

Міністерство освіти і науки України
Тернопільський національний технічний університет імені Івана
Пулюя

М.Р. Петрик, І.В. Бойко

СИСТЕМИ З РОЗПОДІЛЕНИМИ ПАРАМЕТРАМИ

(лабораторний практикум
з використанням високопродуктивних технологій
комп'ютерної математики)

Навчальний посібник

Тернопіль 2020

УДК 519.62
МЗ4

Укладачі:

Петрик М.Р., докт. фіз.-мат. наук, професор,
Бойко І.В., канд. фіз.-мат. наук, доцент

Рецензенти:

О.А. Пастух, докт. техн. наук, професор,
С.А. Лупенко, докт. техн. наук, професор

Навчальний посібник розглянуто і затверджено на засіданні науково-методичної ради факультету комп'ютерно-інформаційних систем і програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя.
Протокол № 1 від 16.09.2020 р.

Петрик М.Р., Бойко І.В. Системи з розподіленими параметрами
МЗ4 (лабораторний практикум з використанням високопродуктивних технологій комп'ютерної математики)
– Тернопіль : Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, 2020 – 46 с.

УДК
519.62

Даний посібник написано згідно програми предметів “Математичне моделювання в науково-технічних дослідженнях”, “Системи рівнянь у частинних похідних”, “Методологія та технологія створення складних програмних систем” з використанням підходів високопродуктивних обчислень, що читаються на факультеті комп'ютерно-інформаційних систем і програмної інженерії.

Для студентів спеціальності 121 – “Інженерія програмного забезпечення”, аспірантів та викладачів вищих навчальних закладів.

© Петрик М.Р., Бойко І.В.
.....2020
© Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, 2020

Зміст

	стор.
Методика використання математичного пакету MathCad в математичному моделюванні	4
<i>Лабораторна робота №1.</i> Математичне моделювання процесів росту МБК	24
<i>Лабораторна робота №2.</i> Математичне моделювання технологічного процесу фільтрації технологічних рідин для нестискуваного фільтраційного середовища при постійному перепаді тисків на фільтрувальній мембрані	28
<i>Лабораторна робота №3.</i> Математичне моделювання фільтраційної консолідації (відтиску вологомістких пористих матеріалів) при постійному і змінному прикладених зовнішніх тисках на середовище	33
<i>Лабораторна робота №4.</i> Математичне моделювання технологічного нестационарного процесу адсорбції в технологіях очищення води	38
Перелік рекомендованої літератури	41
	46

Методика використання математичного пакету MathCad в інженерних задачах

1. MathCad-технології в інженерній освіті

Сучасні комп'ютерні технології для науково-технічних і інженерних задач частіше використовують не традиційні мови програмування та електронні таблиці, а спеціальні математичні програмні продукти типу Mathcad, Matlab, Maple, Mathematica. Ці математичні пакети особливо Mathcad, що є найпоширенішими на сьогоднішній день, дають змогу інженерам- конструкторам та науковим працівникам в конкретній науково-технічній галузі швидко оволодівати комп'ютерними технологіями математичного моделювання фізичних та технічних об'єктів, технологічних процесів і систем, не вдаючись в тонкощі програмування на традиційних мовах (C, Pascal, BASIC тощо).

Переваги роботи в середовищі математичного пакету Mathcad:

- Математичні вирази в середовищі Mathcad записуються у традиційній, зручній для користувача математичній формі: \sqrt{x} , чисельник дробу записується зверху, а знаменник знизу, в інтегралі межі інтегрування розміщені під і над знаком інтегрування: $\int_a^b f(x)dx$ тощо. Такий підхід є дуже важливим з точки зору аналізу математичних моделей фізичних і технічних об'єктів та їх визначальних параметрів;
- В середовищі Mathcad процес створення програмного продукту відбувається паралельно з його відлагоджуванням. Якщо користувач ввів в Mathcad-документ новий вираз, то він має змогу не тільки відразу обчислити цей вираз при певних визначених значеннях змінних, але й побудувати графік або поверхню. Попередня візуальна оцінка такої графічної моделі дає змогу точно вказати на слабкі місця і виявити приховані помилки, які були допущені при введенні формул чи при створенні самої математичної моделі. Такі відлагоджувальні фрагменти доцільно залишати в готовому документі навіть для того, щоб ще раз аргументовано переконати уявного чи реального опонента у правильності розробленої моделі;
- В пакеті Mathcad інтегрований дуже потужний математичний апарат, що дозволяє розв'язувати інженерні та науково-технічні проблеми без додаткового створення чи виклику зовнішніх процедур: розв'язування алгебраїчних рівнянь і рівнянь у частинних похідних та їх систем (задачі Коші і крайові задачі), пошук екстремумів функціональних залежностей (задачі оптимізації), задачі векторної та матричної алгебри, спектральні задачі, інтегральні перетворення і багато інших;
- В Mathcad вбудована база даних з основних математичних і фізико-хімічних формул та констант, які можна легко і безпомилково автоматично переносити в Mathcad –документ;
- При розв'язуванні конкретної інженерної задачі користувач може вводити не тільки числові значення змінних, але і доповнювати їх розмірностями. При цьому за ним залишається право вибору конкретної системи одиниць (СІ, кг-м-с, г-см-с, британська) і конкретні розмірності (м, градус по Цельсію чи Фаренгейту, фут, дюйм, тощо);
- В систему Mathcad також інтегровані засоби символічної математики, що дозволяє розв'язувати поставлені інженерні задачі не тільки чисельно але й аналітично. Це дає великі можливості для аналізу і оцінки математичних моделей і фізичних параметрів, що ними описуються;

- Розв'язуючи інженерну задачу в середовищі Mathcad і не виходячи з нього, можна відкривати нові документи на інших серверах, користуватися Internet-технологіями, здійснювати обмін даних через буфер обміну Windows з іншими прикладними програмами, зокрема Word, Excel, Matlab та інші.

2. Створення математичних виразів з допомогою панелі інструментів

Створення математичних виразів в системі Mathcad 2001 Professional

допомагають спеціальні панелі палітри кнопок (рис.1).

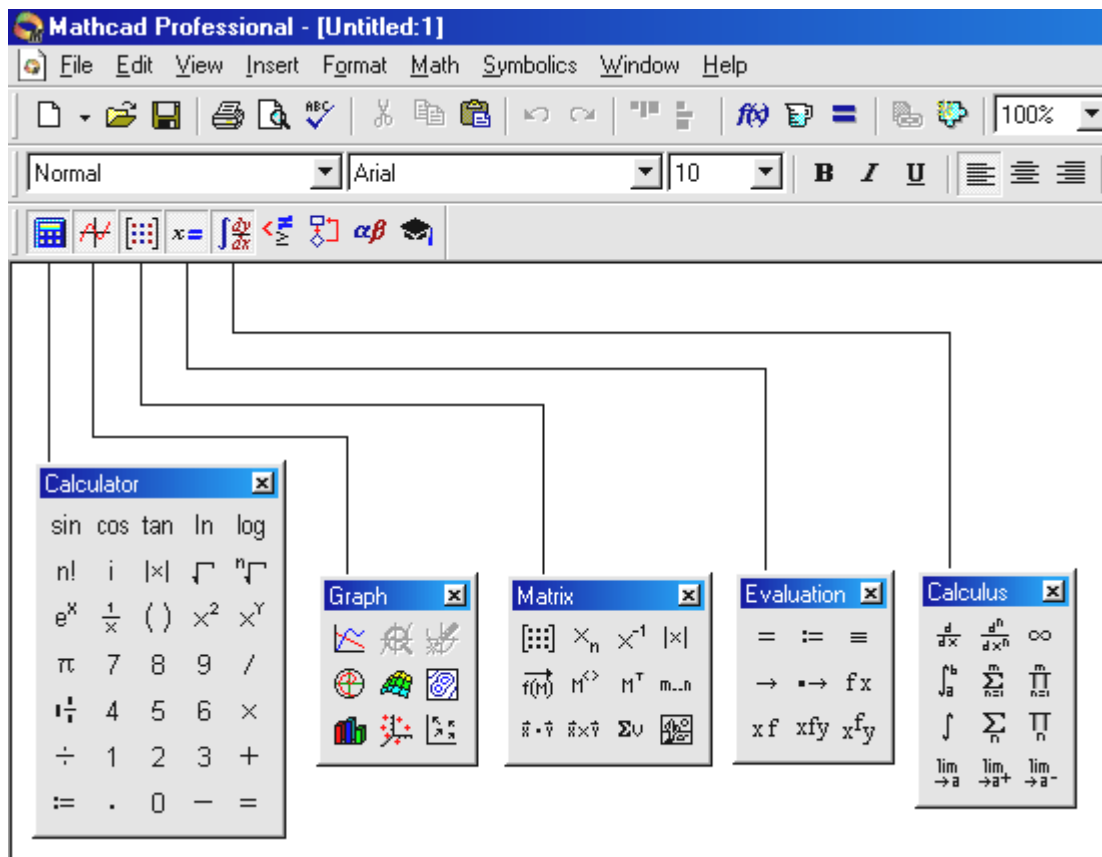


Рисунок 1 - Панелі математичних операторів в Mathcad 2001 Professional

Якщо натиснути на кнопку "=" (перша панель калькулятора; нижній правий кут), то одержимо в робочому полі монітора (в Mathcad - документі) заготовку оператора виведення чисельного значення:



У лівий порожній квадратик (place holder), "утримувач місця" записується математичний вираз, чисельне значення якого появиться в другому (середньому) квадратіку, якщо вивести курсор (автоматичний режим розрахунку), або натиснути клавішу F9 (ручний режим). В правий квадратик можна записати необхідну розмірність фізичного параметру. Якщо фізична величина є безрозмірною, а користувач вніс у правий квадрат позначення, наприклад, кг, то Mathcad не даватиме повідомлення про помилку, а просто перетворить кг в $\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1}$. Як правило, показана вище заготовка на екрані є не видимою. Необхідно після набору математичного виразу набирати символ "=".

Mathcad-документ – це майже одні коментарії, які пояснюють фізичну суть інженерної задачі і роблять її наочною. Коментарії записуються у прямокутній області, яку можна вставити у довільному вільному місці Mathcad-документу,

допомогою вбудованої функції **Find** (знайти). Функція **Find** повертає своє значення, що залежить не тільки від значень її аргументів, а також різних обмежень у вигляді нерівностей, які записані в середині блоку **Given Find**. **Результат** є вектор розмірності вихідної системи рівнянь. Виведення результатів в системі Mathcad здійснюється з допомогою двох операторів: "=" (світле дорівнює) і "→".

Цю задачу в середовищі Mathcad можна розв'язати також з допомогою матричного способу. Для цього на екрані дисплея набираємо присвоєння $A := \square$. Комп'ютер очікує яке значення буде введено в змінну A. Замість числа чи змінної вводимо матрицю шляхом натискування з допомогою миші на панелі інструментів Mathcad на кнопку із зображенням матриці. В результаті на екрані дисплея появляється вікно для роботи з матрицями (рис.2):

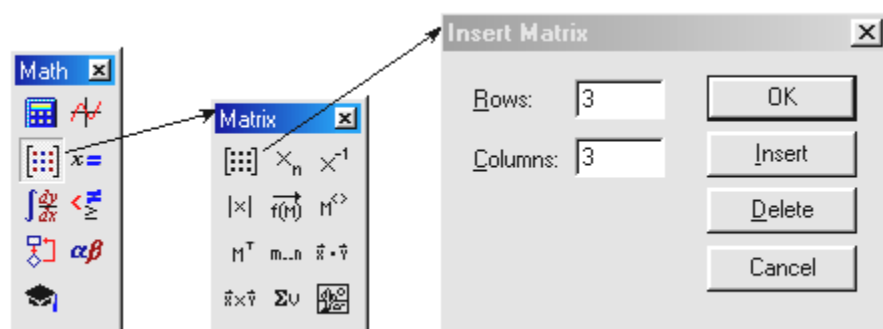


Рисунок 2 - Панель для роботи з матрицями

В цьому вікні є два поля і чотири клавіші. У першому полі користувач задає число рядків (Rows) для матриці, яка створюється, а у другому - число колонок (Columns). По замовчуванню у цих полях записане число 3 і вважається, що матриця порядку 3. Оскільки наша матриця має порядок 2, то в поля вікна вносимо відповідні зміни. На кнопках вікна роботи з матрицями є написи: **OK** (створити), **Insert** (вставити) і **Delete** (вилучити). Для створення матриці A, натискаємо кнопку **OK**. Після натискування на кнопку **OK** справа від виразу $A :=$ появляється обрамлене квадратними дужками каре чотирьох позицій для вводу інформації. Заповнюємо відповідні позиції числами. Далі набираємо $B :=$. При цьому на кнопку для роботи з матрицями не натискаємо оскільки відповідне вікно вже є на дисплеї. На другому полі замінюємо двійку на одиницю, натискаємо на кнопку **OK**, отримуємо заготовку для вводу інформації у вектор B, та заповнюємо вектор B.

Таким чином ми підготували матрицю і вектор коефіцієнтів системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Залишається тільки знайти розв'язок системи і заповнити ним матрицю X. Для цього обернену (матрицю A піднесемо до мінус першої степені) A^{-1} перемножимо на вектор B, а відповідь заносимо у вектор $X = A^{-1} \cdot B$. Якщо тепер наберемо з клавіатури $X =$ то комп'ютер видасть нам в квадратних дужках відповідь, що підтверджує про матричний характер.

ORIGIN=0

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 5 & 3 \end{pmatrix} \quad B := \begin{pmatrix} 138 \\ 540 \end{pmatrix}$$

$$X := A^{-1} \cdot B$$

$$X = \begin{pmatrix} 63 \\ 75 \end{pmatrix}$$

Зауважимо, що системна змінна Mathcad-**ORIGIN** зберігає номер першого елемента векторів і масивів. Якщо користувач не знає значення цієї системної змінної, то по замовчуванню вона рівна нулю. Щоб звернутись до конкретних елементів матриць чи векторів (змінних з індексами $A_{i,j}$, V_j , X_j) потрібно скористуватись клавішею "X_n" панелі математичних інструментів, або клавішею "]" на клавіатурі. Якщо натиснути на кнопку "X_n" на панелі інструментів, то до імені змінної автоматично долучиться індекс.

Текстові індекси. Крім числових індексів, які визначають порядок розташування того чи іншого елемента матриці (масиву) у Mathcad-документах можна використовувати для зручності пояснень і традиційно вживані текстові індекси, наприклад t_{opt} , $P_{ст}$, $y_{дин}$. Для того щоб комп'ютер міг розрізняти числові індекси і текстові, перед введенням текстового індексу потрібно набирати символ ".": ". t_{opt} ", що в Mathcad - документі відповідатиме t_{opt} .

3. Графічне забезпечення Mathcad

В середовищі Mathcad для візуального відображення різних залежностей панелі інструментів містять сім кнопок для створення семи типових графіків. Якщо натиснути на третю кнопку панелі інструментів (рис.1.) то відкриється панель графіків (див. рис.3), що містить дев'ять нових клавіш.

