Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

Факультет цифровых технологий и химического инжиниринга

Кафедра информационных компьютерных технологий

**ОТЧЕТ**

ПО ЛАБОРАТОРНОМУ ПРАКТИКУМУ

**«Численные методы в среде MATLAB. Лабораторная работа № 3»**

**ВЫПОЛНИЛ:** Студент группы КС-24 Ощепков М.А.

**ПРОВЕРИЛ:** Шушпанов В. С.

**Москва**

**2024**

**Задание 1.**

Решить СЛАУ методом обратной матрицы

Определить обусловленность матрицы коэффициентов.

Проверить точность решения системы уравнений (Ах=В: В-Ах=0).

**Листинг кода (файл “T1.m”):**

clc;

A = [6 -1 1;

1 -2 3;

3 4 4];

B = [0; 1; -1];

det\_A = det(A);

rank\_A = rank(A);

norm\_A = norm(A);

cond\_A = cond(A);

X\_obratn\_matrix = inv(A)\*B;

X\_linsolve = linsolve(A, B);

accuracy\_check = (A \* X\_obratn\_matrix - B);

fprintf("Coeffitients matrix:\nDet: %.3f\nRank: %d\nNorm: %.3f\n\n", ...

det\_A, rank\_A, norm\_A);

fprintf('By inv matrix:\n');

fprintf('%10.5f\n', X\_obratn\_matrix);

fprintf('\nlinsolve:\n');

fprintf('%10.5f\n', X\_linsolve);

fprintf('\n %.5f\n\n', cond\_A);

fprintf('Accuracy\n');

fprintf('%14.5e\n', accuracy\_check);

**Вывод:**

Coeffitients matrix:

Det: -115.000

Rank: 3

Norm: 7.808

By inv matrix:

-0.07826

-0.33043

0.13913

linsolve:

-0.07826

-0.33043

0.13913

2.50423

Accuracy

0.00000e+00

-1.11022e-16

0.00000e+00

**Задание 2.**

Решить СЛАУ Методом Гаусса

Определить обусловленность матрицы коэффициентов.

Проверить точность решения системы уравнений (Ах=В: В-Ах=0).

**Листинг кода (файл “T2.m”):**

clc;

A = [9.1 5.6 7.8;

3.8 5.1 2.8;

4.1 5.7 1.2];

B = [9.8; 6.7; 5.8];

det\_A = det(A);

rank\_A = rank(A);

norm\_A = norm(A);

cond\_A = cond(A);

X\_Gauss = A\B;

X\_linsolve = linsolve(A, B);

accuracy\_check = (A \* X\_Gauss - B);

fprintf("Coefficients matrix:\nDet: %.3f\nRank: %d\nNorm: %.3f\n\n", ...

det\_A, rank\_A, norm\_A);

fprintf('Gauss:\n');

fprintf('%10.5f\n', X\_Gauss);

fprintf('linsolve:\n');

fprintf('%10.5f\n', X\_linsolve);

fprintf('\nConditionality of the matrix %.5f\n\n', cond\_A);

fprintf('Accuracy\n');

fprintf('%14.5e\n', accuracy\_check);

**Вывод:**

Coefficients matrix:

Det: -44.942

Rank: 3

Norm: 16.071

Gauss:

-0.37039

1.09381

0.90323

linsolve:

-0.37039

1.09381

0.90323

Conditionality of the matrix 22.44107

Accuracy

0.00000e+00

-8.88178e-16

-1.77636e-15

**Задание 3.**

Решить СЛАУ с помощью LU-разложения

Определить обусловленность матрицы коэффициентов.

Проверить точность решения системы уравнений (Ах=В: В-Ах=0).

**Листинг кода (файл “T3.m”):**

clc;

A = [2.34 -1.42 -0.54 0.21;

1.44 -0.53 1.43 -1.27;

0.63 -1.32 -0.65 1.43;

0.54 0.88 -.67 -2.38];

B = [0.66;

-1.44;

0.94;

0.73];

det\_A = det(A);

rank\_A = rank(A);

norm\_A = norm(A);

cond\_A1 = cond(A);

[L, U] = lu(A);

y = L\B;

x\_LU = U\y;

x\_linsolve = linsolve(A, B);

accuracy\_check = (A \* x\_LU - B);

fprintf("Coefficients matrix:\nDet: %.3f\nRank: %d\nNorm: %.3f\n\n", ...

det\_A, rank\_A, norm\_A);

fprintf('LU:\n');

fprintf('%10.5f\n', X\_obratn\_matrix);

fprintf('\nlinsolve:\n');

fprintf('%10.4f\n', X\_linsolve);

fprintf('Accuracy\n');

fprintf('%10.1e\n', accuracy\_check);

fprintf('\nConditionality of the matrix %.4f\n\n', cond\_A);

**Вывод:**

oefficients matrix:

Det: -4.631

Rank: 4

Norm: 3.443

LU:

-0.07826

-0.33043

0.13913

linsolve:

-0.3704

1.0938

0.9032

Accuracy

0.0e+00

0.0e+00

0.0e+00

0.0e+00

Conditionality of the matrix 22.4411

**Задание 4.**

**.**

= \*

**Получить уравнения химических реакций между заданными веществами,**

**то есть рассчитать матрицу стехиометрических коэффициентов** **В**

Их количество определяется так: из числа веществ вычесть ранг матрицы А.

