбирається автоматично, залежно від величини функції. Змінити ці діапазони можна, змінюючи величину першої та останньої міток, а відстань між мітками – зміною величини другої мітки. Крім того, можна вибрати серед кількох колірних схем і додавати величини до контурних ліній:



3D-графік

Насамперед, визначимося з основними елементами 3D-графіка:



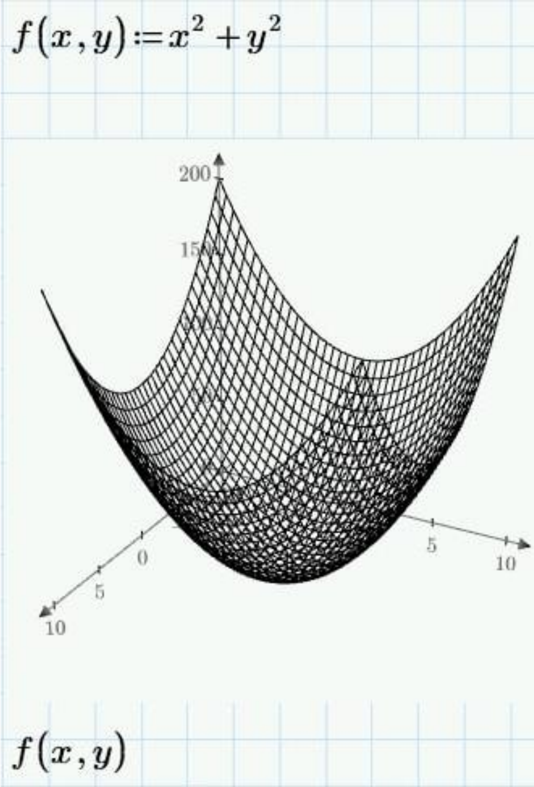
Щоб вставити 3D-графік, виберіть Графики –> Кривые –> Вставить график –> 3D-график на вкладці Графики.

У 3D-графіка є три осі: X, Y та Z. Вісь Z зазвичай вертикальна. Сам графік «укладено» в прямокутну область, обмежену осями. У 2D-графіках були окремі місцезаповнювачі для осей X та Y. Тут – лише один місцезаповнювач для осі Z.

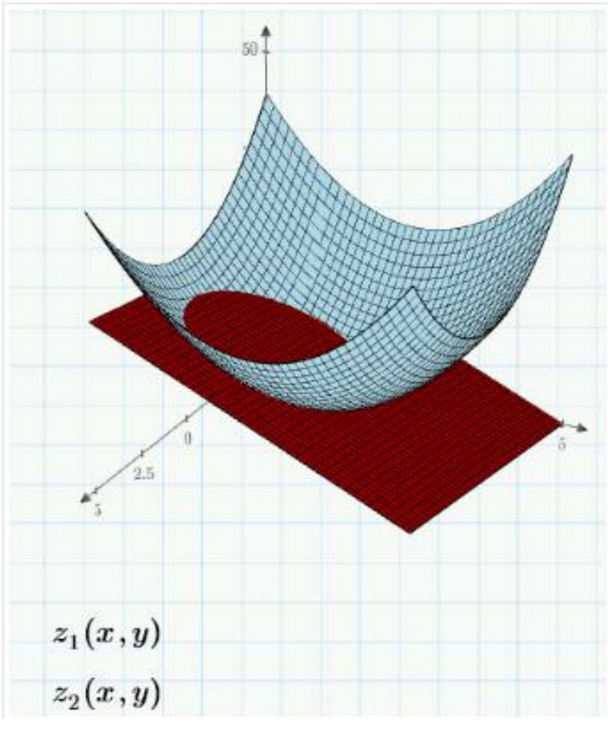
У верхньому правому кутку є кнопка для вибору осей. Обрана вісь буде підсвічена синім як на кнопці вибору, так і в області графіка. Ви можете змінювати значення першої, другої та останньої позначки, як на 2D-графіку. Так можна змінювати діапазони по осях і кількість міток.

Ви можете переміщувати, стискати та розширювати область із графіком за допомогою кнопок на межі області. За допомогою кнопок у лівому верхньому куті можна переміщати, обертати та масштабувати графік, а також скинути вигляд графіка (щось подібне до кнопки «Скасувати»).

Так само, як для 2D-графіку, можна у відповідному місцезаповнювачі вказувати як певний вираз, так і ім’я користувацької функції. Можлива побудова кількох поверхонь в одному полі графіку:



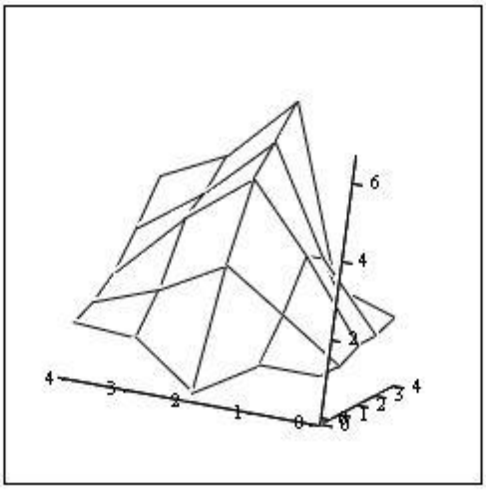
$$z_1(x,y) := x^2 + y^2 - 10 \qquad z_2(x,y) := x - 3 \cdot y - 5$$



«Дискретний» 3D-графік

Графік поверхні може бути не розрахований у програмі, а заданий безпосередньо заданий матрицею аплікат. Наприклад:

$$Z := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1.1 & 1.2 \\ 1 & 2 & 3 & 2.1 & 1.5 \\ 1.3 & 3.3 & 5 & 3.7 & 2 \\ 1.3 & 3 & 5.7 & 4.1 & 2.9 \\ 1.5 & 2 & 6.5 & 4.8 & 4 \end{pmatrix}$$



Z

Побудова параметричного 3D-графіку

Побудувати параметричну 3D-поверхню (наприклад, сферу, тор, спіраль, фігуру типу «морська мушля», тощо) дещо складніше, ніж 2D-графік, тому що ви можете додати на графік лише значення *Z*. Розглянемо, як виконати побудову параметричного 3D-графіку за допомогою за допомогою спеціальної матричної функції **CreateMesh** (Створити сітку)

$F(u,v) := u$ $\qquad$ $mesh := 30$

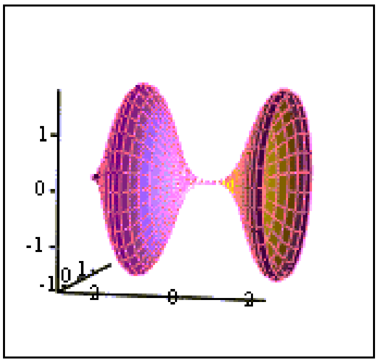
$G(u,v) := f(u) \cdot \cos(v)$

$H(u,v) := f(u) \cdot \sin(v)$

$SX := CreateMesh(F, G, H, a, b, 0, 2\pi, mesh)$

Функція CreateMesh має такі параметри:

- Ім'я матриці значень або функції F;
- Початкове значення першої змінної s;
- Початкове значення другої змінної sl;
- Кінцеве значення першої змінної t;
- Кінцеве значення другої змінної tl;
- Число ліній сітки по перший змінної sgrid;
- Кількість ліній сітки по другій змінної tgrid;
- Карта відображення frnap.



SX

Розв'язання алгебраїчних рівнянь у MathCAD

Існує кілька методів знаходження рішення алгебраїчних рівнянь вигляду ***f(x)=0*** в MathCad.

Розв'язання алгебраїчних рівнянь за допомогою функцій *root, polyroots*.

Загальний вигляд функції root наступний:

root(f(x), x),

де f(x) – функція, що описує ліву частину виразу виду ***f(x)=0,***

x – ім'я змінної, щодо якої вирішується рівняння.

Функція root реалізує алгоритм пошуку кореня ітераційними чисельними методами і вимагає попереднього *завдання початкового наближення* змінної x, що шукається. Пошук кореня буде проводитись поблизу цього числа. Таким чином, присвоєння початкового значення вимагає попередньої інформації про зразкову локалізації кореня.

Функція дозволяє знайти як дійсні корені, так і комплексні. У разі комплексного кореня початкове наближення необхідно задати як комплексне число.

Якщо після багатьох ітерацій MathCAD не знаходить відповідного наближення, з'явиться повідомлення «відсутня збіжність». Ця помилка може бути викликана наступними причинами: 1) немає коріння рівняння; 2) корені рівняння розташовані далеко від початкового наближення; 3) вираз ***f(x)*** має розриви між початковим наближенням та коренем; 4) вираз має комплексний корінь, але початкове наближення було дійсним і навпаки.

Для зміни точності, з якою функція root шукає корінь, потрібно змінити значення системної змінної TOL. Наприклад, після завдання в документі оператора TOL: = 0.00001 точність обчислення кореня дорівнює 0.00001.

Для знаходження коріння поліноміального рівняння виду $a_n \cdot x^n + a_n \cdot x^n + \quad + a_{n-1} \cdot x^{n-1} + \ldots + a_1 \cdot x \quad + a_0 = 0 + a_{n-1} \cdot x^{n-1} + \ldots + a_1 \cdot x \quad + a_0 = 0$ використовується функція *polyroots*. На відміну від функції *root,* функція *polyroots* не вимагає початкового наближення та обчислює відразу всі коріння, як дійсні, так і комплексні.

Загальний вигляд функції polyroots:

polyroots(v),

де v – вектор коефіцієнтів полінома довжини n+1,

n – ступінь полінома.

Вектор v формується наступним чином: у перший його елемент заноситься значення коефіцієнта полінома при x0, тобто, v0, другий елемент – значення коефіцієнта полінома при x1, тобто. v1 і т.д. Таким чином, вектор заповнюється коефіцієнтами перед ступенями полінома зправа наліво.

Функція обчислює вектор довжини n, що складається із коренів полінома.

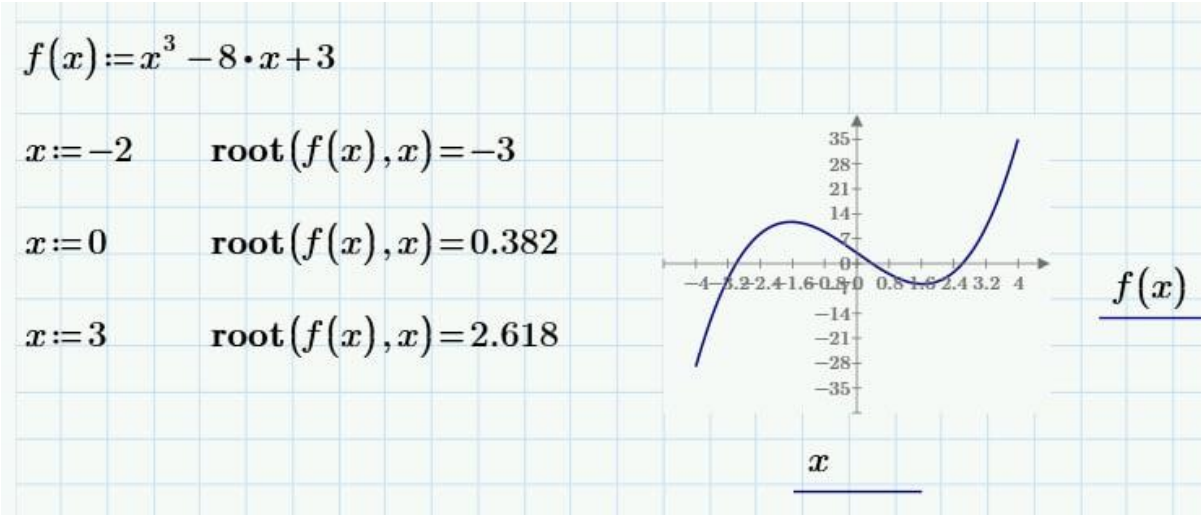
На рис. 5.1 представлено приклади обчислення коренів рівнянь за допомогою функцій *root* (рис. 5.1а, в залежності від початкового наближення) та *polyroots* (рис. 5.1б).

Розв'язання систем алгебраїчних рівнянь

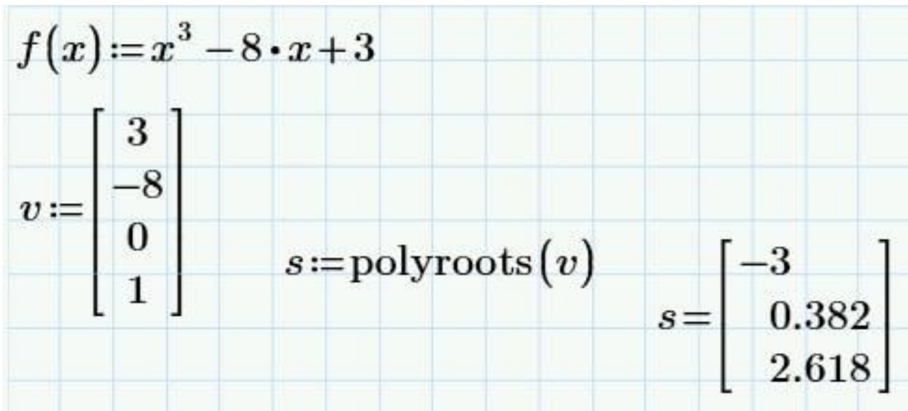
Програма MathCAD дає можливість вирішувати системи рівнянь та нерівностей. Найбільш поширеним методом вирішення рівнянь MathCAD є блоковий метод. Для вирішення системи цим методом необхідно виконати наступне:

1. Натисніть на місці документа, де потрібно вставити блок рішення.

2. На вкладці Математика (Math) у групі Области (Regions) клацніть Блок решенияч (Solve Block).



а)

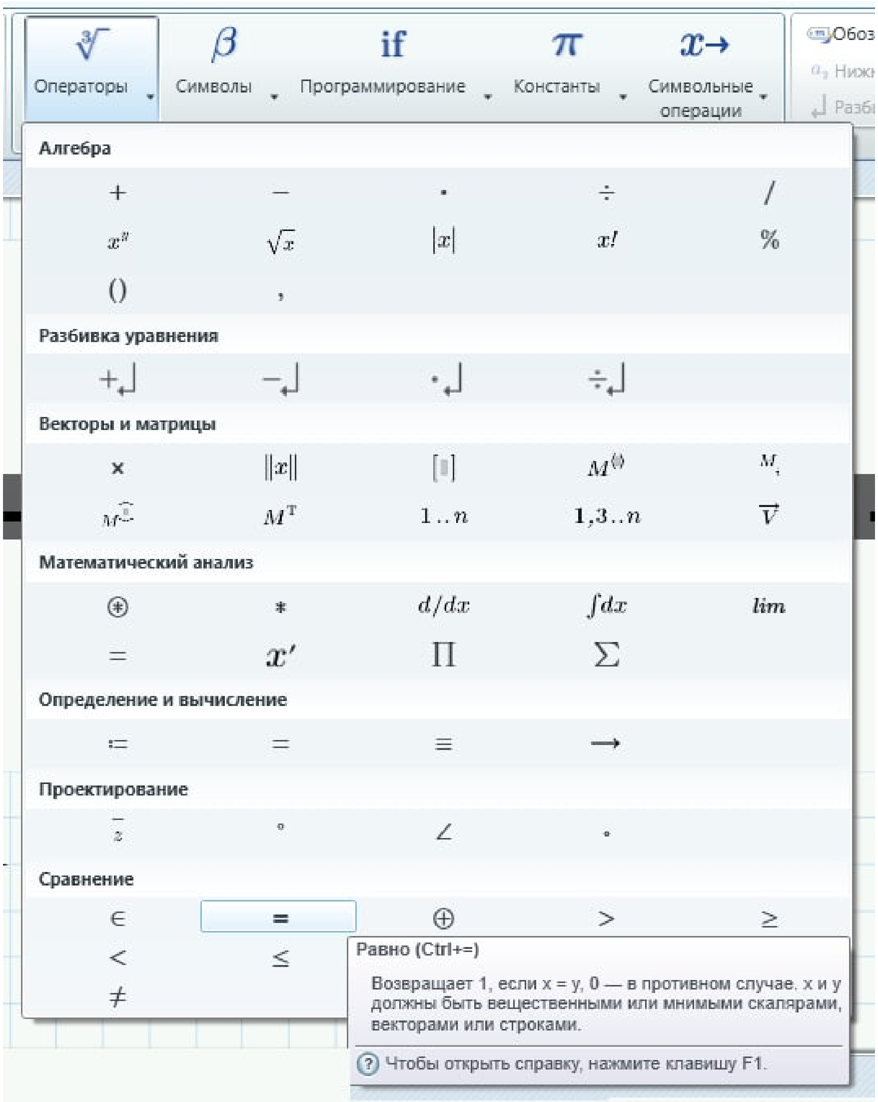


б)

Рисунок 5.1 – Обчислення коренів рівнянь за допомогою функцій *root* та *polyroots*.

3. Натисніть в області блоку рішення, а потім натисніть початкові наближення для всіх невідомих. Наприклад, для системи із двох рівнянь задайте x та y.

4. Використовуючи логічні оператори, ввести рівняння та нерівності у будь-якому порядку. **Увага!** Використовуйте логічний оператор "=" (Equal To), щоб визначити ці рівняння:



5. Викличте функції блоку рішення (наприклад, *Find, Minerr,* тощо).

6. Переконайтеся, що змінні x та y, локально визначені в даному блоці рішення, не мають значень за його межами.

Примітка. У версіях MathCAD 15 та старших блоку рішення задається за допомогою ключового слова *Given*. Блоковий метод у випадку цих весрій програми передбачає такі етапи: а) задати початкове наближення всім невідомих, які входять у систему рівнянь; б) задати ключове слово *Given*, яке вказує, що далі слідує система рівнянь; в) ввести рівняння та нерівності у будь-якому порядку (використовувати кнопку логічної рівності на панелі знаків логічних операцій для набору логічної рівності «=» у рівнянні); г) ввести вираз, який включає функції блоку рішення (наприклад, *Find, Minerr,* тощо). Як блок вирішення у старих версіях програми інтерпретується частина документа, розташована між ключовими словами Given та функціэю блоку рішення (наприклад, *Find, Minerr* тощо). Після набору вирішального блоку MathCAD повертає точне рішення рівняння або системи рівнянь.

Звернутися до функції Find можна декількома способами: Find(x1, x2,…) = - корінь або коріння рівняння обчислюються та виводяться у вікно документа. x := Find(x1, x2,…) – формується змінна чи вектор, що містить обчислені значення коріння.

