

# SPIS TREŚCI

1. WSTĘP	7
2. ŚRODOWISKO MATLABA	10
2.1. Charakterystyka	10
2.2. Budowa pakietu	11
2.2.1. Okno poleceń, katalogów i pamięci roboczej	12
2.2.2. Podstawowe zasady poruszania się w obrębie środowiska MATLAB	14
2.3. Liczby	15
2.4. Zmienne	15
2.4.1. Wprowadzanie zmiennych	16
2.4.2. Formaty liczbowe	18
2.4.3. Operatory arytmetyczne i boolowskie	18
2.5. Specjalne znaki, nazwy i funkcje	19
2.6. Pliki w MATLABie	21
2.7. Zarządzanie pamięcią	22
2.8. Tworzenie skryptów i funkcji	23
2.8.1. Skrypt a funkcja	23
2.8.2. Budowa funkcji	24
2.8.3. Wywołanie funkcji	25
2.8.4. Umieszczanie wielu funkcji w jednym pliku	27
2.8.5. Przekazywanie nazwy funkcji jako parametru	29
2.8.6. Funkcje anonimowe	31
2.8.7. Przekazywanie dodatkowych parametrów do funkcji wbudowanych	33
2.8.8. Funkcje matematyczne MATLABa przydatne w obliczeniach inżynierskich	36
2.9. Instrukcje	37
2.9.1. Instrukcje warunkowe	37
2.9.2. Instrukcje iteracyjne	38
2.9.3. Instrukcje wyboru	39
2.9.4. Instrukcje wejścia/wyjścia w oknie Command Window	39
2.9.5. Uruchamianie programów	40
2.9.6. Publikowanie raportów	41
3. OPERACJE NA MACIERZACH	49
3.1. Macierze pełne	49

3.1.1.	Tworzenie macierzy pełnych	49
3.1.2.	Generowanie macierzy pełnych	51
3.1.3.	Funkcje przekształcające macierze pełne	52
3.1.4.	Macierze wielowymiarowe	53
3.2.	Macierze rzadkie	55
3.2.1.	Charakterystyka macierzy rzadkich	55
3.2.2.	Generowanie macierzy rzadkich	57
3.2.3.	Operacje na macierzach rzadkich	57
3.3.	Łańcuchy i tablice znakowe	59
3.3.1.	Funkcje wykonujące operacje na łańcuchach	61
3.4.	Tablice strukturalne	61
3.5.	Macierze komórkowe	64
3.5.1.	Funkcje działające na macierzach komórkowych	64
3.6.	Odwołanie do elementów macierzy	67
3.7.	Operacje na macierzach i tablicach	68
3.8.	Funkcje macierzowe	73
3.9.	Właściwości i normy macierzy	77
4.	WYKRESY I GRAFIKA	97
4.1.	Wykresy 2D	97
4.1.1.	Tworzenie wykresu 2D	97
4.1.2.	Typy wykresów 2D	101
4.1.3.	Inne funkcje wykorzystywane do pracy z wykresami	104
4.1.4.	Style linii i punktów	106
4.2.	Wykresy 3D	107
4.2.1.	Przygotowanie danych	107
4.2.2.	Wykres funkcji dwóch zmiennych	107
4.2.3.	Typy wykresów 3D	108
4.2.3.1.	Powierzchnie w przestrzeni	108
4.2.3.2.	Krzywe przestrzenne	112
4.2.3.3.	Wizualizacja danych statystycznych	113
4.2.4.	Polecenia przedstawiające funkcje wielu zmiennych	115
4.2.4.1.	Pola skalowne	115
4.2.4.2.	Pola wektorowe	118
4.3.	Grafika za pomocą uchwytów obiektów graficznych (handle graphics)	122
4.4.	Wykorzystanie polecenia patch	137
4.5.	Animacja	143

