

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ПО ВЫСШЕМУ ОБРАЗОВАНИЮ  
САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
Кафедра неорганической химии

**СИСТЕМА MathCAD :  
ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТОВ  
В ХИМИИ**

Методические указания к лабораторным занятиям по курсу  
“Математические методы и информатика в химии”

Издательство “Самарский университет”  
1996

Методические указания предназначены студентам-химикам, изучающим курс "Математические методы и информатика в химии" в рамках учебных планов подготовки химиков-специалистов или химиков-бакалавров. В указаниях достаточно полно описана система программирования MathCAD, позволяющая проводить математические расчеты средней сложности и не требующая введения программного кода, характерного для традиционных алгоритмических языков высокого уровня. Возможности системы проиллюстрированы большим числом примеров, предназначенных для использования на лабораторных занятиях в рамках курса. Приведен ряд типичных химических задач, решение которых должно продемонстрировать студентам преимущества системы MathCAD и помочь им овладеть необходимыми навыками для ее практического использования.

Составители: доц. В.А. Блатов, асс. А.П. Шевченко  
Рецензент доц. В.П. Гарькин

## ВВЕДЕНИЕ

Химику-практику, работающему в лаборатории, постоянно приходится сталкиваться с необходимостью проведения математических расчетов. Это могут быть и очень простые задачи (скажем, пересчет концентрации вещества из одного способа выражения в другой) и весьма сложные (например, расчет состава равновесной смеси веществ при условии протекания нескольких обратимых реакций). Диапазон химических проблем, требующих применения математических методов, охватывает практически все области высшей математики [1].

В настоящее время наиболее распространенный инструмент, применяемый для расчетов в химической лаборатории, - настольный калькулятор. Хотя большинство учреждений оснащено персональными ЭВМ (ПЭВМ), химики предпочитают считать по старинке, полагая, что работа на ПЭВМ - удел программистов-профессионалов. Университетская программа подготовки химиков включает курс "Информатика, вычислительные машины и программирование", в ходе которого студенты знакомятся с устройством ПЭВМ и овладевают навыками программирования на одном из алгоритмических языков (Бейсик, Фортран, Паскаль). Вместе с тем, указанный курс не может дать большого практического опыта в программировании, необходимого для разработки достаточно сложной расчетной программы. Кроме того, даже опытному программисту потребуется значительное время для составления и отладки программы, решающей, казалось бы, такую несложную задачу, как, например, поиск корней системы линейных уравнений, если под рукой нет нужных библиотек прикладных программ. А если задача должна быть решена в течение нескольких минут?

Вместе с тем, существуют пакеты программ, позволяющие даже не владеющему навыками программирования пользователю легко и быстро проводить на ПЭВМ не слишком сложные математические расчеты. Одна из наиболее мощных и универсальных систем этого типа - система

MathCAD [2] (далее просто MathCAD) — рассматривается в курсе "Математические методы и информатика в химии". В данных указаниях кратко рассматриваются основные возможности MathCAD 2.5 и даются примеры решения химических расчетных задач с ее помощью. Более полно MathCAD описана в книге [2].

# 1. Основы работы в MathCAD

## 1.1. Общая характеристика MathCAD

MathCAD является интегрированной<sup>1</sup> интерактивной<sup>2</sup> системой программирования, состоящей из трех взаимодействующих частей - текстового редактора, вычислителя и графического процессора.

Текстовый редактор обеспечивает ввод и редактирование программ. Отличие языка MathCAD от традиционных алгоритмических языков - в максимальной приближенности его к обычной математической символике. На рис.1 приведены некоторые примеры простых расчетов в MathCAD в том виде, в каком они представлены на экране компьютера, или в виде распечатки на принтере. Отметим, что при печати MathCAD использует принцип WYSIWYG<sup>3</sup>.

$$\begin{array}{l}
 \sqrt{4 \cdot 2} = 6 \quad \sqrt{5 \cdot 7} = 12 \quad \frac{7}{8} = 0.875 \quad \frac{2}{4} = 16 \quad \sqrt{25} = 5 \\
 \log(10) = 1 \quad x := 0 \quad \frac{d}{dx} \sin(x) = 1 \quad \int_0^1 \cos(x) dx = 0.841 \\
 i := 0 .. 5 \quad \sum_i 5^i = 3.906 \cdot 10^3 \quad \prod_i (i + 1) = 720
 \end{array}$$

Рис.1. Примеры вычислений в MathCAD

Вычислитель проводит вычисления по программе, введенной пользователем при помощи текстового редактора. Возможности вычисли-

<sup>1</sup> Интегрированная система - объединяющая несколько взаимодействующих между собой программ.

<sup>2</sup> Интерактивная система - ориентированная на диалог с пользователем.

<sup>3</sup> What You See Is What You Get (англ.) - "что видите, то и получите". Принцип работы прикладной программы, согласно которому пользователь получает распечатку информации на принтере в том же виде, что и на экране ПЭВМ.

теля весьма обширны - от стандартных арифметических действий, реализуемых в микрокалькуляторах, до операций высшей математики, таких как численное интегрирование, дифференцирование, сплайн-интерполяция, преобразования Фурье и т.д.

**Графический процессор** осуществляет построение двумерных и трехмерных графиков, реализуя удобный диалог с пользователем.

В состав MathCAD входят следующие файлы:

mcad.exe	—	основной исполняемый модуль;
mcad.ovl	—	оверлейный модуль;
mcad.msc	—	файл конфигурации системы;
mcad.mpr	—	файл конфигурации принтеров;
mcad.hlp	—	файл "помощи";
*.mcf	—	файлы, содержащие шрифты системы.

Кроме того MathCAD работает с файлами следующих типов:

*.mcd	—	файлы, содержащие программы, написанные на языке MathCAD;
*.dat, *.prn	—	файлы, содержащие исходные цифровые данные

## 1.2. Начало работы в MathCAD

MathCAD может быть загружен как с жесткого диска ПЭВМ ("винчестер"), так и с двух дискет с емкостью 360К (или одной емкостью 720К). При этом на дискете № 1 должны содержаться файлы mcad.exe, mcad.msc и mcad.mpr, а на дискете № 2 - mcad.ovl, mcad.hlp и \*.mcf. Для загрузки MathCAD вставьте дискету № 1 в карман накопителя (например, А) и введите команду

A:<Enter>

Дождитесь запроса системой оверлейного файла:

```
PLINK86 Overlay Loader - Can't find file MCAD.OV1.  
Enter file name prefix (X: or path name/) or *.* to quit=>
```

Замените дискету № 1 на дискету № 2 и нажмите клавишу <Enter>. Происходит загрузка системы, и на экране появляется окно MathCAD.

### 1.3. Общие принципы работы MathCAD

MathCAD превращает экран монитора в рабочее поле, на котором можно набирать математические формулы, текст, рисовать графики. В результате мы получаем компьютерную программу, называемую в MathCAD документом. Ввод формул осуществляется с использованием правил языка MathCAD (Приложение 1). Целый ряд клавиш клавиатуры ПЭВМ имеют специальное назначение в MathCAD - они кодируют стандартные математические операции. Например, чтобы ввести операцию интегрирования, достаточно набрать символ & (см. Приложение 1). Каждой операции соответствует определенный шаблон, в котором прямоугольники (поля шаблона) отмечают места для ввода информации. Например, для интеграла шаблон имеет вид (Приложение 1):



Все поля шаблона должны быть заполнены правильно, иначе MathCAD сообщает об ошибке. Попробуйте ввести данные в шаблон интеграла, оставив незаполненным нижний прямоугольник и отведите курсор на достаточное расстояние. Рисунок примет вид:

$$\int_a^1 \sin(x) dx$$

missing operand

MathCAD сообщает об ошибке: "отсутствует операнд" и указывает место ошибки. Система сообщений об ошибках в MathCAD достаточно богата (см. Приложение 2) и позволяет быстро установить и устранить причину ошибки. В этом примере мы сталкиваемся с еще одним важным понятием MathCAD - **блоком**. Блок - это прямоугольная область экранного пространства, отвечающая фрагменту текста, формуле или графику (соответственно текстовый, вычислительный или графический блок). Обычно границы блоков не видны, однако, когда курсор находится в одном из них, он имеет вид мерцающего уголка  $\blacktriangleright$  или  $\blacktriangleleft$ , где вертикальная черта указывает место ввода нового символа (соответственно перед или за текущим). Вне блока курсор приобретает вид символа подчеркивания  $\_$ . MathCAD проверяет наличие ошибок во вновь вводимом блоке только после того, как курсор покинет его пределы. Находясь внутри блока можно очертить его границы, воспользовавшись комбинацией клавиш  $\langle \text{Ctrl} \rangle Y$ . Границы всех блоков на экране выделяются по команде  $\langle \text{Ctrl} \rangle V$ . Вычислительные блоки не могут перекрываться блоками любого другого типа. MathCAD проводит вычисления в строгом порядке, переходя от блока к блоку слева направо и сверху вниз. Поэтому ошибкой является следующая запись:

$c:=a+b$      $a:=1$      $b:=2$

MathCAD укажет, что в первом выражении значения переменных  $a$  и  $b$  неизвестны.