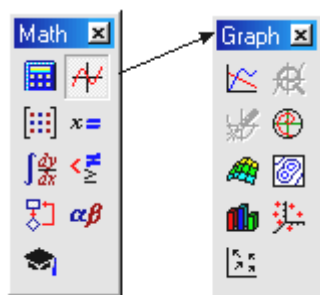


Рисунок 3 - Панель графіків

Використовуючи їх, можна побудувати сім типів графіків. Зробимо це для ілюстрації розв'язку задачі про рівновагу валу.

На рис. 4-8 графічно відображені реакції опор валу в залежності від її геометричних параметрів. На рис.7. показано найпоширеніший графік в декартових координатах (X-Y Plot), що ілюструє зв'язки між двома векторами: на графіку можуть бути одна або декілька кривих, що залежать від одного аргументу (першого вектора - змінної області **Range Variable**).

1. Задання вхідних даних

$$G := 20 \quad a := 1 \quad b := 2$$

2. Функції користувача

$$X(\alpha) := \frac{G(a+b) \cdot \cos(\alpha) \sin(\alpha)}{-a}$$

$$Y(\alpha) := \frac{G a - \cos(\alpha)^2 \cdot G a - \cos(\alpha)^2 \cdot G b}{-a}$$

$$P(\alpha) := \frac{1}{2} \cdot G \cdot (a-b) \cdot \cos(\alpha)$$

3. Побудова графіку

$$\alpha := 0, 0.001 \cdot \pi$$



Рисунок 5 - Приклад побудови графіку в декартових координатах

Перший вектор (в задачі це значення кута нахилу валу α) є аргументом. Другий, третій і наступні вектори - (реакції опор X, Y, P) обчислюються в ході побудови графіка. Декартовий графік будується, як правило, у три кроки:

Крок 1: Задання вигляду функції однієї змінної X(α), Y(α), і P(α).

Крок 2: Формування вектора значень аргументу: в нас цей кутовий аргумент змінюється від 0 до 90° з кроком 5 градусів. По замовчуванню задається не крок, а наступне значення вектору (для нашого випадку вони співпадають).

Крок 3: Побудова графіку. Цей крок складається з наступних кроків:

- Зображення на екрані рисунку заготовки графіка-прямокутника з чорними квадратами біля лівої і нижньої сторін. Заготовка графіку появляється у поміченому курсором місці після того, як користувач вибере одну із опцій панелі інструментів "Графіки" або вибере відповідну команду меню "Insert".

- Заповнення користувачем двох чорних квадратиків заготовки графіка іменем функції та іменем аргументу. Якщо функцій більше однієї, то їх вводять через кому. В заготовці є і інші чорні квадратики, які можна не заповнювати. Mathcad, наприклад автоматично розраховує діапазон зміни Y. Графік на моніторі появляється після виводу курсору із зони графіка (автоматичний режим розрахунків), або після натискування клавіші F9 (ручний або автоматичний режим). Параметри графіка задаються стандартними по замовчуванню.

- Якщо параметри, які встановлені по замовчуванню на попередньому кроці, не влаштовують користувача з певних причин і він бажає їх змінити, то користувач викликає відповідне меню і змінює необхідні параметри та форматує у такий спосіб графік.

Розміри графіка змінюються звичайною протяжкою в середовищі Windows. В середовищі MathCad можлива і швидка (двокрокова) технологія побудови графіку (**Quick Plot**): користувач набирає функцію і зразу віддає команду побудови декартового чи іншого графіку.

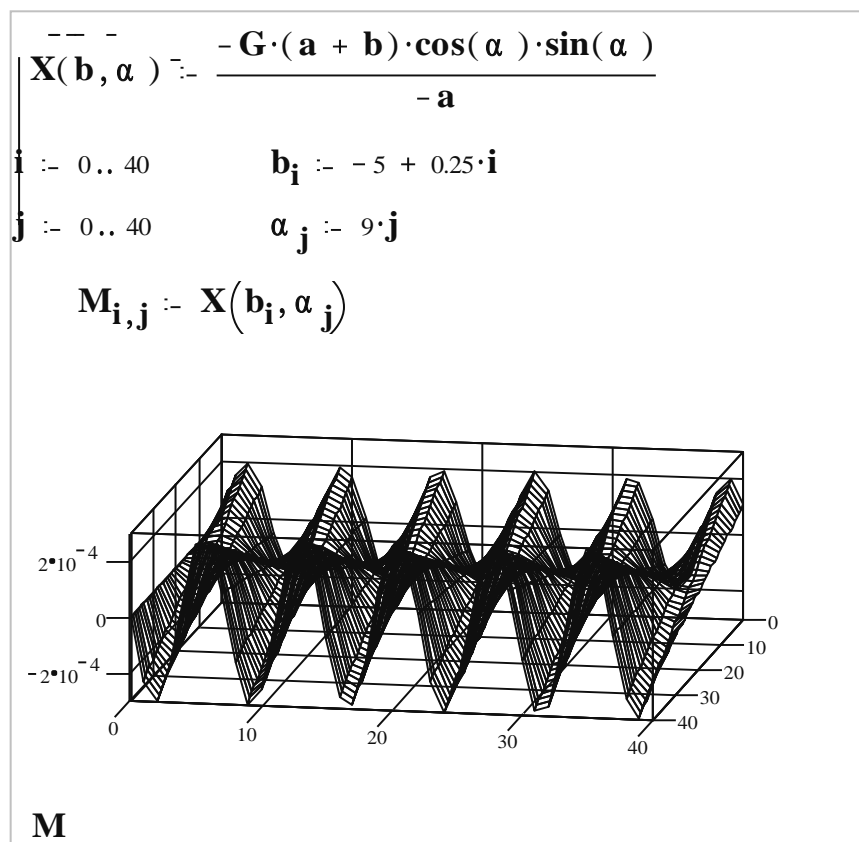



Рисунок 6а - Приклад Mathcad-процедури побудови двовимірного графіку

На рис.5а графічно відображена функція уже не одного аргументу, а двох аргументів: правого плеча валу b та кута нахилу α . **Графік поверхні** ( **Surface Plot**) будується уже не за три, а за сім кроків.

Крок 1: Задання виду функції двох змінних: Y та $X(b,a)$;

Крок 2: Нумерація вузлів сітки-поверхні по першому аргументу - $i:=0..40$;

Крок 3: Формування вектора першого аргументу - $b_i := -5 \cdot m + 0.25 \cdot m \cdot i$; де m -метри;


Крок 4: Нумерація вузлів сітки-поверхні по другому аргументу $j:=0..40$;

Крок 5: Формування вектора другого аргументу $\alpha_j := 9 \cdot \text{deg} \cdot j$ (deg - умовні градуси);

Крок 6: Заповнення матриці (вона має ім'я M) значеннями функції $X(b,a)$ у вузлах сітки;

Крок 7: Побудова і форматування графіка поверхні.

Процес форматування тривимірного графіка має на порядок більше можливостей, ніж форматування двохвимірного. До кольору, товщини і вигляду лінії, нумерації осей, сітки тощо долучається вигляд (**View**) графіка : нахил до глядача і обертання навколо вісі Z , а також багато іншого.

Елементи матриці (або вектора) можна уподобити стовпцям, розставивши їх на площині двох аргументів і отримати тривимірну стовпцеву діаграму ( - 3D Bar Chart).

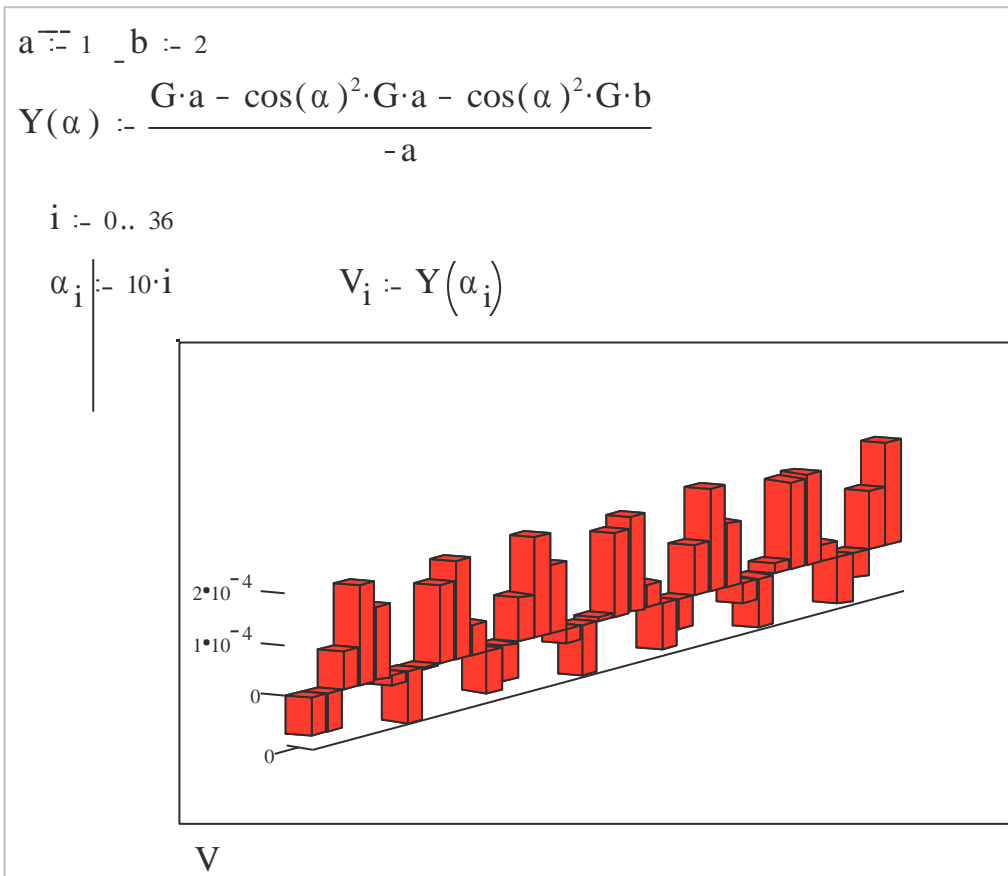


Рисунок 6б. Тривимірна стовпчаста діаграма (за умовою задачі рис 5)

Для плоских графіків у середовищі Mathcad передбачені ще два інструменти: лупа (**Zoom** - див. рис. 7) і трасування (**Trace** - див. рис. 8).

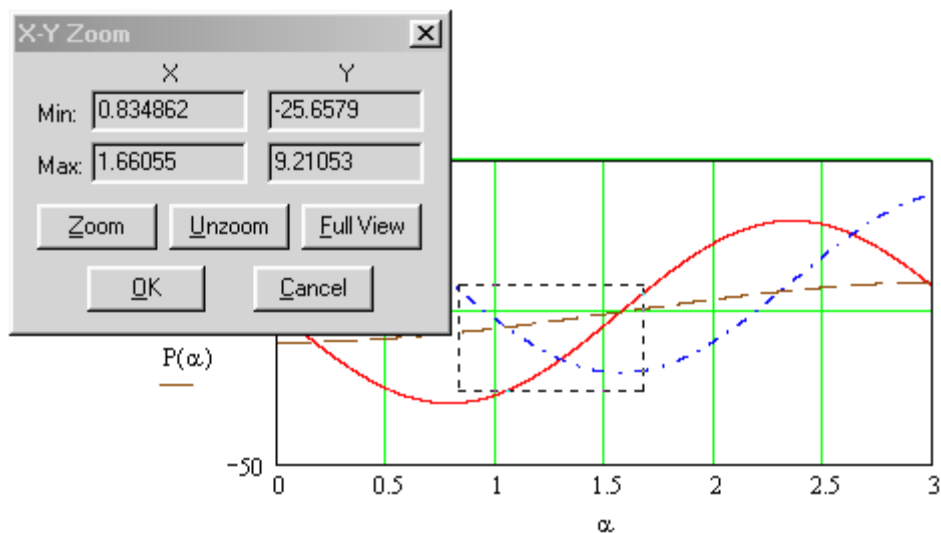


Рисунок 7 - Приклад використання лупи

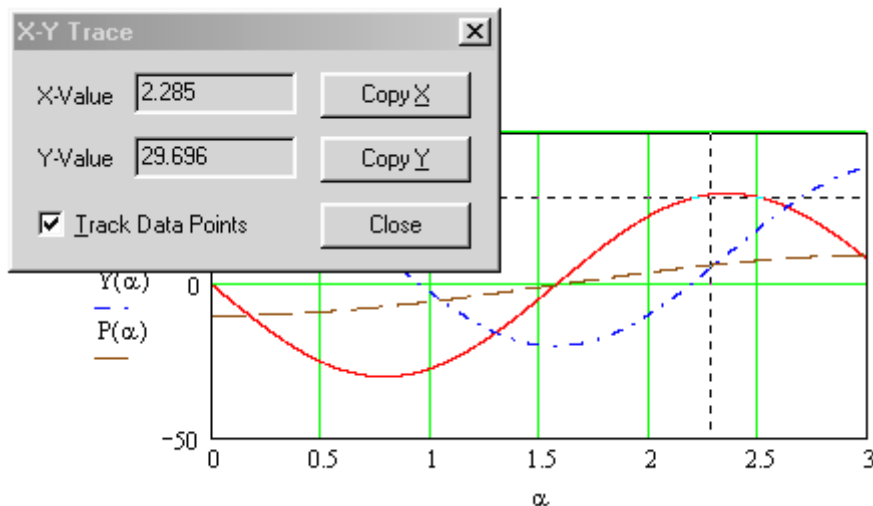


Рисунок 8 - Використання засобів трасування

Якщо досліднику чи іншій людині необхідно детальніше розглянути деякий об'єкт, то він бере в руку лупу (вона зображена на одній з кнопок панелі графіків). Якщо натиснути цю кнопку, то користувач викликає діалогове вікно **X-Y-Zoom** з чотирма полями і п'ятьма кнопками. З допомогою протягування можна на розглядуваному графіку виділити прямокутну область (рис.1.7), координати якої будуть відображатися в діалоговому вікні **X-Y Zoom**. Після натискування на кнопку **Zoom** це вікно буде збільшене до розмірів вихідного графіка. Можна все повернути на попередню позицію (кнопка **UnZoom**), вибрати нову область і розкрити її повністю (**Full View**). Якщо натиснути на останню, дев'яту кнопку панелі графіків, з'явиться діалогове вікно **X-Y-Trace** (Рис.8). Якщо після цього курсор миші перемістити на криву на графіку, то з'являться дві тонкі пунктирні взаємно перпендикулярні лінії (crosshair), координати перетину яких відображаються у вікні **X-Y Trace**. Ці координати можна скопіювати (**CopyX** і **CopyY**) в буфер обміну, а тоді перенести в Mathcad документ.

