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

М.Р. Петрик, І.В. Бойко

Методи математичного моделювання в інженерних задачах

(практикум з використанням високопродуктивних технологій обчислень)

Навчальний посібник

Тернопіль 2024

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

Рецензент: Ясній Олег Петрович, 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 02.09.2024 р.

Петрик М.Р., Бойко І.В. Методи математичного моделювання в інженерних задачах (практикум з використанням високопродуктивних технологій комп'ютерної математики)

 Тернопіль : Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, 2024 – 50 с.

Даний посібник написано згідно програми дисуплін "Математичне моделювання в науково-технічних дослідженнях", "Системи з розподіленими параметрами", "Методологія та технологія створення складних програмних систем" та ін. з використанням підходів висопродуктивних обчислень, що читаються на кафедрі програмної інженерії факультету комп'ютерноінформаційних систем і програмної інженерії.

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

Зміст

стор.

Методика використання математичного пакету MathCad в математичному моделюванні	4
<i>Лабораторна робота №1</i> . Математичне моделювання процесів росту МБК	30
<i>Лабораторна робота №</i> 2. Математичне моделювання технологічного процесу фільтрації технологічних рідин для нестискуваного фільтраційного середовища при постійному перепаді тисків на фільтрувальній мембрані	35
<i>Лабораторна робота №3</i> . Математичне моделювання фільтраційної консолідації (відтиску вологомістких пористих матеріалів) при постійному і змінному прикладених зовнішніх тисках на середовище	38
<i>Лабораторна робота №4</i> . Математичне моделювання технологічного нестаціонарного процесу адсорбції в технологіях очищення води	46
Перелік рекомендованої літератури	52

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 інженерамконструкторам 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: $\sqrt{\mathbf{x}}$, 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;

- B 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 введені формул чи при створенні самої математичної моделі. Такі відлагоджувальні фраґменти доцільно залишати в готовому документі навіть для того, щоб ще раз аргументовано переконати уявного чи реального опонента у правильності розробленої моделі;
- В пакеті Mathcad інтеґрований дуже потужний математичний апарат, що дозволяє розв'язувати інженерні та науково-технічні проблеми без додаткового створення чи виклику зовнішніх процедур: розв'язування алґебраїчних рівнянь і рівнянь у частинних похідних та їх систем (задачі Коші і крайові задачі), пошук екстремумів функціональних залежностей

(задачі оптимізації), задачі векторної та матричної алґебри, спектральні задачі, інтегральні перетворення і багато інших;

- В Mathcad вбудована база даних з основних математичних і фізикохімічних 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, ґрадус по Цельсію чи Фаренґейту, фут, дюйм, тощо);
- В систему Mathcad також інтегровані засоби символьної 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 якого значення появиться в другому (середньому квадратику, (автоматичний режим якщо вивести курсор 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 кг · кг -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 наглядною. Коментарії записуються у прямокутній області, яку можна вставити у довільному вільному місці Mathcad-документу, наприклад, вище чи правіше від коментованого математичного виразу. Коментарі в Mathcad-документі відображаються на екрані дисплея шрифтом, відмінним від шрифту констант і змінних. По замовчуванню фон екрану є білий, колір виразів – чорний, а колір коментарів – синій. Користувач може змінити палітру кольорів на свій розсуд, налаштувавши її під свої особливості сприйняття кольору: команда Change Colors (змінити колір) в меню Windows (вікна).

По замовчуванню, натискуючи кнопки, користувач вводить математичні вирази (пише чорним по білому). Введення коментарів супроводжується натискуванням клавіші "" " клавіатури.

Поряд з оператором "=" для обчислення можна використовувати і оператор "→ " – оператор виведення символьного значення.

Для включення змінних у вираз їм необхідно задати деяке числове значення. Цю роботу в середовищі Mathcad виконують два оператори:

:=

Перший появляється на екрані дисплея після натискування відповідної клавіші "калькулятора" (див. Лівий нижній кут на рис.1) або після натискування клавіш Shift + : клавіатури. Оператор " = " також розміщений на другій панелі рис.2. У лівому квадраті операторів присвоєння вказується ім'я змінної (функції), а у правому – значення, яке їй присвоюється. Оператор ":=" поширює свій "вплив" вниз і вправо, а оператор " = " – на всі чотири сторони. Використання оператора " = " є дуже зручним для об'ємних документів і користувач змінює початкові дані і отримує результат без прокручування самого документу.