## 1.4. Основное меню MathCAD

Как и любая развитая интерактивная программная оболочка, MathCAD имеет разветвленную систему команд, доступных через меню команд, имеющее древовидную структуру. Вход в основной "ствол" дерева команд осуществляется нажатием клавиши  $F10$ , при этом в верхней строке экрана появляется основное меню, содержащее следующие разделы:

- ◆ **System** (система) - группа команд по взаимодействию с оперативной системой и выполнению общих операций MathCAD;
- ◆ **File** (файл) - группа команд для проведения операций с файлами;
- ◆ **Compute** (рассчитывать) - группа команд по управлению вычислениями;



- ◆ **Edit/move** (редактировать/переместить) - группа команд по редактированию документа;
- ◆ **In-Region** (внутри области) - группа команд по редактированию внутри блока;
- ◆ **Text** (текст) - группа команд для ввода и редактирования текстов;
- ◆ **Window/page** (окно/страница) - группа команд для работы с окнами и задания формата страниц.

Выбор команды можно осуществить четырьмя способами:

- путешествуя по дереву команд с помощью клавиш управления курсором <↓><↑><→><←> и клавиши <Enter>;
- нажимая на клавиши, соответствующие прописным буквам в названиях команд. Например, чтобы ввести команду *Cut* из меню *In-Region*, нужно, войдя в основное меню, нажать последовательно клавиши <I> и <C>, а затем <Enter>;
- не входя в основное меню, нажмите клавишу <Esc> (Escape), и в верхней строчке появится запрос **Command:**, на который нужно ввести полное название нужной команды;
- некоторые команды можно ввести, пользуясь "горячими клавишами" (hot keys) - функциональными клавишами *F1...F10* или комбинациями различных клавиш с клавишами <Ctrl> или <Alt>. Например, ввод той же команды *Cut* можно осуществить нажатием комбинации клавиш <Ctrl>F3. Список основных "горячих клавиш" MathCAD приведен в Приложении 3.

Далее мы рассмотрим наиболее важные команды.

### 1.4.1. Системные команды (System)

**Help (F1)** - помощь. Осуществляет ввод с диска файла *mcad.hlp*, содержащего конспективное изложение возможностей системы по принципу "шаргалки". После ввода команды экран приобретает вид, изображенный на рис.2. Нажимая клавишу, отвечающую букве, соответствующей той или иной теме, можно получить конспективную справку. Например, чтобы узнать, каким образом вводятся матрицы и вектора в MathCAD, нужно нажать клавишу <A>.

**Redraw (<Ctrl>R)** - перерисовать. По этой команде содержимое экрана перерисовывается заново. Эта команда очень полезна в тех случаях, когда изображение на экране испорчено наложением блоков друг на друга, сообщениями об ошибках и т.д.

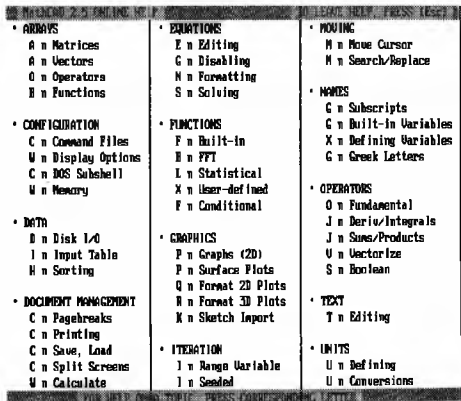


Рис.2. Вид экрана монитора после ввода команды "Help"

**Print (<Ctrl>O)** - печатать. Ввод этой команды обеспечивает вывод документа на печать. Можно выводить не весь документ, а любой его прямоугольный фрагмент (MathCAD запрашивает размеры фрагмента, по умолчанию устанавливая размеры всего документа).

**Memory** - память. Эта команда выдает в командной строке информацию об объеме памяти, занимаемой документом, и об объеме свободной памяти. Например: **14 K of 127 K is used** (14 Кбайт из 127 используется).

**Quit (<Ctrl>Q)** - выход. Данная команда обеспечивает окончание работы с системой и выход в операционную среду.

### 1.4.2. Работа с файлами (File)

**Load (F5)** - загрузить. Эта команда служит для загрузки документа с диска и вывода его на экран монитора. При этом в командной строке появляется запрос **File to load:** (файл для загрузки). Теперь можно набрать имя файла или, нажав клавишу **<Enter>**, получить на экране список всех файлов \*.mcd, находящихся в текущем каталоге, и выбрать из них необходимый.

**Save (F6)** - сохранить. Приведенная команда обеспечивает запись текущего документа на магнитный диск в файл с расширением mcd. В ответ на запрос **Save as:** (сохранить в качестве) необходимо ввести имя файла (можно без расширения). Всегда, когда осуществляется попытка выхода из MathCAD или загрузки другого файла без использования этой команды, MathCAD предупреждает: **Changes not saved. Ok to discard?** Нажмите клавиши **<Y>** ("yes" - "да") и **<Enter>**, если документ сохранять не нужно.

**Clear** - стереть. Ввод этой команды обеспечивает очистку экрана и удаление документа из памяти.

### 1.4.3. Режимы работы вычислителя (Compute)

**Automatic** - автоматический. Этот режим задается по умолчанию при загрузке MathCAD. В нем вычисления проводятся автоматически по мере ввода новых операторов и любой модификации уже введенных блоков. Стоит, например, изменить значение какой-либо переменной, и результаты всех выражений, в которые эта переменная входит, будут изменены. Расчеты проводятся с начала документа до конца текущей страницы (на которой находится курсор), поэтому этот режим может существенно замедлять работу с документом (редактирование, прокрутку текста при помощи

клавиш управления курсором (скроллинг)). Поэтому при редактировании документа лучше перейти в режим ручного расчета.

**Manual** - ручной. В данном режиме удобно проводить редактирование, так как в нем автоматический расчет не проводится.

**Calculate** - вычислить. Эта команда используется в ручном режиме для проведения расчетов по всем блокам, расположенным от начала документа до конца текущей страницы, и обычно выполняется после редактирования.

**Process** - обработать. Ввод указанной команды обеспечивает проведение вычислений по всему документу. Обычно используется в ручном режиме.

Работа вычислителя сопровождается мигающей надписью **Wait...** (ждите) в командной строке, мерцанием формул, по которым проводятся вычисления, и появлением результатов после знаков равенства. Пока работает вычислитель, все операции с документом запрещены. Если необходимо прервать вычисления, нажмите клавиши **<Ctrl><Break>**, тогда через некоторое время в командной строке появится запрос: **Interrupt calculation?** (Прервать вычисления?). Нажмите клавиши **<Y>** и **<Enter>**, и расчет будет прерван.

**Format** - формат. Данная команда вызывает меню, характерное для MathCAD, и в данном случае имеющее вид, изображенный на рис.3.

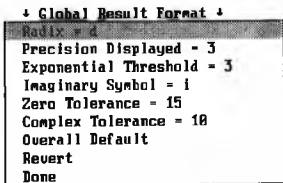


Рис.3. Вид меню числового формата

Здесь

- **Radix** - тип чисел (d - десятичные, o - восьмеричные, b - шестнадцатеричные, c - комплексные);
- **Precision Displayed** - точность представления результатов (количество значащих цифр после запятой);
- **Zero Tolerance** - значение машинного нуля (в примере на рис.3 эта величина равна  $10^{-15}$ );
- **Revert** - команда восстановления исходных значений параметров;
- **Done** - команда, которую нужно ввести, чтобы MathCAD воспринял введенные в параметры изменения.

**Generate matrix (<Alt>M)** - задание матриц. Эта команда позволяет задать вектор или матрицу (см. раздел 1.5.4).

### 1.4.3. Редактирование документов (Edit/move и In-Region)

На рис.4 приведены команды, связанные с перемещением курсора. Для их ввода используются клавиши управления курсором (рис.5) и их комбинации с клавишей <Ctrl>, а также другие "горячие клавиши". Особое искусство представляет собой умение редактировать вычислительные блоки. Для удаления символов используют клавиши <Del> и <Backspace> (эта клавиша находится на основной клавиатуре над клавишей <Enter>). *Помните, что положение вводимого символа определяется состоянием курсора A или  $\mathbb{A}$ .*

**<Enter>** - переход из блока в нижестоящий блок

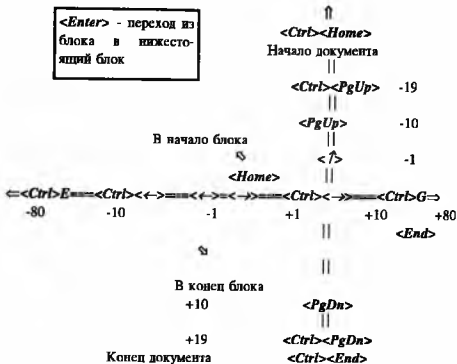


Рис.4. Управление перемещением курсора в MathCAD. Цифры указывают число позиций, на которое перемещается курсор

Рассмотрим основные команды меню редактирования.

