

Побудова тернарних графіків засобами МАХІМА

Баранецький В.І.

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
bvolodi@gmail.com*

The diagram content-property is considered herein for 3-component compounds. The program implementation of such diagram is represented by means of computer algebra system Maxima.

Активне використання комп'ютерів для проведення символічних і графічних обчислень звільняє дослідника від проведення рутинних, але трудомістких і багатих помилками перетворень, істотно скорочує час реалізації наукових і технічних проектів.

Багато спеціалізованих комп'ютерних програмних продуктів для моделювання та аналізу даних успішно використовуються в галузі економіки, біології, хімії, фізиці, інженерії та інших областях науки.

Створення складних моделей пов'язане насамперед з використанням сучасної обчислювальної техніки, що дозволяє вивчати великі системи, які залежать від багатьох факторів. Однією з таких задач є побудова діаграм склад-властивість, де функція описує залежність певної характеристики сполуки від співвідношення її компонентів.

Тернарна система координат часто використовується у фізиці, хімії, біології, матеріалознавстві та ін. Перевага її використання в тому, що зображення композиції трьох змінних може бути легко побудоване засобами двовимірної графіки. Кожна точка на потрійній ділянці являє собою композицію різного складу з трьох компонентів.

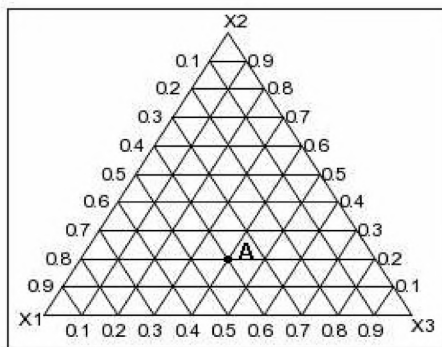


Рис 1. Порожня тернарна діаграма.

Один із способів визначення складу композиції базується на сітці тернарної діаграми. Концентрація кожного фактора становить 100% (чиста речовина) в своєму кутку трикутника і 0% в лінії навпроти неї. Частка окремих факторів убуває зі збільшенням відстані від цього кута. Проводячи паралельні лінії через однакові проміжки між нульовою лінією і точкою в кутку, частка фактору може бути встановлена відповідно до зручності оцінки змісту того чи іншого фактору. Так, наприклад, точці А на рисунку 1 відповідає наступне співвідношення компонентів: x_1 – 40%, x_2 – 20% і x_3 – 40%.

Розглянемо побудову такої “трикутної сітки”. На рисунку 2 наведено програмний код, що будувє у системі Maxima мітки та паралельні прямі для фактора x_1 .

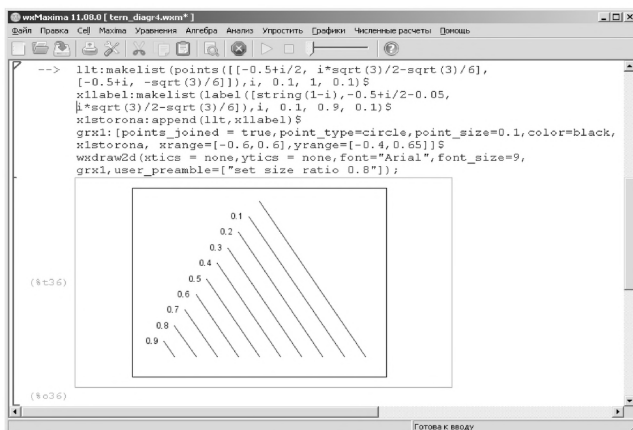


Рис 2. Програмна побудова “сторони” X_1 тернарної системи координат.

Аналогічно будувємо дві інші сторони тернарної системи $X_1 X_2 X_3$.

Оскільки функція, результатом роботи якої повинен бути тернарний графік, залежить від трьох змінних x_1, x_2 і x_3 та має зображатися на площині, то для побудови графіка необхідно привести функцію $f(x_1, x_2, x_3)$ до вигляду $f(x, y)$. Для цього використаємо формули переходу (Дрейпера-Лоуренса) від «трикутних» координат до декартових:

$$x_1 = 1/3(-3z_1 - z_2\sqrt{3} + m), \quad \text{де } m = 1 \text{ (100\%), причому}$$

$$x_2 = 1/3(3z_1 - z_2\sqrt{3} + m), \quad z_1 = x, z_2 = y.$$

$$x_3 = 1/3(2z_2\sqrt{3} + m), \quad \text{Продемонструємо це на прикладі}$$

рис.3).

полінома четвертого порядку (див.

```

(8i16) f1 : 3*x1^4-11*x1^3*x2+35*x1^2*x2^2-11*x1*x2^3+3*x2^4-
11*x1^3*x3+6*x1^2*x2*x3+6*x1*x2^2*x3-11*x2^3*x3+
35*x1^2*x3^2+6*x1*x2*x3^2+35*x2^2*x3^2-11*x1*x3^3-11*x2*x3^3+3*x3^4$

f2: float (expand (subst ([x1=1/3*(-3*x-y*sqrt(3)+1)], x2=1/3*(3*x-y*sqrt(3)
x3=1/3*(2*y*sqrt(3)+1)], f1)));
(8o17) 63.0 y^4 - 15.78090735784978 y^3 + 126.0 x^2 y^2 - 5.333333333333333 y^2 +
47.342722073549933 x^2 y - 6.661338147750939 10^-16 y + 63.0 x^4 - 5.333333333333333 x^2 +
0.814814814814815

```

Рис 3. Перевід функції від трьох змінних у функцію від двох змінних.

Для побудови ліній однакових значень (ліній рівня) скористаємось командою `implicit_plot`.

На рисунку 4 наведена тернарна діаграма склад-властивість для згаданого вище полінома.

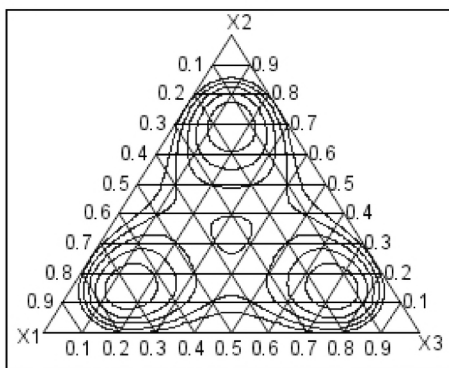


Рис 4. Графік функції для значень $f(x, y) = (0.5, 0.6, \dots, 0.9)$.

Наведений приклад свідчить про досить розвинуті обчислювальні та графічні можливості системи комп'ютерної математики Maxima, що дає змогу використовувати її для розв'язування різноманітних задач, а безкоштовність та відкритість коду робить систему Maxima доступним продуктом для широкого кола користувачів.