В данном случае: 7-5=2,

Следовательно, в матрице стехиометрических коэффициентов В будет 2 строки (количество линейно-независимых реакций) и 7 столбцов (количество столбцов). Каждая строка матрицы В соответствует одной химической реакции. Стехиометрические коэффициенты веществ, не принимающих участия в этой реакции, равны нулю, отрицательные коэффициенты принадлежат исходным веществам, а положительные – продуктам реакции.

Решить однородную СЛАУ: B·A=0, где A =

rank(A) = 5, следовательно система не доопределена. Мы можем найти только 5 неизвестных, опираясь на базисную подматрицу. Нужно для этого задать две неизвестных, поскольку их всего 7. Делаем это с помощью единичной матрицы 2 х 2.

B =

B = .

Таким образом, нужно решить две СЛАУ:

Решение этих СЛАУ выполняется с использованием средств символьной математики МАТЛАБ.

Также определить обусловленность матрицы коэффициентов и проверить точность решения системы уравнений.

В соответствии с полученной матрицей стехиометрических коэффициентов В записать уравнения химических реакций. Вещества с отрицательными стехиометрическими коэффициентами – исходные вещества, записываются в левой части уравнений, а вещества с положительными коэффициентами – продукты реакции, записываются в правой части уравнений.

Рассмотреть решения, основанные на двух различных базисных подматрицах, выделенных из матрицы А.

**Листинг кода (файл “T4.m”):**

substances = ["Na2CO3","HNO3","NaNO3","H2O","CO2","CaO","Ca(NO3)2"];

A = [2 1 3 0 0 0;

0 0 3 1 1 0;

1 0 3 0 1 0;

0 0 1 2 0 0;

0 1 2 0 0 0;

0 0 1 0 0 1;

0 0 6 0 2 1];

rank\_A = rank(A);

norm\_A = norm(A);

syms b11 b12 b13 b14 b15 b16 b17

syms b21 b22 b23 b24 b25 b26 b27

fprintf('\nConditionality of the matrix %.4f\n\n', cond(A));

B1 = [1 0 b13 b14 b15 b16 b17;

0 1 b23 b24 b25 b26 b27];

sys1 = B1 \* A == 0;

sol1 = solve(sys1, [b11 b12 b13 b14 b15 b16 b17 b21 b22 b23 b24 b25 b26 b27]);

sol1.b11 = 1;

sol1.b12 = 0;

sol1.b21 = 0;

sol1.b22 = 1;

B2 = [1 b12 b13 b14 b15 b16 0;

0 b22 b23 b24 b25 b26 1];

sys2 = B2 \* A == 0;

sol2 = solve(sys2, [b11 b12 b13 b14 b15 b16 b17 b21 b22 b23 b24 b25 b26 b27]);

sol2.b11 = 1;

sol2.b17 = 0;

sol2.b21 = 0;

sol2.b27 = 1;

sol1 = double(structfun(@double, sol1))';

sol2 = double(structfun(@double, sol2))';

coeffs1 = sol1(1:7);

coeffs2 = sol1(8:14);

coeffs3 = sol2(1:7);

coeffs4 = sol2(8:14);

function reaction = create\_reaction(substances, coefficients)

reactants = "";

products = "";

for i = 1:length(substances)

if coefficients(i) < 0

if reactants ~= ""

plus = " + ";

else

plus = "";

end

if abs(coefficients(i)) == 1

reactants = reactants + plus + substances(i);

else

reactants = reactants + plus + string(abs(coefficients(i))) + substances(i);

end

elseif coefficients(i) > 0

if products ~= ""

plus = " + ";

else

plus = "";

end

if abs(coefficients(i)) == 1

products = products + plus + substances(i);

else

products = products + plus + string(abs(coefficients(i))) + substances(i);

end

end

end

reaction = reactants + " -> " + products;

disp(reaction)

end

disp("Reaction 1:");

reaction1 = create\_reaction(substances, coeffs1);

disp("Reaction 2:");

reaction2 = create\_reaction(substances, coeffs2);

disp("Reaction 3:");

reaction3 = create\_reaction(substances, coeffs3);

disp("Reaction 4:");

reaction4 = create\_reaction(substances, coeffs4);

**Вывод:**

Conditionality of the matrix 24957852347848764.0000

Reaction 1:

2NaNO3 + CO2 + CaO -> Na2CO3 + Ca(NO3)2

Reaction 2:

0.5H2O + 0.5Ca(NO3)2 -> HNO3 + 0.5CaO

Reaction 3:

2NaNO3 + H2O + CO2 -> Na2CO3 + 2HNO3

Reaction 4:

2HNO3 + CaO -> H2O + Ca(NO3)2