**Copy (F2)** - копировать. По этой команде блок копируется в буфер памяти MathCAD. Сам блок при этом не изменяется.

**Cut (F3)** - вырезать. Эта команда позволяет скопировать блок в буфер, одновременно удалив его с экрана.

**Paste (F4)** - вставить. По этой команде блок копируется из буфера в указанную курсором позицию на экране.

<i>Num Lock</i>	/	*	-
7 <i>Home</i>	8 ↑	9 <i>PgUp</i>	+
4 ←	5	6 →	
1 <i>End</i>	2 ↓	3 <i>PgDn</i>	<i>Enter</i>
0 <i>Ins</i>		. <i>Del</i>	

Рис.5. Вид дополнительной клавиатуры IBM-совместимого компьютера

Команды *Cut* и *Paste* удобно использовать для перемещения блоков по документу. При этом можно переносить сразу несколько блоков, следующих друг за другом. Для этого нужно пометить первый блок, а затем - последний блок, используя команду *<Ctrl>Y*. В результате будут выделены все блоки, находящиеся между ними. Тогда упомянутые выше три команды будут работать для всех помеченных блоков одновременно.

Аналогичные команды в меню *In-Region* облегчают редактирование внутри вычислительного блока. Они позволяют копировать, удалять и перемещать содержимое отдельных полей шаблона. Для их выполнения курсор должен находиться внутри нужного поля.

*Separate* - разделить. Эта очень полезная команда используется тогда, когда в результате переносов, появления сообщений об ошибках, блоки начинают валagаться друг на друга. Ввод указанной команды разделит на экране все блоки и сообщения об ошибках.

*Insertline (<Ctrl>F9)* - вставка линии. Эта команда вставляет пустую строку в место, указанное курсором.

*Deleteline (<Ctrl>F10)* - уничтожение линии. Ввод этой команды приводит к стиранию пустой строки, на которой установлен курсор.

*Goto* - перейти к... Ввод этой команды вызывает запрос в командной строке *Goto:*. Введите через пробел одно или два числа, первое из кото-

рых указывает номер строки документа, к которой нужно перейти, второе (если есть) - номер столбца.

**Find (<Ctrl>F5)** - искать. По этой команде можно найти в документе заданный фрагмент текста, который нужно ввести по запросу **Search for:**.

**Replace (<Ctrl>F6)** - замснить. По этой команде MathCAD ищет заданный по запросу **Search for:** фрагмент текста и заменяет его на фрагмент, введенный по запросу **Replace with:**. Перед заменой MathCAD просит подтверждения, выводя в командной строке возможные команды **Yes, No, Quit or All (y,n,q,a)**. Ответ **y** подтверждает замену, **n** - отменяет замену, **q** - прерывает процесс замены, **a** - осуществляет замену для всех фрагментов заданного типа без запроса.

#### 1.4.4. Редактирование текстов (Text)

MathCAD позволяет вводить текстовые блоки. Для этого нужно нажать клавишу <">, и на экране возникнет пара кавычек """, между которыми можно вводить любой текст. Так как ввод символов кириллицы в MathCAD сопряжен со значительными трудностями, мы не рассматриваем команды, связанные с обработкой текстовых блоков.

#### 1.4.5. Управление окнами (Window/page)

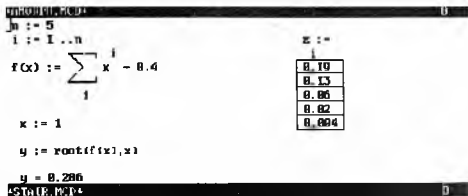
MathCAD имеет возможность перехода к двухоконному режиму работы. При этом на экране имеется два окна, разделенные командной строкой (рис.6). В каждом окне может находиться свой документ, и, таким образом, можно осуществлять обмен информацией между двумя документами, используя буфер и команды *Copy*, *Cut* и *Paste*. Ниже перечислены команды для работы с окнами.

**Split (F7)** - расщепить. Команда разделяет экран на два окна, вводя разделяющую строку в месте нахождения курсора.

**Unsplit (<Ctrl>F7)** - отменить расщепление. Команда уничтожает окно, в котором находится курсор.

**Jump (F8)** - прыгнуть. Команда переводит курсор в другое окно.





## STAIRCASE DESIGN

Based on equations in "Building Design a Construction Handbook, 4th Edition," edited by S. Frederick Nerritt.

(Enter your values on lines marked "w")

Units:            in := 12    ft := 12 in

- w Enter total rise:            rise := 12 ft + 6 in
- w Enter guess for riser height:            rh\_guess := 8 in

Рис.6. Вид экрана с двумя окнами в MathCAD

## 1.5. Основные особенности языка MathCAD

### 1.5.1. Идентификаторы, константы и переменные

Правила записи идентификаторов в MathCAD подобны правилам других языков программирования, например, языка Pascal. Отметим, однако, что MathCAD различает прописные и строчные буквы в идентификаторах. MathCAD использует латинский алфавит, однако можно вводить также греческие символы, используя комбинацию клавиш <Alt><клавиша> из Приложения 4. Следует отметить, что при использовании некоторых драйверов клавиатуры, греческие символы могут отображаться на экране символами кириллицы.

MathCAD не имеет специальных ключевых слов для отдельного описания констант и переменных, как, например, язык Pascal. По сути, константа в MathCAD - либо просто число, либо переменная (идентификатор), которой присвоено числовое значение. Значения констант могут изменяться в процессе выполнения программы (что характерно, например, для типизированных констант в языке Pascal). MathCAD имеет также встроенные системные константы:

$\pi=3.14159\dots$	число "пи";
$e=2.71823\dots$	основание натурального логарифма;
$\infty=10^{307}$	"бесконечность";
$TOL=0.001$	погрешность численных методов;
$ORIGIN=0$	нижняя граница индексации массивов.

Переменные в MathCAD могут изменять в процессе выполнения программы не только свои значения, но и типы. Например, описав переменную как скаляр, можно в другом месте программы описать ее как вектор. Естественно, после этого использование переменной в качестве скаляра приведет к ошибке. Поэтому необходимо быть осторожным в выборе имен новых переменных и заботиться, чтобы они не совпадали со старыми.

### *1.5.2. Встроенные и пользовательские функции*

Основные встроенные функции MathCAD приведены в Приложении 5. Можно также задать любые нестандартные функции, например:

$$R(x, y, z) := \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

### *1.5.3. Циклы и условные выражения*

Задание цикла осуществляется введением переменной типа диапазон (Приложение 1). По умолчанию шаг изменения переменной устанавливается равным  $\pm 1$  (в зависимости от того, возрастает она или уменьшается).

ся). Ввод другого значения шага осуществляется так, как указано в первом из приводимых ниже примеров:

$i:=1,1..10$  (шаг изменения 0.1);

или

$j:=0..10$  (шаг изменения 1);

или

$k:=10..1$  (шаг изменения -1).

Тогда расчет всех выражений, содержащих эту переменную, будет проведен для всех ее значений в заданном интервале. Например,  $\sum_j x_j$  даст сумму первых 11 элементов вектора  $x$ .

Логические выражения в MathCAD могут иметь два значения: 0 (ложь) или 1 (истина). Например,  $5>2=1$  или  $2>5=0$ . Логическая функция  $\text{if}(\text{logic},a,b)$  включает логическое выражение  $\text{logic}$  и принимает значение выражения  $a$ , если  $\text{logic}=1$ , или выражения  $b$ , если  $\text{logic}=0$ .

### 1.5.4. Матрицы и операции с ними

MathCAD использует массивы двух типов: одномерные (векторы) и двумерные (матрицы). Для задания матрицы введите имя переменной, знак присвоения ( $<:=>$ ) и воспользуйтесь комбинацией клавиш  $<Alt>M$ . В командной строке появится запрос **Array size (rows columns):**. Введите через пробел число строк и столбцов матрицы (например, "3 3"). Тогда на экран появится шаблон матрицы

$$\begin{bmatrix} \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \end{bmatrix}$$

который можно заполнить числами, переменными или выражениями. Ввод векторов возможен двумя способами: указанным выше (при этом на запрос нужно ввести лишь число элементов вектора) и непосредственным вводом значений вектора следующим образом:

Введите переменную типа диапазон, например:

$i:=0..9$  (помните, что нумерация элементов массивов в MathCAD начинается с 0).

Определите переменную типа вектор:  $x_i:=$

Вводите значения переменной через запятую. Результат:

$i := 0 .. 9$

$x :=$

1
1,2
2
5,6
...

и т.д.

Для ПЭВМ стандартной конфигурации, не имеющей расширенной оперативной памяти, размеры массивов ограничены: число элементов массива не должно превышать 8000, а число столбцов матрицы - 100. Список матричных операций и функций приведен в Приложении 6.

### 1.5.5. Построение графиков

Нажмите клавишу <@>, и на экране появится шаблон графика (рис.7). Четыре не помеченных поля на рис.7 предназначены для нижних и верхних пределов изменения значений функции и аргумента. Если эти значения не введены, MathCAD рассчитывает их автоматически.

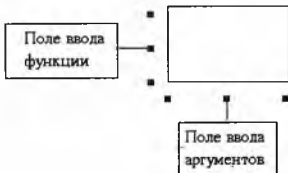
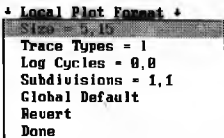


Рис.7. Шаблон графика в MathCAD

Вид графика определяется его форматом. Поместите курсор внутрь графика и нажмите клавишу <F>. На экране появится меню формата графика:



Рассмотрим некоторые наиболее важные параметры формата графика.

**Size=Y,X** - размеры графика по вертикали и горизонтали. Экран монитора имеет размеры Y=25; X=80. Максимальные размеры графика: 127x127.