4. Використання операторів і функцій

Функції вводяться в Mathcad-документ в основному через використання "майстра функцій":

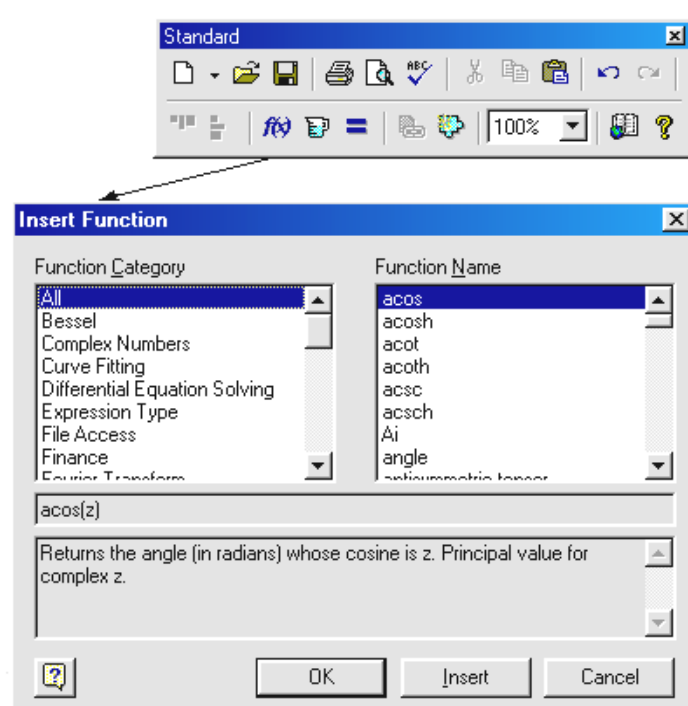


Рисунок 9 – Вигляд майстра функцій в MathCad 2001 Pro

Вбудовані оператори вводяться в документ шляхом натискування кнопок з їх зображенням:

Принципової різниці між функціями і операторами немає: в обох випадках все зводиться до виклику відповідної обчислювальної програми. Функції (вбудовані і функції та оператори користувача) з одним або двома аргументами можна вводити в Mathcad-документ через натискування кнопок "f" "xf" і "x^fy" (нижній ряд на другій панелі рис.1.1.). При цьому з'являться заготовки постфіксного і префіксного операторів з одним операндом ("fx" і "xf"), індексного "xfy" і деревовидного "x^fy" операторів з двома операндами. (див. рис. 10)

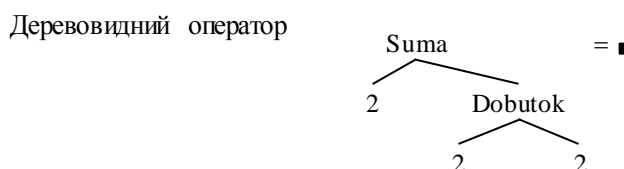
1. Вбудована функція $\sin(1) = \blacksquare$
 Вбудована функція у вигляді префіксного оператора $\sin 1 = \blacksquare$
 Вбудована функція у вигляді постфіксного оператора $1 \sin = \blacksquare$

2. Вбудований оператор $2 + 2 = \blacksquare$

3. Дублювання вбудованих операторів функціями користувача

$$\text{Suma}(a, b) := a + b \quad \text{Dobutok}(a, b) := a \cdot b$$

$$\text{Виклик функції користувача} \quad \text{Suma}(2, \text{Dobutok}(2, 2)) = \blacksquare$$



4. Переозначення вбудованої функції

$$\sin(x) := \sin\left(\frac{\pi}{180} \cdot x\right) \quad \sin(30) = \blacksquare$$

Рисунок 10 - Приклади використання операторів і функцій Mathcad.

Деякі відмінності функцій від операторів. Вбудовані оператори відрізняються від вбудованих функцій по перше, тим, що функції мають однакові пріоритети щодо виконання. Оператори мають певні пріоритети виконання (множення має пріоритет перед додаванням і т.д.). Оператор в середовищі Mathcad має фіксоване число операндів. Деякі функції (наприклад **Find**) можуть мати справу із змінним числом аргументів. Вбудовану функцію на відміну від оператора можна перевизначити.

Одна із причин популярності Mathcad полягає в тому, що користувач вправі вставляти в документи, або функції, або процедури чи оператори в залежності від того, до чого він привик, і як вивчив математику. Mathcad-документ максимально подібний на лист паперу з математичними викладками, написаними від руки або створений в середовищі якого-небудь текстового редактора, наприклад Word. На відміну від традиційних систем програмування в середовищі Mathcad усі процеси створення програм злиті воедино, вводячи нову формулу в документ, можна не тільки подивитися результат обчислень по ній, але й побудувати графік, створити анімаційний кліп.

5. Функції для розв'язування диференціальних рівнянь та їх систем

Значну кількість фізичних, механічних та технологічних процесів і систем можна описати математичними моделями, які легко звести до задачі Коші для

систем звичайних диференціальних першого порядку (лінійних і нелінійних) відносно n - невідомих функцій $y_i, i = \overline{1, n}$ значення прогинів n - точкових мас механічної системи, концентрації та температури компонентів середовищ тепломасопереносу тощо):

$$\begin{cases} \frac{\partial y_i(t)}{\partial t} = f_i(y, t), i = \overline{1, m} \\ y_i(t)|_{t=t_{\text{поч}}} = y_n \end{cases}$$

В середовищі Mathcad є цілий набір вбудованих функцій для чисельного розв'язання таких задач (задачі Коші).

Функція $\text{rkfixed}(x, t_{\text{поч}}, t_{\text{кін}}, n, f)$ - знаходить розв'язок задачі Коші за допомогою методу Рунге-Кутта (rk) четвертого порядку точності з фіксованим (fixed) кроком інтегрування. У цієї функції п'ять аргументів:

y_n - вектор початкових значень шуканих розв'язків;

$t_{\text{поч}}$ - координата початкової точки інтегрування;

$t_{\text{кін}}$ - координата кінцевої точки інтегрування;

n - число кроків інтегрування;

f - функція-вектор правих частин системи.

Функція rkfixed повертає матрицю z $[n, m]$. (m - кількість рівнянь або порядок системи, n - таблицю розв'язків системи: перший (вірніше нульовий) стовпець - це значення аргументу t (їх задає користувач через величини $t_{\text{поч}}, t_{\text{кін}}, i$ n) а наступні стовпці - вектори шуканих розв'язків y_1, y_2, \dots, y_m).

Для дослідження жорстких механічних систем доцільно використовувати функції **Stiffb** і **Stiff**. В них реалізовані методи Буліриш-Штера і Розенброка. Форма матриці, отриманої за допомогою з допомогою цих функцій ідентична матриці отриманої через функцію **rkfixed**. Функції **Stiffb** і **Stiff** мають шість аргументів:

Stiffb($y_n, t_{\text{поч}}, t_{\text{кін}}, f, j$)

Stiff($y_n, t_{\text{поч}}, t_{\text{кін}}, f, j$)

Тут y_n - вектор початкових значень; $T_{\text{поч}}, t_{\text{кін}}$ - початкове і кінцеве значення координат інтервалу інтегрування (початкові значення y_n визначається в точці $t_{\text{поч}}$); n - кількість точок за початковою, в яких повинен бути визначений розв'язок; $f(t, x)$ - вектор-функція правих частин; $j(t, x)$ -функція, яка приводить до $n \cdot (n+1)$ матриці, в першому стовпці якої знаходяться похідні dy/dt , а наступні стовпці складає Якобіан для системи диференціальних рівнянь.

6. Програмування в середовищі Mathcad

Широкий набір інструментарію Mathcad, який реалізований в загальноприйнятому в математиці вигляді, не реально втиснути в рамки традиційних мов програмування (C, Pascal, BASIC, та інші). Тому Mathcad присуті не має як такої вбудованої мови програмування. В ньому знято обмеження на використання складних операторів для керуючих алгоритмічних конструкцій вибору і повторення. Алгоритмічні конструкції в середовищі Mathcad вводяться не традиційним набором через клавіатуру ключових слів **if, then, else, while** та інші, а натискуванням однієї із кнопок на **панелі програмування**. В системі Mathcad також введено поняття локальної змінної, введено цикл з параметром **for**, оператори дострокового виходу із циклу **break, continue**, а також оператор дострокового виходу із програми **return**.

Панель програмування Mathcad показана на рис.11

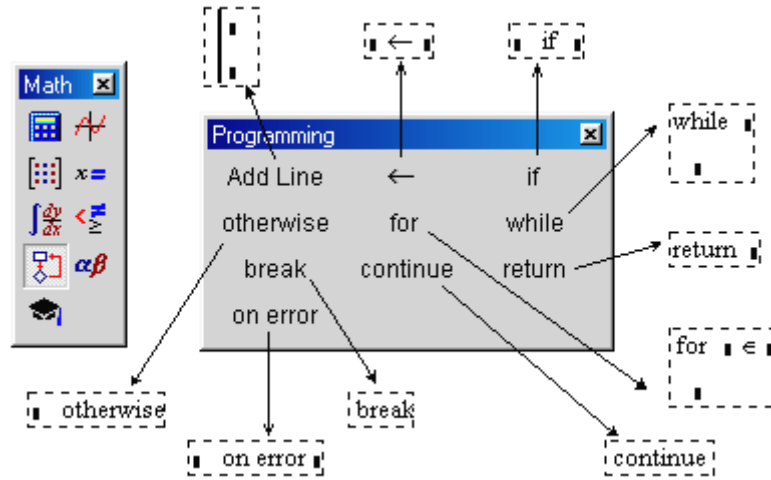


Рисунок 11 - Панель програмування в Mathcad

Натискання на одній із цих кнопок створює на дисплеї заготовку відповідної програмної конструкції.

Клавіша **Add Line** – це команда вставлення рядка в програму, в тіло циклу, в плече альтернативи тощо. Цією дією знімається вище означене обмеження на число операторів, що вкладені в конструкцію мови:

Було

$a :=$ █

Стало

$a :=$ █
█
█

Вертикальна лінія об'єднує окремі оператори в операторний блок з одним входом і виходом, який виконується як один оператор (один із трьох атрибутів структурного програмування).

Клавіша **←** – це оператор присвоєння значення **локальній змінній**.

Приклад, який показує різницю між глобальною і локальною змінною:

$A := B \leftarrow 3$

$A = 3$

$C := A + B$

This variable or function is not defined above.

В середовищі Mathcad негативне зображення змінної **B** свідчить про те, що її значення поза програмою (фрагментом, що демонструється) (**B←3**) є невизначеним. Завдяки локальним змінним можна створювати об'ємні Mathcad-документи, поручаючи розробки окремих програм різним програмістам. При цьому не потрібно турбуватись про розділення змінних в різних програмах (фрагментах) змінні можуть співпадати по імені, але при цьому вони не будуть перекриватись (технологія програмування зверху-вниз). Отже, локальна зміна поширює свою дію тільки на програму (фрагмент Mathcad-документа), а глобальна на весь документ.

Mathcad володіє інструментарієм, що дозволяє змінним, функціям користувача проникати в інші Mathcad-документи. Для цього у новому документі

необхідно зробити посилання (**Reference**) на Mathcad-документ, який містить потрібні функції чи змінні.

Якщо натиснути на кнопку **while**, то одержимо заготовку циклу з перепроверкою – слово **While** з двома порожніми квадратиками:

while ■

■

У квадрат, що розміщений справа від слова **While** необхідно написати логічний вираз (змінну) для керування циклом. В другий квадрат, що нижче циклу **While** – тіло циклу, записуємо оператор (оператори), що буде виконуватися до тих пір, поки логічний вираз повертатиме значення "так" (у середовищі Mathcad це числове значення, відмінне від нуля). Якщо тіло циклу містить більше одного оператора, то необхідно скористатись кнопкою **Add Line** (див.рис.11).

На рис.12 з метою демонстрації роботи циклу **While** подані програми числового розв'язку диференціального рівняння методом Ейлера (n.1), методом Рунге-Кутта. Ядро програми – цикл **While**. Програмно створені функції Euler і RK4 повертають вектор значень, що є розв'язком диференціального рівняння чи системи. Аргументи функції Euler і RK4 відповідають за описом і порядком аргументам функції **rkfixed**.

Клавіша **if** дозволяє вводити в програму в середовищі Mathcad альтернативу з одним плечем:

C ← D if A > B.

Якщо плече альтернативи – складний оператор, то матимемо таку форму:

if A > B
 | E ← F
 | F ← G

Клавіша **otherwise** перетворює неповну альтернативу в повну:

| C ← D if A > B
 | E ← F otherwise

Оператори **if** і **otherwise** дозволяють створювати в програмах алгоритмічні конструкції.

Слід зауважити, що замість **if...otherwise** можна використовувати Mathcad-функцію **if**, якщо вкласти її саму в себе :

if(...if(...if(...))...)

Диференціальне рівняння $f(t, x) := x$

Початкові умови $t_1 := 0 \quad x_1 := 1 \quad t_2 := 1 \quad N := 500$

$$\begin{array}{l}
 \text{RK4}(x_1, t_1, t_2, N, f) := \left\{ \begin{array}{l} x \leftarrow x_1 \\ t \leftarrow t_1 \\ D \leftarrow \frac{t_2 - t_1}{N} \\ \text{while } t < t_2 \\ \left\{ \begin{array}{l} k_1 \leftarrow f(t, x) \cdot D \\ k_2 \leftarrow \left(f\left(t - \frac{D}{2}, x + \frac{k_1}{2}\right) \right) \cdot D \\ k_3 \leftarrow \left(f\left(t + \frac{D}{2}, x + \frac{k_1}{2}\right) \right) \cdot D \\ k_4 \leftarrow f(t + D, x + k_3) \cdot D \\ x \leftarrow x + \frac{1}{6} \cdot (k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4) \\ t \leftarrow t + D \end{array} \right. \\ x \end{array} \right. \\
 \text{Euler}(x_1, t_1, t_2, N, f) := \left\{ \begin{array}{l} x \leftarrow x_1 \\ D \leftarrow \frac{t_2 - t_1}{N} \\ t \leftarrow t_1 \\ \text{while } t < t_2 \\ \left\{ \begin{array}{l} x \leftarrow x + D \cdot (f(t, x)) \\ t \leftarrow t + D \end{array} \right. \\ x \end{array} \right.
 \end{array}$$

$$\text{RK4}(x_1, t_1, t_2, N, f) = \blacksquare$$

$$\text{Euler}(x_1, t_1, t_2, N, f) = \blacksquare$$

Рисунок 13 - Mathcad - процедура чисельного розв'язування диференціального рівняння двома методами (Euler – метод Ейлера, RK4 – метод Рунге-Кутта 4-го порядку)

Клавіша **for** вводить в програму цикл з параметром. Якщо заране відомо, скільки разів необхідно виконувати деяку частину програми, то використовують не цикл **While**, а **for**, в заголовку якого записують булевий вираз, а параметр циклу вказує яких дискретних значень він повинен набути в циклі. Ці значення можна перелічити через кому (1, 2, 3, 4, 7) або вказати діапазоном (5..100) або вектором (V). В програмі на рис.14 використано цикл for із заголовком **for t ∈ t1, t1+D..t2**, а не цикл **While**. При цьому програму можна дещо спростити, вилучивши оператори **t<t1** і **t<t+D**.

Диференціальне рівняння $f(t, x) := x$

Початкові умови $t_1 := 0 \quad x_1 := 1 \quad t_2 := 1 \quad N := 500$

$$\text{Euler}(x_1, t_1, t_2, N, f) := \left| \begin{array}{l} x \leftarrow x_1 \\ D \leftarrow \frac{t_2 - t_1}{N} \\ \text{for } t \in t_1, t_1 + D.. t_2 \\ \quad x \leftarrow x + D \cdot (f(t, x)) \\ x \end{array} \right.$$

$\text{Euler}(x_1, t_1, t_2, N, f) = \blacksquare$

Рисунок 14 - Приклад використання циклу for

Подаємо ще декілька варіантів заготовок циклів з параметром в середовищі Mathcad:

For $A \in V$ (V - вектор)
For $A \in 5, 4.6, 8.7, 5.4 \cdot 10^{-4}$
For $m \in m_1..m_2$

Оскільки варіант привабливий тим, що змінні m_1 і m_2 можуть набувати різних значень, навіть, можливо, що $m_1 < m_2$.