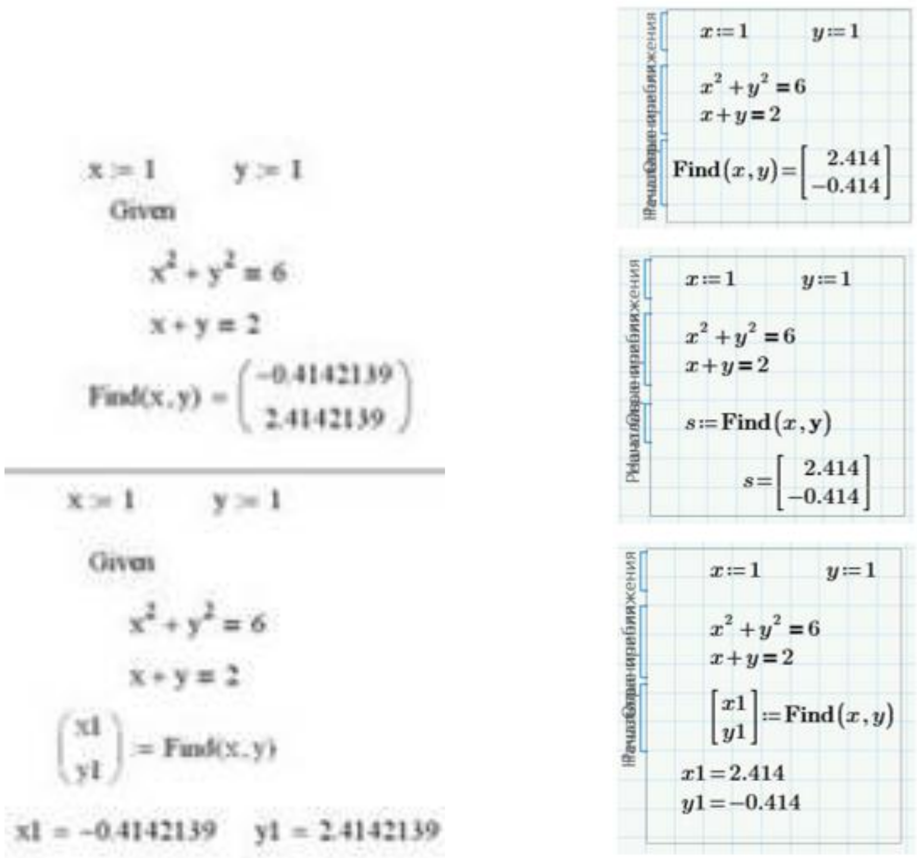
Повідомлення про помилку «Рішення не знайдено» з'являється тоді, коли система не має рішення або для рівняння, яке не має речовинного коріння, як початкове наближення взято речовинне число і навпаки.

Наближене рішення рівняння або системи можна отримати за допомогою функції Minerr. Якщо в результаті пошуку не може бути отримано подальше уточнення поточного наближення (тобто, рішення рівняння відсутнє), таке рівняння все одно можна "вирішити" за допомогою функції *Minerr* замість *Find*, Функція Find у цьому разі повертає повідомлення про помилку. Правила використання функції Minerr такі ж, як і для функції Find.

Приклади застосування блоку вирішення представлено на рис. 5.2 (а – версії MathCAD 15 та старші, б – MathCAD Prime).

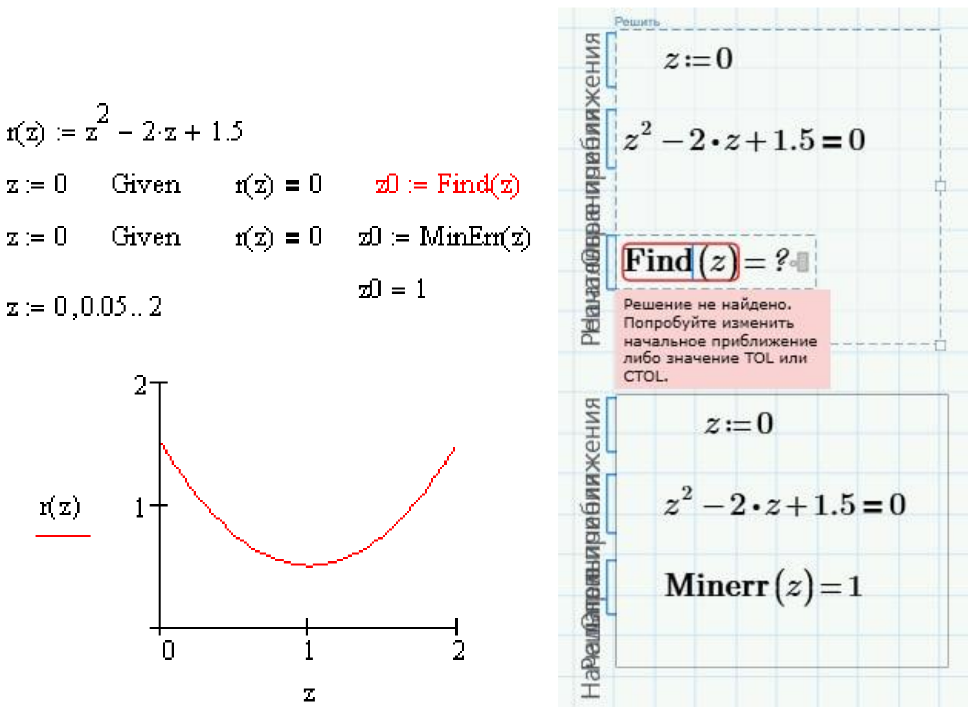
Пошук кореня *рівняння* з *одним невідомим* за допомогою функцій *Find, Minerr* виконується аналогічно.

Приклади застосування блоку вирішення представлено на рис. 5.3 (а – версії MathCAD 15 та старші, б – MathCAD Prime).



а) б)

Рисунок 5.2 – Розв'язання систем рівнянь блоковим методом.



а) б)

Рисунок 5.3 – Розв'язання рівнянь блоковим методом: пошук значення «близького» до кореня.

Для розв'язання систем лінійних рівнянь можна також використовувати загальноприйняті математичні методи: метод Крамера, метод зворотньої матриці і т.д.

Приклад. Задана система лінійних алгебраїчних рівнянь, наприклад, система трьох лінійних рівнянь із трьома невідомими:

$$x+y+z=6$$
$$x-y+z=2$$
$$2\cdot x+y-z=1$$

Лінійні рівняння можна вирішити за допомогою методу оберненої матриці. Представимо ліву частину рівнянь (1), (2) та (3) як добуток матриці коефіцієнтів A на вектор невідомих розв'язків X:

$$A:=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 1 & -1 & 1\\ 2 & 1 & -1\end{bmatrix} \qquad X=\begin{bmatrix}x\\ y\\ z\end{bmatrix}$$

Праву частину запишемо як вектор:

$$b:=\begin{bmatrix}6\\ 2\\ 1\end{bmatrix}$$

Тоді рішення у MathCAD можна знайти:

$$X:=A^{-1}\cdot b \qquad X=\begin{bmatrix}1\\ 2\\ 3\end{bmatrix}$$

Такий запис можна застосовувати до систем лінійних рівнянь довільної розмірності.

Слід пам’ятати, що рішення є лівим добутком зворотної матриці коефіцієнтів і вектора результатів, тобто при множенні важлива послідовність множників. Розмірність матриці A та вектора вільних членів мають відповідати одна одній.

Матричний метод розв'язання системи лінійних рівнянь (метод зворотньої матриці) реалізований у MathCAD також у вбудованій функції *lsolve*. Загальний вигляд функції:

lsolve (a, b),

де a – матриця коефіцієнтів перед невідомими,

b – вектор вільних членів.

Приклад розв'язання системи лінійних рівнянь

$$x + 3y = 5$$
$$2 \cdot x + y = 12$$

із використанням вбудованої функції *lsolve*:

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \qquad B := \begin{bmatrix} 5 \\ 12 \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{lsolve}(A, B) = \begin{bmatrix} 6.2 \\ -0.4 \end{bmatrix}$$

Розв'язання звичайних диференційних рівнянь

При розв'язанні диференціального рівняння (ЗДР) шуканою величиною є функція.

Для ЗДР невідома функція – функція однієї змінної. Диференціальні рівняння у часткових похідних – це диференціальні рівняння, у яких невідомою є функція двох чи більше змінних.

З диференціальних рівнянь у часткових похідних у MathCAD є можливість вирішувати рівняння з двома незалежними змінними: одновимірні параболічні та гіперболічні рівняння, такі як рівняння теплопровідності, дифузії, хвильові рівняння, а також двомірні еліптичні рівняння (рівняння Пуассона та Лапласа).

MathCAD не має універсальної функції для розв'язання диференціальних рівнянь, а містить близько двадцяти функцій для різних видів рівнянь, додаткових умов і методів розв'язання.

Кожна з цих функцій призначена для чисельного розв'язання диференціального рівняння, наприклад, ЗДР першого порядку. Диференціальне рівняння першого порядку — це рівняння, яке не містить похідних вище першого порядку від невідомої функції. Приклад: диференціальне рівняння $y'+3y=0$ з початковими умовами: y(0) = 4.

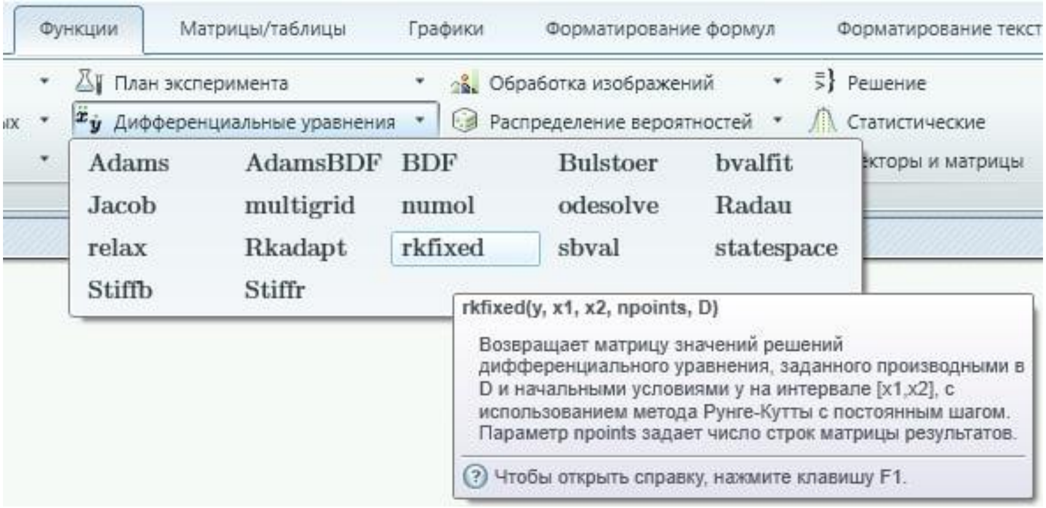
В результаті рішення виходить матриця, що містить значення функції, обчислені у деякій точці (на деякій сітці значень). Для кожного алгоритму, який використовується під час вирішення диференціальних рівнянь, MathCAD має різні вбудовані функції. Незважаючи на різні методи пошуку рішення, кожна з цих функцій вимагає, щоб були задані принаймні наступні величини, необхідні для пошуку рішення:

- Початкові умови.
- Набір точок, у яких потрібно знайти рішення.
- Саме диференціальне рівняння, записане у певному спеціальному вигляді, який буде описаний нижче.

Є два типи задач, для яких можливе чисельне рішення ОДУ за допомогою MathCAD:

– задача Коші, якою визначено початкові умови на шукані функції, тобто, задані значення цих функцій у початковій точці інтервалу інтегрування рівняння;
– крайові задачі, якими задані певні співвідношення відразу обох межах інтервалу.

Для вирішення диференціальних рівнянь із початковими умовами система MathCAD має ряд вбудованих функцій, які доступні в меню Дифференциальные уравнения на вкладці Функции.



Найбільш часто використовуються наступні функції для розв'язання диференціальних рівнянь:

Rkfixed – функція для розв'язання ЗДР та систем ЗДР методом Рунге-Кутта четвертого порядку зі сталим кроком;

Rkadapt – функція розв'язання ЗДР та систем ЗДР методом Рунге-Кутта зі змінним кроком;

Odesolve – функція, що вирішує ЗДР блоковим способом;

BDF – метод на основі формул диференціювання назад для жорстких систем диференціальних рівнянь.

Stiffb – метод Булірша-Штера, адаптований до жорстких систем диференціальних рівнянь.

Stiffr – метод Розенброка для жорстких систем диференціальних рівнянь.

AdamsBDF – «автовибір» методу вирішення: автоматично визначається, чи є система жорсткою чи нежорсткою, і застосовується *Adams* чи *BDF* відповідно.

Розв'язання звичайних диференційних рівнянь з використанням вбудованої функції rkfixed.

Функція rkfixed використовує для пошуку рішення чисельний метод Рунге-Кутти четвертого порядку.

Функція rkfixed має такі аргументи:

rkfixed (y, x1, x2, npoints, D),

де y = вектор початкових умов розмірності n,

n – порядок диференціального рівняння або число рівнянь в системі (якщо вирішується система рівнянь); для диференціального рівняння першого порядку, як, наприклад, рівняння вектор початкових значень вироджується в одну точку y0 = y(x1).

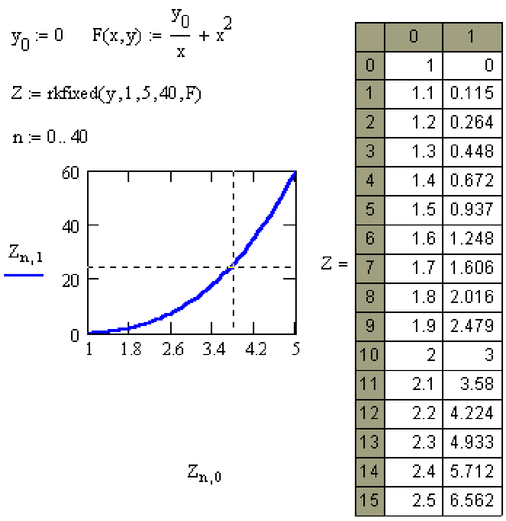
x1, x2 – граничні точки інтервалу, у якому шукається розв'язання диференціальних рівнянь. Початкові умови, задані у векторі, — це значення рішення в точці x1.

npoints – кількість точок (крім початкової точки), у яких шукається наближене рішення. За допомогою цього аргументу визначається число рядків (1 + npoints) у матриці, що повертається функцією rkfixed.

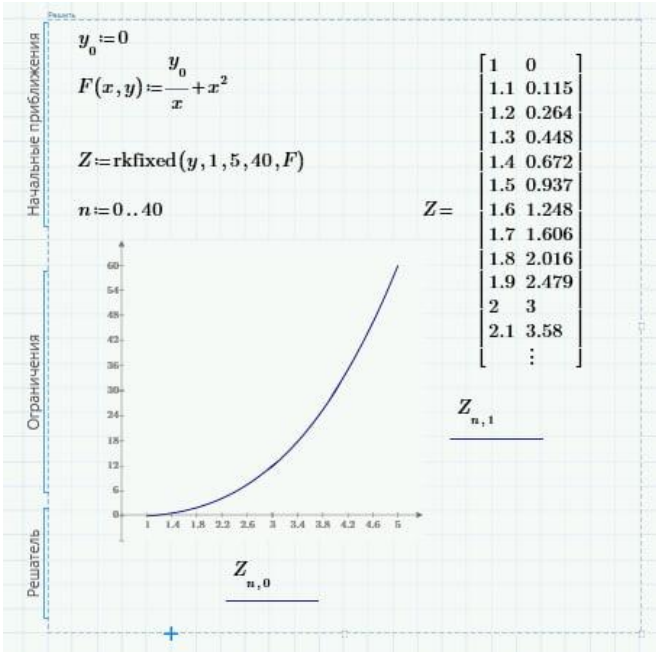
D (x, y) = Функція, що повертає значення у вигляді вектора n елементів, що містять перші похідні невідомих функцій.

Приклад вирішення задачі Коші методом Рунге-Кутти з фіксованим кроком (на прикладі диференційного рівняння $\frac{d}{dx}y = \frac{y}{x} + x^2$ при початковій умові y(1)=0 на відрізку [1,5]) із застосуванням блоку вирішення представлено на рис. 5.4 (а – версії MathCAD 15 та старші, б – MathCAD Prime).

Приклад розв'язання на відрізку [0,10] методом Рунге-Кутти з фіксованим кроком задачі Коші, що включає систему з двох диференційних рівнянь $\frac{d}{dt}x = y - x^2 - x$ $\frac{d}{dt}y = 3 \cdot x - x^2 - y$ при початкових умовах $x(0)=0$, $y(0)=1$ із застосуванням блоку вирішення представлено на рис. 5.5 (а – версії MathCAD 15 та старші, б – MathCAD Prime).

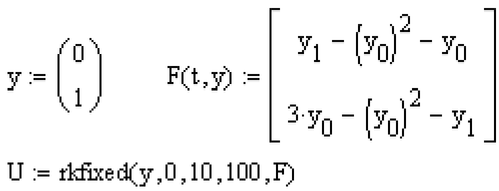


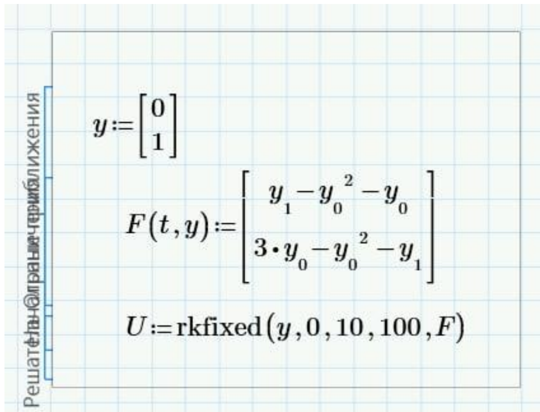
	0	1
0	1	0
1	1.1	0.115
2	1.2	0.264
3	1.3	0.448
4	1.4	0.672
5	1.5	0.937
6	1.6	1.248
7	1.7	1.606
8	1.8	2.016
9	1.9	2.479
10	2	3
11	2.1	3.58
12	2.2	4.224
13	2.3	4.933
14	2.4	5.712
15	2.5	6.562



а) б)

Рисунок 5.4 – Розв'язання задачі Коші методом Рунге-Кутти.





а) б)

Рисунок 5.5 – розв'язання системи диференційних рівнянь методом Рунге-Кутти.

Як відомо, ЗДР вищих порядків можуть бути зведені до системи рівнянь першого порядку, із подальшим розв'язанням цієї системи.

Приклад: вирішити ЗДР другого порядку $\frac{d^2}{dx^2}y - 2\cdot\frac{d}{dx}y = e^x + x\cdot\cos(x)$ з початковими умовами $y(0)=0,\ \frac{d}{dx}y(0) = 1$ на відрізку [0; π].