Mathcad-документ, як було відмічено раніше, є об'єднанням формул, Mathcad-команд і коментаріїв з позиції зручності, наглядності читабельності для користувача. Формули і коментарі в Mathcad-документі можуть складати одне ціле, яке не переривається при переміщенні фраґменту на інше місце. В цьому випадку документ містить тільки текстові поля, без окремих областей формул. Формули вставляються в кінці текстових полів командою **Math Region** меню **Insert**. На імена змінних в системі Mathcad накладаються деякі обмеження. Зокрема, не допускається використання пробілів, яке замінюється на символ підкреслення.

Нижче поданий приклад побудови фрагменту Mathcad-документу для розв`язування системи алгебраїчних рівнянь.

За ключовим словом Given (дано) користувач у явному вигляді записує систему рівнянь, для якої потрібно знайти розв'язок. При цьому ліві і праві частини рівнянь зв'язуються знаком "еквівалентно": жирним знаком дорівнює (див. другу панель на рис 2.) Розв'язати записану систему рівнянь можна з 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: "="

Цю задачу в середовищі Mathcad можна розв'язати також з допомогою матричного способу. Для цього на екрані дисплея набираємо присвоєння A:= П. Комп'ютер очікує яке значення буде введене в змінну А. Замість числа чи змінної вводимо матрицю шляхом натискуванням 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: **ОК** (створити), **Insert** (вставити) і **Delete** (вилучити). Для створення матриці А, натискуємо кнопку **ОК**. Після натискування на кнопку **ОК** справа від виразу А:= появляється обрамлене квадратними дужками каре чотирьох позицій для вводу інформації. Заповнюємо відповідні позиції числами. Далі набираємо В:= . При цьому на кнопку для роботи з матрицями не натискаємо оскільки відповідне вікно вже є на дисплеї. На другому полі замінюємо двійку на одиницю, натискуємо на кнопку **ОК**, отримуємо заготовку для вводу інформації у вектор В, та заповнюємо вектор В.

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

OR IGIN= 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 $A_{i,j}$, B_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 Mathcadдокументах можна використовувати для зручності пояснень і традиційно вживані текстові індекси, наприклад t_{onm} , P_{cm} , $y_{j\partial uh}$. 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 (КХ-У 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 a := 1 b := 2

2. Функції користувача

$$X(\alpha) := \frac{G(a + b) \cdot \cos(\alpha) \sin(\alpha)}{-a}$$
$$Y(\alpha) := \frac{Ga - \cos(\alpha)^2 \cdot Ga - \cos(\alpha)^2 \cdot Gb}{-a}$$
$$P(\alpha) := \frac{1}{2} \cdot G(a - b) \cdot \cos(\alpha)$$

3. Побудова графіку

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



α

Рисунок 5 - Приклад побудови графіку в декартових координатах

Перший вектор (в задачі це значення кута нахилу валу α) є арґументом. 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 Х(α), Υ(α), і Р(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).

Крок3: Побудова графіку. Цей крок складається з наступних кроків:

• Зображення на екрані рисунку заготовки графіка-прямокутника з чорними квадратиками 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 арґументу. 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: У та Х(b,a);

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

- **Крок 3**: Формування вектора першого аргументу b_i:=-5·m + 0.25·m·i ; де m- метри;
- Крок 4: Нумерація вузлів сітки-поверхні по другому арґументу ј:=0..40;
- **Крок 5**: Формування вектора другого аргументу $\alpha_j = 9* \text{deg}*j$ (deg- умовні градуси);
- Крок 6: Заповнення матриці (вона має ім'я М) 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 арґументів і отримати тривимірну стовпцеву діаґраму (



Рисунок 6b. 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 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** i **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":

Standard □ • 22 ■ """ = f(*) =	× ♣ Q, ♥ % ि ि ि ♥ ♀ ■ ‰ ۞ 100% ▼ ₽ ?
nsert Function	×
Function Category All Bessel Complex Numbers Curve Fitting Differential Equation Solving Expression Type File Access Finance Equiver Transform	Function <u>N</u> ame acos acosh acoth acoth acsc acsch Ai angle ■
acos(z)	
Returns the angle (in radians) who complex z.	ose cosine is z. Principal value for
	OK Insert Cancel

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 арґументами 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

Вбудована функція sin(1) = ■
 Вбудована функція у вигляді префіксного оператора sin 1 = ■
 Вбудована функція у вигляді постфіксного оператора 1 sin = ■