Кнопки **break** і **continue** дозволяють достроково виходити із циклу **While** і **for**, а клавіша **return** – зовсім з програми.

В середовищі Mathcad можна складати різні програми, що формують певні константи (програма-константа), змінні (програма-змінна), функції (програма-функція, програма-скаляр, програма-вектор, програма-матриця). Для зразку на рис.15 показана програма залежності змінної y , від значення іншої змінної x , заданої десь вище в Mathcad-документі (в нас $x:=10$).

$x := 10$

$$y := \left| \begin{array}{l} \sqrt[3]{|x|} \text{ if } x < 0 \\ e^x \text{ if } 0 \leq x \leq 10 \\ \int_0^x \frac{\sin(t)}{t} dt \text{ if } x > 10 \end{array} \right. \quad y = \blacksquare$$

Рисунок 15 - Програма-змінна

Натискування на кнопку **on error** панелі програмування Mathcad приводить до появи на дисплеї помилок. Оператор **on error** є незамінним для випадків, коли складно локалізувати помилки. Вбудована в Mathcad функція **root** повертає дійсний корінь рівняння тільки в тому випадку, якщо перше наближення до кореня є також дійсним, якщо корінь комплексний, а перше наближення дійсне, то функція **root** дає помилку.

7. Інструментарій символічної математики

З метою застосування в комп'ютерному моделюванні методів математичного аналізу (аналітичних методів диференціального і інтегрального числення, методів розв'язування диференціальних рівнянь, розвинення функцій в ряд тощо), поступового відходу від неповоротливості та похибок чисельних методів у середовищі Mathcad реалізований інструментарій символічної математики. Інструменти символічної математики Mathcad умовно можна поділити на 3 групи:

- 1) команди символічної математики з меню **Symbolic**;
- 2) оператори символічних перетворень (**Live Symbolics**);
- 3) оптимізація чисельних розрахунків через символічні перетворення (**Optimize**).

Команди символічних перетворень із меню Symbolic

1. Обчислити - **Evaluate**
 - 1.1. Обчислити в символах – **Evaluate Symbolicaly**
 - 1.2. В комплексному виді – **Complex Evaluation.**
 - 1.3.3 плаваючою комою – **Floating Point Evaluation.**
2. Спростити – **Simplify.**
3. Розкласти по степенях – **Expand Expression.**
4. Розкласти на множники – **Factor Expression.**
5. Розкласти по підвиразу – **Collection Sube xpression.**
6. Поліноміальні коефіцієнти – **Polinomial Coefficients.**
7. Диференціювати по змінній – **Differentiate on Variable.**
8. Інтегрувати по змінній – **Integrate on Variable.**
9. Розв'язати відносно змінної – **Solve on Variable.**
10. Замінити змінну – **Substitute for Variable.**
11. Розкласти в ряд ... – **Expand to Series...**
12. Розкласти на елементарні дроби – **Convert to Partial Fraction.**
13. Матричні операції – **Matrices Operations.**
 - 13.1. Транспонувати – **Transpose Matrix.**
 - 13.2. Перетворити – **Invert Matrix.**
 - 13.3. Визначник – **Determinant of Matrix.**
14. Перетворення – **Transform.**
 - 14.1. Перетворення Фур'є – **Fourier Transform.**
 - 14.2. Обернене перетворення Фур'є – **Inverse Fourier Transform.**
 - 14.3. Перетворення Лапласа – **Laplace Transform.**
 - 14.4. Обернене перетворення Лапласа – **Inverse Laplace Transform.**
 - 14.5. z - перетворення – **z - Transform.**
 - 14.6. Обернене z - перетворення – **Inverse z - Transform.**
15. Границі (команд немає, є клавіші-іконки).

В Mathcad 2001 Professional команди символічної математики, які вимагають, щоб перед їх виконанням курсором була відмічена змінна, до якої ця команда відноситься, об'єднані в групи **Variable... (Змінні...)**. Можна також застосовувати команди символічної математики до виразів, що містять функції користувача. Необхідно, зокрема, вказувати змінні інтегрування, диференціювання. Щодо виконань п.1-4,13, то достатньо, щоб весь вираз або його частина була виділена. Якщо виділення відсутнє, то відповідна позиція меню **Symbolic** є недоступною (як це прийнято, на екрані відображена не чорним, а сірим кольором, що є підказкою для користувача – виправити помилку). Три точки після певної команди меню (**Expand to Series**) означає, що повинно бути уточнення.

Якщо команда п.9 **Solve on Variable** (розв'язання рівнянь) адресована не до рівняння, а до виразу, то по замовчуванню вважається, що вона прирівнюється до нуля. Якщо розв'язків є більше одного, то вони виводяться у вигляді вектора.

В п.10 при операції заміни виразу на вираз, необхідно у перетворюваному виразі курсором виділити підвираз, що змінюється (**x**). Другий підвираз $\pi - a \cdot \cos(a-1)$ попередньо заноситься в буфер обміну командою **Copy**. Команда **Replace** відноситься тільки до здійснення замін у коментаріях або глобальної заміни одного імені змінної (функції) на іншу. "Символьна" заміна дозволяє не тільки перевіряти правильність розв'язання, скажімо, рівнянь, а й розв'язувати багато задач методом підстановок та замін.

Відмінності обчислювальної і символьної математики. Користуючись послугами обчислювальної математики, ми як правило, обмежуємось наближеним розв'язком, в обчислювальній математиці виконання прямих і зворотних операцій, які часто використовуються для тестування, приводить до нагромодження похибки. В символьній математиці це відсутнє.

8. Оператори символьних перетворень

Ці оператори дозволяють працювати не тільки в ручному режимі, але і в автоматичному. В середовищі Mathcad, як було раніше означено, знак "=" означає числовий, а знак "→" символьний вивід значення змінної, функції або виразу, що є у ряді випадків зручнішим.

1. Взяття похідної

$$\frac{d}{dx} x^n \rightarrow \frac{d^3}{dx^3} x^n \rightarrow$$

2. Інтегрування

$$\int \frac{1}{\sin(\alpha \cdot x) \cdot \cos(\alpha \cdot x)} dx \rightarrow \int_0^{\infty} \frac{\sin(x)}{\sqrt{x}} dx \rightarrow$$

3. Сума

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2 \cdot n - 1)^2} \rightarrow$$

4. Добуток

$$\prod_{n=1}^x \frac{1}{n^2} \rightarrow$$

5. Границя

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)}{x} \rightarrow$$

Рисунок16 - Приклади використання операторів символьної математики

В аналітичному вигляді можна розв'язувати як алгебраїчні та диференціальні рівняння так і системи рівнянь (рис.17).

На рис.17 показано як аналітично можна знайти розв'язок двох нелінійних алгебраїчних рівнянь (частинних похідних оптимізаційної функції Розенброка). Частинні похідні брались відповідною командою із меню **Symbolic**. У п.2 показано знаходження мінімуму функції через аналітичний виклик вбудованої функції **Minerr**.

1. Варіант перший

$$100(y - x^2)^2 + (a - x)^2 \quad \text{функція Розенброка зі змінною } a$$

$$\frac{d}{dx} \left[100(y - x^2)^2 + (a - x)^2 \right] \rightarrow$$

$$\frac{d}{dy} \left[100(y - x^2)^2 + (a - x)^2 \right] \rightarrow$$

Given

$$400(y - x^2) \cdot x - 2 \cdot a + 2 \cdot x = 0$$

$$200 \cdot y - 200 \cdot x^2 = 0$$

Find(x,y) →

2. Варіант другий

Given

$$100(y - x^2)^2 + (a - x)^2 = 1$$

MinErr(x,y) →

Рисунок 17 - Приклади Mathcad - процедури розв'язування систем рівнянь різного типу у символній формі

При символічних перетвореннях з допомогою команд меню **Symbolic** шуканий вираз (інтеграл, похідна тощо) з'являється (п.1.1.рис.16) або нище, або замість вихідного виразу. Ключеві слова **панелі клавiш символних перетворень** (рис.18) можна вважати зачатком нової мови програмування, орієнтованої не на обчислювальний, а на аналітичний процес. В середовищі Mathcad 2001 Professional оператор "→" суттєво доповнений і розширений в порівнянні з попередніми версіями Mathcad.

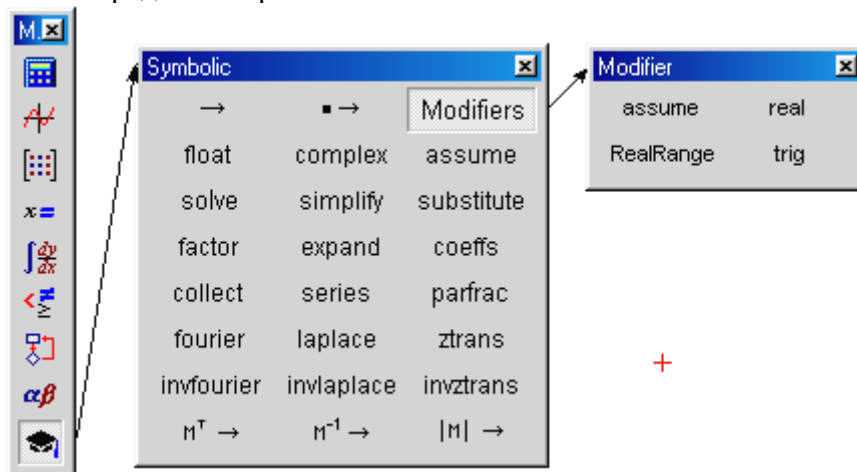



Рисунок 18 - Панель символної математики Mathcad 2001 Professional.

Вибір (напрям) символічного перетворення задається натискуванням однієї із 28 кнопок. На рис.19 подані приклади застосування символічних перетворень в середовищі Mathcad 2001 Professional.

Для спрощення виразу можна, по-перше, натиснути на клавішу , тоді у перший пустий квадратик записати вираз, а у другий – слово **Simplify**. Другий спосіб потребує записування виразу, що спрощується і натискання клавіші **Simplify**. В середовищі Mathcad 2001 Professional (рис.19) можна здійснювати ряд символічних перетворень, не показуючи при цьому проміжних викладень, які іноді бувають настільки громіздкими, що їх неможливо ні розглянути, ні стерти ("нічого не дають ні розуму, ні серцю"). Зокрема в середовищі Mathcad 2001 Professional можна розв'язувати алгебраїчні рівняння не тільки через функцію **Find**, але і через операцію **Solve**, із панелі символічної математики.

1. Спрощення виразів

$$\frac{x^2 - y^2}{x + y} \text{ simplify } \rightarrow$$

2. Перевірка чисел на простоту

$$33585230197823627 \text{ factor } \rightarrow$$

$$2^{127} - 1 \text{ factor } \rightarrow$$

3. Перетворення Лапласа

$$\cos(a \cdot t) \text{ laplace, } t \rightarrow \quad \text{- пряме}$$

$$\frac{s}{(s^2 + a^2)} \text{ invlaplace, } s \rightarrow \quad \text{- зворотнє}$$

4. Комплексне символічне перетворення

$$f(x) := \sin(x)$$

$$f(x) \text{ series, } x, 4 \rightarrow$$

Рисунок 19 - Приклади застосування операторів панелі інструментів символічної математики

9 Оптимізація

Третій інструмент символічної математики Mathcad, який без перебільшення уже можна вважати системою штучним інтелекту, пов'язаний з оптимізаційними розрахунками. Якщо, наприклад ми маємо справу з інтегруванням, зокрема з обчисленням потрібного інтегралу, то Mathcad з виключеним режимом оптимізації (він включається з допомогою опції **Optimize** меню **Math**), буде довго і вперто сумувати, опираючись на відповідний чисельний метод (прямокутників, трапецій, парабол, тощо). Ключове слово **Optimize**, що ставиться перед знаком інтеграла, суми, добутку (див.рис.1.21) – перед усім тим, що можна замінити простішою залежністю (формулою), заставляє Mathcad відходити від лобової атаки і працювати не тільки швидше, але й розумніше. Тут і де мова про шосту версію Mathcad. Із середовища Mathcad 2001 Professional ключові слова **optimize** і **literally** вилучені. Оптимізація математичних виразів тут здійснюється через команду **Property...** меню **Format**. Якщо оптимальний розв'язок знайдений (його пошук відображається миготінням докторської рогатівки - ознаки роботи символічної математики), то правіше виразу з'являється червона зірка.

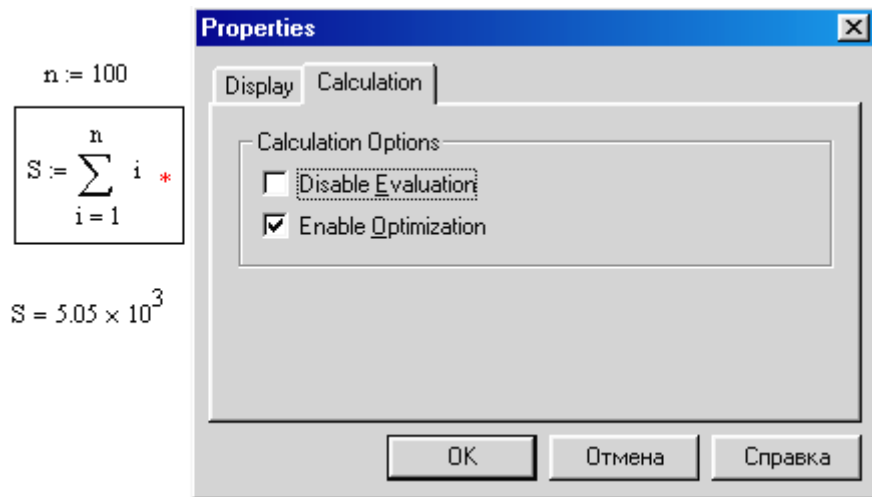


Рисунок 20 - Меню для використання режиму **оптимізація**

Користувач може проглянути не тільки чисельний результат, але й аналітичний вираз, що привів до спрощення чисельних розрахунків. Він заноситься у спеціальний буфер, який можна відобразити на дисплеї командою **Show Smart Math...** меню **Math**, або клацанням на червоній зірці. Із буфера формула може бути перенесена в основний документ. Оптимізувати можна усі вирази без особливої на те вказівки, включивши опцію **Optimize** в меню **Math**. В ряді випадків оптимізація може не тільки пришвидшувати обчислення, а й суттєво впливати на їх точність (підвищувати кількісно і якісно за рахунок виправлення методологічних помилок чисельних методів.

Тема: «Математичне моделювання процесів росту МБК»

1. Фізична постановка задачі Розглядається біотехнологічний процес росту мікробіологічної культури – МБК (мікроорганізмів, дріжджів тощо). Графіки результатів мікробіологічних експериментів росту МБК, що відображають кінетику мікробіологічного росту, подані на рис.1.