Позначивши *y* як y_0, *y'* як y_1, запишемо еквівалентну систему ЗДР першого порядку:

$$\begin{bmatrix} \frac{d}{dx}y_0 = y_1 & y_0(0) = 0 \\ \frac{d}{dx}y_1 = 2\cdot y_1 - 2\cdot y_0 + \left(e^x + x\cdot\cos(x)\right) & y_1(0) = 1 \end{bmatrix}$$

Подальше розв'язання ЗДР другого порядку зводиться до розв'язання системи ЗДР першого порядку:

$$y := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad F(x,y) := \begin{bmatrix} y_1 \\ 2\cdot y_1 - 2\cdot y_0 + \left(e^x + x\cdot\cos(x)\right) \end{bmatrix}$$

$$Z := \mathrm{rkfixed}(y, 0, \pi, 314, F)$$

Розв'язання крайових задач для звичайних диференційних рівнянь

Якщо для диференціального рівняння n-го порядку ***k*** граничних умов задані у початковій точці x_1, а ***(n-k)*** граничних умов – у кінцевій точці x_2, то така задача називається, як відомо, *крайовою задачею*. У MathCAD реалізовані функції, що дозволяють чисельно знайти умови в точках x_1 і x_2.

Двоточкова крайова задача

Задача вирішується у два етапи. Спочатку за допомогою функції *sbval* знаходяться початкові значення, а потім застосовується одна з вище описаних функцій для вирішення стандартної задачі Коші на відрізку.

Отже, функція *sbval*(v,x1,x2,F,load,score) шукає відсутні початкові умови, в точці x_1,

де v – вектор початкових наближень для початкових значень у точці x_1,

x_1, x_2 – граничні точки інтервалу;

F(x,y) – вектор-стовпець з n елементів, що містить праві частини диференціальних рівнянь;

load(x1,v) – вектор-стовпець з n елементів, що містить початкові значення у точці x_1; деякі з значень-константи, інші невідомі та будуть знайдені у процесі рішення.

score(x2,y) – вектор-стовпець розмірності вектора v, що містить різницю між початковою умовою в точці x_2 та значенням шуканого рішення в цій точці.

Приклад. Вирішити диференційне рівняння $y^{(V)} + y = 0$ за граничних умов: $y(0) = 0 \quad y'(0) = 7$ $y(1) = 1 \quad y'(1) = 10 \quad y''(1) = 5$.

Перший етап:

$$V := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$ Стартові умови для пошуку

$$F(x, y) := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ -y_0 \end{pmatrix}$$

$y''(0), \quad y'''(0), \quad y''''(0)$

$$L1(x1, V) := \begin{pmatrix} 0 \\ 7 \\ V_0 \\ V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} \qquad score(x2, y) := \begin{pmatrix} y_0 - 1 \\ y_1 - 10 \\ y_2 - 5 \end{pmatrix}$$

$$S := sbval(V, 0, 1, F, L1, score)$$

$$S = \begin{pmatrix} -85.014 \\ 348.107 \\ -516.257 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} y''(0) \\ y'''(0) \\ y''''(0) \end{matrix}$$ Недостаючі початкові умови знайдено

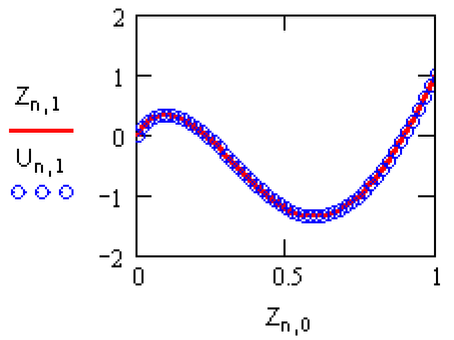
На другому етапі розв'язання крайової задачі вирішуємо ЗДР традиційним чисельним методом:

$$y := \begin{pmatrix} 0 \\ 7 \\ S_0 \\ S_1 \\ S_2 \end{pmatrix}$$

$Z := rkfixed(y, 0, 1, 50, F)$

$U := Rkadapt(y, 0, 1, 50, F)$

$n := 0 .. 50$



Крайова задача з умовами всередині інтервалу.

Дана задача також вирішується у два етапи. На першому етапі використовується функція *balfit*, що шукає відсутні початкові умови в точках x_1 і x_2, «зшиваючи» рішення, які виходять з цих точок, в точці x_f:

balfit(V1,V2,x1,x2,xf,F,load1,load2,score),

де V1,V2 – вектори початкових наближень для початкових значень у точках x_1 і x_2;

x_1, x_2 – граничні точки інтервалу;

load1(x1,V1) – вектор-стовпець з n елементів, що містить початкові значення у точці x_1; деякі з значень-константи, інші невідомі та будуть знайдені у процесі вирішення;

load2(x2,V2) – вектор-стовпець з n елементів, містить початкові значення у точці x_2; деякі з значень-константи, інші невідомі та будуть знайдені у процесі рішення;

score(xf,y) – вектор-стовпець розмірності n, що містить різницю між рішеннями, що починаються в точках x1 і x2, у точці x_f.

Приклад. Розв'язати диференційне рівняння $y''=y$ за граничних умов $y(-1) = 1$ $y(3) = 2$, «зшиваючи» рішення у точці x=0.

$$F(x,y) := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_0 \end{pmatrix} \quad x1 := -1 \quad x2 := 3 \quad xf := 0. \quad v1_0 := 1 \quad v2_0 := 1$$

$$load1(x1,v1) := \begin{pmatrix} 1 \\ v1_0 \end{pmatrix} \qquad load2(x2,v2) := \begin{pmatrix} 2 \\ v2_0 \end{pmatrix}$$

$$score(xf,y) := y \qquad S1 := bvalfit(v1,v2,x1,x2,xf,F,load1,load2,score)$$

«Недостаючі» значення похідних у точках x=-1 та x=3, відповідно, знайдено:

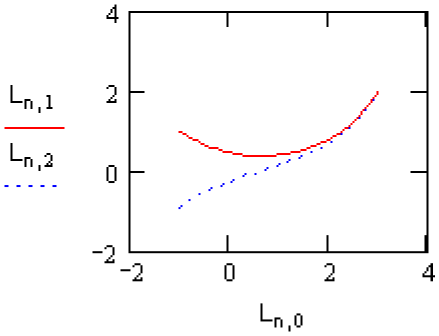
$$S1 = (-0.927 \quad 1.965)$$

Другий етап вирішення. Складаємо вектор початкових умов та реалізуємо метод Рунге-Кутти:

$$y := \begin{pmatrix} 1 \\ -0.927 \end{pmatrix}$$

$L := \text{rkfixed}(y, x1, x2, 40, F)$

$n := 0 .. 40$



L =

	0	1	2
0	-1	1	-0.927
1	-0.9	0.912	-0.831
2	-0.8	0.833	-0.744
3	-0.7	0.763	-0.665
4	-0.6	0.7	-0.591
5	-0.5	0.645	-0.524
6	-0.4	0.595	-0.462
7	-0.3	0.552	-0.405
8	-0.2	0.514	-0.352
9	-0.1	0.482	-0.302
10	0	0.454	-0.255
11	0.1	0.43	-0.211
12	0.2	0.411	-0.169
13	0.3	0.397	-0.129
14	0.4	0.386	-0.09
15	0.5	0.379	-0.051

Наближення функцій у середовищі MathCAD: лінійна регресія

Лінійна регресія в системі Mathcad виконується за векторами аргументу X та відліків Y функціями:

intercept(X,Y) – обчислює параметр a1, усунення лінії регресії по вертикалі;

slope(X,Y) – обчислює параметр a2, кутовий коефіцієнт лінії регресії.

Отримані значення коефіцієнтів використовуємо у рівнянні регресії *y(x) = a1+a2*x*.

Функція *corr (Y, y (x))* обчислює коефіцієнт кореляції Пірсона. Чим він ближчий до 1, тим точніше оброблювані дані відповідають лінійній залежності.

Поліноміальна регресія

Одновимірна поліноміальна регресія з довільним ступенем n полінома з довільними координатами відліків Mathcad виконується функціями:

regress(X,Y,n) – обчислює вектор S, у складі якого є коефіцієнти ai полінома n-го ступеня;

Значення коефіцієнтів ai можуть бути вилучені із вектора S функцією *submatrix(S, 3, length(S)-1, 0, 0)*.

Отримані значення коефіцієнтів використовуємо в рівнянні регресії *y(x) = a1+a2*x+a3*x2*

Нелінійна регресія

Для простих типових формул апроксимації передбачено низку функцій нелінійної регресії, у яких параметри функцій підбираються програмою Mathcad.

До них належить функція *expfit(X,Y,S)*, яка повертає вектор, що містить коефіцієнти a1, a2 і a3 експоненційної функції *y(x) = a1·exp(a2·x) + a3.*

У вектор S вводяться початкові значення коефіцієнтів a1, a2 та a3 першого наближення.

Приклади:

Вихідні дані: *(MathCAD 15)*

$$m := \begin{pmatrix} 0 & 16 \\ 0.4 & 20 \\ 0.7 & 25.5 \\ 1 & 34 \\ 1.5 & 40.7 \\ 1.9 & 49 \\ 2.5 & 60 \\ 2.9 & 69.6 \\ 3.6 & 89 \\ 4.3 & 98.3 \end{pmatrix} \qquad x := m^{\langle 0 \rangle} \qquad y := m^{\langle 1 \rangle}$$

x =

	0
0	0
1	0.4
2	0.7
3	1
4	1.5
5	1.9
6	2.5
7	2.9
8	3.6
9	4.3

y =

	0
0	16
1	20
2	25.5
3	34
4	40.7
5	49
6	60
7	69.6
8	89
9	98.3

Лінійна регресія:

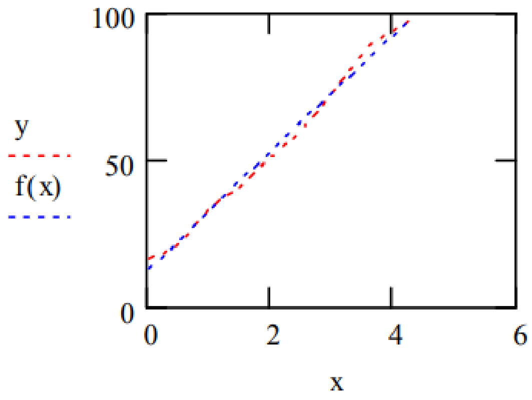
$$a1 := \mathrm{intercept}(x, y)$$

$$a1 = 12.665$$

$$a2 := \mathrm{slope}(x, y)$$

$$a2 = 19.971$$

$$f(x) := a1 + a2 \cdot x \qquad \mathrm{corr}(y, f(x)) = 0.997$$



Поліноміальна регресія (n=2):

$s := \mathrm{regress}(x, y, 2)$

$coeff := \mathrm{submatrix}(s, 3, \mathrm{length}(s) - 1, 0, 0)$

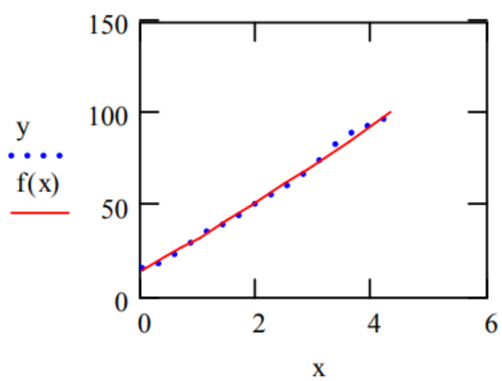
$A := coeff$

$a1 := A_0 \qquad a1 = 14.494$

$a2 := A_1 \qquad a2 = 16.96$

$a3 := A_2 \qquad a3 = 0.714$

$f(x) := a1 + a2 \cdot x + a3 \cdot x^2 \qquad \mathrm{corr}(y, f(x)) = 0.998$



Експоненційна регресія (n=2):

$$s := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

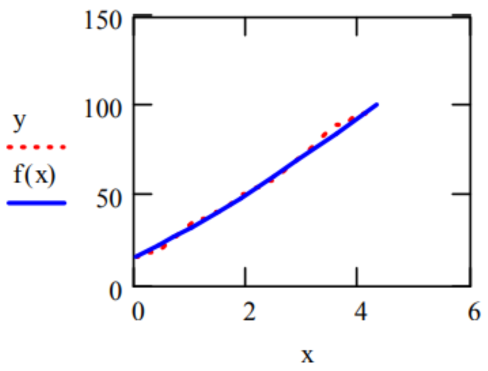
$$A := \mathrm{expfit}(x, y, s) \qquad A = \begin{pmatrix} 169.694 \\ 0.095 \\ -154.614 \end{pmatrix}$$

$$a1 := A_0 \qquad a1 = 169.694$$

$$a2 := A_1 \qquad a2 = 0.095$$

$$a3 := A_2 \qquad a3 = -154.614$$

$$f(x) := a1 \cdot e^{a2 \cdot x} + a3 \qquad \mathrm{corr}(y, f(x)) = 0.997$$



Сплайн-інтерполяція

Кубічна сплайн-інтерполяція дозволяє провести криву через набір точок таким чином, що перші і другі похідні кривої безперервні в кожній точці. Ця крива утворюється шляхом створення ряду кубічних поліномів, що проходять через набори трьох суміжних точок. Кубічні поліноми потім стикуються один з одним, щоб утворити одну криву.

У MathCad доступні різні сплайн-функції; кубічну сплайн-інтеполяцію реалізує функція *cspline (vx, vy).*

Сплайн-функція повертає вектор коефіцієнтів других похідних *vs*. Цей вектор *vs* зазвичай використовують у функції *interp*, описаної нижче.

Аргументи *vx* та *vy* повинні бути дійсними векторами однакової довжини. Значення вектора *vx* мають бути розташовані в порядку зростання.

Щоб провести кубічний сплайн через набір точок (рис. 2.9), слід:

–створити вектори вихідних даних *vx* і *vy*, що містять координати х і у, через які потрібно провести кубічний сплайн. Елементи *vx* повинні бути розташовані в порядку зростання. можна використовувати будь-які імена);

– обчислити вектор *vs: = cspline (vx, vy)*.

Вектор *vs* містить другі похідні інтерполяційної кривої в точках, що розглядаються;

Щоб знайти значення, що інтерполюється в довільній точці х0, слід скористатися функцією *interp(vs, vx, vy, x0)*, де *vs, vx, vy* - вектори, описані вище.

Приклад:

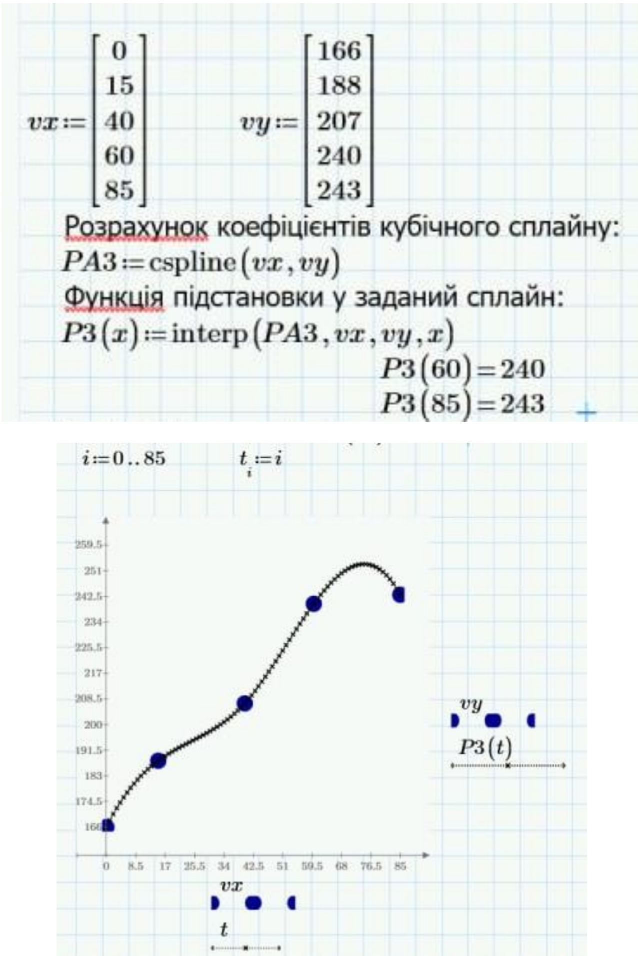


Рисунок 2.9 – Приклад побудови кубічного сплайну

3. Прикладні розрахунки та моделювання хіміко-технологічних процесів: комп'ютерний лабораторний практикум

Лабораторна робота 1. Початок роботи з програмою MathCAD

Мета: Вивчити інтерфейс середовища MathCAD.

Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

Послідовність виконання роботи

Завдання 1.1

1. Створити новий документ MathCAD.

2. Набрати в верхній частині робочого аркуша MathCAD текст «Завдання №1», а також інший коментар (тему, номер варіанта, прізвище студента та групу, дату виконання практикуму).

3. Набрати текст завдання до першого завдання («1. Обчислити значення виразу»).

4. Виконати розрахунок (використати десяткові точки):

$$\frac{12{,}25 + 3{,}25^3}{25{,}5} - 2{,}65 \cdot \sqrt[5]{2{,}25 + 1{,}26^3}$$

5. Виконати розрахунок теплоємності речовини C_{oP}, Дж/(моль·К) за температури T=298 К за наведеною формулою (використати десяткові точки):

	Коефіцієнти рівняння C°_p=a + bT + c'/T2		
Речовина	a	$b{*}10^3$	$c'{*}10^{-5}$
$Al_2(SO_4)_3$(к)	366,31	62,59	-112,47
		Дж/(моль·К)	

6. Виконати розрахунок:

Змінні				Вираз
a	*b*	*c*	*x*	
0,35	1,75	3,25	5,75	$\beta = \frac{bx^2 - a}{e^{ax} - 1} + \sqrt[3]{x^2 + 2ac}$

7. Перемістити блок, у якому змінній a присвоюється значення, нижче (або лівіше) блоку розрахунку виразу β. Зробити висновки щодо послідовности обчислення блоків у MathCAD.