**Trace Types** - тип линий, при помощи которых строятся графические зависимости. Допустимы следующие параметры:

- ◆ **L** или **l** - непрерывная линия с линейной интерполяцией между узловыми точками графика;
- ◆ **d** - точки в узлах;
- ◆ **s** - ступенчатая линия, соединяющая узловые точки;
- ◆ **b** - прямоугольники, высота которых определяется положением узловых точек. Обычно используется для построения гистограмм;
- ◆ **x, p, o, v** - соответственно знаки вида  $\times$ ,  $+$ ,  $\blacksquare$ ,  $\blacklozenge$  в узловых точках;
- ◆ **X, P, O, V** - по сравнению с предыдущими параметрами узловые точки дополнительно соединяются отрезками (линейная интерполяция).

Возможно изображение нескольких графиков в одном шаблоне. В этом случае в поля шаблона необходимо ввести несколько имен функций (через запятую), зависящих от одной переменной. Чтобы графики различались визуально, в поле **Trace Types** необходимо ввести несколько разных параметров. Например, для графика на рис.8 поле имеет вид **Trace Types=lp**. Отметим, что на цветных мониторах графики различаются цветом.

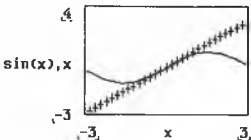


Рис.8. Вид графиков  $\sin(x)$  и  $x$

### 1.5.6. Функции статистики и линейной регрессии

К статистическим функциям MathCAD относятся следующие функции:  $mean(Z)$ ;  $var(Z)$ ;  $stdev(Z)$  - вычисляют соответственно среднее арифметическое, дисперсию и среднеквадратичное отклонение для вектора  $Z$ ;

$slope(Y,Z)$ ;  $intercept(Y,Z)$ ;  $corr(Y,Z)$  - рассчитывают соответственно коэффициенты  $a$  и  $b$  для уравнения линейной регрессии  $Z_i = aY_i + b$ , а также коэффициент парной корреляции для векторов  $Y$  и  $Z$ ;

$hist(intervals,data)$  - служит для построения гистограмм. Эта функция рассчитывает вектор частот попадания данных из вектора  $data$  в интервалы, определяемые значениями элементов вектора  $intervals$ .

### 1.5.7. Методы решения систем нелинейных уравнений

MathCAD дает уникальную возможность для решения уравнений любой сложности (в том числе трансцендентных) и их систем. Для решения любого уравнения вида  $F(x)=0$  используется функция  $root(F(x),x)$ . Для инициализации процесса решения необходимо задать пробное значение переменной  $x$ , используя которое MathCAD находят одно из решений уравнения. Если уравнение имеет несколько решений, необходимо использовать различные исходные значения  $x$ , применяя метод проб и ошибок. Функция  $root$  дает приближенное решение уравнения  $F(x)=0$ , при этом ошибка результата определяется величиной системной константы  $TOL$ .

Для решения систем уравнений используется конструкция:

<Инициализация решения>

**Given**

<Уравнения>

<Ограничительные условия>

<Функции *find* или *minerr*>

Функция *find*( $x_1, x_2, \dots, x_n$ ) и *minerr*( $x_1, x_2, \dots, x_n$ ) возвращают вектор решений системы уравнений, если система имеет точное решение (функция *find*), или вектор приближенных решений с минимальной среднеквадратичной погрешностью, если у системы нет точного решения (функция *minerr*).

Отметим, что применение функций *root*, *find* и *minerr* может привести к ошибке, если неудачно выбраны исходные значения переменных для инициализации процесса решения (см. Приложение 2). В этом случае необходимо выбрать другие исходные значения переменных.

### 1.5.8. Работа с файлами данных

MathCAD обладает возможностями обмена данными с другими программами. При этом MathCAD использует промежуточные файлы последовательного доступа \*.dat и \*.prn для ввода/вывода векторов и матриц соответственно. Файлы \*.dat должны содержать последовательность чисел, файлы \*.prn - одну или несколько колонок чисел, разделенных пробелами. Файлы могут быть созданы как самим MathCAD, так и любой прикладной программой, в том числе и в текстовом редакторе. Считывание данных осуществляется функциями (*обратите внимание, что их имена пишутся прописными буквами!*):

*READ*(<имя файла>) - возвращает значение очередной константы в файле <имя файла>.dat;

*READPRN*(<имя файла>) - возвращает матрицу, элементы которой находятся в файле <имя файла>.prn.

Для записи данных в файл предназначены функции:

*WRITE*(<имя файла>):=*A* - записывает в файл <имя файла>.dat значение арифметического выражения *A*;

*WRITEPRN*(<имя файла>):=*M* - записывает в файл <имя файла>.prn матрицу, являющуюся результатом матричного выражения *M*;

**APPEND(<имя файла>):=A; APPENDPRN(<имя файла>):=M** - аналогичны функциям **WRITE** и **WRITEPRN**, но в отличие от них не создают новый файл на диске, а добавляют данные в уже имеющийся файл.

Отметим, что массивы чисел, полученные из файлов \*.dat и \*.prn, не могут быть изменены текстовым редактором MathCAD, но их значения могут изменяться в процессе расчетов.

### 1.5.9. Функции линейной и сплайн-интерполяции

Если зависимость вида  $y(x)$  задана набором значений  $x$  и  $y$  и нужно найти значение  $y(x)$  для некоторого промежуточного  $x$ , то необходимо применять интерполяцию. MathCAD позволяет использовать два типа интерполяции:

1. **Линейная** - узловые точки соединяются отрезками прямых. Если  $x$  выходит за пределы конечных точек, то осуществляется линейная экстраполяция по отрезкам прямых, примыкающим к конечным точкам. Линейная интерполяция удовлетворительна лишь при достаточно гладких функциях и большом числе узлов интерполяции.

2. **Сплайн** - зависимость  $y(x)$  заменяется кусками полиномов третьей степени. График функции при этом напоминает гибкую линейку, закрепленную в узловых точках интерполируемой функции.

Интерполяция реализуется с помощью следующих функций:

**linterp(VX, VY, x)** - возвращает значение  $y(x)$  для заданного  $x$  при линейной интерполяции;

**cspline(VX, VY)** - возвращает вектор VS вторых производных при сплайн-интерполяции и кубической экстраполяции;

**pspline(VX, VY)** - возвращает вектор VS вторых производных при сплайн-интерполяции и параболической экстраполяции;

**lspline(VX, VY)** - возвращает вектор VS вторых производных при сплайн-интерполяции и линейной экстраполяции;

**interp(VS, VX, VY, x)** - возвращает значение  $y(x)$  для заданного  $x$  при сплайн-интерполяции.



# Примеры заданий для практических занятий

## Занятие 1. Прimitивные вычисления

1. Выполните элементарные вычисления:

сложение, вычитание, деление, умножение, возведение в степень.

2. Вычислите значение функций при  $x=\pi/4$ :  $\sin(x)$ ,  $\cos(x)$ ,  $\tan(x)$ .

3. Вычислите значение функций при  $x=1/2$ :  $\operatorname{asin}(x)$ ,  $\operatorname{acos}(x)$ ,  $\operatorname{atan}(x)$ .

4. Вычислите значение функций при  $x=1$ :  $\exp(x)$ ,  $\ln(x)$ ,  $\log(x)$ .

5. Определите вектор через указание верхней, нижней границы и шага изменения переменной, найдите, используя специальные операции, сумму и произведение всех его элементов.

6. Запишите функцию  $y(x)$  с использованием знака суммы. Определите значение ее при  $x$ , равном 0 и 4.

$$y(x) := 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!}$$

7. Вычислите значение функции в точках  $x = -2, 0, 2$ .

В. 125

$$y(x) := \begin{bmatrix} 8 & x \\ x & -8 \end{bmatrix}$$

8. Вычислите значение функции:

a)  $x=1, y=2$ ; b)  $x=2, y=1$ ;

$$z(x, y) := e^{|x-y|} + \ln(1 + e) \cdot \log(\tan(x))$$

c)  $x=1, y=1, z=1$ ; d)  $x=0, y=2, z=0$ ; e)  $x=10, y=7, z=5$

$$r(x, y, z) := \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

9. Определите значение суммы:

a)

$$i := 1 \dots 10$$

$$x := 0.5$$

$$\sum_{i=1}^{10} \frac{x^i}{2^i}$$

b)

$$i := 1 \dots 10$$

$$x := 0.5$$

$$\sum_{i=1}^{10} \frac{x^i}{i!}$$

c)

$$s := 10 \quad l := 0 \dots s \quad y := \frac{\pi}{2}$$

$$\sum_{l=1}^s \left[ (-1)^l \cdot \frac{2 \cdot l + 1}{(2 \cdot l + 1)!} \right]$$

d)

$$s := 10 \quad l := 0 \dots s \quad y := \frac{\pi}{2}$$

$$\sum_{l=1}^s \left[ (-1)^l \cdot \frac{2 \cdot l + 1}{(2 \cdot l + 1)!} \right]$$

e)

$$i := 1 \dots 10 \quad j := 1 \dots 5$$

$$\sum_{i=1}^{10} \left[ \sum_{j=1}^5 \left[ \frac{1}{i+j} \right] \right]$$

f)

$$i := 1 \dots 10 \quad j := 1 \dots 60$$

$$\sum_{i=1}^{10} \left[ \sum_{j=1}^{60} \left[ \sin \left[ i^3 + j^4 \right] \right] \right]$$

g)

