

УДК 66.02.001.24:004.42(075)
ББК 24:32.97я7
Р24

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

Рецензенты:
д-р техн. наук, проф. В. Н. Шарифуллин
канд. пед. наук, доц. С. М. Куценко

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

Р24 Расчеты и моделирование в химической технологии с применением Mathcad : учебное пособие / Т. В. Лаптева [и др.]; Минобрнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2018. – 248 с.

ISBN 978-5-7882-2526-5

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

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

Подготовлено на кафедре системотехники.

**УДК 66.02.001.24:004.42(075)
ББК 24:32.97я7**

ISBN 978-5-7882-2526-5

© Лаптева Т. В., Зиятдинов Н. Н., Лаптев С. А.,
Первухин Д. Д., 2018
© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2018

СОДЕРЖАНИЕ

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

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

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

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

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