8. Виконати розрахунок:

Визначити коефіцієнт тепловіддачі α (Вт/м^2·град) між стінкою реактора і шаром твердих частинок каталізатора (нерухомий шар):

$$\alpha = \begin{cases} \exp[\ln(0{,}813 \cdot \dfrac{K_g}{D_t}) + 0{,}9\ln(\dfrac{D_p \cdot G}{\mu}) - \dfrac{G \cdot D_p}{D_t}] & при\ \dfrac{D_p}{D_t} < 0{,}35, \\ \exp[\ln(0{,}125 \cdot \dfrac{K_g}{D_t}) + 0{,}75\ln(\dfrac{D_p \cdot G}{\mu})] & при\ \dfrac{D_p}{D_t} \geq 0{,}35. \end{cases}$$

при наступних значеннях вихідних даних:
$D_t = 0{,}14$ м – діаметр трубчатого реактора; $D_p = 0{,}177 \cdot 10^{-3}$ м –діаметр частинки каталізатора; $G = 771$ кг/(м^2·ч) – масова швидкість потоку газу крізь шар каталізатора; $\mu = 0{,}0647$ кг/(м·ч) – в'язкість; $K_g = 0{,}0947$ Вт/(м^2·град) – коефіцієнт теплопровідності.

9. Зберегти документ MathCAD.

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп’ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

Лабораторна робота 2. Базові розрахунки та робота з матрицями в середовищі MathCAD

<u>Мета</u>: Дослідити базові прийоми організації розрахунків та роботи з матрицями в середовищі MathCAD для потреб хімічних технологій.

Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

Послідовність виконання роботи

Завдання 2.1

1. Створити новий файл і присвоїти йому ім’я ***Прізвище_Пр2_Формули***.

2. Набрати текст завдання до першої частини практикуму («1. Обчислити значення виразу»). Виконати дії відповідно до індивідуального завдання свого варіанту (табл. 3.1).

3. Набрати текст завдання до другого завдання практикуму («2. Обчислити за формулою»). Виконати дії відповідно до індивідуального завдання свого варіанту (табл. 3.2). Результати розрахунку записати у змінну β. Вивести значення змінної β на екран.

4. Зберегти документ MathCAD під іменем, що містить номер практикуму, завдання, прізвище студента та варіант.

Таблиця 3.1 – Обчислення значення найпростішого виразу.

№ вар.	Арифметичний вираз	№ вар.	Арифметичний вираз
1	$0.123^2+\frac{32.265+2.56^3}{\sqrt[3]{456+3.12^{-0.236}}}$	16	$\sqrt[6]{12.26+2.65^3}+5.26^{-1.26}$
2	$\frac{45.23+2.65^3}{5.26}-\sqrt{23.56^2+3.26^3}$	17	$\sqrt{\frac{2.65^3+0.265^2}{15.26}+0.12^4}$
3	$\frac{23.6^2+3.25^3}{2.654}+\sqrt[7]{2.65+3.25^4}$	18	$15.26^3+\sqrt[6]{\frac{12.23^4+3.26^5}{156.23+2.26}}$
4	$45.26^2+5.65+\sqrt{\frac{2.65^3+0.265^2}{15.26}}$	19	$3.26^{-0.12}\cdot\sqrt{2.26^4+3.21^3+0.265^{-15}}$
5	$2.36+\frac{3.65^3+0.654^2}{0.265^{-2.365}}$	20	$\frac{12.26+3.26^3}{12.26}-2.654\cdot\sqrt[5]{2.26+1.26^3}$

№ вар.	Арифметичний вираз	№ вар.	Арифметичний вираз
6	$1.26^{-0.32} + \frac{2.56^3 - 3.26^4}{2 + 3.26 \cdot \sqrt[5]{2.65 + 0.265}}$	21	$\sqrt[7]{12.26^2 + 3.26^3} + 6.26^{-0.265} - \sqrt{456.26}$
7	$2.65^{-0.32} \cdot 3.26^2 + 0.26 \cdot \sqrt[6]{12.26 + 2.65^3}$	22	$\sqrt{2.26^2 + 3.26^3} + 0.5 \cdot 2.26^4 + \frac{126}{1.2 - 0.456}$
8	$0.25 \cdot \sqrt[8]{12.26 + 3.26^4} + 5.26^{-1.26}$	23	$\frac{12.26 + 3.26^3}{12.26} - 2.654 \cdot \sqrt[5]{2.26 + 1.26^3}$
9	$2.45 + \frac{1 - 2.6^3 + 0.514^2}{0.25^{-2.365}}$	24	$5.25^2 - 15.5 + \sqrt{\frac{2.5^4 + 0.25^3}{15.5}}$
10	$0.263^3 \cdot \sqrt[3]{1.23^2 + 6.23^3} - \sqrt{12.65 - 2.12^{-0.32}}$	25	$\sqrt[3]{15.6^3 + 3.25^3} + 6.26^{-0.25}$
11	$1.26^{-0.32} + \frac{2.56^3 - 3.26^4}{2 + 3.26 \cdot \sqrt[5]{2.65 + 0.265}}$	26	$\sqrt[7]{12.26^2 + 3.26^3} + 6.26^{-0.265} - \sqrt{456.26}$
12	$2.65^{-0.32} \cdot 3.26^2 + 0.26 \cdot \sqrt[6]{12.26 + 2.65^3}$	27	$\sqrt{2.26^2 + 3.26^3} + 0.5 \cdot 2.26^4 + \frac{126}{1.2 - 0.456}$
13	$0.25 \cdot \sqrt[8]{12.26 + 3.26^4} + 5.26^{-1.26}$	28	$\frac{12.26 + 3.26^3}{12.26} - 2.654 \cdot \sqrt[5]{2.26 + 1.26^3}$
14	$2.45 + \frac{1 - 2.6^3 + 0.514^2}{0.25^{-2.365}}$	29	$5.25^2 - 15.5 + \sqrt{\frac{2.5^4 + 0.25^3}{15.5}}$
15	$0.263^3 \cdot \sqrt[3]{1.23^2 + 6.23^3} - \sqrt{12.65 - 2.12^{-0.32}}$	30	$\sqrt[3]{12.26^2 + 3.26^3} + 6.26^{-0.254}$

Таблиця 3.2 – Обчислення значення виразу при заданих значеннях змінних.

№ Вар.	Змінні				Вираз $\beta =$
	a	**b**	**c**	**X**	
1	2.23	0.45	3.25	0.123	$a \cdot e^{-\sqrt{x}} \cdot cos\, b\, x + c$
2	0.23	135	0.36	0.231	$a \cdot cos(bc \cdot sin\, x) + c$
3	1.23	0.68	136	1.235	$\sqrt{a + b \cdot c^{sin\, x} + 1}$
4	2.36	0.56	3.65	1.365	$\sqrt[3]{a \cdot tgx + c \cdot sin\, b}$
5	0.36	1.23	5.26	0.236	$\frac{bx^2 - a}{e^{ax} - 1} + \sqrt[3]{x^{0.35} + 2ac}$
6	2.65	3.23	1.25	0.254	$\frac{sin\, x}{\sqrt{1 + a^3\, sin^2\, x}} - c \cdot ln\, b\, x$

№ Вар.	Змінні				Вираз $\beta =$
	a	**b**	**c**	**X**	
7	0.45	3.26	2.26	1.265	$bac^{ax^2} + a \cdot \sqrt{c + 1.5}$
8	2.36	1.25	5.36	0362	$e^{-ax} \cdot \sqrt{x+1} + e^{-bx} \cdot \sqrt[3]{x + 1.5}$
9	3.23	2.56	2.65	1.254	$b^x \cdot ctg(\frac{x}{a}) - \sqrt[5]{x + c}$
10	4.56	2.56	8.45	0.698	$\frac{x + cos\, 2\, x}{x + \sqrt{a + b\, sin\, 3\, c}}$
11	536	4.56	5.65	1.562	$ae^{-\sqrt{x}} - be^{-2\sqrt{x}}$
12	6.13	5.98	1.25	1.302	$sin\left(\frac{x}{a}\right) - e^{-bx} \cdot \sqrt{x+1}$
13	2.31	4.89	2.26	0.365	$e^{-ax}\, cos\, x + e^{-bx}\, sin\, x$
14	3.65	5.25	2.36	0.987	$2^x\, lg\, a\, x - 3^x\, lg\, b\, x$
15	2.34	2.01	5.26	1.205	$e^{-ax} \cdot \frac{x + \sqrt{x + a}}{c - \sqrt{2x + b}}$
16	3.51	3.02	4.21	0.236	$\frac{a}{x+2} e^{-bx^2} + ln(\, a + bx)$
17	1.62	5.12	3.21	0.365	$e^{-ax} \cdot \sqrt[3]{ax + b\, sin\, 2\, x}$
18	3.26	3.23	6.12	1.364	$\frac{ax + e^{-x}\, cos\, b\, x}{bx - e^{-x}\, sin\, b\, x + 1}$
19	6.13	5.98	1.25	1.302	$cos\left(\frac{x}{2a}\right) - e^{-bx} \cdot \sqrt{(x+1)^2}$
20	2.31	4.89	2.26	0.365	$e^{-bx}\, sin\, x + e^{-ax}\, cos^2\, x$
21	4.56	2.56	8.45	0.698	$\frac{x + arccos\, 2\, x}{x + \sqrt{a + b\, sin\, 3\, c}}$
22	536	4.56	5.65	1.562	$ae^{-\sqrt{x}} - be^{-2\sqrt{x}}$
23	6.13	5.98	1.25	1.302	$sin\left(\frac{x}{a}\right) - e^{-bx} \cdot \sqrt{x+1}$
24	2.31	4.89	2.26	0.365	$e^{-ax}\, cos\, x + e^{-bx}\, sin\, x$
25	3.65	5.25	2.36	0.987	$2^x\, lg\, a\, x - 3^x\, lg\, b\, x$
26	2.34	2.01	5.26	1.205	$e^{-ax} \cdot \frac{x + \sqrt{x + a}}{c - \sqrt{2x + b}}$
27	3.51	3.02	4.21	0.236	$\frac{a}{x+2} e^{-bx^2} + ln(\, a + bx)$
28	1.62	5.12	3.21	0.365	$e^{-ax} \cdot \sqrt[3]{ax + b\, sin\, 2\, x}$
29	3.26	3.23	6.12	1.364	$\frac{ax + e^{-x}\, cos\, b\, x}{bx - e^{-x}\, sin\, b\, x + 1}$

№ Вар.	Змінні				Вираз $\beta =$
	a	**b**	**c**	**X**	
30	6.13	5.98	1.25	1.302	$arccos\left(\frac{x}{2a}\right) - e^{-bx} \cdot \sqrt{(x+1)^2}$

Завдання 2.2

1. Створити новий файл і присвоїти йому ім'я ***Прізвище_Пр2_Матриці***.

2. Вставити до документу матрицю A (згідно варіанту табл. 3.3):

$$A := \begin{bmatrix} 8 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & -1 \\ 1 & -1 & 5 \end{bmatrix}$$

3. Розрахувати транспоновану матрицю A:

$$A^{T} = \begin{bmatrix} 8 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & -1 \\ 1 & -1 & 5 \end{bmatrix}$$

4.Розрахувати матрицю, обернену до матриці A:

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 0.133 & -0.033 & -0.033 \\ -0.033 & 0.217 & 0.05 \\ -0.033 & 0.05 & 0.217 \end{bmatrix}$$

5. Розрахувати визначник матриці A:

$$|A| = 180$$

6. Вставити до документу матрицю B (однакову для всіх варіантів):

$$B := \begin{bmatrix} 26 \\ 7 \\ 8 \end{bmatrix}$$

7. Розрахувати матрицю X, що є добутком оберненої матриці A та стовпця B: $X=A^{-1}B$:

$$X := A^{-1} \cdot B \qquad X = \begin{bmatrix} 2.967 \\ 1.05 \\ 1.217 \end{bmatrix}$$

8. Визначити максимальний і мінімальний елементи у матрицях A та B:

$$min(A) = -1$$
$$\max(A) = 8$$
$$min(B) = 7$$
$$\max(B) = 26$$

9. Створити нові матриці:

а) матрицю C, розташувавши матрицю B ліворуч від матриці A;

б) матрицю D, розташувавши обернену матрицю A під вихідною матрицею A.

$$C := \mathrm{augment}(A, B) \qquad C = \begin{bmatrix} 8 & 1 & 1 & 26 \\ 1 & 5 & -1 & 7 \\ 1 & -1 & 5 & 8 \end{bmatrix}$$

$$D := \mathrm{stack}\left(A, A^{-1}\right) \qquad D = \begin{bmatrix} 8 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & -1 \\ 1 & -1 & 5 \\ 0.133 & -0.033 & -0.033 \\ -0.033 & 0.217 & 0.05 \\ -0.033 & 0.05 & 0.217 \end{bmatrix}$$

10. Створити нові вектори-стовпці (рядки):

а) матрицю A1, «вирізавши» для неї з матриці A найперший рядок;

б) матрицю A2, «вирізавши» для неї з матриці A найперший стовпець.

11. Переключитися на нумерацію рядків і стовпців матриць, починаючи з одиниці (а не з нуля). Піднести до квадрату елемент матриці A, що стоїть на перетині її найпершого найостаннішого рядка і стовпця:

$$A1 := \widehat{A^{0}} = \begin{bmatrix} 8 & 1 & 1 \end{bmatrix} \qquad A2 := A^{\langle 0 \rangle} = \begin{bmatrix} 8 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{ORIGIN} := 1$$

$$a := A_{3,3}$$

$$a^2 = 25$$

$$A2 := A^{\langle \boxed{0} \rangle}$$

Недопустимый индекс массива. Индекс должен быть целым числом не менее ORIGIN и не более номера последнего элемента.

12. Знайти кількість рядків і кількість стовпців матриці A:

$\mathrm{cols}(A)=3$

$\mathrm{rows}(A)=3$

13. Розрахувати ранг матриці А:

$\mathrm{rank}(A)=3$

14. Зберегти документ MathCAD під іменем, що містить номер практикуму, завдання, прізвище студента та варіант.

Таблиця 3.3 – Виконати перетворення матриць

Вар. №	Завдання	Вар. №	Завдання	Вар. №	Завдання
1	$A=\begin{bmatrix}1&0&2\\3&-1&1\\0&2&1\end{bmatrix}$	**11**	$A=\begin{bmatrix}2&0&1\\1&4&0\\1&-1&1\end{bmatrix}$	**21**	$A=\begin{bmatrix}2&3&-1\\0&1&2\\0&1&3\end{bmatrix}$
2	$A=\begin{bmatrix}1&-1&0\\0&2&1\\-2&0&2\end{bmatrix}$	**12**	$A=\begin{bmatrix}-1&1&2\\2&2&0\\0&-1&0\end{bmatrix}$	**22**	$A=\begin{bmatrix}1&3&0\\0&1&-1\\3&1&-1\end{bmatrix}$
3	$A=\begin{bmatrix}5&0&2\\-1&1&-3\\3&0&2\end{bmatrix}$	**13**	$A=\begin{bmatrix}0&1&2\\2&3&-1\\0&1&3\end{bmatrix}$	**23**	$A=\begin{bmatrix}2&1&0\\-1&3&1\\0&2&-1\end{bmatrix}$
4	$A=\begin{bmatrix}6&5&2\\11&9&2\\4&5&2\end{bmatrix}$	**14**	$A=\begin{bmatrix}1&1&1\\3&4&3\\9&8&5\end{bmatrix}$	**24**	$A=\begin{bmatrix}3&3&1\\7&6&2\\7&9&2\end{bmatrix}$
5	$A=\begin{bmatrix}3&5&4\\8&9&7\\5&6&4\end{bmatrix}$	**15**	$A=\begin{bmatrix}1&0&3\\3&1&7\\2&1&8\end{bmatrix}$	**25**	$A=\begin{bmatrix}1&4&-1\\5&15&0\\1&7&0\end{bmatrix}$
6	$A=\begin{bmatrix}3&5&2\\-2&2&5\\4&3&-2\end{bmatrix}$	**16**	$\mathrm{A}=\begin{bmatrix}1&-1&3\\2&3&3\\1&-2&-1\end{bmatrix}$	**26**	$A=\begin{bmatrix}5&4&2\\8&9&4\\13&9&5\end{bmatrix}$
7	$A=\begin{bmatrix}1&-1&0\\0&2&1\\-2&0&2\end{bmatrix}$	**17**	$A=\begin{bmatrix}-1&1&2\\2&2&0\\0&-1&0\end{bmatrix}$	**27**	$A=\begin{bmatrix}1&3&0\\0&1&-1\\3&1&-1\end{bmatrix}$

Вар. №	Завдання	Вар. №	Завдання	Вар. №	Завдання
8	$A=\begin{bmatrix} 5 & 0 & 2 \\ -1 & 1 & -3 \\ 3 & 0 & 2 \end{bmatrix}$	**18**	$A=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & -1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$	**28**	$A=\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & -1 \end{bmatrix}$
9	$A=\begin{bmatrix} 6 & 5 & 2 \\ 11 & 9 & 2 \\ 4 & 5 & 2 \end{bmatrix}$	**19**	$A=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 3 & 4 & 3 \\ 9 & 8 & 5 \end{bmatrix}$	**29**	$A=\begin{bmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 7 & 6 & 2 \\ 7 & 9 & 2 \end{bmatrix}$
10	$A=\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 1 & 4 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$	**20**	$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 3 & -1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}$	**30**	$A=\begin{bmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & -1 \end{bmatrix}$

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп’ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

Лабораторна робота 3. Балансові розрахунки шляхом розв'язання систем рівнянь

<u>**Мета**</u>: Дослідити базові засоби організації балансових розрахунків шляхом розв'язання систем рівнянь.

Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

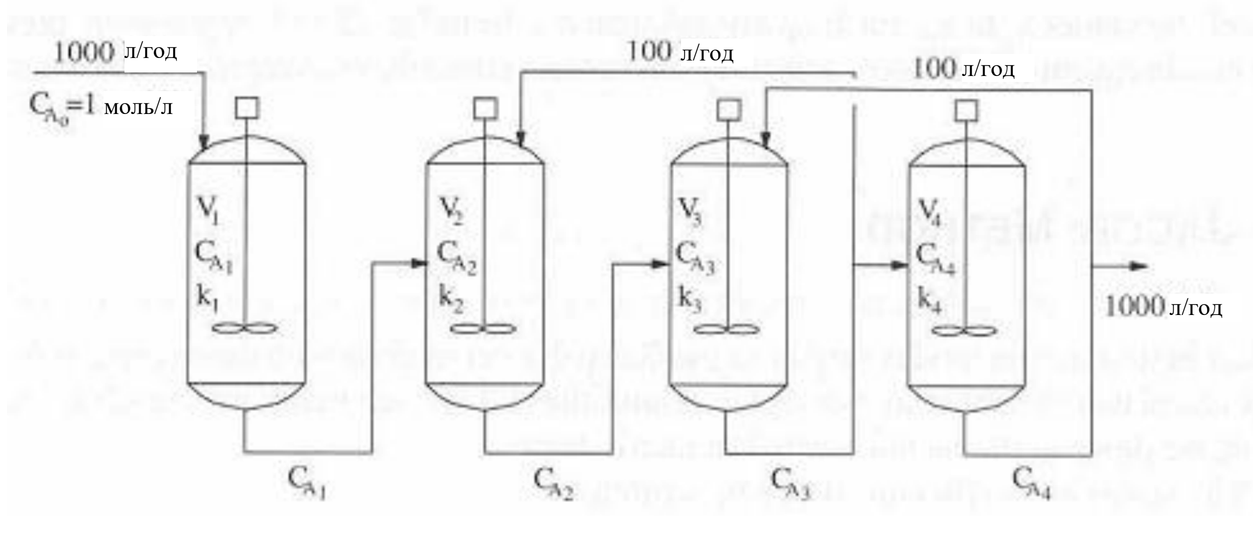
Послідовність виконання роботи

Загальне завдання:

1. Створити новий файл і присвоїти йому ім'я ***Прізвище_Пр3_БалансиСистеми***.
2. Для кожної з хіміко-технологічних систем скласти систему рівнянь матеріального балансу.
3. Розв'язати систему балансових рівнянь:
   a. методом «зворотньої матриці»;
   b. з використанням вбудованої функції MathCAD.