2. Математична модель процесу. З урахуванням того факту, що мікробіологічні процеси мають автокаталітичну закономірність і кінетика їх росту має стадію експоненціального росту при умові постійності субстрату, процес росту МБК може описуватися у вигляді наступної математичної моделі:

$$\frac{dN}{dt} = 2k_2 \cdot X - k_1 S_0 N \quad (1)$$

$$\frac{dX}{dt} = k_1 \cdot S_0 N - k_2 X$$

з початковою умовою:

$$N(t)|_{t=0} = N_0 \quad (2)$$

Тут $N(t)$, $X(t)$ – розподіл приведених концентрацій новоутворюваних МБК і насичених клітин, готових до поділу від часу t , k_1 , k_2 , S_0 – константа швидкості клітинного росту відповідно для стадії росту і стадії поділу клітин та концентрація субстрату в мікробіологічному середовищі, що визначається із даних мікробіологічного експерименту, N_0 – початкове значення приведеної концентрації МБК у мікробіологічному середовищі.

3. Початкові дані:

$t := 1, 10..1000$ — діапазон зміни часу t для визначення неперервного розподілу концентрацій МБК;

$n := 100$ — кількість досліджуваних експериментальних точок;

$t_0 := 10$ — початкове значення часу t для визначення дискретного (точкового) розподілу концентрацій МБК;

$\Delta t := 10$ — крок зміни часу t для визначення дискретного розподілу концентрацій МБК;

$i := 1..100$ — діапазон зміни часу t для визначення дискретного розподілу

$tt_i := t_0 + i \cdot \Delta t$ концентрацій МБК;

$t := 0, 10..1000$

$C_0 := 1$ — початкове значення приведеної концентрації продукту;

4. Параметри і залежності для симуляції фізичного експерименту:

$k_e := 0.0005$ — параметр, що симулює експоненціальний ріст(спад) концентрації;

$\alpha := 0.001$ — параметр, що симулює ступінь імпульсивності випадкових вимірювань концентрацій;

rnd(t) — генератор випадкових величин.

$$k_1 := 0.001 \quad k_2 := 0.06 \quad S_0 := 1 \quad N_0 := 1$$

$$\Delta\lambda := -2 \cdot \sqrt{\frac{1}{4} \cdot (k_1 \cdot S_0 + k_2)^2 + k_1 \cdot k_2 \cdot S_0}$$

$$\lambda_1 := \frac{-(k_1 \cdot S_0 + k_2)}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} \cdot (k_1 \cdot S_0 + k_2)^2 + k_1 \cdot k_2 \cdot S_0} \quad \lambda_1 = 9.682 \times 10^{-4}$$

$$\lambda_2 := \frac{-(k_1 \cdot S_0 + k_2)}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} \cdot (k_1 \cdot S_0 + k_2)^2 + k_1 \cdot k_2 \cdot S_0} \quad \lambda_2 = -0.062$$

$$N_e(t) := C_0 \cdot \frac{\lambda_2 - k_1 \cdot S_0}{\Delta\lambda} \cdot e^{\lambda_1 \cdot (1 + \alpha \cdot \text{rnd}(t)) \cdot t}$$

$$N_{\text{expem}_i} := C_0 \cdot \frac{\lambda_2 + k_1 \cdot S_0}{\Delta\lambda} \cdot e^{\lambda_1 \cdot (1 + \alpha \cdot \text{rnd}(tt_i)) \cdot tt_i}$$

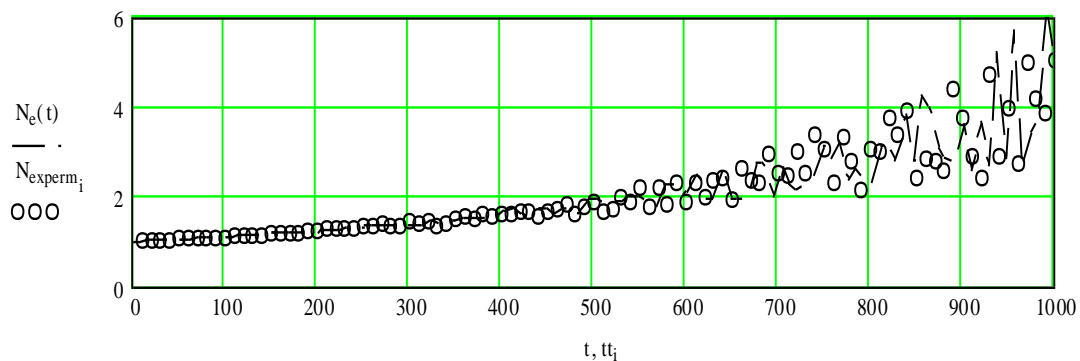


Рисунок 1 - Експериментальні дані розподілу концентрацій росту МБК

5. Алгоритмізація побудови математичного розв'язку моделі.

Розв'язком математичної моделі (1)-(2) є залежність:

$$N(t) = N_0 \cdot \frac{\lambda_2 + k_1 S_0}{\lambda_2 - \lambda_1} \exp[\lambda_1 t], \quad (4)$$

де значення констант швидкостей мікробіологічного росту МБК, що визначає внутрішню кінетику протікання процесу, визначається із експериментальних даних (рис.1) шляхом розв'язання зворотної задачі.

6. Перевірка математичної моделі на адекватність. З метою перевірки математичної моделі на адекватність (відповідність) експериментальним даним (рис.1), використовуємо математичний розв'язок зворотної задачі:

$$k_i := \frac{1}{tt_i} \cdot \ln \left(\left| \frac{N_0}{N_{\text{expem}_i}} \right| \right)$$

Тут k_i – точкові (дискретні) значення приведеної константи швидкості мікробіологічного росту, одержані на основі експериментальних розподілів концентрацій $N_{\text{exp}erm_i}$ (рис.1). Далі, за одержаним значенням k_i , шляхом їх усереднення визначаємо значення приведеної константи швидкості росту МБК k_r , що відповідає вказаним експериментальним даним (рис.1):

$$k_r := \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{100} k_i \quad k_r = -1.061 \times 10^{-3}$$

та будуємо їх відповідні графічні розподіли (рис.2):

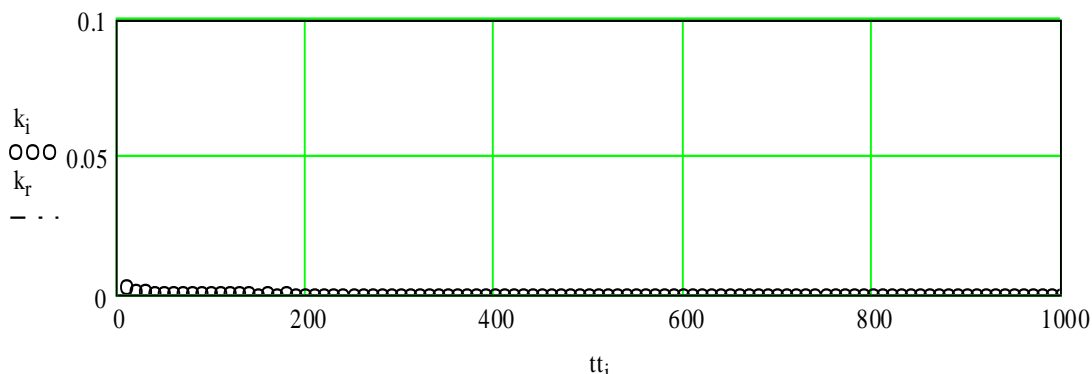


Рисунок 2 - Розподіл розрахункових залежностей констант швидкості мікробіологічного росту і їх середнього значення від часу

7. Числове та графічне моделювання кінетики протікання процесу.

Використовуючи результат перевірки математичної моделі на адекватність, визначивши константу швидкості мікробіологічного росту МБК k_r як розв'язок зворотної задачі (1)-(2), одержуємо модельний розподіл концентрації мікробіологічного росту, (рис.3):

$$N_{\text{model}_i} := C_0 \cdot \frac{\lambda_2 + k_1 \cdot S_0}{\Delta\lambda} \cdot e^{\lambda_1 \cdot tt_i} \quad (4)$$

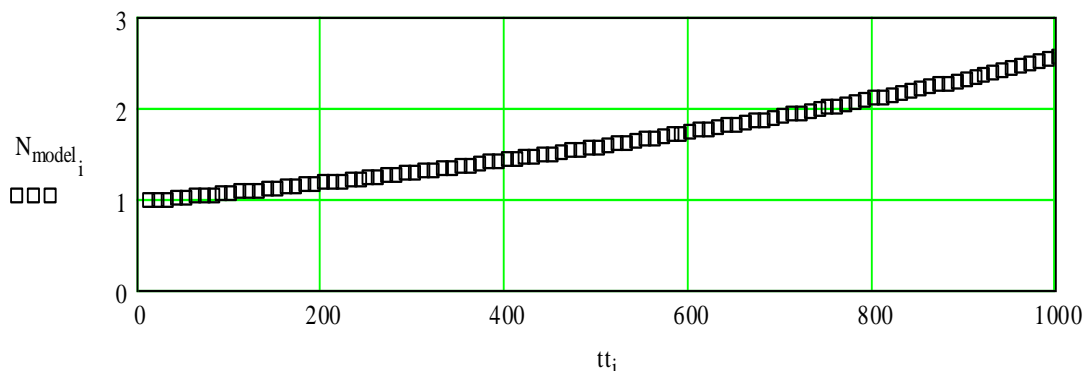


Рисунок 3 - Модельний розподіл приведених концентрацій МБК

8. Порівняльний аналіз з даними експерименту. Наклавши на графік модельного розподілу концентрацій (рис.3) експериментальні точки (рис.1), отримуємо порівняльну якісну картину щодо відповідності результатів математичного моделювання (N_{model_i}) результатам фізичного експерименту ($N_{\text{exp}erm_i}$), (рис.4):

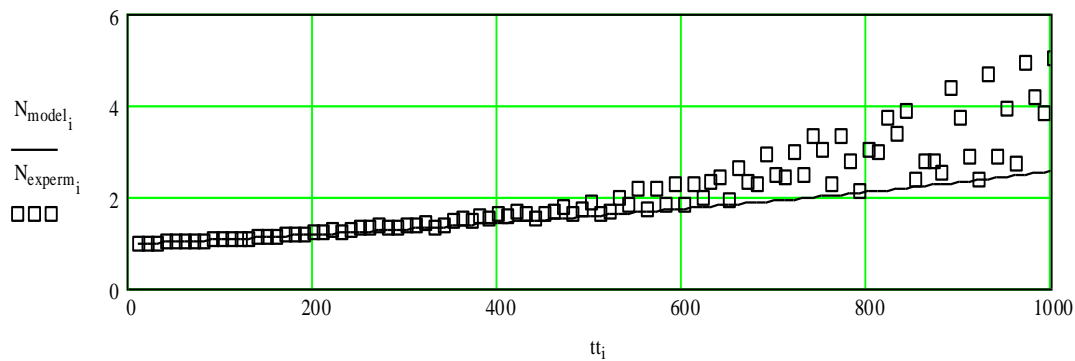


Рисунок 4 - Порівняльний аналіз модельного розподілу концентрації з даними мікробіологічного експерименту

Як простежується з рис.4, результати математичного моделювання добре корелюються з результатами фізичного експерименту. Величина відносного відхилення (похибки) ΔC_i визначається за формулою (5). На рис.5 показана графічна залежність похибки для оцінки ефективності математичної моделі.

$$\Delta C_i := \left| \frac{N_{\text{model}_i} - N_{\text{experm}_i}}{N_{\text{model}_{100}}} \right| \quad (5)$$

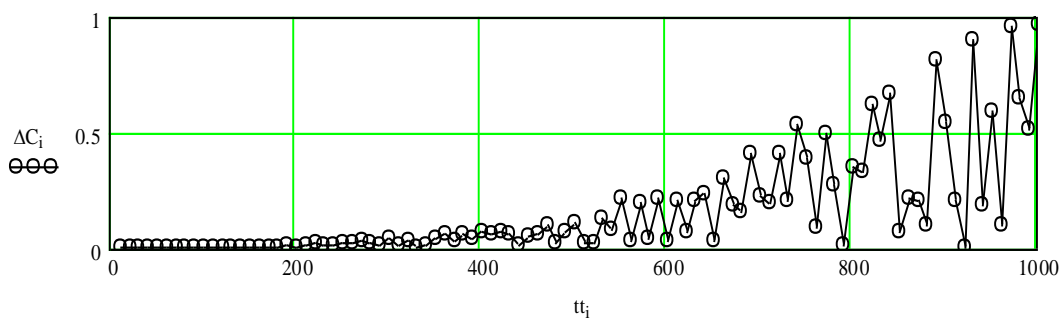


Рисунок 5 - Залежність похибки ΔC_i для оцінки ефективності математичної моделі

Як видно з рис.4,5, на початковій стадії процесу (стадія експоненціального спуску – діапазон 0-100 s), ми спостерігаємо відносно добру кореляцію розрахункових (модельних) і експериментальних параметрів. Максимальне значення відносної похибки для цього випадку становить 0.1%. Для проміжного діапазону (стадія пологого зниження концентрації, діапазон 100-600 s) спостерігаємо майже повне співпадання модельних і експериментальних значень. Найбільше значення похибки для цього випадку не перевищує 0.13%. Для стадії стабілізації (діапазон 600-1000 s) спостерігаємо практично повне співпадання модельних і експериментальних значень, значення відносної похибки в окремих точках цього діапазону досягає 0.03-0.01%, що знаходиться в допустимих межах розрахунків інженерного аналізу.

Висновки. Результатом проведеного дослідження з математичного моделювання мікробіологічного процесу з використанням даних фізичного експерименту є розробка ефективного інструментарію для оцінки ефективності

математичної моделі. Розраховано точне значення компонентів констант швидкості мікробіологічного росту МБК, що відповідає проведеним експериментам і забезпечує високий ступінь відповідності і узгодженості модельних і експериментальних розподілів концентрацій МБК впродовж всієї тривалості протікання технологічного процесу. Такий якісний і кількісний аналіз кінетики процесу дозволить суттєво знизити витрати на проведення експериментальних досліджень, підвищити їх якість, отримати оптимальні енергозберігаючі технологічні параметри, що забезпечує інтенсифікацію процесу в цілому.

Тема: «Математичне моделювання технологічного процесу фільтрації рідини для нестискуваного фільтраційного середовища при постійному перепаді тисків на фільтрувальній мембрані»

1. Фізична постановка задачі Розглядається технологічний процес фільтрації технологічних рідин (суспензій) для нестискуваного середовища при постійному перепаді тисків на фільтрувальній мембрані, що відбувається за законом Дарсі. Рідинна фаза рухається в напрямі фільтрувальної перепони і освітлюється (очищується від твердих включень) проходячи через фільтрувальну мембрану. Тверда фаза (частинки), рухаються разом з рідиною і осідають на фільтрувальній мембрані, утворюючи шар осаду, товщина якого збільшується в часі. Експериментальні дані, що визначають залежність тиску в твердій фазі (в Па) у фільтрувальному середовищі подані нижче.