2. Вбудований оператор 2 + 2 =

3. Дублювання вбудованих операторів функціями користувача

$$Suma(a,b) := a + b$$
 $Dobutok(a,b) := a \cdot b$

Виклик функції користувача Suma(2, Dobutok(2, 2)) = ∎

Деревовидний оператор

$$Suma = \mathbf{I}$$
2 Dobutok
2 2 2

4. Переозначення вбудованої функції

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

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 одинакові 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. Mathcadдокумент 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 воєдино, 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 диференціяльних 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 диференціяльних 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):

$$\begin{cases} \frac{\partial y_i(t)}{\partial t} = f_i(y,t), i = \overline{1,m} \\ y_i(t)\Big|_{t=t_{nov}} = y_{H} \end{cases}$$

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

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

у_п - вектор початкових значень шуканих розв'язків;

t_{поч} - координата початкової точки інтегрування;

t_{кін} - координата кінцевої точки інтегрування;

n - число кроків інтеґрування;

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 арґументу t (їх задає користувач через величини t_{nov} , t_{kin} , i n) а наступні стовпці - вектори шуканих розв'язків $y_1, y_2, ..., y_m$.

Для дослідження жорстких механічних систем доцільно використовувати функції **Stiffb i 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 i Stiff** мають шість арґументів:

Stiffb $(y_{\pi}, t_{\pi_{0}}, t_{\kappa_{1}}, f, j)$

Stiff($y_{\Pi}, t_{\Pi O \Psi}, t_{\kappa i H}, f, j$)

Тут y_n - вектор початкових значень; $T_{nou}, t_{\kappa i \mu}$ - початкове і кінцеве значення координат інтервалу інтегрування (початкові значення y_n визначається в точці t_{nou}); 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 Якобіян 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 посуті не має як такої вбудованої мови програмування. В ньому знято обмеження на використання складних операторів для керуючих алґоритмічних конструкцій вибору і повторення. Алґоритмічні конструкції в середовищі Mathcad вводяться не традиційним набором через клавіатуру ключових слів **if, then, else, wnile** 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

Натискування 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

а := ∎ Стало

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 змінні.** Приклад, який показує різницю між глобальною і локальною зміною:



В середовищі Mathcad негативне зображення змінної **В** свідчить про те, що її значення поза програмою (фраґментом, що демонструється) (**B** \leftarrow **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 (фраґментах) 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 (фраґмент 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 перепровіркою – 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 Рунґе-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 арґументам функції rkfixed.

Клавіша і 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 $E \leftarrow F$ $F \leftarrow G$ Клавіша otherwise перетворює неповну альтернативу в повну: $C \leftarrow D$ if A > B $E \leftarrow F$ 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
$$\begin{split} F_{1} & = 1 \quad N = 500 \\ & F_{1} = 1 \quad N = 500 \\ & F_{1} = 1 \quad N = 500 \\ & F_{1} = 1 \quad N = 500 \\ & F_{1} = 1 \quad N = 100 \\ & F_{1} =$$
 $\mathbf{t}_1 \coloneqq \mathbf{0}$ $\mathbf{x}_1 \coloneqq \mathbf{1}$ $\mathbf{t}_2 \coloneqq \mathbf{1}$ $\mathbf{N} \coloneqq 500$ Початкові у мови

Рисунок 13 - Mathcad - процедура чисельного розв'язування диференціального

 $RK4(x_1, t_1, t_2, N, f) = \mathbf{I}$

 $\operatorname{Euler}(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{N}, \mathbf{f}) = \bullet$

Клавіша ^{for} вводить в програму цикл з параметром. Якщо заранє відомо, скільки разів необхідно виконувати деяку частину програми, то використовують не цикл While, a 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 is заголовком for $t \in t1$, t1+D..t2, а не цикл While. При цьому програму можна дещо спростити, вилучивши оператори t < t1 i t < t+D.

Диференціальне р івняння f(t, x) := xПочаткові у мови $t_1 := 0$ $x_1 := 1$ $t_2 := 1$ N := 500Euler $(x_1, t_1, t_2, N, f) := \begin{vmatrix} x \leftarrow x_1 \\ D \leftarrow \frac{t_2 - t_1}{N} \\ for \ t \in t_1, t_1 + D.. t_2 \\ x \leftarrow x + D \cdot (f(t, x)) \\ x \end{vmatrix}$

Euler $(x_1, t_1, t_2, N, f) = \bullet$ Рисунок 14 - Приклад використання циклу for

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

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

Оскільки варіант привабливий тим, що змінні m₁ і m₂ можуть набувати різних значень, навіть, можливо, що m₁<m₂.

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

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 у, від значення іншої змінної х, заданої десь вище в Mathcad-документі (в нас х:=10).