Завдання 3.1

Опис об'єкту моделювання та приклад розрахунків. У каскаді реакторів неперервної дії з мішалками (рис.) протікають незворотні хімічна реакції першого порядку $\left(A \overset{k_i}{\rightarrow} B\right)$.



Каскад реакторів з мішалками (CSTR)

Температурні умови у кожному з реакторів є такими, що значення константи швидкості k_i у кожному з реакторів не співпадають. Також, різними є об'єми реакторів V_i. Значення k_i та V_i наведені у таблиці:

Об'ємно-кінетичні характеристики досліджуваних реакторів

Реактор №	V_i, л	k_i, 1/год	Реактор №	V_i, л	k_i, 1/год
1	1000	0,1	3	100	0,4
2	1500	0,2	4	500	0,3

При складені математичного опису зроблено такі припущення:

а) Процес проходить у стаціонарних умовах

б) Реакція протікає у рідкій фазі

в) Об'єм та густина рідини не змінюється в ході реакції

г) Швидкість витрати компонента A задається співвідношенням (моль/год):

$$R_i = V_i k_i c_{A_i}$$

Матеріальні баланси для кожного з реакторів у стаціонарному режимі можна представити у вигляді системи рівнянь:

$$\begin{cases} (1000)(1) = 1000\, c_{A_1} + V_1 k_1 c_{A_1} \\ 1000\, c_{A_1} + 100\, c_{A_3} = 1100\, c_{A_2} + V_2 k_2 c_{A_2} \\ 1100\, c_{A_2} + 100\, c_{A_4} = 1200\, c_{A_3} + V_3 k_3 c_{A_3} \\ 1100\, c_{A_1} = 1100\, c_{A_4} + V_4 k_4 c_{A_4} \end{cases}$$

Із урахуванням значень об'єму та константи швидкості для кожного з реакторів, маємо:

$$\begin{cases} 1100\, c_{A_1} & & & & = 1000 \\ 1000\, c_{A_1} & -1400\, c_{A_2} & +100\, c_{A_3} & & = 0 \\ & 1100\, c_{A_2} & -1240\, c_{A_3} & +100\, c_{A_4} & = 0 \\ & & 1100\, c_{A_3} & -1250\, c_{A_4} & = 0 \end{cases}$$

Розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь у MathCAD:

a. методом «зворотньої матриці»:

$$A := \begin{bmatrix} 1100 & 0 & 0 & 0 \\ 1000 & -1400 & 100 & 0 \\ 0 & 1100 & -1240 & 100 \\ 0 & 0 & 1100 & -1250 \end{bmatrix} \qquad B := \begin{bmatrix} 1000 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$X := A^{-1} \cdot B = \begin{bmatrix} 0.909 \\ 0.697 \\ 0.665 \\ 0.586 \end{bmatrix}$$

b. з використанням вбудованої функції MathCAD:

$$A := \begin{bmatrix} 1100 & 0 & 0 & 0 \\ 1000 & -1400 & 100 & 0 \\ 0 & 1100 & -1240 & 100 \\ 0 & 0 & 1100 & -1250 \end{bmatrix} \qquad B := \begin{bmatrix} 1000 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

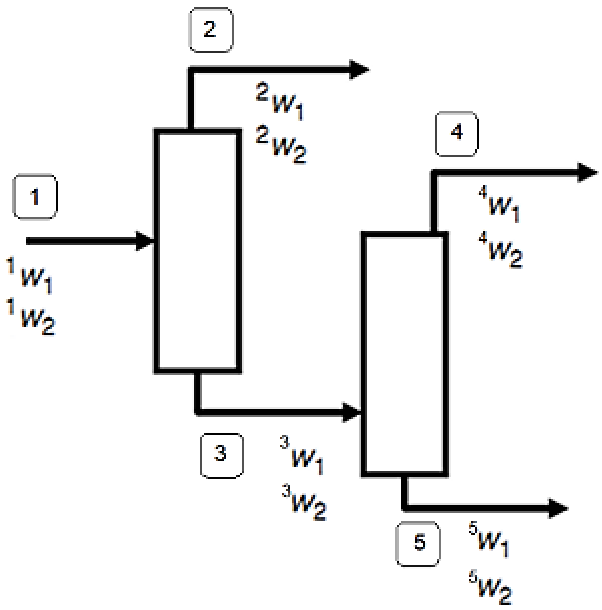
$$X := \mathrm{lsolve}(A, B) \qquad X = \begin{bmatrix} 0.909 \\ 0.697 \\ 0.665 \\ 0.586 \end{bmatrix}$$

Завдання 3.2

Опис об’єкту моделювання та приклад розрахунків. Розрахунок матеріальних балансів підсистеми розділення суміші у складі хіміко-технологічної системи[1] (рис.).

Вихідними даними є масова витрата вхідного (першого) потоку ${}^{1}F = 10\ {}^{\text{кг}}/_{\text{год}}$, склад вхідного потоку у вигляді масових часток по двох цільових компонентах ${}^{1}w_1 = 0{,}2$, ${}^{1}w_2 = 0{,}6$, а також параметри кожної з ректифікаційних колон (апаратів розділення), задані як масові частки компонентів: ${}^{2}w_1 = 0{,}04$, ${}^{4}w_1 = 0{,}54$, ${}^{5}w_1 = 0{,}26$, ${}^{2}w_2 = 0{,}93$, ${}^{4}w_2 = 0{,}24$, ${}^{5}w_2 = 0$. Ставиться задача обчислити масові витрати потоків на виході кожного з апаратів розділення (потоки 2, 4 і 5).

[1] Adidharma H., Temyanko V. Mathcad for Chemical Engineers. Trafford Publishing, 2007. 172 p.



Підсистема розділення суміші в складі хіміко-технологічної системи:

^iF – масова витрата потоку i, кг/год, $i = \overline{1,5}$, ^iw_j – масова частка у i-тому потоці компоненту j, $i = \overline{1,5}$, $j = \overline{1,2}$.

Складемо матеріальні баланси:

1. Загальний баланс: $^1F = {}^2F + {}^3F = {}^2F + {}^4F + {}^5F$.
2. За компонентом 1: ${}^1w_1 \cdot {}^1F = {}^2w_1 \cdot {}^2F + {}^4w_1 \cdot {}^4F + {}^5w_1 \cdot {}^5F$.
3. За компонентом 2: ${}^1w_2 \cdot {}^1F = {}^2w_2 \cdot {}^2F + {}^4w_2 \cdot {}^4F + {}^5w_2 \cdot {}^5F$.

Після підстановки чисельних значень, уведення замін $x_1 = {}^2F$, $x_2 = {}^4F$, $x_3 = {}^5F$ і належних спрощень отримуємо систему рівнянь:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 10 \\ 0{,}04 \cdot x_1 + 0{,}54 \cdot x_2 + 0{,}26 \cdot x_3 = 2 \\ 0{,}93 \cdot x_1 + 0{,}24 \cdot x_2 + 0{,}00 \cdot x_3 = 6. \end{cases}$$

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0.04 & 0.54 & 0.26 \\ 0.93 & 0.24 & 0.00 \end{bmatrix} \qquad B := \begin{bmatrix} 10 \\ 2 \\ 6 \end{bmatrix}$$

$$X := A^{-1} \cdot B = \begin{bmatrix} 5.8238 \\ 2.433 \\ 1.7433 \end{bmatrix}$$

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп'ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

Лабораторна робота 4. Розв'язання нелінійних алгебраїчних рівнянь у розрахунках з хімічній інженерії

Мета: Дослідити базові засоби організації розв'язання нелінійних алгебраїчних рівнянь у розрахунках з хімічній інженерії.

Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

Послідовність виконання роботи

Завдання 4.1

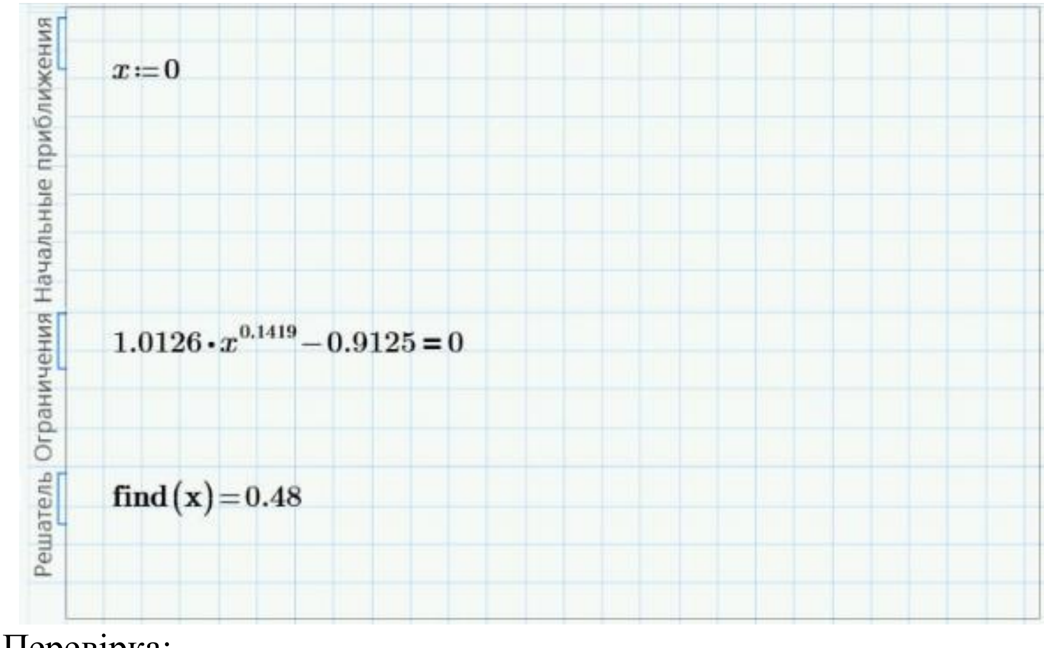
1. Створити новий файл і присвоїти йому ім'я ***Прізвище_Пр4_Рівняння***.
2. Для кожного з хіміко-технологічних об'єктів скласти рівняння або систему рівнянь математичного опису.
3. Розв'язати рівняння:

Опис об'єкту моделювання та приклад розрахунків. Внаслідок математичного опрацювання (апроксимації) результатів експериментального вимірювання залежності концентрації парів етанової кислоти (y, мольн. частки) від концентрації етанової кислоти в рідині (x, мольн. частки) отримано наступну формулу:

$$y(x) = 1{,}0126 \cdot x^{0{,}1419}.$$

Поставлено задачу визначити значення x, яке відповідає певному значенню $y = 0{,}9125$. Тоді, після належних перетворень, можна отримати рівняння до розв'язання:

$$y(x) = 1{,}0126 \cdot x^{0{,}1419} - 0{,}9125 = 0$$



Перевірка:

$$1.0126 \cdot 0.48^{0.1419} - 0.9125 = -5.635 \cdot 10^{-5}$$

Відповідь:

Концентрації етанової кислоти в рідині $x \approx 0{,}48$.

4. Розв'язати систему нелінійних рівнянь:

Опис об'єкту моделювання та приклад розрахунків. Досліджується рівновага у водному розчині оксалатної кислоти з концентрацією с = 0,100 моль/л:

$$H_2C_2O_4 \Leftrightarrow H^+ + HC_2O_4^-;\ K_1 = \frac{[H^+][HC_2O_4^-]}{[H_2C_2O_4]} = 6{,}5 \cdot 10^{-2} \text{ (моль/л)},$$

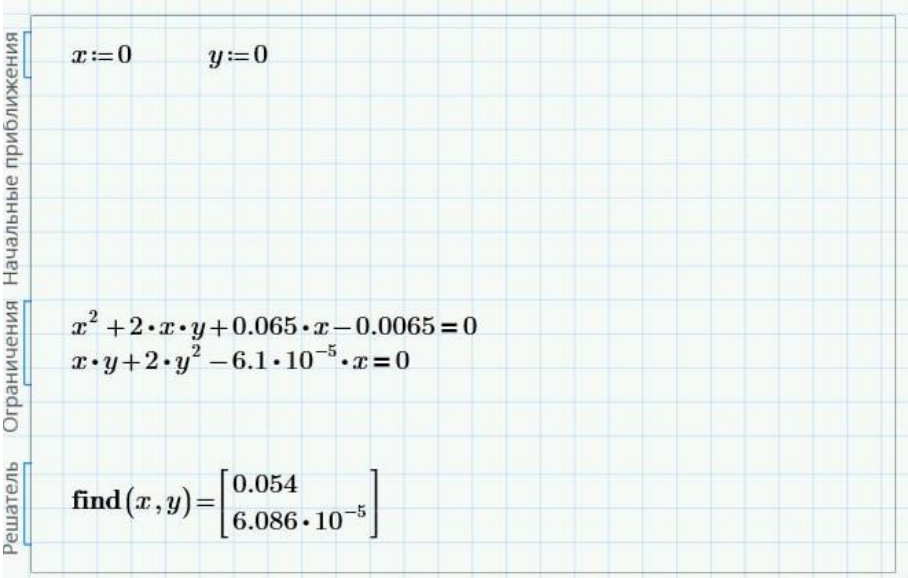
$$HC_2O_4^- \Leftrightarrow H^+ + C_2O_4^{2-};\ K_2 = \frac{[H^+][C_2O_4^{2-}]}{[HC_2O_4^-]} = 6{,}1 \cdot 10^{-5} \text{ (моль/л)}.$$

Якщо позначити рівноважні концентрації $[HC_2O_4^-] = x$ (моль/л), $[C_2O_4^{2-}] = y$ (моль/л), і (виходячи зі схем дисоціації) $[H^+] = x + 2 \cdot y$ (моль/л), $[H_2C_2O_4] = c - x - y$ (моль/л), то система рівнянь для розрахунку рівноважних концентрацій набуде вигляду:

$$\begin{cases} K_1 = \dfrac{(x+2y)\cdot x}{c - x - y} \text{ (моль/л)} \\ K_2 = \dfrac{(x+2y)\cdot y}{x} \text{ (моль/л)}, \end{cases}$$

або, після підставлення чисельних значень та здійснення алгебраїчних перетворень:

$$\begin{cases} x^2 + 2xy + 6{,}5 \cdot 10^{-2}x + 6{,}5 \cdot 10^{-2}y - 6{,}5 \cdot 10^{-3} = 0 \\ xy + 2y^2 - 6{,}1 \cdot 10^{-5}x = 0. \end{cases}$$



Відповідь

$[HC_2O_4^-] = x \approx 0{,}054$ (моль/л), $[C_2O_4^{2-}] = y \approx 6{,}09 \cdot 10^{-5}$ (моль/л).

$[H^+] = x + 2 \cdot y \approx 0{,}053$ (моль/л), $[H_2C_2O_4] = c - x - y \approx 0{,}047$ (моль/л).

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп'ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

Лабораторна робота №5. Побудова графіків в системі MathCAD

Мета: Дослідити базові засоби побудови графіків в системі MathCAD для потреб хімічної інженерії.

Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

Послідовність виконання роботи

Завдання 5.1

1. Створити новий файл і присвоїти йому ім'я ***Прізвище_Пр5_Графіки***.
2. Створити вектор (матрицю-стовпець) **T**, заповнивши його значеннями аргументу (температури) та вектор (матрицю-стовпець) $\boldsymbol{\eta}$, заповнивши його значеннями функції (в'язкості) згідно наданої інформації:

Динамічна в'язкість води за атмосферного тиску

Температура **t**, °C	В'язкість **η** 10^3,Па·с
0	1,787
5	1,519
10	1,307
20	1,002
30	0,798
40	0,653
50	0,547
60	0,467
70	0,404
80	0,355
90	0,315
100	0,282

1. Записати вміст вектора **T** у текстовий файл, назвавши його «(Прізв).txt», де (Прізв) – прізвище студента.
2. Побудувати графік залежності $\boldsymbol{\eta}$ від **T**.
3. Виконати побудову графіка залежності y = f(x), заданої функціонально.

У ізотермічному реакторі ідеального перемішування перебігає хімічний процес за схемою: $A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} D$.

Зміна концентрації компонента *P* (за умови $C_{P0} = C_{D0} = 0$) визначається залежністю:

$$C_P = \frac{k_1 \tau C_{A0}}{(1+k_1\tau)(1+k_2\tau)},$$

де *Cp* – поточна концентрація речовини *P,* кмоль/м^3; C_{A0}, C_{P0}, C_{D0} – початкова концентрація сировини компонентів A, *P,* D; k_1, k_2 – константи хімічних реакцій, с$^{-1}$; τ – час перебування в апараті, с$^{-1}$. Задано значення C_{A0} = 5,0 кмоль/м^3; C_{P0} = C_{D0} = 0; k_1=5,7*10^{-3} с$^{-1}$; k_2 =3,21*10^{-3} с$^{-1}$. Можливий час перебування – від 0 до 3600 с.

3. Використовуючи дані таблиці 3.4, відповідно до свого варіанта виконати побудову графіка №1 залежності *y = f(x)* для х від -15 до +15.
4. Використовуючи дані таблиці 4, відповідно до свого варіанта виконати побудову графіка №2, що <u>містить дві криві *f(x)* та *g(x)* на одному полі графіка</u>.