2. Математична модель процесу. Поданий вище процес фільтрації може бути описаний у вигляді такої математичної моделі з допомогою диференціального рівняння в частинних похідних, у вигляді:

$$\frac{dP}{dt} = b \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} \quad (1)$$

з крайовими умовами:

$$P(t, z) \Big|_{z=0} = P_2 \quad P(t, z) \Big|_{z=h(t)} = P_1 \quad (2)$$

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{1}{\mu r} \frac{\partial P}{\partial z} \Big|_{z=h(t)} \quad (3)$$

Тут $P(t, z)$ – розподіл тиску в рідинній фазі фільтрувального середовища від часу t і координати довжини робочого каналу z ; b, μ, r - коефіцієнти консолідації, динамічної вязкості і питомого опору середовища; P_1, P_2 - значення тисків в рідинній фазі на верхній межі формування осаду на фільтрувальній мембрані; $h(t)$ - поточне значення рухомої межі утворення осаду. Слід зауважити, що остання крайова умова (3) є умовою з рухомою межею, яка носить назву – умова Стефана.

3. Початкові дані:

$P_1 := 1, P_2 := 0.3$ — значення тисків на верхній і нижній межах фільтрувального середовища;

$r := 10^{12}, \mu := 10^{-3}$ — значення кінетичних констант фільтраційного середовища;

$h := 0.1$ — початкове значення верхньої межі осаду, м;

$u := 2$ — коефіцієнт зовнішнього відкладення осаду, м.

$$PE := \begin{bmatrix} 30 & 0.82 \\ 60 & 0.76 \\ 90 & 0.69 \\ 120 & 0.67 \\ 150 & 0.66 \\ 180 & 0.654 \\ 210 & 0.65 \\ 240 & 0.645 \end{bmatrix}$$

— матриця експериментальних значень тиску в твердій фазі фільтрувального середовища, перша колонка – час, друга – значення тиску в цей помент часу;

З матриці експериментальних значень тиску створимо два масива даних:

— масив значень тиску

$$P_{\text{exp}} := PE^{<1>},$$

— масив значень часу

$$t := PE^{<0>};$$

— кількість досліджуваних експериментальних точок

$$n := 7, \quad i := 0..n.$$

4. Алгоритмізація математичного розв'язку моделі та чисельне моделювання

Розв'язок математичної моделі, описаної диференціальним рівнянням (1) та крайовими умовами (2)-(3) запишеться в такому вигляді:

$$P(t, z) = P_2 + (P_1 - P_2) \cdot \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{h(t)}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}. \quad (4)$$

тут $\operatorname{erf}(\lambda)$ – інтеграл імовірності, функція яка є табульованою в спеціальних таблицях, і має такий вигляд:

$$\operatorname{erf}(\lambda) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\lambda e^{-\lambda^2} d\lambda,$$

причому, для неї справедливі вирази: $\operatorname{erf}(0) = 0, \operatorname{erf}(\infty) = 1$.

Визначаємо значення коефіцієнту консолідації осаду шляхом розв'язання зворотної задачі, використовуючи експериментальні значення процесу та аналітичний розв'язок моделі, що його описує. Отож, знайдемо масив коефіцієнтів консолідації як корені такого рівняння:

$$P_2 + (P_1 - P_2) \cdot \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{h}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)} = P_{\text{exp}}. \quad (5)$$

Дане рівняння є трансцендентним, і для його розв'язку скористаємося MathCad функцією *root*:

$$F(b_{\text{exp}}, i) := P_2 + (P_1 - P_2) \cdot \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{b_{\text{exp}} \cdot t_i}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{h}{2\sqrt{b_{\text{exp}} \cdot t_i}}\right)} - P_{\text{exp}_i}$$

$$b_{\text{exp}} := 10^{-4} \quad b_{\text{exp}_i} := \operatorname{root}(F(b_{\text{exp}}, i), b_{\text{exp}}) \quad b := b_{\text{exp}_2}$$

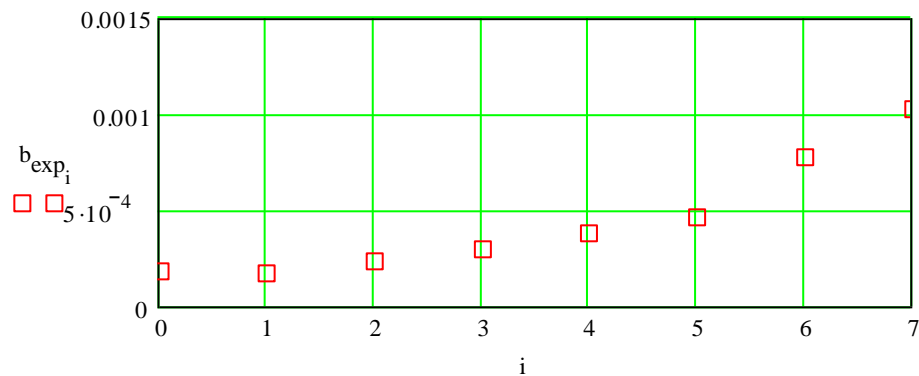


Рисунок 1 - Розподіл розрахункових коефіцієнтів консолідації

5. Перевірка математичної моделі на адекватність. Знаходимо розподіли тисків при проходженні процесу фільтрування за математичною моделлю для різних значень z і порівнюємо їх з експериментальними значеннями:

$$P(t, z) := \left[P_2 + (P_1 - P_2) \cdot \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{h}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)} \right] \quad (6)$$

$$t_1 := 30, 60..240 \quad i := 0..7$$

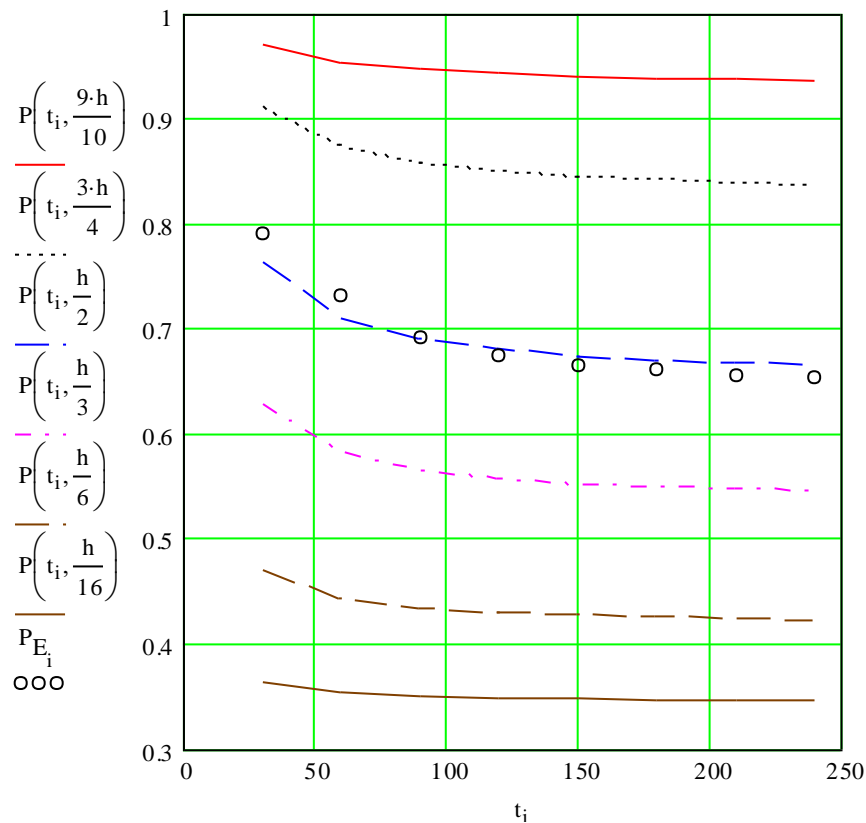


Рисунок 2 – Порівняння результатів математичного моделювання і фізичного експерименту

6. Знаходження розподілу висоти шару осаду при фільтрації в часу.

Для цього зробимо заміну змінних такого вигляді $\lambda = \frac{z}{2\sqrt{bt}}$:

$$P(\lambda) = P_2 + \Delta P \frac{\text{erf}(\lambda)}{\text{erf}(\alpha)}; \quad (7)$$

тут $\alpha = \frac{h(t)}{2\sqrt{bt}}$.

Крайова умова (3) матиме такий вигляд:

$$\frac{1}{\mu r} \frac{dP}{d\lambda} = \frac{2b}{u} \alpha. \quad (8)$$

Продиференціювавши (7) та підставивши його в (8), після ряду перетворень одержимо рівняння для визначення параметру α :

$$\sqrt{\pi} \alpha \cdot \exp(\alpha^2) \text{erf}(\alpha) = u \frac{\Delta P}{G}; \quad (9)$$

де $G = b\mu r$ - фізична величина, що носить назву модуля стискування осаду.

Рівняння (9) також трансцендентне.

$$\text{fnc}(\alpha) := \alpha \cdot \sqrt{\pi} \cdot \exp(\alpha^2) \cdot \text{erf}(\alpha) - u \cdot \frac{P_1 - P_2}{G}$$

$$\alpha := 1 \quad \alpha := \text{root}(\text{fnc}(\alpha), \alpha) \quad \alpha = 0.015$$

$$t := 0, 30..240$$

$$h(t) := 2 \cdot \alpha \cdot \sqrt{b \cdot t} \quad h_0 := 0.1$$

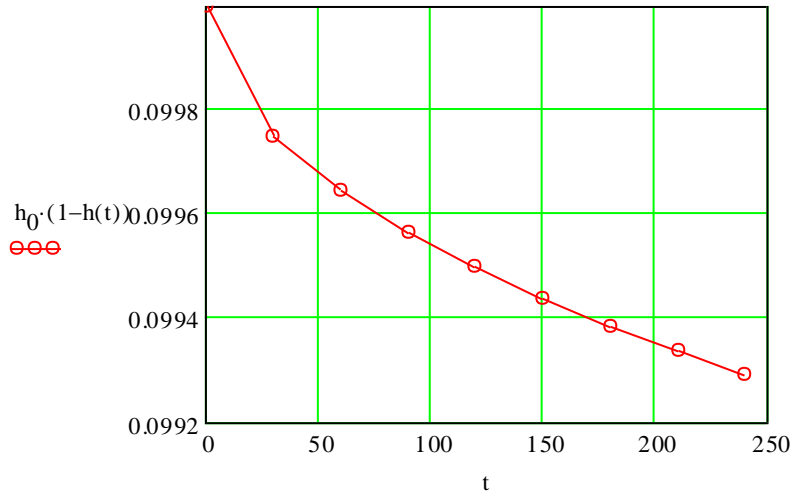


Рисунок 3 – Розподіл висоти шару осаду при фільтрації

Висновки. Результатом проведеного дослідження з математичного моделювання процесу фільтрації рідин в при постійному прикладеному зовнішньому тиску є створення інструментарію для лцінки ефективності математичної моделі. За наявною матрицею експериментальних даних розраховано коефіцієнти консолідації, що відповідають даному експерименту, за рахунок чого забезпечується високий степінь узгодженості математичної моделі з експериментом. Також знайдено розподіл висоти шару осаду в часі при процесі фільтрації.

Тема: «Математичне моделювання технологічного процесу фільтраційної консолідації (віджиму осаду) при прикладеному зовнішньому тиску на середовище»

1. Фізична постановка задачі Розглядається технологічний процес фільтраційної консолідації (віджиму водомістких пористих матеріалів). Процес фільтраційного віджиму відбувається за законом Дарсі-Шпірато. Рідинна фаза міститься в скелеті і твердих частинках, і в результаті деформації скелету та частинок під дією зовнішнього навантаження, рідина заповнює простір скелету і рухаються в напрямі фільтрувальної перепони. Тверда фаза (скелет і частинка) під дією зовнішнього тиску деформуються в об'ємі, рухаються разом з рідиною і консоліднуються на фільтрувальній перепоні, утворюючи щільний шар осаду, товщина якого зменшується в часі (для процесів періодичної дії). Експериментальні дані, що визначають залежність тиску в твердій фазі (в Па) у фільтрованому середовищі подані нижче.

2. Математична модель процесу. Поданий вище процес фільтраційної консолідації (віджиму) може бути описаний у вигляді такої математичної моделі з допомогою диференціального рівняння в частинних похідних, у вигляді:

$$\frac{dP_s}{dt} = b \frac{\partial^2 P_s}{\partial z^2}, \quad (1)$$

з крайовими умовами:

$$P_s(t, z)|_{z=0} = P_E - P_2, \quad P_s(t, z)|_{z=h(t)} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{1}{\mu r} \frac{\partial P}{\partial z} \frac{\partial P}{\partial z} \Big|_{z=h(t)}$$

Тут $P_s(t, z)$ – розподіл тиску в рідинній фазі фільтрувального середовища від часу t і координати довжини робочого каналу z ; b, μ, r – коефіцієнти консолідації, динамічної вязкості і питомого опору середовища; P_E, P_2 – значення тисків в рідинній фазі на нижній межі формування осаду на фільтрувальній мембрані; $h(t)$ – поточне значення рухомої межі утворення осаду. Слід зауважити, що остання крайова умова (2) є умовою з рухомою межею, яка носить назву – умова Стефана. В початковий момент часу згідно з гідромеханічною концепцією віджиму, зовнішнє навантаження сприймається рідинною фазою, що власне і відображено у другому рівнянні крайової умови.

3. Початкові дані:

$P_E := 1, P_2 := 0.3$ — значення тисків в твердій фазі на нижній межі формування осаду на фільтрувального середовища;

$r := 10^{12}, \mu := 10^{-3}$ — значення кінетичних констант фільтраційного середовища;

$h := 0.2$ — початкове значення верхньої межі осаду, м.

$$PE := \begin{bmatrix} 30 & 0.21 \\ 60 & 0.28 \\ 90 & 0.31 \\ 120 & 0.32 \\ 150 & 0.325 \\ 180 & 0.33 \\ 210 & 0.333 \\ 240 & 0.337 \end{bmatrix} \quad \text{— матриця експериментальних значень тиску в твердій фазі фільтрувального середовища, перша колонка – час, друга – значення тиску в цей помент часу;}$$

З матриці експериментальних значень тиску створимо два масива даних:

— масив значень тиску

$$P_{\text{exp}} := PE^{<1>},$$

— масив значень часу

$$t := PE^{<0>};$$

— кількість досліджуваних експериментальних точок

$$n := 7, \quad i := 0..n.$$

4. Алгоритмізація математичного розв'язку моделі та чисельне моделювання

Розв'язок математичної моделі, описаної диференціальним рівнянням (1) та крайовими умовами (2)-(3) запишеться в такому вигляді:

$$P_s(t, z) = (P_E - P_2) \left(1 - \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{h(t)}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)} \right). \quad (4)$$

тут $\operatorname{erf}(\lambda)$ – інтеграл імовірності, функція яка є табульованою в спеціальних таблицях, і має такий вигляд:

$$\operatorname{erf}(\lambda) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\lambda e^{-\lambda^2} d\lambda,$$

причому, для неї справедливі вирази: $\operatorname{erf}(0) = 0, \operatorname{erf}(\infty) = 1$.