5. ANALIZA DANYCH DOŚWIADCZALNYCH	149
5.1. Zapisywanie i wczytywanie danych	149
5.1.1. Eksport danych	149
5.1.2. Import danych	156
5.2. Obróbka wstępna danych	160
5.3. Aproksymacja	162
5.3.1. Metoda najmniejszych kwadratów	163
5.3.2. Ocena statystyczna jakości parametrów funkcji aproksymującej	164
5.3.3. Aproksymacja liniowa	165
5.3.4. Aproksymacja wielomianem	166
5.3.5. Aproksymacja dowolną funkcją	171
5.3.6. Aproksymacja funkcji wielu zmiennych	184
5.3.7. Wykorzystanie narzędzia Basic Fitting	200
5.3.8. Korzystanie z narzędzia Curve Fitting Tool	203
5.4. Interpolacja danych	208
5.5. Wygładzanie danych	213
6. ROZWIĄZYWANIE RÓWNAŃ	219
6.1. Równania liniowe	219
6.1.1. Układ równań dobrze i źle uwarunkowany	220
6.2. Równania i układy równań nieliniowych	228
6.2.1. Rozwiązywanie równań i układów równań algebraicznych z pomocą solverów MATLABa	228
6.2.1.1. Rozwiązanie pojedynczego równania algebraicznego	229
6.2.1.2. Rozwiązywanie układów równań	233
6.2.2. Rozwiązywanie nadokreślonych układów równań	242
6.2.3. Rozwiązywanie nieoznaczonych układów równań	244
7. ROZWIĄZYWANIE RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWYCH ZWYCZAJNYCH	247
7.1. Typy równań i warunków brzegowych	247
7.1.1. Szywność równań różniczkowych	248
7.1.1.1. Pojedyncze sztywne ODE	248
7.1.1.2. Szywność układów równań	248
7.1.2. Numeryczne rozwiązywanie ODE	249
7.2. Integratory numeryczne równań różniczkowych MATLABa	249
7.3. Rozwiązywanie zagadnień początkowych	255
7.3.1. Procesy nieustalone	255
7.3.1.1. Teoretyczne podstawy dynamiki liniowej	257

7.3.1.2. Dynamika nieliniowa	263
7.3.2. Modele procesów o postaci ODE w inżynierii procesowej	271
7.3.2.1. Procesy nieustalone	272
7.3.2.2. Procesy ustalone	296
7.3.3. Wywoływanie integratorów z opcjami	307
7.3.3.1. Rozwiązanie zagadnienia początkowego z obsługą wydarzeń	310
7.3.3.2. Rozwiązanie zagadnienia początkowego z przekazywaniem dodatkowych parametrów	322
7.4. Rozwiązywanie dwupunktowych zagadnień brzegowych	324
7.5. Rozwiązywanie uwikłanych równań różniczkowych	328
8. ROZWIĄZYWANIE RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWYCH CZĄSTKOWYCH	331
8.1. Klasyfikacja równań różniczkowych cząstkowych	331
8.1.1. Równania rzędu pierwszego	331
8.1.2. Równania rzędu drugiego	332
8.2. Zagadnienia początkowe i brzegowe	333
8.3. Rozwiązywanie równań cząstkowych pierwszego rzędu	334
8.3.1. Stan nieustalony	334
8.3.2. Stan ustalony	340
8.4. Rozwiązywanie równań typu parabolicznego	345
8.4.1. Metoda linii	345
8.4.2. Wykorzystanie integratora pdepe	357
8.5. Rozwiązywanie równań typu eliptycznego	367
8.6. Problemy obliczeń numerycznych w rozwiązywaniu PDE	378
8.7. Przykłady obliczeniowe	382
9. IDENTYFIKACJA PARAMETRÓW RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWYCH – ROZWIĄZYWANIE ZAGADNIEŃ ODWROTNYCH	419
9.1. Sformułowanie problemu identyfikacji parametrów	419
9.2. Sformułowanie zagadnienia odwrotnego	419
9.3. Algorytmy optymalizacyjne	420
9.4. Identyfikacja współczynników modelu określonego równaniem różniczkowym zwyczajnym	422
9.5. Identyfikacja współczynników modelu określonego równaniem różniczkowym cząstkowym	442
10. SPIS LITERATURY	469

## 1. WSTĘP

Potrzeby obliczeniowe inżynierii chemicznej i procesowej są coraz większe. Jest to związane zarówno z rozwojem stopnia poznania podstaw teoretycznych procesów, a co za tym idzie coraz bardziej skomplikowanymi ich modelami, jak i z rozwojem metod obliczeniowych, techniki komputerowej oraz oprogramowania, w tym wyspecjalizowanych programów do obliczeń numerycznych. W książce „Symulacja procesów inżynierii chemicznej” (Pakowski i Głębowski, 2001) opartej w całości o program Mathcad<sup>®</sup> zostały przedstawione podstawy zastosowania tego narzędzia do rozwiązywania problemów z dziedziny symulacji procesów inżynierii chemicznej.

Jednakże wiele problemów symulacyjnych przekracza często możliwości metod numerycznych Mathcada (Pakowski i in., 2003). Jest to podstawowa przyczyna wymagająca zastosowania innego narzędzia obliczeniowego. Drugą jest potrzeba rozszerzenia spektrum specjalistycznych funkcji i metod poza uniwersalne metody dostępne w Mathcadzie. Narzędziem spełniającym oba te warunki jest program MATLAB<sup>®</sup> firmy MathWorks. MATLAB pojawił się jako narzędzie obliczeniowe już w r. 1984 i początkowo służył jedynie do celów rachunku macierzowego. Obecnie jest uniwersalnym programem do obliczeń numerycznych stosowanym powszechnie, zarówno w nauce jak i dyscyplinach technicznych m.in. w inżynierii chemicznej i procesowej (Ramirez, 1997). Ma on znaczną przewagę w szybkości pisania, uruchamiania i wykonywania programów do obliczeń numerycznych nad zwykłymi językami programowania takimi jak Fortran, C+ itp.