Таблиця 3.4 – Вихідні дані для побудови Декартових графіків

№ Вар.	f(x)	g(x)	№ Вар.	f(x)	g(x)
1	$\cos x + x\sin x$	$2-\frac{\lvert x\rvert}{x+0.1}$	*16*	$arctg\frac{2}{x+0.2}$	$1-2^{\frac{1}{x}}$
2	$x\cdot 2^{-x}$	$\sin^4 x+\cos^4 x$	*17*	x^3+x	$\sin x+2x$
3	$(x-2)^{\frac{2}{3}}+(x+2)^{\frac{2}{3}}$	$\sin(3x+1)$	*18*	$4-x^2$	$\sin^2 x$
4	$2x\sin^2 x$	$3x^3$	*19*	$\lvert 4x-x^3\rvert$	$\sin x - x - \frac{x^3}{3}$
5	$\left(\frac{1}{3}\right)^x-3^x$	$\lvert\sin x\rvert$	*20*	$\frac{2\lvert x\rvert}{x+0.2}$	$x\ln x - x$
6	$\frac{x}{\sin x}$	$\frac{1}{2^x}$	*21*	$x+arctgx$	x^2-6x+8
7	$5\log_2(x+1)$	x^3-x^2	*22*	$(x+2)e^{\frac{1}{x}}$	$3x^4+4x^3+1$
8	$x\cdot 4^{-x^2}$	$\sin 3x+\sin 2x$	*23*	$x+\sin 2x$	$\frac{1}{x}+x$
9	$\log_2\frac{2-x}{2+x}$	$2\lvert x-1\rvert$	*24*	$e^{\frac{1}{x}}-x$	$\frac{x}{x-1}$
10	3^x+3^{-x}	$\sin 4x$	*25*	x^3-3x	$\frac{e^x}{x^2-3}$
11	5^{-x^2}	$tg\left(\frac{x}{2}\right)$	*26*	$1+2x^2$	$x^2e^{-x^2}$
12	x^2-x	$\sin 2x+\cos x$	*27*	$(x^2-1)^3$	$x\ln^2 x$
13	x^3+x^2	$\cos^2 3x$	*28*	$\frac{x}{1+x^2}$	$x-\ln x$
14	$\frac{4}{4+x^2}$	$\sin^2\frac{x}{3}$	*29*	x^2-x+1	$1+\sin x$

№ Вар.	f(x)	g(x)	№ Вар.	f(x)	g(x)
15	$2^{\frac{1}{x-2}}$	$\left\|\cos\frac{x}{2}\right\|$	*30*	$(x+1)^2$	$x^2\cos^2 x$

5. Використовуючи дані таблиці 3.5, відповідно до свого варіанта побудувати графік функції *Z = f (x,y)*. Зазначену функцію попередньо задати у вигляді функції користувача MathCAD.

Таблиця 3.5 – Вихідні дані для побудови тривимірних графіків

№	Завдання	№	Завдання	№	Завдання
1	$z = x^2 y + \frac{x^2}{y} + \frac{4}{x}$	11	$z = 3y + \frac{2x}{y} + \frac{1}{x^2 y}$	21	$z = 2xy + \frac{3}{y} + \frac{27}{x^2 y}$
2	$z = 2xy + \frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2}$	12	$z = x^3 + y^3 + \frac{3}{xy}$	22	$z = 3x^3 + 3y^3 + \frac{9}{xy}$
3	$z = \frac{1}{4}x^2 y + \frac{x^2}{y} + \frac{2}{x}$	13	$z = 2\sqrt{x} + 3y + \frac{1}{xy^3}$	23	$z = \sqrt{xy} + \frac{9}{y} + \frac{36}{x}$
4	$z = 2xy + \frac{3}{y} + \frac{27}{x^2 y}$	14	$z = 2x + \frac{2}{x\sqrt{y}} + y$	24	$z = x^2 y + \frac{3}{y} + \frac{2y}{x}$
5	$z = 3x^3 + 3y^3 + \frac{9}{xy}$	15	$z = 4y\sqrt{x} + \frac{4}{y} + \frac{4}{\sqrt{x}}$	25	$z = x^2 y + \frac{x^2}{y} + \frac{4}{x}$
6	$z = xy + \frac{2}{x^4 y^2} + \frac{2}{y^2}$	16	$z = 3\sqrt[3]{x} \cdot y + \frac{2}{y} + \frac{1}{xy}$	26	$z = 2xy + \frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2}$
7	$z = xy + \frac{2}{y} + \frac{2}{x^2 y}$	17	$z = x^2 y + \frac{4x^2}{y} + \frac{8}{x}$	27	$z = \sqrt{x} \cdot y + \frac{4}{xy} + \frac{1}{y}$
8	$z = x + \frac{2y}{\sqrt{x}} + \frac{2}{y}$	18	$z = \sqrt{xy} + \frac{9}{y} + \frac{36}{x}$	28	$z = 2\sqrt{x} + 3y + \frac{1}{xy^3}$
9	$z = \frac{2}{9}xy^4 + \frac{8}{x} + \frac{16}{3y}$	19	$z = x^2 y + \frac{3}{y} + \frac{2y}{x}$	29	$z = xy + \frac{2}{x^4 y^2} + \frac{2}{y^2}$
10	$z = y + \frac{2x}{\sqrt{y}} + \frac{2}{x}$	20	$z = \sqrt{x} \cdot y + \frac{4}{xy} + \frac{1}{y}$	30	$z = x^2 y + \frac{x^2}{y} + \frac{4}{x}$

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп’ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

Лабораторна робота №6. Побудова апроксимаційних моделей

Мета: Дослідити базові засоби побудови апроксимаційних моделей в системі MathCAD для потреб хімічної інженерії.

Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

Послідовність виконання роботи

Завдання 6.1

1. Створити новий файл і присвоїти йому ім’я ***Прізвище_Пр6_Апрокимація***.
2. Обчислити параметри лінійної регресії за допомогою стандартних функцій пакету MathCAD.

Опис об’єкту моделювання та приклад розрахунків.

На підприємстві проводять експериментальне визначення питомої продуктивності апарата безперервної дії (трубчастого реактора), в якому здійснюється рідкофазна реакція.

Позначимо параметри: x – об’ємна швидкість подачі сировини Q (л/хв),

параметр y – масова швидкість утворення цільового продукту (кг/год), виміряна в усталеному режимі.

№	Об’ємна швидкість x, дм^3/хв	Продуктивність y, кг/год
1	2,0	0,95
2	6,2	2,9
3	10,7	5,1
4	14,9	6,8
5	20,5	9,6

При збільшенні швидкості подачі сировини в апарат (за однакових умов температури, тиску й концентрацій) зростає масова швидкість утворення продукту. У діапазоні експерименту залежність $y(x)$ виявилась близькою до лінійної: $y=ax+b$,

де a – коефіцієнт пропорційності (характеризує ефективність процесу), b – умовне зміщення (враховує початкові втрати чи холостий режим апарата).

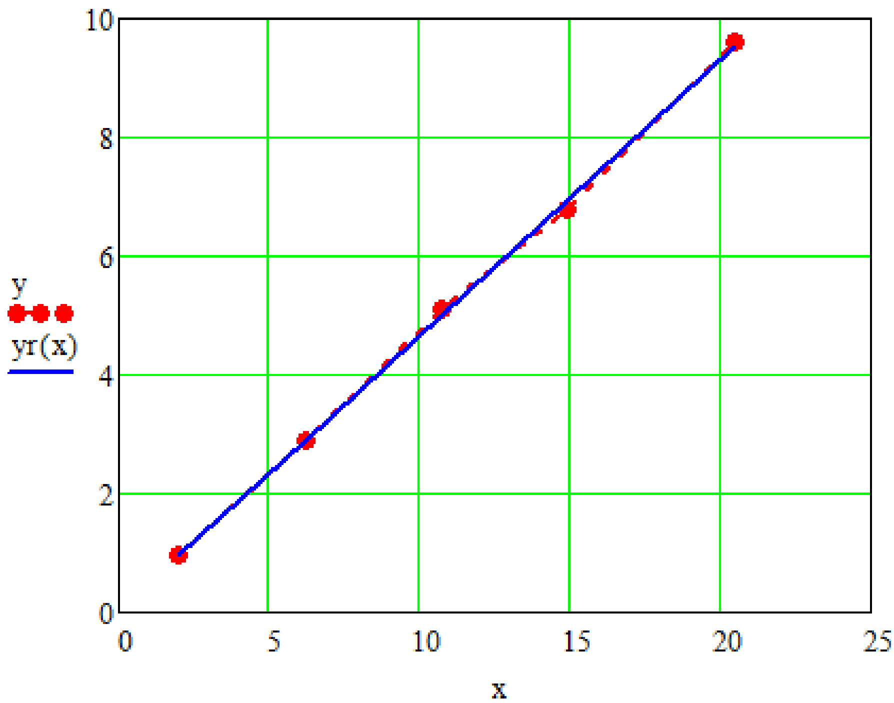
Потрібно побудувати лінійну модель $y(x)=ax+b$ за експериментальними даними з метою використання її, наприклад, для прогнозу продуктивності при іншій швидкості подачі.

$$x := \begin{pmatrix} 2.0 \\ 6.2 \\ 10.7 \\ 14.9 \\ 20.5 \end{pmatrix} \qquad y := \begin{pmatrix} 0.95 \\ 2.9 \\ 5.1 \\ 6.8 \\ 9.6 \end{pmatrix}$$

$a := \mathrm{intercept}(x, y) \qquad b := \mathrm{slope}(x, y)$

$a = 0.028 \qquad b = 0.464$

$yr(z) := a + b \cdot z$



Завдання 6.2

1. Обчислити параметри нелінійної регресії за допомогою стандартних функцій пакету MathCAD.

Опис об’єкту моделювання та приклад розрахунків.

В лабораторній практиці часто будують калібрувальні криві для приладів (наприклад, для фотометрів або кондуктометрів).

При підготовці процесу аналізу водного розчину солей було проведено серію калібрувань.

Позначено x – масова частка розчиненої солі у розчині (кг солі на 1 кг розчину); y – оптична густина розчину, виміряна приладом.

№	x, мас. частка адсорбату	y, ступінь насичення
1	0,04	0,396
2	0,12	0,631
3	0,20	0,754
4	0,31	0,839
5	0,43	0,895
6	0,55	0,929
7	0,66	0,949
8	0,76	0,962

Через те, що при високих концентраціях розчин відхиляється від ідеальної поведінки (взаємодії між частинками), залежність $y(x)$ є нелінійною.

Щоб використовувати цю калібрувальну криву в подальших (автоматичних) розрахунках, потрібно апроксимувати її поліномом із заданою точністю.

$$x := \begin{pmatrix} 0.04 \\ 0.12 \\ 0.20 \\ 0.31 \\ 0.43 \\ 0.55 \\ 0.66 \\ 0.76 \end{pmatrix}$$ значення незалежної змінної

$$y := \begin{pmatrix} 0.396 \\ 0.631 \\ 0.754 \\ 0.839 \\ 0.895 \\ 0.929 \\ 0.949 \\ 0.962 \end{pmatrix}$$ значення функції y

$k := 2$ k - степінь апроксимуючого поліному

$R := \text{regress}(X, Y, k)$

$$Yr := \begin{pmatrix} \mathrm{interp}(R, X, Y, X_0) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_1) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_2) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_3) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_4) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_5) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_6) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_7) \end{pmatrix} \qquad Yr = \begin{pmatrix} 0.4543 \\ 0.5897 \\ 0.7044 \\ 0.8285 \\ 0.9194 \\ 0.964 \\ 0.9642 \\ 0.9305 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := \frac{\sum \left(\frac{|Y - Yr|}{Y} \right) 100}{8} \qquad \varepsilon = 14.133$$

Похибка завелика, отже, збільшуємо степінь поліному.

$k := 3$ *k* - степінь апроксимуючого поліному

$R := \mathrm{regress}(X, Y, k)$

$$Yr := \begin{pmatrix} \mathrm{interp}(R, X, Y, X_0) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_1) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_2) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_3) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_4) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_5) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_6) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_7) \end{pmatrix} \qquad Yr = \begin{pmatrix} 0.4113 \\ 0.6079 \\ 0.7449 \\ 0.8563 \\ 0.9074 \\ 0.9216 \\ 0.9345 \\ 0.9712 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := \frac{\sum \left(\frac{|Y - Yr|}{Y} \right) 100}{8} \qquad \varepsilon = 5.546$$

Знову збільшуємо степінь поліному.

$k := 4$ *k* - степінь апроксимуючого поліному

$R := \mathrm{regress}(X, Y, k)$

$$Yr := \begin{pmatrix} \mathrm{interp}(R, X, Y, X_0) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_1) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_2) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_3) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_4) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_5) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_6) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_7) \end{pmatrix} \qquad Yr = \begin{pmatrix} 0.3987 \\ 0.6243 \\ 0.7559 \\ 0.8457 \\ 0.8906 \\ 0.9251 \\ 0.9546 \\ 0.9601 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := \frac{\sum \left(\frac{|Y - Yr|}{Y} \right) 100}{8} \qquad \varepsilon = 1.78$$

Якщо бажаємо зменшити похибку, ще збільшуємо степінь поліному.

$k := 5$ $\quad$ k - степінь апроксимуючого поліному

$R := \mathrm{regress}(X, Y, k)$

$$Yr := \begin{pmatrix} \mathrm{interp}(R, X, Y, X_0) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_1) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_2) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_3) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_4) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_5) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_6) \\ \mathrm{interp}(R, X, Y, X_7) \end{pmatrix} \qquad Yr = \begin{pmatrix} 0.3961 \\ 0.6306 \\ 0.7542 \\ 0.8397 \\ 0.8936 \\ 0.9304 \\ 0.9483 \\ 0.9621 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := \frac{\sum \left(\frac{|Y - Yr|}{Y} \right) 100}{8} \qquad \varepsilon = 0.309$$

Якщо такий рівень точності нас влаштовує, знайдемо коефіцієнти поліному 5-го степеня за допомогою МНК. Система нормальних рівнянь[2] для поліному 5-го степеня має наступний вигляд:

---

[2] https://uk.wikipedia.org/wiki/Метод_найменших_квадратів

$$
\begin{cases}
a_0 \sum\limits_i x_i^0 + a_1 \sum\limits_i x_i^1 + \ldots + a_5 \sum\limits_i x_i^5 = \sum\limits_i y_{ei} x_i^0 \\
a_0 \sum\limits_i x_i^1 + a_1 \sum\limits_i x_i^2 + \ldots + a_5 \sum\limits_i x_i^6 = \sum\limits_s y_{ei} x_i^1 \\
\ldots \\
a_0 \sum\limits_i x_i^5 + a_1 \sum\limits_i x_i^5 + \ldots + a_5 \sum\limits_i x_i^{10} = \sum\limits_i y_{ei} x_i^5
\end{cases}
$$

Отже сформуємо в MathCAD матрицю коефіцієнтів цієї системи та вектор вільних членів. Для розв’язання системи скористаємось методом оберненої матриці.

$$
A := \begin{pmatrix}
\sum X^0 & \sum X^1 & \sum X^2 & \sum X^3 & \sum X^4 & \sum X^5 \\
\sum X^1 & \sum X^2 & \sum X^3 & \sum X^4 & \sum X^5 & \sum X^6 \\
\sum X^2 & \sum X^3 & \sum X^4 & \sum X^5 & \sum X^6 & \sum X^7 \\
\sum X^3 & \sum X^4 & \sum X^5 & \sum X^6 & \sum X^7 & \sum X^8 \\
\sum X^4 & \sum X^5 & \sum X^6 & \sum X^7 & \sum X^8 & \sum X^9 \\
\sum X^5 & \sum X^6 & \sum X^7 & \sum X^8 & \sum X^9 & \sum X^{10}
\end{pmatrix}
\qquad
YX := \begin{pmatrix}
Y \cdot X^0 \\ Y \cdot X^1 \\ Y \cdot X^2 \\ Y \cdot X^3 \\ Y \cdot X^4 \\ Y \cdot X^5
\end{pmatrix}
$$

$$
AI := A^{-1} \cdot YX \qquad AI = \begin{pmatrix} 0.212 \\ 5.311 \\ -19.341 \\ 39.013 \\ -39.898 \\ 16.052 \end{pmatrix}
$$

коефіцієнти апроксимуючого поліному

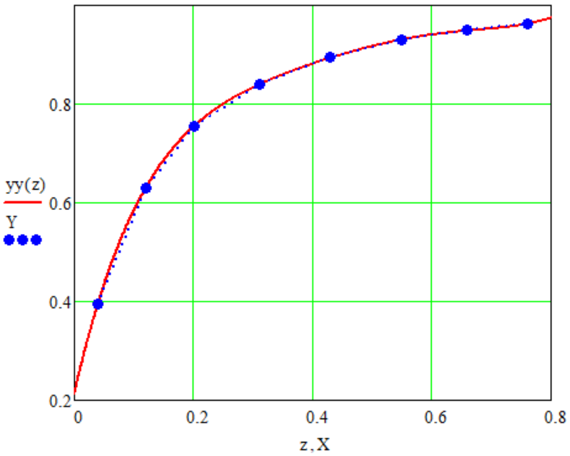
Вигляд апроксимуючого поліному:

$$yy(z) := AI_0 + AI_1 \cdot z + AI_2 \cdot z^2 + AI_3 \cdot z^3 + AI_4 \cdot z^4 + AI_5 \cdot z^5$$

Обчислюємо розрахункові значення функції та величину похибки. Також побудуємо графік, на якому зобразимо отриманий апроксимуючий поліном 5-го степеня та експериментальні значення.

$$YR5 := \begin{pmatrix} yy(X_0) \\ yy(X_1) \\ yy(X_2) \\ yy(X_3) \\ yy(X_4) \\ yy(X_5) \\ yy(X_6) \\ yy(X_7) \end{pmatrix} \qquad YR5 = \begin{pmatrix} 0.3961 \\ 0.6306 \\ 0.7542 \\ 0.8397 \\ 0.8936 \\ 0.9304 \\ 0.9483 \\ 0.9621 \end{pmatrix} \qquad Emnk := \frac{\sum \left(\frac{|Y - YR5|}{Y} \right) 100}{8}$$

$$Emnk = 0.3092$$



<u>Примітка</u>. Замість складання системи нормальних рівнянь для знаходження коефіцієнті апроксимуючого поліному заданого степеня можна скористатися вбудованими функціями MathCAD – парою *regress – submatix.*

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп’ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

Лабораторна робота №7. Структурна та параметрична ідентифікація моделей

Мета: Дослідити базові засоби прийоми структурної та параметричної ідентифікації моделей для потреб хімічної інженерії.

Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

Послідовність виконання роботи

Завдання 7.1

1. Створити новий файл і присвоїти йому ім'я ***Прізвище_Пр7_СтатистМодель***.
2. Занести до робочої області стовпці аргументу та функції – результати експериментів згідно індивідуального завдання (таблиця 3.6).
3. Побудувати графік експериментальних даних та апроксимувати ці дані лінійною функцією $y=a+b*x$. Навести в звіті графіки та результати апроксимації.