$$n := 1 \dots 10 \quad k := 1 \dots 10$$

$$\sum_{k=1}^{10} \left[ \sum_{n=1}^{10} \frac{k-n+1}{k+n} \right]$$

10. Определите значение произведения:

a)

$$i := 1 \dots 5$$

$$\prod_{i=1}^5 \left[ \frac{2^i}{2^{i+2i+3}} \right]$$

b)

$$j := 2 \dots 10$$

$$\prod_{j=2}^{10} \frac{j+1}{j+2}$$

c)

$$l := 1 \dots 10 \quad x := 1$$

$$\prod_{l=1}^{10} \left[ 1 + \frac{\sin(l \cdot x)}{l!} \right]$$

d)

$$n := 4 \quad x := 7 \quad k := 1 \dots n$$

$$\prod_k \left[ \frac{x^k}{k+1} - (\cos(|x|))^k \right]$$

e)

$$n := 4 \quad x := 7 \quad k := 1 \dots n$$

$$\prod_k \left[ \frac{(1+x)^{k+1}}{(k+1)! + 1} \right]$$

f)

$$i := 1 \dots 3 \quad j := 1 \dots 3$$

$$\prod_i \left[ \prod_j \left[ \frac{i \cdot j}{i + j} \right] \right]$$

g)

$$i := 1 \dots 3 \quad j := 1 \dots 3$$

$$\prod_i \left[ \prod_j \left[ (i + j)^2 \right] \right]$$

11. Определите функцию:  $y(x) = x^2 + x + 1$ . Вычислите значение производной от этой функции в точках:  $x = 1, 0, 2$ .

12. Вычислите значение определенного интеграла:

a)

$$\int_0^1 \frac{1}{2} \sqrt{4 \cos(x)} dx$$

b)

$$\int_0^{\pi} \frac{1}{3 \cos(x)^2} dx$$

c)

$$\int_4^9 \frac{x+1}{\sqrt{x}} dx$$

d)

$$\int_0^2 e^{-x} \cos\left[y \cdot \frac{x}{4}\right] dx$$

e)

$$\int_{0.2}^{0.56} a \cos \left[ e^{-\frac{1}{3} x} \right] dx$$

f)

$$\int_0^5 e^x \sin \left[ \frac{2}{x} \right] dx$$

## Занятие 2. Построение графиков

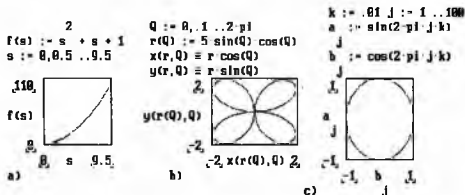


Рис.9. Пример построения графика функции, описанной:

а) обычным образом; б) в полярных координатах; с) параметрически.

1. Постройте график функции (рис. 9, а):

- а) измените размер области, отводимой под график;
- б) измените формат представления точек на графике;
- в) выберите иные конечные пределы на графике;
- г) нанесите масштабную сетку на график;
- д) изобразите на том же графике функцию  $f(-s)$ .

2. Постройте график функции, заданной в полярных координатах(рис.9,б):

- а)  $\rho=2\sin(2\varphi) \{0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ ;    б)  $\rho=3\sin(3\varphi) \{0 \leq \varphi \leq \pi\}$ ;
- с)  $\rho=4\sin(4\varphi/3) \{0 \leq \varphi \leq 6\pi\}$ ;    д)  $\rho=5\sin(5\varphi/3) \{0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ ;
- е)  $\rho=4(\cos(2\varphi))^{0.5} \{0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ ;    ф)  $\rho=1^\varphi \{0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ ;
- г)  $\rho=(\cos(\varphi))^{\sin\varphi/8} \{0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ .

3. Постройте график функции, заданной параметрически (рис.9, с):

- а)  $x=\sin(4\pi t) \quad y=\cos(2\pi t)$ ;    б)  $x=\sin(6\pi t) \quad y=\cos(2\pi t)$ ;
- с)  $x=\sin(4\pi t) \quad y=\cos(6\pi t)$ ;    д)  $x=\sin(2\pi t) \quad y=\cos(6\pi t)$ ;
- е)  $x=\sin(4\pi t) \quad y=\cos(2\pi t)$ ;    ф)  $x=\sin(6\pi t) \quad y=\cos(10\pi t)$ ;
- г)  $x=\sin(8\pi t) \quad y=\cos(6\pi t)$ .

4. Уравнение спирали задается параметрически  $x=t\cdot\cos(t)$  и  $y=t\cdot\sin(t)$ .  
 Постройте изображение спирали ( $0\leq t\leq 6\pi$ ).

5. Постройте график зависимости  $y=e^{-k\cdot x}\cdot\sin(2\pi x+\pi/2)$ , описывающий  
 затухающие колебания маятника, и две асимптоты к нему:  $y=e^{-k\cdot x}$  и  
 $y=-e^{-k\cdot x}$  при  $k=1/2$ .

```

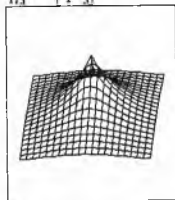
i := 4 N := 20 i := 0 .. N j := 0 .. N
x := -1 + i / N y := -1 + j / N

```

```

f(x,y) := e
N := f[x,y]
i,j

```

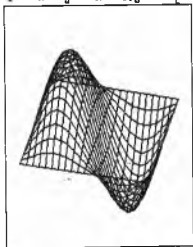


а)

```

N := 20 i := 0 .. N j := 0 .. N
f(x,y) := 2 * sin(pi * x) * sin(2 * pi * y)
x := -1 + i / N y := -1 + j / N := f[x,y]
i,j

```



б)

Рис.10. Построение графиков функций с двумя независимыми переменными:

а)  $f(x,y) = e^{-\sqrt{x^2+y^2}}$ ; б)  $f(x,y) = 2 \sin(\pi x) \sin(2\pi y)$

6. Постройте графики функций с двумя независимыми переменными, изображенные на рис.10.

### Занятие 3. Векторы и матрицы

1. Определите два вектора-столбца  $v$  и  $w$  и вектор-строку  $z$ , состоящие из трех чисел каждый.
2. Найдите значение выражений:  $\sum v$ ,  $v/2$ ,  $v \cdot 2$ ,  $v-3$ ,  $v-w$ ,  $v+w$ ,  $v \cdot z$ ,  $v \times w$ ,  $v^T$ .
3. Для вектора  $v$  определите:
  - а) общее число элементов;
  - б) индекс последнего элемента;
  - в) значение максимального и минимального элементов;
  - г) выполните сортировку элементов по возрастанию.
4. Определите две матрицы  $A$  и  $B$  размером  $3 \times 3$ .
5. Найдите значение выражений:
 
$$2 \cdot A, A/2, A^2, -A, A^T, A \cdot v, A^T, A^{-1}, A \cdot A^{-1},$$

$$A+B, A-B, A \cdot B, A \cdot B \cdot B \cdot A, B \cdot A \cdot A \cdot B, A^2, \sin(A).$$

6. Выполните слияние матриц  $A$  и  $B$ .
7. Из матрицы  $A$  выделите 2-й столбец и элемент  $A_{2,3}$ .
8. Для матрицы  $A$  определите:
  - а) число строк и столбцов;
  - б) проведите сортировку строк так, чтобы во втором столбце элементы располагались по возрастанию;
  - в) проведите сортировку столбцов так, чтобы в 3-й строке элементы располагались по возрастанию.
9. Вычислите определитель матрицы  $D$  и найдите значение  $D \cdot D^{-1}$

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

*Пример решения системы линейных уравнений:*

*а) методом Крамера*

$$\begin{cases} 10x - 5y = -5 \\ 4x + 7y = 25 \end{cases} \quad M := \begin{bmatrix} 10 & -5 \\ 4 & 7 \end{bmatrix} \quad u := \begin{bmatrix} -5 \\ 25 \end{bmatrix} \quad \text{DetM} := |M|$$

$$M1 := M \quad \langle 0 \rangle \quad M := u \quad x1 := \frac{|M|}{\text{DetM}} \quad x1 = 1$$

$$M := M1 \quad \langle 1 \rangle \quad M := u \quad x2 := \frac{|M|}{\text{DetM}} \quad x2 = 3$$

b) методом обратной матрицы

$$M \cdot u = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

6. Решите систему линейных уравнений:

- |                       |                       |                       |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| a) $5a+35b+5c+5d=115$ | b) $5a+35b+5c+5d=115$ | c) $5a+35b+5c+5d=115$ |
| $3a+4b+2c+d=16$       | $3a+4b+2c+d=16$       | $3a+4b+2c+d=16$       |
| $2a+b+3c+5d=10$       | $2a-3b+2c+4d=-13$     | $2a+b+3c+5d=10$       |
| $4a-3b+4c+6d=1$       | $4a-3b+4c+6d=1$       | $4a-3b+4c+6d=2$       |
| d) $a-2b+3c-4d=3$     | e) $10a-b+2c+3d=0$    | f) $2a+3b+4c+d=3.1$   |
| $b-2c+3d=2$           | $a-10b-c+2d=0$        | $0.1a-2b-5c+d=2$      |
| $c-2d=1$              | $2a+3b+20c-d=-10$     | $0.15a-3b+c-4d=1$     |
| $d=0$                 | $3a+2b+c+20d=15$      | $10a+2b-c+2.1d=-4.7$  |

#### Занятие 4. Работа с диском

1. Выполните запись на диск поэлементно скалярной величины, вектора, матрицы. Прочитайте записанные значения с диска и присвойте их новым переменным.
2. Запишите произвольный массив (3×3) на диск, используя функцию WRITEPRN, а затем прочитайте его с диска, исправив предварительно значение некоторых элементов в массиве.
3. Наберите в текстовом редакторе NC файл, содержащий числовые данные, и прочитайте эти данные в среде MathCAD.