Jednak MATLAB, w odróżnieniu od Mathcada, jest językiem programowania i wymaga znajomości takich pojęć z zakresu informatyki, jak: typ zmiennej, struktury danych, funkcja i procedura, sposoby przekazywania parametru, operacje dyskowe itd., a ponadto wymaga również znajomości zasad algebry liniowej. Natomiast program w Mathcadzie ma strukturę dokumentu i zasadniczo nie wymaga od użytkownika umiejętności programowania. Wysiłek włożony w naukę MATLABa procentuje dopiero po pewnym czasie (wg nas przeciętnie po pół roku pracy) i opłaca się wtedy, gdy zamierza się wykorzystywać program do rozwiązywania poważnych problemów obliczeniowych. Mathcada zaś można nauczyć się w ciągu dwóch tygodni i prawie natychmiast używać go do rozwiązywania stosunkowo prostych zadań.

Czytelnicy, którzy znają wcześniejszą pracę „Symulacja procesów inżynierii chemicznej” spodziewają się tu, być może, podobnej struktury, a więc podziału modeli procesów na klasy i prezentacji problemów dla każdej z klas. Zastosowano tu jednak inną strukturę, odpowiada ona rodzajom problemów matematycznych występujących w praktyce obliczeniowej inżynierii procesowej. Ograniczono

omówienie teorii zagadnień matematycznych a skupiono się narzędziach programistycznych do ich praktycznej realizacji, gdyż książka jest, przede wszystkim, prezentacją MATLABa. Dla ilustracji w tekście zawarto 59 przykładów obliczeniowych o charakterze ogólnym. Problematykę inżynierii chemicznej obejmują natomiast 43 projekty – zadania o charakterze praktycznym. Rozwiązują one konkretne problemy inżynierskie. Można je modyfikować w celu dostosowania do konkretnego zadania.

Szczególnie dużo uwagi poświęcono rozwiązywaniu równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych, te bowiem sprawiają początkującym najwięcej problemów.

Przygotowane przez nas problemy obliczeniowe posługują się stosunkowo prostymi rozwiązaniami programistycznymi i prowadzą prosto do celu. Korzystając z wielu dostępnych w MATLABie opcji dodatkowych, można znacznie wzbogacić i udoskonalić te programy. Zachęcamy do intensywnego korzystania z pomocy programu MATLAB, szczególnie na etapie nauki na poziomie zaawansowanym, gdyż pozwala to znacznie rozwinąć umiejętności posługiwania się tym narzędziem. Liczymy na to, że trud włożony w naukę MATLABa zapoczątkuje podczas przygotowywania zarówno prac naukowych jak i w praktyce zawodowej. Książka jest przeznaczona dla wszystkich, którzy interesują się praktyką obliczeń numerycznych w dziedzinie inżynierii chemicznej i procesowej, studentów, doktorantów, pracowników naukowych i inżynierów.

Większość przykładów i projektów powstała w czasie wielu lat zajęć prowadzonych przez autorów na studium doktoranckim. W tym miejscu dziękujemy doktorantom, którzy wnieśli swój wkład w ich powstanie.

*Autorzy*


## **LITERATURA**

*Pakowski Z., Głębowski M., 2001, Symulacja procesów inżynierii chemicznej, Wyd. PŁ.*

*Pakowski Z., Głębowski M., Adamski R., 2003, Mathcad vs. MATLAB in the curriculum of chemical engineering at the Technical University of Lodz, Process Integration and Modeling of Chromatography Processes Conf., Rzeszów.*

*Ramirez W.F., Computational Methods for Process Simulation, 2nd ed., Butterworth-Heinemann, 1997.*

## PRZYKŁADOWE PROGRAMY

Książka zawiera 102 przykłady i projekty napisane w celu ilustracji omawianych w niej zagadnień. Większość z nich zamieszczona jest w tekście. Niektóre spośród tych programów używają dodatkowych plików pomocniczych, których w tekście nie zamieszczono. Wszystkie te programy są dostępne w katalogach PRZYKŁADY i PROJEKTY na stronie <http://books.wipos.p.lodz.pl/matlab/>. Podkatalogi są oznaczone numerem rozdziału, a pliki główne numerem przykładu lub projektu. Wszystkie programy oznaczone znakiem  w tekście znajdują się w tych katalogach. Pozostałe programy zawarte w książce należy wpisywać z klawiatury. Programy zostały napisane w MATLABie wersja R2011b (7.10).