Таблиця 3.6 – Вихідні дані для наближення функції. Теплофізичні властивості води за атмосферного тиску:

Варіант № 1		**Варіант № 2**		**Варіант № 3**	
Темпера-тура t, °C	Теплоємність **c**, кДж/(кг·К)	Темпера-тура t, °C	Густина **ρ**,кг/м^3	Темпера-тура t, °C	Густина **ρ**,кг/м^3
0	4,209	0	999,75	0	0,550
6	4,199	18,68	998,15	17,6	0,594
12	4,191	37,36	993,14	35,2	0,625
18	4,183	56,04	986,82	52,8	0,648
24	4,181	74,72	977,40	70,4	0,662
30	4,173	93,4	965,99	88	0,669
36	4,171	112,08	956,24	105,6	0,669
42	4,175	130,76	945,77	123,2	0,667
48	4,175	149,44	937,81	140,8	0,659
54	4,175	168,12	932,08	158,4	0,651
60	4,178	186,8	927,41	176	0,641

Варіант № 4		**Варіант № 5**		**Варіант № 6**	
Темпера-тура t, °C	Тепло-ємність c, кДж/(кг·К)	Темпера-тура t, °C	Густина ρ,кг/м3	Темпера-тура t, °C	Густина ρ,кг/м3
0	4,208	0	999,58	0	0,550
9,24	4,196	2,9	1000,59	7,13	0,569
18,48	4,183	5,8	999,88	14,26	0,586
27,72	4,176	8,7	1000,02	21,39	0,601
36,96	4,174	11,6	999,15	28,52	0,615
46,2	4,174	14,5	999,95	35,65	0,626
55,44	4,175	17,4	998,81	42,78	0,637
64,68	4,180	20,3	998,34	49,91	0,645
73,92	4,186	23,2	997,02	57,04	0,652
83,16	4,193	26,1	996,54	64,17	0,658
92,4	4,20	29	996,20	71,3	0,662

Варіант № 7		**Варіант № 8**		**Варіант № 9**	
Темпера-тура t, °C	Тепло-ємність **c**, кДж/(кг·К)	Темпера-тура t, °C	Густина **ρ**,кг/м^3	Темпера-тура t, °C	Густина **ρ**,кг/м^3
0	4,210	0	999,61	0	0,550
13,26	4,191	8,9	1000,63	14,93	0,587
26,52	4,176	17,8	998,18	29,86	0,617
39,78	4,173	26,7	995,74	44,79	0,638
53,04	4,174	35,6	994,88	59,72	0,654
66,3	4,180	44,5	991,28	74,65	0,664
79,56	4,192	53,4	987,50	89,58	0,669
92,82	4,206	62,3	983,69	104,51	0,670
106,08	4,219	71,2	977,86	119,44	0,668
119,34	4,228	80,1	973,85	134,37	0,662
132,6	4,24	89	968,62	149,3	0,655

Варіант № 10

Температура t, °C	Теплоємність **c**, кДж⁄(кг·К)
0	4,209
7,2	4,201
14,4	4,186
21,6	4,182
28,8	4,175
36	4,176
43,2	4,173
50,4	4,173
57,6	4,176
64,8	4,181
72	4,18

Варіант № 11

Температура t, °C	Густина **ρ**,кг⁄м^3
0	1000,15
8,58	999,63
17,16	998,50
25,74	997,32
34,32	994,32
42,9	991,63
51,48	987,55
60,06	984,71
68,64	979,25
77,22	975,01
85,8	970,09

Варіант № 12

Температура t, °C	Густина **ρ**,кг⁄м^3
0	0,550
1,8	0,555
3,6	0,559
5,4	0,564
7,2	0,569
9	0,574
10,8	0,578
12,6	0,582
14,4	0,586
16,2	0,591
18	0,594

Варіант № 13

Температура t, °C	Теплоємність **c**, кДж⁄(кг·К)
0	4,213
15,8	4,188
31,6	4,176
47,4	4,175
63,2	4,177
79	4,188
94,8	4,207
110,6	4,222
126,4	4,236
142,2	4,248
158	4,25

Варіант № 14

Температура t, °C	Густина **ρ**,кг⁄м^3
0	999,04
9,9	999,70
19,8	998,74
29,7	996,47
39,6	993,01
49,5	988,53
59,4	985,30
69,3	980,11
79,2	973,46
89,1	968,76
99	962,93

Варіант № 15

Температура t, °C	Густина **ρ**,кг⁄м^3
0	0,550
14,69	0,587
29,38	0,616
44,07	0,638
58,76	0,654
73,45	0,664
88,14	0,669
102,83	0,670
117,52	0,668
132,21	0,663
146,9	0,656

Варіант № 16		Варіант № 17		Варіант № 18	
Темпера-тура t, °C	Тепло-ємність **c**, кДж⁄(кг·К)	Темпера-тура t, °C	Густина **ρ**,кг⁄м^3	Темпера-тура t, °C	Густина **ρ**,кг⁄м^3
0	4,208	0	1000,62	0	0,550
8,5	4,193	12,88	999,82	16	0,590
17	4,187	25,76	996,14	32	0,621
25,5	4,175	38,64	993,02	48	0,643
34	4,172	51,52	988,13	64	0,658
42,5	4,173	64,4	981,24	80	0,666
51	4,175	77,28	976,12	96	0,670
59,5	4,179	90,16	968,55	112	0,669
68	4,184	103,04	960,42	128	0,665
76,5	4,191	115,92	954,46	144	0,658
85	4,20	128,8	946,74	160	0,650

Варіант № 19		Варіант № 20		Варіант № 21	
Темпера-тура t, °C	Тепло-ємність **c**, кДж⁄(кг·К)	Темпера-тура t, °C	Густина **ρ**,кг⁄м^3	Темпера-тура t, °C	Густина **ρ**,кг⁄м^3
0	4,209	0	999,80	0	0,550
9,8	4,193	6,6	999,30	7,11	0,569
19,6	4,181	13,2	999,45	14,22	0,586
29,4	4,174	19,8	997,26	21,33	0,601
39,2	4,174	26,4	996,89	28,44	0,614
49	4,174	33	994,84	35,55	0,626
58,8	4,179	39,6	993,54	42,66	0,637
68,6	4,184	46,2	990,66	49,77	0,645
78,4	4,191	52,8	988,45	56,88	0,652
88,2	4,200	59,4	983,52	63,99	0,657
98	4,21	66	980,80	71,1	0,662

Завдання 7.2

1. Побудувати графік експериментальних даних (згідно індивідуального завдання – таблиця 3.6) та апроксимувати ці дані поліномом другого порядку (параболічною функцією) $y=a+B_1*x+B_2*x^2$. Навести в звіті графіки та результати апроксимації.

2. Апроксимувати вихідні дані згідно індивідуального завдання (таблиця 3.6), використовуючи вбудовані засоби побудови кубічного сплайну. Навести в звіті графік та результати розрахунків

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп'ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

.

Лабораторна робота №7. Математичний опис динаміки технологічних процесів

Мета: Дослідити базові засоби математичного опису динаміки технологічних процесів.

Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

Послідовність виконання роботи

Завдання 8.1

1. Створити новий файл і присвоїти йому ім'я ***Прізвище_Пр8_ДифРівн***.
2. Згідно індивідуального завдання (таблиця 3.7) розв'язати на заданому інтервалі $x \in [x_0;\ x_{end}]$ диференційне рівняння з наданими початковими умовами $y(x_0)$ (задачу Коші для звичайного диференційного рівняння). Скористатися вбудованою функцією MathCAD, що реалізує чисельний метод Рунге-Кутти.
3. Побудувати графік чисельного розв'язку на заданому інтервалі та графік точного розв'язку (наведений в таблиці 3.7) – дві криві в одному полі. Зробити висновок про точність вбудованої функції MathCAD, яка реалізує чисельний метод Рунге-Кутти.

Таблиця 3.7 – Вихідні дані для розв'язання диференційного рівняння

№ Вар	Рівняння	x_0	x_{end}	$y(x_0)$	Точний розв'язок
1	$y' + y \cdot tg\ x = \sec\ x$	0	1.5	1	y = sin x + cos x
2	$x^2 y' + xy + 1 = 0$	1	3	1	$xy = 1 - \ln\lvert x\rvert$
3	$(2x+1)y' = 4x + 2y$	0	4	1	$y = (2x + 1) \ln\lvert 2x+1\rvert + 1$
4	$x(y' - y) = e^x$	1	3	e	$y = e^x(\ln\lvert x\rvert + 1)$
5	$y = x(y' - x \cdot \cos\ x)$	$\frac{\pi}{2}$	2π	$\frac{\pi}{2}$	$y = x \cdot \sin x$
6	$y' = 2x(x^2 + y)$	1	2	e	$y = e^{x^2} - x^2 - 1$
7	$(xy' - 1) \cdot \ln\ x = 2y$	1	3	0	$y = \ln^2 x - \ln\ x$
8	$xy' + (x+1)y = 3x^2 e^{-x}$	1	5	1/e	$y = x^2 e^{-x}$
9	$y' + 2y = y^2 e^x$	-1	1	e	$y = e^{-x}$
10	$(x+1)(y' + y^2) = -y$	1	5	$(2 \ln 2)^{-1}$	$y(x+1) \cdot \ln\lvert x+1\rvert = 1$

№ Вар	Рівняння	x_0	x_{end}	$y(x_0)$	Точний розв'язок
11	$x \cdot y^2 \cdot y' = x^2 + y^3$	1	3	0	$y^3 = 3x^2(x-1)$
12	$xy' - 2x^2\sqrt{y} = 4y$	1	2	0	$y = x^4 \cdot \ln^2 x$
13	$xy' + 2y + x^5y^3e^x = 0$	1	2	$(2e)^{-1/2}$	$2y^2x^4e^x = 1$
14	$2y' - \frac{x}{y} = \frac{xy}{x^2-1}$	1.1	4	$\sqrt{0.21}$	$y^2 = x^2 - 1$
15	$(1+x^2)y' - 2xy = (1+x^2)^2$	0	2	0	$y = x(1 + x^2)$
16	$y' + y \cdot tg\ x = \sec\ x$	0	1.5	1	$y = \sin x + \cos x$
17	$x^2y' + xy + 1 = 0$	1	3	1	$xy = 1 - \ln\|x\|$
18	$(2x+1)y' = 4x + 2y$	0	4	1	$y = (2x + 1) \ln\|2x+1\| +1$
19	$x(y' - y) = e^x$	1	3	e	$y = e^x(\ln\|x\| +1)$
20	$y = x(y' - x \cdot \cos\ x)$	$\frac{\pi}{2}$	2π	$\frac{\pi}{2}$	$y = x \cdot \sin x$
21	$y' = 2x(x^2 + y)$	1	2	e	$y = e^{x^2} - x^2 - 1$
22	$(xy' - 1) \cdot \ln\ x = 2y$	1	3	0	$y = \ln^2 x - \ln\ x$
23	$xy' + (x+1)y = 3x^2e^{-x}$	1	5	1/e	$y = x^2e^{-x}$
24	$y' + 2y = y^2e^x$	-1	1	e	$y = e^{-x}$
25	$(x+1)(y' + y^2) = -y$	1	5	$(2 \ln 2)^{-1}$	$y(x+1) \cdot \ln\|x+1\| = 1$
26	$x \cdot y^2 \cdot y' = x^2 + y^3$	1	3	0	$y^3 = 3x^2(x-1)$
27	$xy' - 2x^2\sqrt{y} = 4y$	1	2	0	$y = x^4 \cdot \ln^2 x$
28	$xy' + 2y + x^5y^3e^x = 0$	1	2	$(2e)^{-1/2}$	$2y^2x^4e^x = 1$
29	$(1+x^2)y' - 2xy = (1+x^2)^2$	0	2	0	$y = x(1 + x^2)$
30	$y' + y \cdot tg\ x = \sec\ x$	0	1.5	1	$y = \sin x + \cos x$

Завдання 8.2

1. Згідно індивідуального завдання (таблиця 3.8) розв'язати на заданому інтервалі $x \in [a;\ b]$ систему з двох диференційних рівнянь

$$\begin{cases} f_1(x, y_1, y_2) \\ f_2(x, y_1, y_2) \end{cases}$$

з наданими початковими умовами $y_{0,1}$ та $y_{0,2}$ (задачу Коші для системи звичайних диференційних рівнянь). Скористатися вбудованою функцією MathCAD, що реалізує чисельний метод Рунге-Кутти.

2. Побудувати графік чисельного розв’язку на заданому інтервалі – дві криві в одному полі.

Таблиця 3.8 – Вихідні дані для розв’язання системи диференційних рівнянь

№ Вар	$f_1(x, y_1, y_2)$	$f_2(x, y_1, y_2)$	$y_{0,1}$	$y_{0,2}$	a	b
1	$x^2 y_1 + y_2$	$\cos(y_1 + x y_2)$	-1	1	0	4
2	$x^2 + y_2^2$	$x y_1 y_2$	1	0	0	5
3	$\frac{x}{\sqrt{1 + x^2 + y_2^2}}$	$\frac{y_2}{\sqrt{1 + x^2 + y_1^2}}$	0.2	0	-1	1
4	$\sin(x^2 + y_2^2)$	$\cos(x y_1)$	0	0	0	4
5	$\sin y_2$	$\cos y_1$	0.5	-0.5	-1	3
6	$x \cdot \cos(y_1 + y_2)$	$\sin(y_1 - y_2)$	-0.6	2	2	5
7	$\sin y_1 \cdot \cos^2 y_2$	$\cos y_1 \cdot \cos y_2$	0	0	-1	3
8	$2\sqrt{3x^2 + y_1^2 + y_1}$	$\sqrt{x^2 + y_1^2 + y_1}$	0.5	1.2	0	2
9	$\frac{y_1}{y_2}$	$y_1^2 - y_2$	1	1	1	3
10	$y_2 + \sqrt{x^2 + y_1^2}$	$y_2 \cdot \cos x - \sin 2x$	0.8	3.5	2	4
11	$\frac{y_1 + x}{\exp(y_1 + y_2)}$	$\frac{y_2 - x}{\exp(y_1 + y_2)}$	1	-1	2	4
12	$\cos(y_1 y_2)$	$\sin(y_1 + y_2)$	0	0	0	2
13	$y_2 \cdot \ln x$	$y_1 + y_2^2$	-2	-1	1	4
14	$x + y_1^2$	$(y_1 - y_2)^2$	0	1	-1	1
15	$y_1^2 + y_2^2$	$y_1 \cdot y_2$	-1	1	0	4
16	$x^2 y_1 + y_2$	$\cos(y_1 + x y_2)$	-1	1	0	4
17	$x^2 + y_2^2$	$x y_1 y_2$	1	0	0	5
18	$\frac{x}{\sqrt{1 + x^2 + y_2^2}}$	$\frac{y_2}{\sqrt{1 + x^2 + y_1^2}}$	0.2	0	-1	1
19	$\sin(x^2 + y_2^2)$	$\cos(x y_1)$	0	0	0	4
20	$\sin y_2$	$\cos y_1$	0.5	-0.5	-1	3
21	$x \cdot \cos(y_1 + y_2)$	$\sin(y_1 - y_2)$	-0.6	2	2	5
22	$\sin y_1 \cdot \cos^2 y_2$	$\cos y_1 \cdot \cos y_2$	0	0	-1	3
23	$2\sqrt{3x^2 + y_1^2 + y_1}$	$\sqrt{x^2 + y_1^2 + y_1}$	0.5	1.2	0	2
24	$\frac{y_1}{y_2}$	$y_1^2 - y_2$	1	1	1	3

№ Вар	$f_1(x, y_1, y_2)$	$f_2(x, y_1, y_2)$	$y_{0,1}$	$y_{0,2}$	a	b
25	$y_2 + \sqrt{x^2 + y_1^2}$	$y_2 \cdot \cos x - \sin 2x$	0.8	3.5	2	4
26	$\dfrac{y_1 + x}{\exp(y_1 + y_2)}$	$\dfrac{y_2 - x}{\exp(y_1 + y_2)}$	1	-1	2	4
27	$\cos(y_1 y_2)$	$\sin(y_1 + y_2)$	0	0	0	2
28	$y_2 \cdot \ln x$	$y_1 + y_2^2$	-2	-1	1	4
29	$x + y_1^2$	$(y_1 - y_2)^2$	0	1	-1	1
30	$y_1^2 + y_2^2$	$y_1 \cdot y_2$	-1	1	0	4

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп'ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

Лабораторна робота №8. Моделювання процесу теплообміну

<u>Мета</u>: Дослідити базові засоби моделювання теплообмінних апаратів.

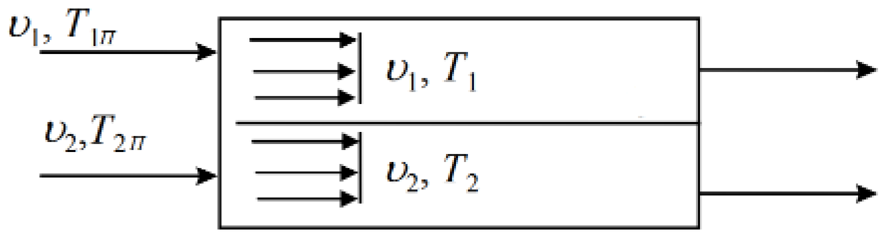
Основні теоретичні відомості: див. Розд. 1–2.

Послідовність виконання роботи

Завдання 9.1

1. Створити новий файл і присвоїти йому ім'я ***Прізвище_Пр9_МодельТОА***.
2. Виконати моделювання теплообмінного апарату в режимі прямотоку та побудувати графіки.

Опис об'єкту моделювання та приклад розрахунків. Необхідно розрахувати розподіл температур за довжиною проточного кожухотрубчастого теплообмінного апарату[3]. Такий апарат може бути описаний гідродинамічною математичною моделлю «витіснення – витіснення» (рис).



Схематичне представлення теплообмінного апарату типу «витіснення-витіснення» для випадку прямотечії

У випадку прямоточного режиму взаємного плину потоків математичний опис вказаного апарату (в стаціонарному режимі) являє собою систему з двох звичайних диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} -\vartheta_1 C_{T_1} \dfrac{dT_1}{dx} - \left(\dfrac{F}{L}\right) K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ -\vartheta_2 C_{T_2} \dfrac{dT_2}{dx} + \left(\dfrac{F}{L}\right) K_T (T_1 - T_2) = 0, \end{cases}$$

[3] Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології / Уклад.: Т.В. Бойко, В.І. Бендюг, І.О. Потяженко, О.М. Жигір, А.М. Шахновський, О.С. Бондаренко –К.: НТУУ «КПІ, 2007. 128 с.

де індекси 1 та 2 належать відповідно гарячому та холодному теплоносіям; V – об'єм апарату; ϑ – об'ємна витрата потоку; c_T – теплоємність теплоносія; F – площа поверхні теплообміну; K_T – коефіцієнт теплопередачі; T – температура теплоносія; L – довжина апарату; x – поточне значення довжини апарату.