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\coloneqq 10 \\ \mathbf{y} &\coloneqq \begin{cases} \sqrt[3]{|\mathbf{x}|} & \text{if } \mathbf{x} < 0 \\ \mathbf{e}^{\mathbf{x}} & \text{if } 0 \leq \mathbf{x} \leq 10 \\ \int_{0}^{\mathbf{x}} \frac{\sin(t)}{t} \, dt & \text{if } \mathbf{x} > 10 \end{cases} \end{aligned}$$

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 символьної математики

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

- 1) команди символьної математики з меню Symbolic;
- 2) оператори символьних перетворень (Live Simbolics);
- 3) оптимізація чисельних розрахунків через символьні перетворення (Optimize).

Команди символьних перетворень із меню Symbolic

1. Обчислити - Evaluate

- 1.1. Обчислити в символах Evaluate Symbolicaly
- 1.2. В комплексному виді Complex Evaluation.
- 1.3. З 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. Поліномінальні 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 Matrics Operations.
 - 13.1. Транспонувати **Transpose Matrix.**
 - 13.2. Перетворити **Invert Matrix.**
 - 13.3. Визначник Determinant of Matrix.

14.Перетворення – Transform.

- 14.1. Перетворення Φ ур'є Fourier Transform.
- 14.2. Обернене перетворення Φ ур'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 символьної 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 символьної математики до виразів, що містять функції користувача. Необхідно, зокрема, вказувати змінні інтеґрування, 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 **Сору**. Команда **Replase** 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 наґромадження 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 " \rightarrow " символьний вивід значення змінної, функції або виразу, що є у ряді випадків зручнішим.

1. Взяття похідної

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}^{\mathrm{n}} \rightarrow \qquad \qquad \frac{\mathrm{d}^{3}}{\mathrm{d}x^{3}}^{\mathrm{n}} \rightarrow$$

2. Інтегрування

$$\int \frac{1}{\sin(\alpha \cdot x) \cdot \cos(\alpha \cdot x)} \, dx \rightarrow \qquad \qquad \int_{0}^{\infty} \frac{\sin(x)}{\sqrt{x}} \, dx \rightarrow$$

3. Сума

4. Добуток

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

5. Границя

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

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. Варінат перший

$$100\left(y - x^{2}\right)^{2} + (a - x)^{2} \qquad \text{функція Розенброка зі змінною а}$$

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

$$\frac{d}{dy}\left[100\left(y - x^{2}\right)^{2} + (a - x)^{2}\right] \rightarrow$$
Given
$$400\left(y - x^{2}\right) \cdot x - 2 \cdot a + 2 \cdot x = 0$$

$$200 \cdot y - 200 \cdot x^{2} = 0$$
Find(x, y) \rightarrow
2. Варінат другий
Given

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

$$MinEm(x, y) \rightarrow$$

Рисунок 17 - Приклади Mathcad - процедури розв'язування систем рівнянь різного типу у символьній 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 клавіш символьних 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.

M.×								
		Symbolic		×		Modifier		×
Æ		\rightarrow	$\bullet \rightarrow$	Modifiers	ľ	assume	real	
[:::]		float	complex	assume		RealRange	trig	
x =		solve	simplify	substitute				
[∰ ₩		factor	expand	coeffs				
<		collect	series	parfrac				
焽		fourier	laplace	ztrans				
αß		invfourier	invlaplace	invztrans		Ŧ		
	ľ	$M^{\intercal} \to$	$M^{-1} \rightarrow$	m →				

Рисунок 18 - Панель символьної математики Mathcad 2001 Professional.

Вибір (напрям) символьного перетворення задається натискуванням однієї із 28 кнопок. На рис.19 подані приклади застосування символьних 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 символьних 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 алґебраїчні рівняння не тільки через функцію **Find,** але і через операцію **Solve**, із панелі символьної математики.

1. Спрощення виразів $x^2 - y^2$

$$\frac{x-y}{x+y}$$
 simplify –

2. Перевірка чисел на простоту

```
2^{127} - 1 factor \rightarrow
```

3. Перетворення Лапласа $\cos(a \cdot t)$ laplace, $t \rightarrow$

- пряме

$$\frac{s}{\left(s^2+a^2\right)}$$
 invlaplace, $s \rightarrow$ - 3bopothe

4. Комплексне символьне перетворення

```
f(x) := \sin(x)
f(x) series , x, 4 \rightarrow
```

Рисунок 19 - Приклади застосування операторів панелі інструментів символьної математики

9 Оптимізація

Третій математики інструмент символьної 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 потрійного інтегралу, то Mathcad з виключеним режимом оптимізації (він включаеться з допомогою опції **Ontimize** 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 середовиша Mathcad 2001 Professional ключові слова optimize i 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 символьної 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:

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

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

з початковою умовою:

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

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;
- *Δt* :=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

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

4. Параметри і залежності для симуляції фізичного експерименту:

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

α := 0.001 — параметр, що симулює ступінь імпульсивності випадкових вимірювань концентрацій;

rnd(**t**) — генератор випадкових величин.