Визначаємо значення коефіцієнту консолідації осаду шляхом розв'язання зворотної задачі, використовуючи експериментальні значення процесу та аналітичний розв'язок моделі, що його описує. Отож, знайдемо масив коефіцієнтів консолідації як корені такого рівняння:

$$(P_E - P_2) \cdot \left(1 - \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{h}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)} \right) = P_{\text{exp}}. \quad (3)$$

Дане рівняння є трансцендентним, і для його розв'язку скористаємося MathCad функцією *root*:

$$F(b_{\text{exp}}, i) := (P_{\text{sol}} - P_2) \cdot \left(1 - \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{b_{\text{exp}} \cdot t_i}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{h}{2\sqrt{b_{\text{exp}} \cdot t_i}}\right)} \right) - P_{\text{exp}_i}$$

$$b_{\text{exp}} := 10^{-4} \quad b_{\text{exp}_i} := \operatorname{root}(F(b_{\text{exp}}, i), b_{\text{exp}}) \quad b := b_{\text{exp}_2}$$

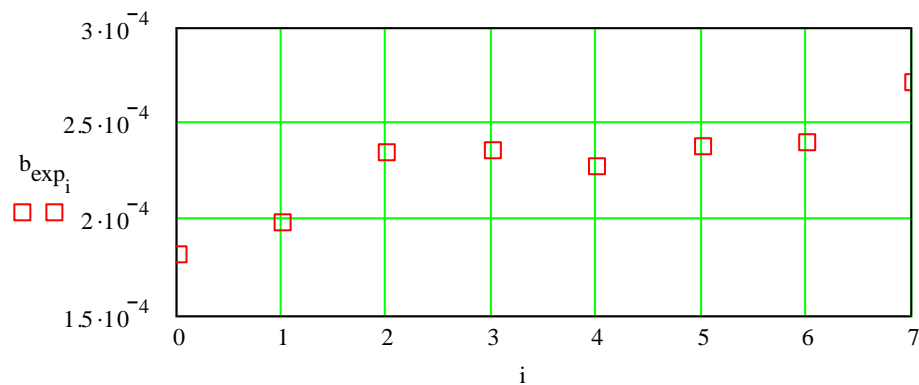


Рисунок 1 - Розподіл розрахункових коефіцієнтів консолідації

5. Перевірка математичної моделі на адекватність. Знаходимо розподіли тисків при проходженні процесу фільтрування за математичною моделлю для різних значень z і порівнюємо їх з експериментальними значеннями:

$$P(t, z) := (P_E - P_2) \cdot \left(1 - \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{h}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)} \right) \quad (4)$$

$$t_1 := 30, 60..240 \quad i := 0..7$$

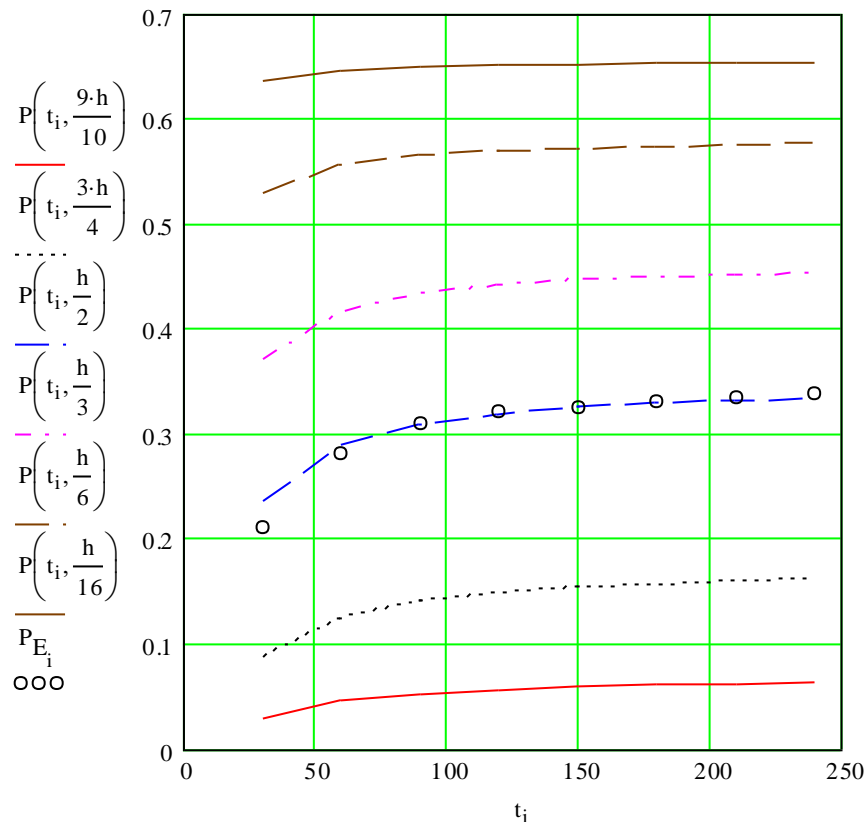


Рисунок 2 – Порівняння результатів математичного моделювання і фізичного експерименту

6. Знаходження розподілу висоти шару осаду при фільтрації в часу.

Для цього зробимо заміну змінних такого вигляді $\lambda = \frac{z}{2\sqrt{bt}}$:

$$P(\lambda) = (P_E - P_2) \left(1 - \frac{\text{erf}(\lambda)}{\text{erf}(\alpha)} \right); \quad (5)$$

тут $\alpha = \frac{h(t)}{2\sqrt{bt}}$.

Крайова умова (3) матиме такий вигляд:

$$\frac{1}{\mu r} \frac{dP}{d\lambda} = \frac{2b}{u} \alpha. \quad (6)$$

Продиференціювавши (5) та підставивши його в (6), після ряду перетворень одержимо рівняння для визначення параметру α :

$$\sqrt{\pi} \alpha \cdot \exp(\alpha^2) \text{erf}(\alpha) = u \frac{P_2 - P_E}{G}; \quad (7)$$

де $G = b\mu r$ - фізична величина, що носить назву модуля стискування осаду.

Рівняння (7) також трансцендентне.

$$\text{fnc}(\alpha) := \alpha \cdot \sqrt{\pi} \cdot \exp(\alpha^2) \cdot \text{erf}(\alpha) - u \cdot \frac{P_2 - P_{\text{sol}}}{G}$$

$$\alpha := 0.01 \quad \alpha := \text{root}(\text{fnc}(\alpha), \alpha) \quad \alpha = 4.854 \times 10^{-3}$$

$$t := 0, 30..240$$

$$h(t) := 2 \cdot \alpha \cdot \sqrt{b \cdot t} \quad h_0 := 0.1$$

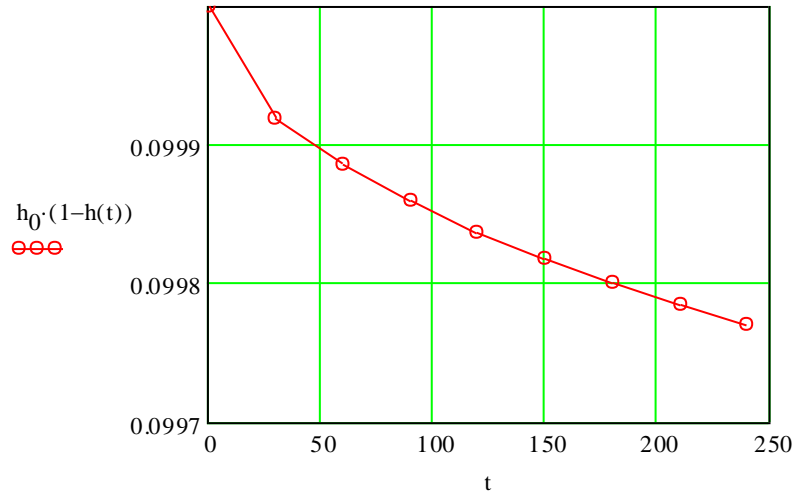


Рисунок 3 – Розподіл висоти шару осаду при віджимі

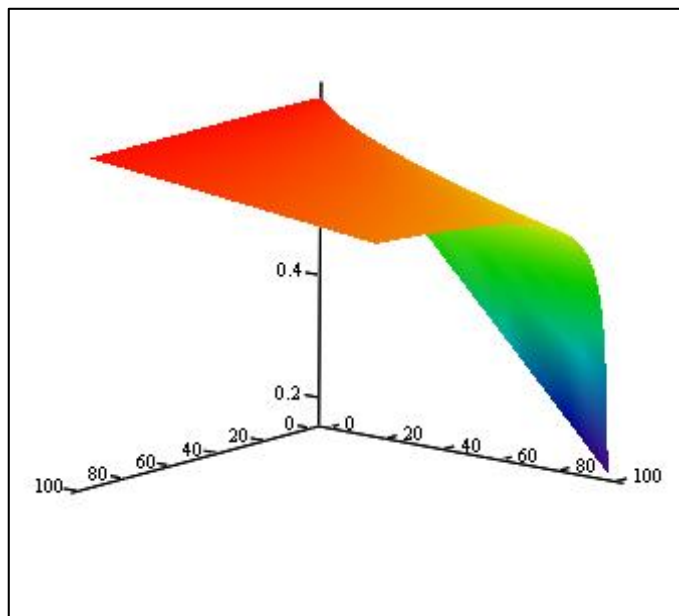
7. Просторовий розподіл тиску. Побудуємо тепер 3D-поверхню розподілу тиску при проходженні процесу віджиму (рис.5):

$$\tau := 0, 30..240 \quad z := 0, 0.001..0.1 \quad i := 0..100 \quad j := 0..100 \quad \Delta\tau := 20 \quad \Delta z := 0.00000$$

$$P(t, z) := (P_E - P_2) \cdot \left(1 - \frac{\text{erf}\left(\frac{z}{2 \cdot \sqrt{b \cdot t}}\right)}{\text{erf}\left(\frac{h(t)}{2 \cdot \sqrt{b \cdot t}}\right)} \right)$$

$$q_i := \Delta\tau \cdot (i + 1) \quad w_j := \Delta z \cdot (j + 1)$$

$$M_{i,j} := P(q_i, w_j)$$



М
Рисунок 5 – Поверхня розподілу тиску при віджимі

Висновки. Результатом проведеного дослідження з математичного моделювання процесу фільтраційної консолідації (віджиму вологомістких матеріалів) при прикладеному зовнішньому тиску на середовище є створення інструментарію для оцінки ефективності математичної моделі. За наявною матрицею експериментальних даних розраховано коефіцієнти консолідації, що відповідають даному експерименту, за рахунок чого забезпечується високий ступінь узгодженості математичної моделі з експериментом. Також знайдено розподіл висоти шару осаду в часі при процесі віджиму і здійснено побудову просторового графіку залежності тиску на межі осаду в часу і по біжучій координаті.

Тема: «Математичне моделювання технологічного нестационарного процесу адсорбції в технологіях очищення рідин»

1. Фізична постановка задачі. Розглядається один із технологічних процесів нестационарного масопереносу молекулярною адсорбцією і дифузією (закон Фіка-Нернста) в робочому середовищі, заповненому пористим матеріалом. Дифундована речовина (сахароза), яка знаходиться в робочому каналі обмеженого об'єму (довжиною h), під дією градієнтів концентрації, що виникають у середовищі, переноситься вздовж координати z і виходить на зовні робочого середовища (положення $z=0$). Графіки результатів натурних фізичних експериментів дослідження кінетики стосовно процесу адсорбційного очищення води від нітратів подані на рис.1.

2. Математична модель процесу. Такий процес молекулярної дифузії, що протікає в описаному дифузійному апараті (для очищення води) можна описати за допомогою одновимірної нестационарної математичної моделі дифузійного типу з використанням диференціальних рівнянь в частинних похідних у вигляді такої крайової задачі:

$$\frac{\partial C(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t} = D_0 \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2} C, \quad (1)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = c - \gamma a,$$

з початковою умовою:

$$C(t, z)|_{t=0} = C_0, \quad (2)$$

та крайовими умовами по координаті z :

$$C(t, z)|_{t=0} = 0; \quad \left. \frac{\partial C(t, z)}{\partial z} \right|_{z=h} = 0 \quad (3)$$

Тут $C(t, z)$, $a(t, z)$ – розподіли приведених концентрацій дифундованої речовини в макро і мікро порах адсорбційного середовища від часу t ; D_0, γ - ефективний коефіцієнт молекулярної дифузії та константа адсорбції, що визначають інтенсивність внутрішньої кінетики процесу дифузії і визначаються із даних фізичного експерименту; C_0 – початкове значення приведеної концентрації дифундованого продукту (сахарози) в дифузійному апараті.

3. Початкові дані:

- $t := 0, 4..200$ — діапазон зміни часу t для визначення неперервного розподілу концентрацій дифундованого продукту у водному розчині;
- $n := 50$ — кількість досліджуваних експериментальних точок;
- $t_0 := 0$ — початкове значення часу t для визначення дискретного (точкового) розподілу концентрацій дифундованого продукту;
- $\Delta t := 4$ — крок зміни часу t для визначення дискретного розподілу концентрацій очищуваного розчину;

$i := 0..n$ — діапазон зміни часу t для визначення дискретного розподілу
 $\tau_i := t_0 + i \cdot \Delta t$ концентрацій розчинюваного продукту;

$C_0 := 1$ — початкове значення приведеної концентрації дифундованого продукту;

$h := 1$ — значення приведеної довжини робочого каналу дифузійного апарату.

4. Параметри і залежності для симуляції фізичного експерименту:

$De_0 := 0.025$ — параметр, що симулює експоненціальний ріст(спад) концентрації;

$\alpha := 0.29581$ — параметр, що симулює ступінь імпульсивності випадкових вимірювань концентрацій;

$\text{rnd}(t)$ — генератор випадкових величин.

$m := 0..50$

$\lambda_m := \frac{2 \cdot m + 1}{2 \cdot h} \cdot \pi$ - спектр власних чисел для визначення C_{exp_i} .

$$C_{\text{exp}_i} := C_0 \cdot \frac{2}{h} \cdot \left[\sum_{m=0}^{20} \left[e^{-De_0 (\lambda_m)^2 \cdot \tau_i} \cdot \sin\left(\lambda_m \cdot \frac{h}{2}\right) \right] \right] \cdot (1 - \alpha \cdot \sin(\text{md}(\tau_i)))$$

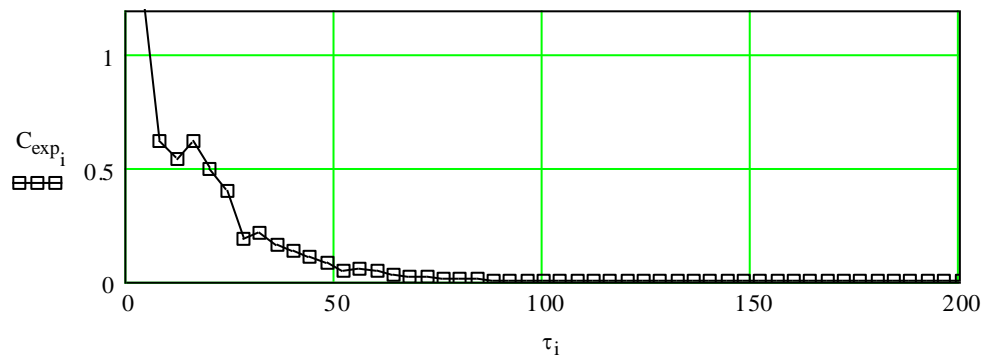


Рисунок 1 - Експериментальні дані розподілу концентрації дифундованого продукту

5. Алгоритмізація побудови математичного розв'язку моделі.