#### Занятие 5. Простейшие статистические функции и построение прямой методом наименьших квадратов (МНК)

1. Определите два вектора X и Y одинаковой размерности.
2. Вычислите уравнение прямой ( $y=ax+b$ ), проведенной по МНК.
3. Изобразите точки ( $X_i, Y_i$ ) в прямую на графике.

4. Вычислите значение ординаты в опытку ее определения по МНК-прямой по заданному значению абсциссы и ее погрешности с использованием следующих расчетных формул:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum x_i \quad s_x = \sqrt{\frac{\sum (\bar{x} - x_i)^2}{N-1}} = \sqrt{\frac{\sum x_i^2 - N\bar{x}^2}{N-1}}$$

$$a = \frac{\overline{xy} - (\bar{x})(\bar{y})}{(\overline{x^2}) - (\bar{x})^2} \quad b = \frac{(\overline{x^2})\bar{y} - \bar{x}(\overline{xy})}{(\overline{x^2}) - (\bar{x})^2}$$

$$s_0^2 = \frac{N}{N-2} \left\{ (\overline{y^2}) - (\bar{y})^2 - \frac{[\overline{xy} - (\bar{x})(\bar{y})]^2}{(\overline{x^2}) - (\bar{x})^2} \right\}$$

$$s_a^2 = \frac{s_0^2}{N[(\overline{x^2}) - (\bar{x})^2]}$$

$$s_b^2 = s_a^2 \bar{x}^2 \quad r = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{Ns_x s_y}$$

$x = a \cdot D + b$   $\delta_a = s_a$   $\delta_b = s_b$   $\delta_D = 1\%$  (для лабораторного ФЭКа)

$$\delta_x = D\delta_a + a\delta_D + \delta_b$$

### Занятие 6. Построение гистограмм

1. Прочитайте массив данных с диска.
2. Определите как переменную число интервалов по формуле Стэрджеса  $k = 1 + 3.32 \cdot \lg(n)$ , где  $n$  - объем выборки.
3. Определите шаг гистограммы.
4. Определите нижнюю границу распределения.
5. Определите массив границ интервалов (inter).



6. Вычислите частоты с использованием функции `hist(inter,x)`.

7. Постройте гистограмму.

8. Определите моменты распределения по формулам:

$$h_j = \frac{1}{n} \sum (x_j - \bar{x})^j$$

9. Вычислите асимметрию и эксцесс распределения:

$$A = \frac{h_3}{h_2^{3/2}}, \quad E = \frac{h_4}{h_2^2} - 3$$

10. Вычислите ошибки определения асимметрии и эксцесса по формулам:

$$S_A = \sqrt{\frac{6n(n-1)}{(n-2)(n+1)(n+3)}}$$

$$S_E = \sqrt{\frac{24n(n-1)^2}{(n-3)(n-2)(n+3)(n+5)}}$$

*Пример построения гистограммы:*

```
i := 0 .. 199  X := READ(f)  n := length(X)  n = 200
k := ceil(1 + 3.32 * log(n))  k = 9  j := 0 .. k
step := (max(X) - min(X)) / k
inter := min(X) + step * j
g := hist(inter, X)
g[0] := 0
g[last(g)+1] := 0
```

min(X) - 1 inter max(X) + 1

## Занятие 7. Приближенные вычисления

1. Найдите приближенное решение уравнений:

- а)  $x^2 \cdot \cos(2x) + 1 = 0$ , для  $x \in [0, \pi/2]$ ;    б)  $x^3 + x^2 + x + 1 = 0$ , для  $x \in [-2, 1]$ ;  
 в)  $x^5 - 0.3 \cdot |x-3| = 0$ , для  $x \in [0, 1]$ ;    д)  $2x - \cos(x) = 0$ , для  $x \in [0, \pi/2]$ ;  
 е)  $9x - \sin(\sqrt{x}) = 0$ , для  $x \in [0, 1.5]$ ;    ф)  $e \cdot \operatorname{tg}(x) - (x+1)/2 = 0$ , для  $x \in [0, \pi/4]$ ;  
 г)  $x \cdot \ln(x+1) = 0$ , для  $x \in [0, \pi/4]$ .

*Пример:*

$$y(x) := e^{\tan(x)} \quad x := 2 \quad \operatorname{root}(y(x), x) = 3.142 \quad y(3.142) = 8.689$$

2. Определите корни уравнения  $e^{-x} \cdot \sin(x) - \ln(x) = 0$  для различных исходных значений величины  $x$  и проанализируйте причины ошибок:

- а)  $x = -100$     б)  $x = -10$     в)  $x = -1$     д)  $x = 0$     е)  $x = 1$     ф)  $x = 10$     г)  $x = 100$     х)  $x = 1000$ .

3. Найдите приближенное решение систем линейных уравнений:

- а)  $y - x^4 \approx 0$     б)  $y^2 - \cos(x) \approx 0$     в)  $y - e^x \approx 0$     д)  $\sin(y) - e^x \approx -1$   
 $y^5 - x^3 \approx 0$      $y^3 - x^2 + 1 \approx 0$      $y + x + 1 \approx 0$      $\cos(y - \pi/3) + 2x \approx 0$

*Пример:*

$$x := 8 \quad y := 8$$

Given

$$y + 3 \exp(x) - 8 \approx 0 \quad \tan(y) + 2 \cdot x + 12 \approx 0$$

$$u := \operatorname{Find}(x, y) \quad u = \begin{bmatrix} 1.153 \\ -1.581 \end{bmatrix}$$

$$u + 3 \exp \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix} - 8 = 0 \quad \tan \begin{bmatrix} u \\ 1 \end{bmatrix} + 2 \cdot u + 12 = 5.329 \cdot 10^{-15}$$

## Занятие 8. Сплайн - аппроксимация

1. Прочитайте массив  $M$  с диска.
2. Изобразите на графике точки  $M_{i,j}$  в виде крестиков.
3. Изобразите на графике кривую методом кубической сплайн-аппроксимации.

Пример:

```
n := 10  i := 0 .. n  X := READ(f11)
```

```

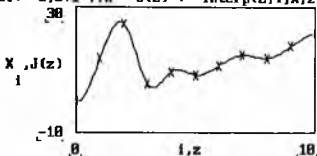
      0
13.595
24.581
 5.39
 9.32
X =  8.296
     11.256
     14.53
     13.614
     17.418
     21.559

```

```

      i
Y := i      Z := cspline(Y,X)
zi := 0,0.1 .. n  J(z) := interp(Z,Y,X,zi)

```



## Примеры задач для самостоятельного решения

1. Составьте программу определения концентрации (в %) малорастворимой соли по произведению растворимости этой соли и вычислите растворимость для следующих солей:

Соединение	ПР	Соединение	ПР
$Ag_4[Fe(CN)_6]$	$8.5 \cdot 10^{-45}$	$Bi_2S_3$	$1 \cdot 10^{-97}$
$Ag_2SO_3$	$1.5 \cdot 10^{-14}$	$[Cr(NH_3)_6](MnO_4)_3$	$4.0 \cdot 10^{-8}$
$Ba_3(AsO_4)_2$	$7.8 \cdot 10^{-51}$	$Cu_2P_2O_7$	$8.3 \cdot 10^{-16}$
$Bi_2(C_2O_4)_3$	$4 \cdot 10^{-36}$	$Zr_3(PO_4)_4$	$1 \cdot 10^{-132}$

2. Составьте программу определения концентрации ионов водорода в растворе слабой кислоты по известной величине константы диссоциации, учтя изменение концентрации недиссоциированной формы кислоты при ионизации, и вычислите pH 0.01 М растворов следующих слабых кислот:

Соединение	$K_{дис}$	Соединение	$K_{дис}$
$NH_3$	$2.0 \cdot 10^{-5}$	$HOC_6H_2(NO_2)_3$	$4.2 \cdot 10^{-1}$
$C_6H_5COOH$	$6.3 \cdot 10^{-5}$	$H_2Se$ $K_1$	$1.3 \cdot 10^{-4}$
$HBrO_3$	$2.0 \cdot 10^{-1}$	$K_2$	$1.0 \cdot 10^{-11}$
$CHCl_2COOH$	$5.0 \cdot 10^{-2}$	$HF$	$6.2 \cdot 10^{-4}$

3. Газовая смесь состоит из окиси азота и кислорода. Найдите концентрацию, при которой содержащаяся в смеси окись азота окисляется с максимальной скоростью по реакции:



4. Требуется изготовить прямоугольный сосуд из прямоугольника, вырезав углы его и загнув затем края, причем объем сосуда должен быть максимальным. Создайте общий алгоритм определения и вычислите оптимальный объем сосуда, если прямоугольный лист имеет размеры  $10 \times 13$  см.

5. Вырежьте из круга сектор так, чтобы из него можно было склеить конусообразный фильтр с максимальным объемом. Создайте общий алгоритм и определите максимальный объем фильтра, если радиус круга равен 7 см.