Початкові умови для випадку прямоточного руху теплоносіїв: при $l=0$, $T_1(0)=T_{1П}$; $T_2(0)=T_{2П}$.

Для отримання розподілу температур по довжині ТОА (так званий температурний профіль) необхідно розв’язати систему звичайних диференціальних рівнянь (4). Можна одержати аналітичне рішення цих рівнянь при заданих граничних умовах, але більш зручно використовувати чисельні методи – метод Рунге-Кутти або, якщо це задовольняє вимогам точності, метод Ейлера.

Для реалізації методу Рунге-Кутти при розв’язанні системи ЗДР в програмному середовищі Mathcad можна використати вбудовану функцію ***rkfixed*(*y*, x_1, x_2, *n*, *F*)**. Вона реалізує метод Рунге-Кутти четвертого порядку з фіксованим кроком інтегрування. Функція ***rkfixed*** має п'ять наступних аргументів:

- ***y*** – вектор початкових значень шуканої функції;
- x_1 – початкове значення незалежної змінної;
- x_2 – кінцеве значення незалежної змінної;
- ***n*** – фіксоване число кроків інтегрування;
- ***F*** – праві частини системи рівнянь, записані у векторі в символьному виді.

Функція ***rkfixed*** повертає таблицю (певним чином побудовану матрицю) результатів рішень з ($\boldsymbol{m+1}$) стовпцями і $\boldsymbol{n}$ рядками ($\boldsymbol{m}$ – число рівнянь у системі). При цьому нульовий стовпець таблиці (матриці) містить значення незалежної змінної (аргументу) $\boldsymbol{x}$ на кожнім кроці інтегрування: x_1, x_2, ..., x_n. Наступні стовпці матриці визначають значення ординат шуканих $y_1(x), y_2(x)$, … для відповідних поточних значень аргументу $\boldsymbol{x}$.

Побудуємо профілі температур для ТОА, що має наступні параметри: F=15 $м^2$; L=2 $м$; K_T =60 $Вт/м^2град$; $T_{1_П}$= 65°С; $T_{2_П}$= 20°С; $\vartheta_1 = 0{,}267\ м^3/с$; $\vartheta_2 = 0{,}26 \cdot 10^{-3}$ $м^3/с$; c_{T_1}=1670 $дж/м^3град$; c_{T_2}= 4185·10^3 $дж/м^3град$. Розрахунки виконані в середовищі Mathcad.

Моделювання розподілу температур по довжині прямоточного ТОА

Вихідні дані:

$T_{1n} := 65 \quad T_{2n} := 20 \qquad F := 15 \quad L := 2 \quad K := 60$

$\upsilon_1 := 0.28 \qquad c_{T1} := 1670$

$\upsilon_2 := 0.26 \cdot 10^{-3} \quad c_{T2} := 4185 \cdot 10^3$

Матриця температур теплоносіїв на вході в ТОА (початкові умови для розв'язання системи ЗДР):

$$T1 \equiv \begin{pmatrix} 65 \\ 20 \end{pmatrix}$$

Матриця правих частин диференціальних рівнянь математичної моделлі ТОА:

$$G1(t, T1) := \begin{bmatrix} -F \cdot K \cdot \dfrac{(T1_0 - T1_1)}{L \cdot \upsilon_1 \cdot c_{T1}} \\ F \cdot K \cdot \dfrac{(T1_0 - T1_1)}{L \cdot \upsilon_2 \cdot c_{T2}} \end{bmatrix}$$

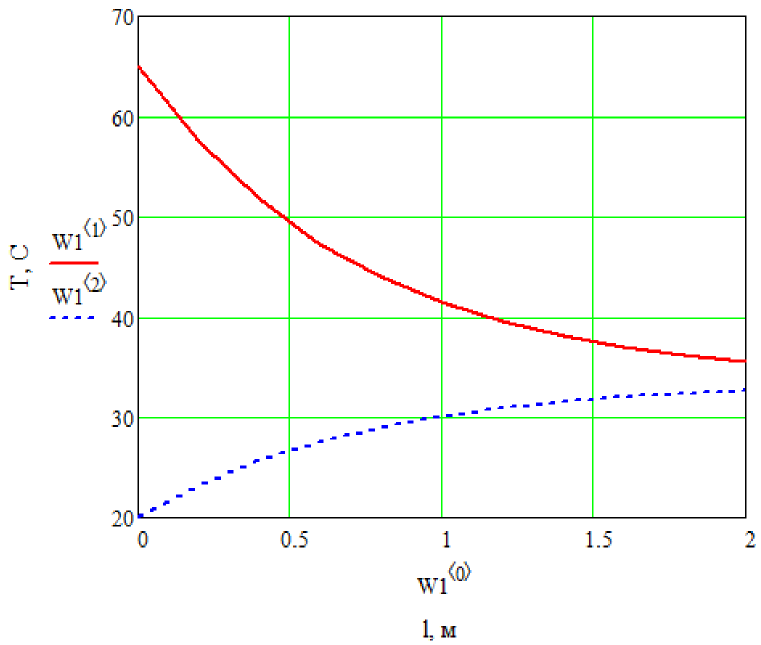
Розвязання системи ЗДР методом Рунге-Кутти:

$W1 := \mathrm{rkfixed}(T1, 0, L, 10, G1)$

W1 =

	0	1	2
0	0	65	20
1	0.2	57.429	23.254
2	0.4	51.679	25.725
3	0.6	47.312	27.601
4	0.8	43.996	29.026
5	1	41.477	30.109
6	1.2	39.564	30.931
7	1.4	38.112	31.555
8	1.6	37.008	32.029
9	1.8	36.171	32.389
10	2	35.534	32.663

Отримані профілі температур наведені на рисунку.



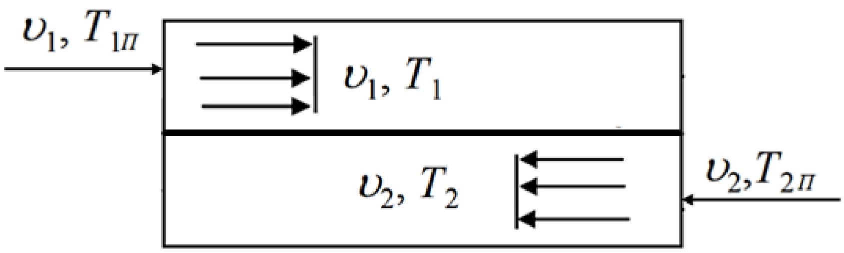
Профілі температур прямоточного теплообмінного апарату

Як видно з таблиці розрахованих температур, різниці між температурами теплоносіїв на виході з ТОА складає приблизно 3 $°C$.

Завдання 9.2

1. Виконати моделювання теплообмінного апарату в режимі протитоку та побудувати графіки.

Опис об’єкту моделювання та приклад розрахунків. Необхідно розрахувати розподіл температур за довжиною проточного кожухотрубчастого теплообмінного апарату[4]. Такий апарат може бути описаний гідродинамічною математичною моделлю «витіснення – витіснення» (рис).



Схематичне представлення теплообмінного апарату типу «витіснення-витіснення» для випадку протитечії

Коли у кожухотрубчастому теплообмінному апараті реалізовано режим протитоку, модель типу «витіснення-витіснення» в стаціонарних умовах набуває вигляду:

$$\begin{cases} -\vartheta_1 c_{T_1} \dfrac{dT_1}{dl} - \dfrac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ +\vartheta_2 c_{T_2} \dfrac{dT_2}{dl} + \dfrac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0. \end{cases} \qquad (*)$$

Граничні умови в цьому випадку такі: при *1* = 0, $T_1(0) = T_{1_П}$; при *1* = L, $T_2(L) = T_{2_П}$.

Складність чисельного розв'язання системи (*) полягає в тому, що граничні умови у випадку протитоку задані на різних кінцях апарату. Тому для моделювання такого ТОА <u>необхідно підібрати таке значення температури холодного теплоносія на виході</u> (при *1* = 0 – початкову умову $T_2(0)$), <u>щоб в результаті розв'язку системи (*) розраховане значення $T_2(L)$ співпало з заданим значенням температури холодного теплоносія на вході</u> ($T_2(L) = T_{2_П}$) <u>з потрібною точністю</u>.

Побудуємо профілі температур для протитічного ТОА з тими самими параметрами, що і у попередньому завданні.

[4] Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології / Уклад.: Т.В. Бойко, В.І. Бендюг, І.О. Потяженко, О.М. Жигір, А.М. Шахновський, О.С. Бондаренко –К.: НТУУ «КПІ, 2007. 128 с.

Наприклад, якщо задати в якості початкових умов надані вхідних значення температур обох теплоносіїв, отримаємо:

$$T \equiv \begin{pmatrix} 65 \\ 20 \end{pmatrix}$$

W =

	0	1	2
0	0	65	20
1	0.2	56.797	16.475
2	0.4	49.447	13.316
3	0.6	42.861	10.486
4	0.8	36.959	7.95
5	1	31.671	5.677
6	1.2	26.933	3.641
7	1.4	22.687	1.817
8	1.6	18.883	0.182
9	1.8	15.474	-1.283
10	2	12.419	-2.596

Примітка. Стовпці 1 і 2 матиці W зберігають, відповідно, розраховані значення гарячого та холодного теплоносіїв по довжині ТОА (стовпець 0).

Бачимо, що отриманий результат нас не влаштовує із зрозумілих причин. Адже холодний теплоносій повинен мати температуру 20°C не на виході з апарату (при $1 = 0$), а на вході (при $1 = L$). Отже необхідно послідовно підбирати значення при $1 = 0$, щоб розраховане значення при $1 = L$ приблизно дорівнювало заданому $T_{2_\text{П}} = 20$°C. Прийнятною похибкою будемо вважати різницю в 0,01°. Для даного прикладу підбір кінцевої температури холодного теплоносія наведено в таблиці 1.

Як видно, коли $T_{2_\text{К}} = 35{,}05$ значення $T_2(L) = 20{,}01$. Тобто в межах припустимої похибки воно збігається з заданим значенням вхідної температури $T_{2_\text{П}} = 20$°C. Нижче наведено результати розрахунку для підібраного значення температури холодного теплоносія на виході.

Таблиця. Підбір кінцевої температури холодного теплоносія.

$T_{2_\text{К}}$	20	30	40	35	36	35,1	35,05
$T_2(L)$	-2,596	12,42	27,45	19.94	21,44	20,09	20,01

$W =$

	0	1	2
0	0	65	35.05
1	0.2	59.541	32.704
2	0.4	54.649	30.602
3	0.6	50.265	28.718
4	0.8	46.337	27.03
5	1	42.818	25.517
6	1.2	39.664	24.162
7	1.4	36.839	22.948
8	1.6	34.306	21.86
9	1.8	32.038	20.885
10	2	30.005	20.011

Моделювання розподілу температур по довжині протитічного ТОА

Вихідні дані:

$T_{1n} := 65 \quad T_{2n} := 20 \qquad F := 15 \quad L := 2 \quad K := 60$

$\upsilon_1 := 0.28 \qquad c_{T1} := 1670$

$\upsilon_2 := 0.26 \cdot 10^{-3} \quad c_{T2} := 4185 \cdot 10^3$

Матриця температур теплоносіїв у точці входу гарячого теплоносія (початкові умови для розв'язання системи ЗДР):

$$T \equiv \begin{pmatrix} 65 \\ 35.05 \end{pmatrix}$$

Матриця правих частин диференціальних рівнянь математичної моделі ТОА:

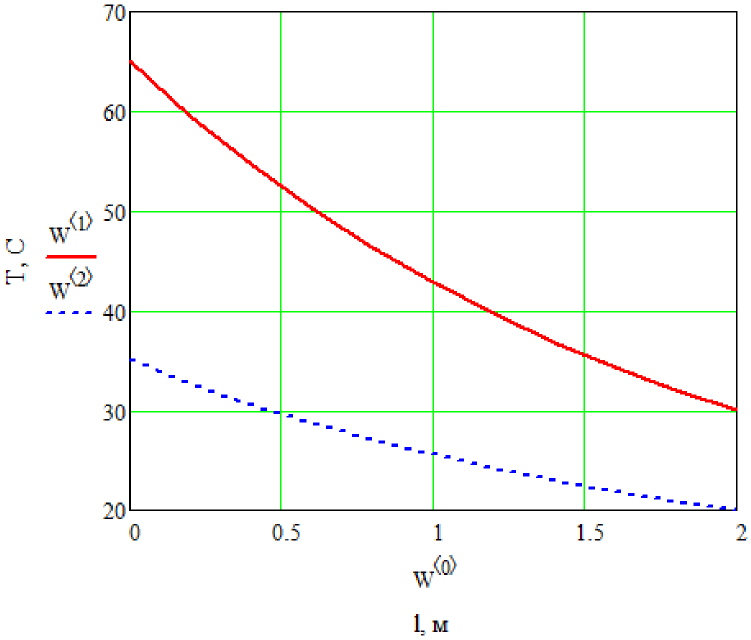
$$G(t,T) := \begin{bmatrix} -F \cdot K \cdot \dfrac{(T_0 - T_1)}{L \cdot \upsilon_1 \cdot c_{T1}} \\ -F \cdot K \cdot \dfrac{(T_0 - T_1)}{L \cdot \upsilon_2 \cdot c_{T2}} \end{bmatrix}$$

Розвязання системи ЗДР методом Рунге-Кутти:

$W := \mathrm{rkfixed}(T, 0, L, 10, G)$

Примітка. Замість ітераційного методу (підбору) під час розв’язку наведеної крайової задачі можна скористатися вбудованою функцією MathCAD – *sbval*.

Отримані в результаті профілі температур наведені на рисунку.



Профілі температур протиточного ТОА для наданого прикладу

Обробка та аналіз результатів. Оформлення звіту

При оформленні звіту з комп’ютерного лабораторного практикуму до вступної частини звіту (назва і номер роботи, тема, завдання) додаються результати виконання роботи у вигляді математичних виразів із підстановкою чисельних значень, таблиць, графіків, а також тексту коментарів до отриманих результатів.

Питання для самопідготовки

1. Чому система MathCAD вважається універсальною масовою математичною системою? Що потрібно від користувача системи насамперед?
2. З чого складається робочий простір MathCAD та у чому його особливості?
3. Як організовано роботу з документами в MathCAD? Що таке кожен документ?
4. Як користувач керує процесом обчислень?
5. Які форми набуває курсор миші у документі MathCAD? Назвіть прийоми керування формою курсору?
6. Перерахуйте прийоми виділення об'єктів у документі. Робота із виділеними областями.
7. З чого складається алфавіт вхідної системи?
8. Назвіть типи даних MathCAD.
9. Як вводяться речові числові константи? Як видаються комплексні константи?
10. Як водяться розмірні константи і навіщо вони використовуються?
11. Що називається змінною в MathCAD? Як встановити (визначити) змінну у програмі? Які тут можливі помилки? Як отримати числове значення змінної?
12. Навіщо використовується команда Математика/Формат числа?
13. Пояснити різницю між глобальною та локальною змінною. Як MathCAD обробляє документ?
14. Як користуватись вбудованими функціями системи? Як задати функцію користувача?
15. Навіщо призначені ранжировані змінні в Mathcad?
16. Як задається ранжована змінна?
17. Що таке масив і як створюється масив у системі Mathcad?
18. Що таке файлові дані?

19. Перерахуйте системні змінні. Як змінити їхнє значення?
20. Назвіть правила використання шаблонів під час завдання оператора.
21. Символьні обчислення в системі Mathcad та порядок їх виконання.
22. Як створюється декартовий графік?
23. Пояснити прийоми редагування та форматування графіка.
24. Як створити тривимірний графік поверхні?
25. Як у Mathcad розв'язати систему лінійних рівнянь?
26. Які типові моделі використовуються для опису гідродинаміки теплоносіїв у теплообмінних апаратах? Навести приклади.
27. Охарактеризуйте основні коефіцієнти і змінні, які входять у математичний опис ТОА, та їх розмірність.
28. Який вигляд має блочний принцип при побудові математичної моделі ТОА?
29. Охарактеризуйте математичний опис протитічного теплообмінного апарату у стаціонарному режимі, його межові умови? Чим він відрізняється від математичного опису прямоточного ТОА?
30. В який спосіб відбувається рішення математичної моделі ТОА? Які засоби MathCAD можна використати для цього? Охарактеризуйте їх.
31. У чому полягає особливість рішення моделі ТОА у випадку протитічного руху теплоносіїв? З чим це пов'язано?

Список рекомендованої літератури

1. Програмне забезпечення в хімічних технологіях: хіміко-технологічні розрахунки з використанням пакету MathCAD : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» ; уклад.: А. М. Шахновський, О. О. Квітка. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 112 с. URL: https://ela.kpi.ua/handle/123456789/67250
2. Бондаренко С. Г., Сангінова О. В., Шахновський А. М. Чисельні методи в хімії та хімічній технології : підруч. для здобувачів ступеня бакалавра за спец. 161 Хімічні технології та інженерія. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 564 с. URL: https://ela.kpi.ua/handle/123456789/67248
3. Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології / Уклад.: Т.В. Бойко, В.І. Бендюг, І.О. Потяженко, О.М. Жигір, А.М. Шахновський, О.С. Бондаренко – К.: НТУУ «КПІ, 2007. 128 с.
4. Моделювання хіміко-технологічних процесів; навчальний посібник / В. М. Атаманюк, О. О. Кузик, З. Я. Гнатів. – Львів: Видавництво "Бона", 2023. – 152 с.
5. Математичні пакети та їх застосування. Навчальний посібник : навчальний посібник. уклад.: Л. М. Бугаєва, С. В. Плашихін. - Електронні текстові дані (1 файл: 2,24 Мбайт). - Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. - 86 с.
6. Загальна хімічна технологія. Приклади вирішення задач з використанням MathCAD та MS Excel : навч. посіб. для студентів закл. вищ. освіти / О. В. Кутова, Р. В. Сагайдак-Нікітюк, та ін. Харків : ; Нац. фармацевт. ун-т.: Золоті сторінки, 2019. 126 с.
7. Кундрат А. М. Науково-технічні обчислення засобами MathCAD та MS Excel : навч. посіб. / А. М. Кундрат, М. М. Кундрат. – Рівне : НУВГП, 2014. - 252 с. URL: http://ep3.nuwm.edu.ua/1760/1/734733%20zah.pdf
8. Дубинін А. І. Використання пакета Mathcad у хімічній інженерії : навч. посіб. – Львів : "Львівська політехніка", 2010. – 240 с.
9. Adidharma H., Temyanko V. Mathcad for Chemical Engineers. Trafford Publishing, 2007. 172 p.