Аналітичний розв'язок математичної моделі (1)-(3) будемо з допомогою методу скінченних інтегральних перетворень Фур'є (Sin-Фур'є), визначеного такими інтегральними операторами:

- прямої дії:

$$F_s [C(t, z)] = \int_0^h C(t, z) \cdot \cos(\lambda_m z) dz = C_m(t), \quad (4)$$

- зворотньої дії:

$$F_s^{-1} [C(t, z)] = \frac{2}{h} \sum_{m=0}^{\infty} C_m(t) \cdot \cos(\lambda_m z) \equiv C(t, z), \quad (5)$$

- основної тотожності інтегрального перетворення диференціального оператора Лапласа $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$:

$$F_s \left[\frac{\partial^2 C(t, z)}{\partial z^2} \right] = -\lambda_m^2 \cdot C_m(t), \quad (6)$$

де $\cos(\lambda_m z)$ - власна (спектральна) функція інтегрального перетворення Фур'є, яка визначається з однорідної задачі Штурма-Ліувілля, що відповідає вихідній крайовій задачі (1)-(3); $\lambda_m := \frac{2 \cdot m + 1}{2 \cdot h} \cdot \pi, m = 0, \infty$ - власні числа інтегрального перетворення.

В результаті застосування інтегральних операторів (4)-(6) до крайової задачі (1)-(3) отримуємо її точний аналітичний розв'язок:

$$C(t, z) = C_0 \cdot \frac{2}{h} \sum_{m=0}^{\infty} \exp[-D_0 \cdot \lambda_m^2 \cdot t] \cdot \cos(\lambda_m z). \quad (7)$$

Значення коефіцієнту дифузії D_0 , що визначає внутрішню кінетику протікання процесу, визначаємо із експериментальних даних (рис.1) шляхом розв'язання зворотньої задачі.

6. Перевірка математичної моделі на адекватність. Перевірку математичної моделі на адекватність експериментальним даним (рис.1), здійснюємо в наступній послідовності. Використовуючи один із *solve*-блоків (функцію *root*) та математичний розв'язок зворотньої задачі, з допомогою Mathcad-процедури знаходиться значення D_0 :

$$D1 := 0.0075$$

$$D_i := \text{root} \left[C_{\text{exp}_i} - C_0 \cdot \frac{2}{h} \cdot \left[\sum_{m=0}^{10} \left[e^{-D1 \cdot (\lambda_m)^2 \cdot \tau_i} \cdot \sin\left(\lambda_m \cdot \frac{h}{2}\right) \right] \right], D1 \right]$$

тут D_i - i -ті (дискретні значення) компоненти коефіцієнту дифузії продукту, одержані на основі експериментальних розподілів концентрацій C_{exp_i} (рис. 1). Далі, шляхом усереднення одержаних значень D_i , визначаємо значення ефективного коефіцієнту дифузії D_0 , що відповідає вказаним експериментальним даним (рис.1).

$$D_0 := \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=0}^n D_i \quad D_0 = 0.022$$

та будуємо їх відповідні графічні розподіли (рис.2).

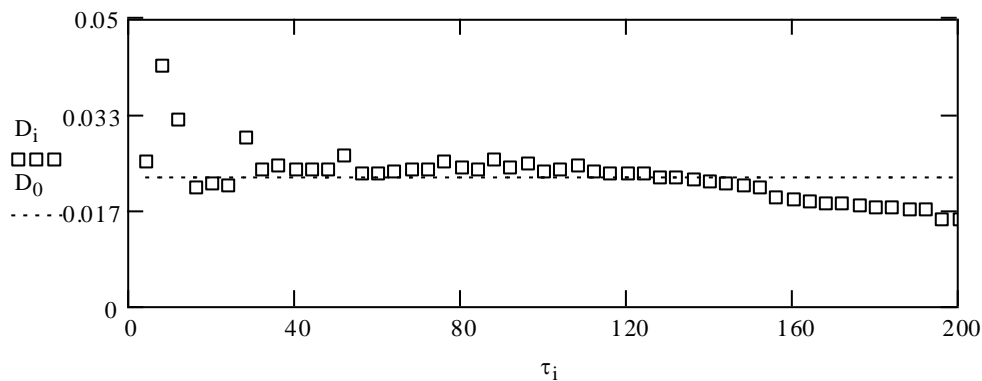


Рисунок 2 - Розподіл розрахункових залежностей коефіцієнта дифузії, їх середнього значення від часу

6. Чисельне та графічне моделювання кінетики протікання процесу.

Використовуючи результат перевірки математичної моделі на адекватність, визначивши значення ефективного коефіцієнту дифузії D_0 як розв'язок зворотної задачі (1)-(3), одержуємо модельний розподіл концентрації дифундованої речовини (рис.3), записаний у формі матриці і функції двох змінних:

$$C_{\text{mod}_i} := C_0 \cdot \frac{2}{h} \cdot \left[\sum_{m=0}^{20} \left[e^{-D_0(\lambda_m)^2 \cdot \tau_i} \cdot \sin\left(\lambda_m \cdot \frac{h}{2}\right) \right] \right]$$

$$C_{\text{mode}}(t, z) := C_0 \cdot \frac{2}{h} \cdot \sum_{m=0}^{10} \left[e^{-D_0(\lambda_m)^2 \cdot t} \cdot \sin(\lambda_m \cdot z) \right]$$

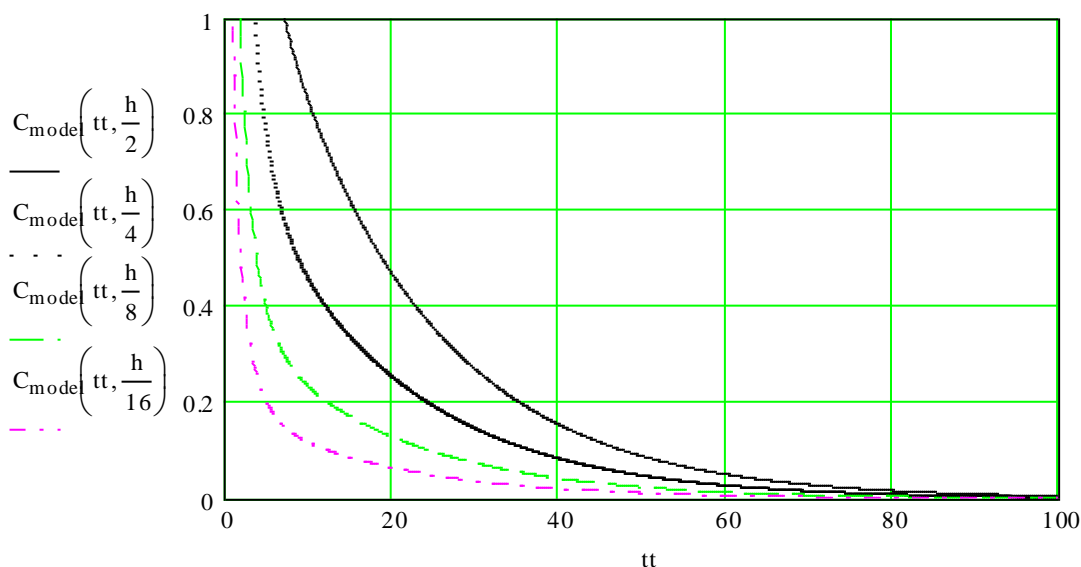


Рисунок 3 - Модельний розподіл концентрації розчиненої речовини (в твердій фазі)

7. Порівняльний аналіз з даними експерименту. Наклавши на графік модельного розподілу концентрацій (рис.3) експериментальні точки (рис.1), отримуємо порівняльну якісну картину щодо відповідності результатів

математичного моделювання (C_{mod_i}) результатам фізичного експерименту (C_{exp_i}) (рис.4). Як простежується з рис.4, результатами математичного моделювання відносно добре корелюються з результатами фізичного експерименту. Величини відносного відхилення (похибки) ΔC_i , визначаються формулою (5). На рис.5 показана графічна залежність похибки для оцінки ефективності математичної моделі.

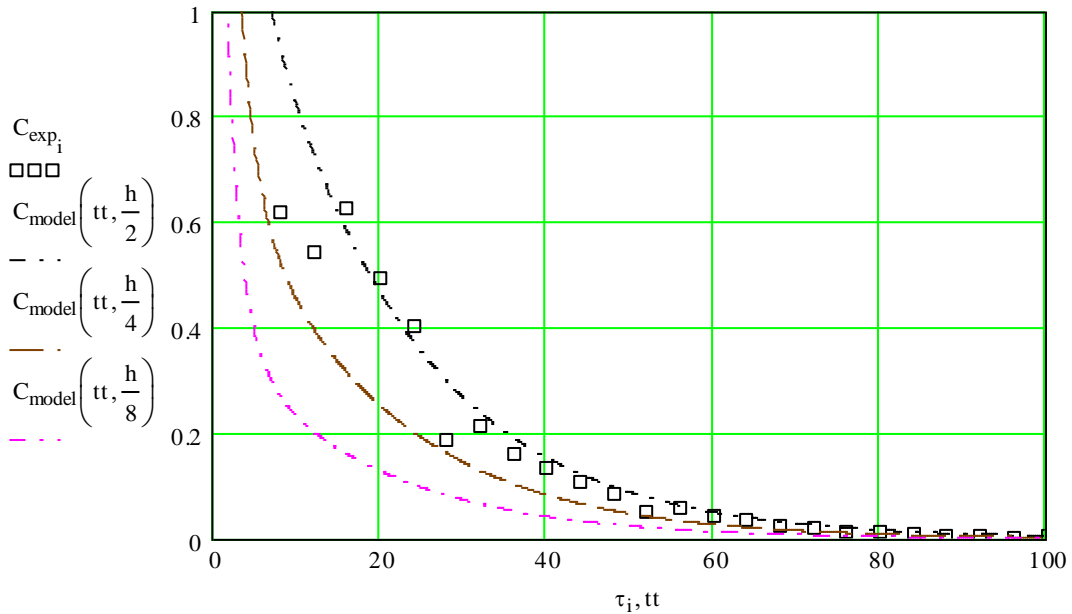


Рисунок 4 - Порівняльний аналіз модельного розподілу концентрації розчиненої речовини (забруднень води) з даними фізичного експерименту

$$\Delta C_i := \frac{|C_{mod_i} - C_{exp_i}|}{C_{mod_i}} \quad (5)$$

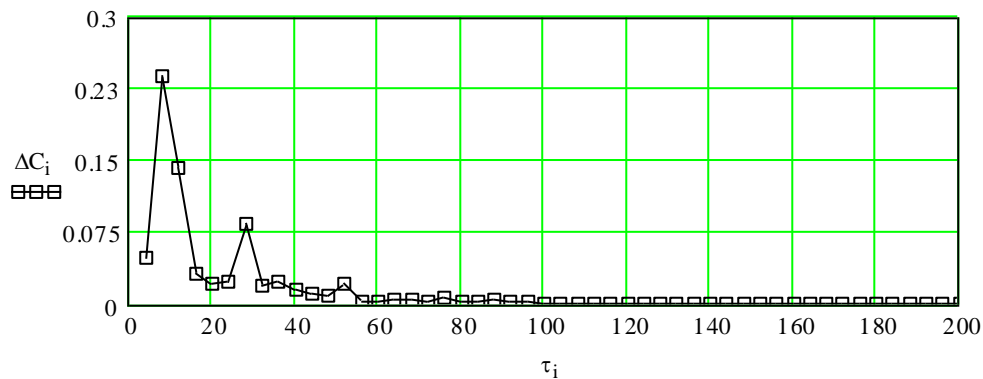


Рисунок 5 - Залежність похибки ΔC_i для оцінки ефективності математичної моделі

Як видно з рис.4, 5, на початковій стадії процесу (стадія експоненціального спуску — діапазон 0—30 одиниць), ми спостерігаємо деяке відхилення розрахункових і експериментальних даних. Максимальне значення відносної похибки тут складає біля 4%. Це пов'язане, очевидно, із значним впливом факторів нестационарності та інших випадкових чинників, що як правило мають місце на початковій стадії процесу. Наступний період тієї ж стадії

експоненціального спаду (діапазон 30-50 одиниць) характеризується незначним відхиленням модельних і експериментальних даних. Тут ми спостерігаємо відносно добру кореляцію розрахункових (модельних) і експериментальних параметрів. Максимальне значення відносної похибки тут складає біля 2%. Для проміжного діапазону (стадія пологого зниження концентрації, діапазон 50 -120 одиниць) спостерігаємо майже повне співпадання модельних і експериментальних значень. Найбільше значення відносної похибки для цього випадку не перевищує 0.8%. Для стадії стабілізації (діапазон 120 - 200 s) спостерігаємо практично повне співпадання модельних і експериментальних значень. Значення відносної похибки в окремих точках цього діапазону досягає 0.03-0.01%, що знаходиться в допустимих межах розрахунків інженерного аналізу.

Висновки. Результатом проведеного дослідження з математичного моделювання процесу адсорбції з використанням даних фізичного експерименту є розробка ефективного інструментарію для оцінки ефективності математичної моделі. Шляхом розв'язання зворотньої задачі розраховано точне значення ефективного коефіцієнту дифузії, що відповідає проведеним експериментам і забезпечує високий ступінь відповідності і узгодженості модельних і експериментальних розподілів концентрацій дифундованого продукту в рідкій фазі впродовж всієї тривалості протікання технологічного процесу. Такий якісний і кількісний аналіз кінетики процесу дозволить суттєво знизити витрати на проведення експериментальних досліджень, підвищити їх якість, отримати оптимальні енерго-зберігаючі технологічні параметри, що забезпечують інтенсифікацію процесу в цілому.

Перелік рекомендованої літератури

1. Петрик М. Mathcad-технології в інженерних задачах теорії розрахунку і конструювання. - Тернопіль: Вид-во ТДТУ ім. Ів.Пулюя.- 2000. - 154с.
2. Федоткин И.М Математическое моделирование технологических процессов .-К.: Вища школа, 1986.- 415с.
3. Самойленко А.М. Диференціальні рівняння та їх застосування.-К.: Вища школа, 1992. - 196с.
4. Булавацький В. М., Кривонос Ю. Г., Скопецький В. В. Некласичні математичні моделі процесів тепло – та масопереносу. К.: Наукова думка, 2005, – 282с.
5. Сергієнко І.В., Петрик М.Р., Хіміч О.М., Кане Д., Михалик Д.М., Леклерк С., Фресар Ж. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури / Національна академія наук України, Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова. – 2014. –210с.
6. Хіміч О.М., Петрик М.Р., Михалик Д. М., Бойко І.В., Попов О.В., Сидорук. В.А. Методи математичного моделювання та ідентифікації складних процесів і систем на основі висопродуктивних обчислень (нейро- та нанопористі кібер-фізичні системи із зворотніми зв'язками, моделі з даними розрідженої структури, паралельні обчислення).Київ: Національна Академія наук України. Інститут кібернетики імені В. В. Глушкова. –2019. - 188 с.