6. Создайте алгоритм для перевода нормальной концентрации в молярную, процентную и моляльную концентрацию. Определите в различных единицах концентрацию 3.22 М водного раствора серной кислоты, плотность которой равна  $1.170 \text{ г/см}^3$ .

7. Ниже приведены степени диссоциации  $\alpha$  водорода (3500 К) при различных давлениях:

p, Па	$1 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^5$	$1 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^6$	$1 \cdot 10^7$
$\alpha$	$7.83 \cdot 10^{-2}$	$5.55 \cdot 10^{-2}$	$3.50 \cdot 10^{-2}$	$2.48 \cdot 10^{-2}$	$4.76 \cdot 10^{-2}$	$7.86 \cdot 10^{-3}$

Рассчитайте константы равновесия при указанных давлениях. Постройте график зависимости константы равновесия от давления.

8. Вычислите коэффициенты активности иона  $\text{Na}^+$  в 0.001, 0.01 и 0.1 М растворах NaCl по формулам:

$$\lg(f) = -0.51 \cdot z^2 \sqrt{I} \quad \text{и} \quad \lg(f) = -0.51 \cdot z^2 \frac{\sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}}$$

При каких значениях ионной силы раствора результаты вычислений практически совпадают?

9. Для реакции  $\text{CH}_3\text{OH}_{(г)} + 1.5\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}_{(г)}$  определите энтальпию, энтропию и константу равновесия реакции при 500 К. Стандартные

термодинамические величины для веществ, участвующих в реакции, даны в следующей таблице:

Вещество	$\Delta H_{298}$ кДж <small>моль</small>	$\Delta S_{298}$ Дж <small>моль·К</small>	a Дж <small>моль·К</small>	$b \cdot 10^3$ Дж <small>моль·К<sup>2</sup></small>	$c \cdot 10^9$ Дж·К <sup>2</sup> <small>моль</small>	$c \cdot 10^6$ Дж <small>моль·К<sup>2</sup></small>
$\text{CH}_3\text{OH}_{(г)}$	-201.2	239.76	15.28	105.2	—	-31.04
$\text{O}_2$	—	205.01	31.46	3.39	-3.77	—
$\text{CO}_2$	-393.51	213.66	44.14	9.04	-8.54	—
$\text{H}_2\text{O}_{(г)}$	-241.84	188.72	30.00	11.71	0.33	—

При вычислениях используйте формулы:

$$\Delta H(T) = \Delta H_{298} + \int_{298}^T (\Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^2 + \frac{\Delta c'}{T^2}) dT,$$

$$\Delta S(T) = \Delta S_{298} + \int_{298}^T \frac{(\Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^2 + \frac{\Delta c'}{T^2})}{T} dT,$$

$$\Delta G(T) = \Delta H(T) - T \cdot \Delta S(T),$$

$$\ln(K_p) = -\frac{G(T)}{R \cdot T}, \text{ где } R=8.31 \text{ (универсальная газовая постоянная)}$$

10. В рамках простого метода Хюккеля найдите энергию и вид молекулярных орбиталей для следующих органических молекул:

- бутадиена;
- циклобутадиена;
- метиленциклопропена;
- триметилсметана.

11. Нитрующая смесь состава  $\omega(\text{HNO}_3)=16\%$ ,  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4)=62\%$ ,  $\omega(\text{H}_2\text{O})=22\%$  расходуется в количестве 4250 кг. Эта смесь готовится из следующих растворов:

меланж -  $\omega(\text{HNO}_3)=85\%$ ,  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4)=10\%$ ,  $\omega(\text{H}_2\text{O})=5\%$ ;

олеум(20%) -  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4)=104.5\%$ ;

отработанная кислота -  $\omega(\text{H}_2\text{SO}_4)=70\%$ ,  $\omega(\text{H}_2\text{O})=30\%$ .

Определите расход кислот, идущих на приготовление смеси данного состава.

12. Для хлористого метилена, применяемого в качестве охлаждающего средства, известны следующие три значения давления пара:

$p_1=0.0355$  атм, при  $-30^\circ\text{C}$ ;

$p_2=0.190$  атм, при  $0^\circ\text{C}$ ;

$p_3=1.020$  атм, при  $40^\circ\text{C}$ .

Найдите давление пара хлористого метилена при  $-15^\circ\text{C}$  и при  $20^\circ\text{C}$ , используя следующую формулу:

$\lg(p) = -\frac{A}{T} + B \cdot \lg(T) + C$ , где  $A$ ,  $B$  и  $C$  - некоторые константы.

13. Определите оптимальную среднюю объемную скорость газа-носителя  $F_0$  и эффективность в теоретических тарелках  $N_0$  газохроматографической колонки, которые в первом приближении связаны по уравнению Ван-Деемтера:

$$H = A + B/F + C \cdot F.$$

Здесь  $H$  - высота, эквивалентная теоретической тарелке, т.е.  $H=L/N$ , где  $L$  - длина колонки;  $N$  - ее эффективность в теоретических тарелках;  $A$ ,  $B$ ,  $C$  - коэффициенты, характеризующие вклад различных видов диффузий в размывания хроматографических зон компонентов;  $F$  - средняя объемная скорость газа-носителя.

Исходные данные:  $N_1=1250$ ,  $F_1=50$ ,  $N_2=1300$ ,  $F_2=40$ ,  $N_3=500$ ,  $F_3=5$ .

$$F_0 = \sqrt{B/C}$$

14. Известно, что атом  $A$  расположен в начале координат, а атом  $B$  занимает позицию внутри кубической ячейки  $a=10\text{\AA}$ . Определите координаты атома  $B$ , если известны четыре расстояния до него от различных атомов  $A$ .

Координаты атома	Расстояние		
	Вариант 1	Вариант 2	Вариант 3
(0,0,0)	10.488	8.307	8.718
(1,1,0)	7.071	9.434	10.770
(0,1,1)	8.367	7.000	10.770
(1,0,1)	9.487	12.207	6.000

15. Составьте программу для вычисления объема элементарной ячейки для следующих сингоний:

- триклинной;
- моноклинной;
- ромбоэдрической;
- гексагональной;
- ромбической.

16. Концентрация летучего продукта, находящегося вне реактора в момент времени  $t$ , описывается уравнением:

$$C(t) = b \cdot \frac{k_1 \cdot a}{k_1 - a} \left( \frac{1 - a\xi V/\omega}{1 - aV/\omega} \exp(-at) - \frac{1 - k_1\xi V/\omega}{1 - k_1V/\omega} \exp(-k_1t) + \left( \frac{1 - k_1\xi V/\omega}{1 - k_1V/\omega} - \frac{1 - a\xi V/\omega}{1 - aV/\omega} \right) \exp\left(\frac{-t}{V/\omega}\right) \right)$$

$$a = \frac{\omega}{KV_1} \quad b = A_0V_1/\omega$$

Здесь  $k_1$  - константа скорости реакции разложения реагента;  $\xi$  - параметр, характеризующий инерционность перемешивания;  $V$  - объем газового пространства над жидкостью в реакторе ("мертвый объем");  $\omega$  - скорость потока газа-носителя, увлекающего летучий продукт;  $K$  - коэффициент распределения летучего продукта (равный отношению массо-объемных концентраций продукта в жидкости и газе);  $V_1$  - объем жидкой фазы, в которой протекает реакция первого порядка с образованием летучего продукта;  $A_0$  - начальная концентрация реагента.

Исходные данные:  $k_1=0.05$ ,  $a=0.1$ ,  $\omega=V=20$  и  $b=1000$ .

Постройте график зависимости концентрации от времени, если величина  $\xi$  равна -0.5, 0, 0.5 или 1.


## Литература

1. Батунер Л.М., Позин М.Е. Математические методы в химической технике. Л.:Химия, 1968.
2. Дьяконов В.П. Система MathCAD: Справочник. М.: Радио и связь, 1993.
3. Мариничев А.Н., Турбович М.Л., Зенкевич И.Г. Физико - химические расчеты на микро-ЭВМ. Л.:Химия, 1990.
4. Зайцев О.С. Задачи и вопросы по химии: Учебное пособие для вузов. М.:Химия, 1985.



# Приложение 1

## Основные операторы MathCAD

Оператор	Ввод	Шаблон	Оператор	Ввод	Шаблон
Сложение	$X+Y$	$\blacksquare + \blacksquare$	Факториал	$X!$	$\blacksquare !$
Вычитание	$X-Y$	$\blacksquare - \blacksquare$	Модуль	$ X $	$ \blacksquare $
Умножение	$X*Y$	$\blacksquare \cdot \blacksquare$	Расчет	$X=$	нет
Деление	$X/Y$	$\frac{\blacksquare}{\blacksquare}$	Диапазон от $k_0$ до $k_1$ с шагом $n-k_0$	$k_0,n;k_1$	$\blacksquare, \blacksquare \dots \blacksquare$
Присваивание	$X:Y$	$\blacksquare := \blacksquare$	Суммирование ряда	$i\#X$	$\sum \blacksquare$
Скобки	$X'$	$(\blacksquare)$	Перемножение ряда	$i\#X$	$\prod \blacksquare$
Степень	$X^Y$	$\blacksquare^{\blacksquare}$	Производная	$x?f(x)$	$\frac{d}{d\blacksquare}$
Смена знака	$-X$	$-\blacksquare$	Определенный интеграл	$x\&f(x)$	$\int \blacksquare = d\blacksquare$
График	@		Квадратный корень	$\sqrt{X}$	$\sqrt{\blacksquare}$
Меньше	$X<Y$	$\blacksquare < \blacksquare$	Больше	$X>Y$	$\blacksquare > \blacksquare$
Меньше или равно	$X<A B>Y$	$\blacksquare \leq \blacksquare$	Больше или равно	$X<A B>Y$	$\blacksquare \geq \blacksquare$
Приблизительно равно	$X<A B>=Y$	$\blacksquare \approx \blacksquare$	Не равно	$X<A B>\#Y$	$\blacksquare \neq \blacksquare$

## Приложение 2

### Некоторые сообщения об ошибках в MathCAD

Сообщение	Перевод	Сообщение	Перевод
not a name	Имя неверно	undefined	Не определено
singularity	Деление на 0	must be nonzero	Не должен быть нулем
index out of bounds	Индекс за пределами границ	illegal range	Ошибка в диапазоне
must be vector	Должен быть вектором	must be integer	Должно быть целым
too few arguments	Слишком мало аргументов	too many arguments	Слишком много аргументов
domain error	Ошибка в области определения	File not found	Файл не найден
not converging	Нет сходимости	underflow	Переполнение
overflow	Переполнение	unmatched parenthesis	Незакрытая скобка
Illegal command	Неправильная команда	Too close to a region	Слишком близко к блоку
Can't edit blank space	Не могу редактировать пустое пространство		

### Приложение 3

#### Основные "горячие клавиши" MathCAD

"Горячая клавиша"	Назначение
<i>F1</i>	Вызов справочной службы MathCAD
<i>F2</i>	Копирование в буфер
<i>F3</i>	Копирование в буфер с одновременным удалением
<i>F4</i>	Вставка из буфера
<i>F5</i>	Загрузка документа с диска
<i>F6</i>	Сохранение документа на диске
<i>F7</i>	Расщепление экрана на два окна
<i>F8</i>	Переход из одного окна в другое
<i>F9</i>	Расчет от начала документа до конца страницы
<i>F10</i>	Вход в основное меню
<i>&lt;Ctrl&gt;F2</i>	Копирование поля шаблона в буфер
<i>&lt;Ctrl&gt;F3</i>	Копирование поля шаблона в буфер с одновременным удалением
<i>&lt;Ctrl&gt;F4</i>	Вставка поля шаблона из буфера
<i>&lt;Ctrl&gt;F5</i>	Поиск фрагмента текста
<i>&lt;Ctrl&gt;F6</i>	Замена фрагмента текста другим фрагментом
<i>&lt;Ctrl&gt;F7</i>	Уничтожение второго окна
<i>&lt;Ctrl&gt;F9</i>	Вставка пустой строки
<i>&lt;Ctrl&gt;F10</i>	Удаление пустой строки
<i>&lt;Ctrl&gt;C, &lt;Ctrl&gt;&lt;Break&gt;</i>	Прерывание вычислений
<i>&lt;Ctrl&gt;D</i>	Смена палитры экрана
<i>&lt;Ctrl&gt;O</i>	Печать документа
<i>&lt;Ctrl&gt;Q</i>	Выход из MathCAD
<i>&lt;Ctrl&gt;R</i>	Перерисовка экрана
<i>&lt;Ctrl&gt;V</i>	Выделение всех блоков в документе
<i>&lt;Ctrl&gt;Y</i>	Выделение текущего блока

## Приложение 4

Таблица соответствия клавиш греческим символам в  
MathCAD

Клавиша	Символ	Клавиша	Символ	Клавиша	Символ
<A>	$\alpha$	<B>	$\beta$	<D>	$\delta$
<E>	$\varepsilon$	<F>	$\Phi$	<G>	$\Gamma$
<H>	$\phi$	<I>	$\infty$	<L>	$\lambda$
<N>	$\eta$	<O>	$\Omega$	<P>	$\pi$
<Q>	$\theta$	<R>	$\rho$	<S>	$\sigma$
<T>	$\tau$	<U>	$\mu$	<W>	$\omega$

## Приложение 5

Основные встроенные функции MathCAD

Вид функции	Обозначение	Вид функции	Обозначение
Экспоненциальная	$\exp(X)$	Угол радиус-вектора	$\text{angle}(x,y)$
Натуральный логарифм	$\ln(X)$	Десятичный логарифм	$\log(X)$
Синус (угол - в рад.)	$\sin(X)$	Косинус	$\cos(X)$
Тангенс	$\tan(X)$	Арксинус	$\text{asin}(X)$
Аркосинус	$\text{acos}(X)$	Арктангенс	$\text{atan}(X)$
Синус гиперболический	$\sinh(X)$	Косинус гиперболический	$\cosh(X)$
Тангенс гиперболический	$\tanh(X)$	Арксинус гиперболический	$\text{asinh}(X)$
Аркосинус гиперболический	$\text{acosh}(X)$	Арктангенс гиперболический	$\text{atanh}(X)$

## Приложение 6

### Основные векторные и матричные операции и функции в MathCAD\*

#### Операции

Назначение операции	Ввод	Назначение операции	Ввод
Умножение вектора или матрицы на скаляр	$Z \cdot V$ $M \cdot V$	Умножение двух векторов или матриц	$Y \cdot Z$ $M \cdot N$
Деление вектора или матрицы на скаляр	$Z/V$ $M/V$	Сложение двух векторов или матриц	$Y+Z$ $M+N$
Сложение вектора со скаляром	$Z+V$	Вычитание двух векторов или матриц	$Y-Z$ $M-N$
Вычитание из вектора скаляра	$Z-V$	Смена знака у всех элементов вектора или матрицы	$-Z$ $-M$
Возведение матрицы в степень $n$ (при $n=-1$ - инвертирование)	$M^n$	Вычисление длины вектора или определителя матрицы	$ Z$ $ M$
Транспонирование вектора или матрицы	$Z \langle \text{Alt} \rangle !$ $M \langle \text{Alt} \rangle !$	Сумма всех элементов вектора	$\langle \text{Alt} \rangle \$Z$
Векторизация вектора или матрицы	$Z \langle \text{Alt} \rangle -$ $M \langle \text{Alt} \rangle -$	Выделение $n$ -го столбца матрицы	$M \langle \text{Alt} \rangle ^n$
Выделение $n$ -го элемента вектора	$Z[n$	Выделение $n, n1$ -го элемента матрицы	$M[(n, n1)$

## Функции

Векторные		Матричные	
Вид функции	Обозначение	Вид функции	Обозначение
Число элементов	$\text{length}(Z)$	Число строк	$\text{rows}(M)$
Индекс последнего элемента	$\text{last}(Z)$	Число столбцов	$\text{cols}(M)$
Максимальный элемент	$\text{max}(Z)$	Единичная матрица $n \times n$	$\text{identity}(n)$
Минимальный элемент	$\text{min}(Z)$	Слияние двух матриц	$\text{augment}(M,N)$
Сортировка элементов по возрастанию	$\text{sort}(Z)$	Сортировка строк так, чтобы в $n$ -ом столбце элементы располагались по возрастанию	$\text{csort}(M,n)$
Расположение элементов в обратном порядке	$\text{reverse}(Z)$	То же для столбцов	$\text{rsort}(M,n)$

\* Обозначения:  $V$  - скаляр;  $Y, Z$  - векторы;  $M, N$  - матрицы.

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
1. Основы работы в MathCAD.....	5
1.1. Общая характеристика MathCAD.....	5
1.2. Начало работы в MathCAD.....	6
1.3. Общие принципы работы MathCAD.....	7
1.4. Основное меню MathCAD.....	8
1.4.1. Системные команды (System).....	9
1.4.2. Работа с файлами (File).....	11
1.4.3. Режимы работы вычислителя (Compute).....	11
1.4.3. Редактирование документов (Edit/move и In-Region).....	13
1.4.4. Редактирование текстов (Text).....	16
1.4.5. Управление окнами (Window/page).....	16
1.5. Основные особенности языка MathCAD.....	17
1.5.1. Идентификаторы, константы и переменные.....	17
1.5.2. Встроенные и пользовательские функции.....	18
1.5.3. Циклы и условные выражения.....	18
1.5.4. Матрицы и операции с ними.....	19
1.5.5. Построение графиков.....	20
1.5.6. Функции статистики и линейной регрессии.....	22
1.5.7. Методы решения систем нелинейных уравнений.....	22
1.5.8. Работа с файлами данных.....	23
1.5.9. Функции линейной и сплайн-интерполяции.....	24
Примеры заданий для практических занятий.....	25
Защиты 1. Примитивные вычисления.....	25
Занятие 2. Построение графиков.....	28
Занятие 3. Векторы и матрицы.....	30
Занятие 4. Работа с диском.....	31
Занятие 5. Простейшие статистические функции и построение прямой методом наименьших квадратов (МНК).....	31
Занятие 6. Построение гистограмм.....	32
Занятие 7. Приближенные вычисления.....	34
Занятие 8. Сплайн - аппроксимация.....	34
Примеры задач для самостоятельного решения.....	35
Литература.....	40
Приложение 1.....	41
Приложение 2.....	42
Приложение 3.....	43
Приложение 4.....	44
Приложение 5.....	44
Приложение 6.....	45