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

$$\Delta \lambda := -2 \cdot \sqrt{\frac{1}{4} \cdot (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{S}_0 + \mathbf{k}_2)^2 + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2 + \mathbf{S}_0}$$

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

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

$$N_{e}(t) := C_{0} \cdot \frac{\lambda_{2} - k_{1} \cdot S_{0}}{\Delta \lambda} \cdot e^{\lambda_{1} \cdot (1 + \alpha \cdot rnd(t)) \cdot t}$$

$$N_{experm_{i}} := C_{0} \cdot \frac{\lambda_{2} + k_{1} \cdot S_{0}}{\Delta \lambda} \cdot e^{\lambda_{1} \cdot (1 + \alpha \cdot rnd(tt_{i})) \cdot tt_{i}}$$



1 - Експериментальні дані розподілу концентрацій росту МБК

5. Алгоритмізація побудови математичного розв'язку моделі. Розв'язком математичної моделі (1)-(2) є залежність:

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

де значення констант швидкостей мікробіологічного росту МБК, що визначає

внутрішню кінетику протікання процесу, визначається із експериментальних даних (рис.1) шляхом розв'язання зворотньої задачі.

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

$$\mathbf{k}_{i} := \frac{1}{\mathbf{tt}_{i}} \cdot \ln \left(\left| \frac{\mathbf{N}_{0}}{\mathbf{N}_{experm_{i}}} \right| \right)$$

Тут k_i – точкові (дискретні) значення приведеної константи швидкості мікробіологічного росту, одержані на основі експериментальних розподілів концентрацій $N_{\exp erm_i}$ (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):

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

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 зворотньої задачі (1)-(2), одержуємо модельний розподіл концентрації мікробіологічного росту, (рис.3):

$$N_{\text{model}_{i}} := C_{0} \cdot \frac{\lambda_{2} + k_{1} \cdot S_{0}}{\Delta \lambda} \cdot e^{\lambda_{1} \cdot tt_{i}}$$
(4)



- 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 ($N_{\text{mod}\,el_i}$) результатам фізичного експерименту ($N_{\text{exp}\,erm_i}$), (рис.4):



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.

$$\Delta C_{i} := \left| \frac{N_{\text{model}_{i}} - N_{\text{exp}\,\text{em}_{i}}}{N_{\text{model}_{100}}} \right|$$
(5)



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 технологічий процес фідьтрації 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 освітляється (очищується від твердих включень) проходячи через фільтрувальну мембрану. Тверда фаза (частинки), рухаються разом з рідиною і осідають на фільтрувальній мембрані, 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:

$$\frac{dP}{dt} = b \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} \tag{1}$$

з крайовими умовами:

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

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{1}{\mu r} \frac{\partial P}{\partial z}\Big|_{z=h(t)}$$
(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 кінетичих констант фільтраційного середовища; h := 0.1 — початкове значення верхньої межі осаду, м;

<i>PE</i> :=	30	0.82
	60	0.76
	90	0.69
	120	0.67
	150	0.66
	180	0.654
	210	0.65
	240	0.645

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

3 матриці експериментальних значень тиску створимо два масива даних:

— масив значень тиску

$$P_{\rm exp} \coloneqq PE^{<1>}$$
,

— масив значень часу

$$t \coloneqq PE^{<0>}$$

- кільскість досліджуваних експериментальних точок

$$n \coloneqq 7, \qquad i \coloneqq 0..n.$$

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:

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

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

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

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

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

$$P_{2} + \left(P_{1} - P_{2}\right) \cdot \frac{erf\left(\frac{z}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}{erf\left(\frac{h}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)} = P_{exp}.$$
(5)

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

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

$$b_{exp} := 10^{-4}$$
 $b_{exp_i} := root(F(b_{exp}, i), b_{exp})$ $b := b_{exp_2}$



Рисунок 1 - Розподіл розрахункових коефіціентів 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:

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

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

37



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 $\lambda = \frac{z}{2\sqrt{bt}}$:

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

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

Крайова умова (3) матиме такий вигляд:

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

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

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

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

Рівняння (9) також трансцендентне.

$$\begin{aligned} &\operatorname{fnc}\left(\alpha\right) := \alpha \cdot \sqrt{\pi} \cdot \exp\left(\alpha^{2}\right) \cdot \operatorname{erf}\left(\alpha\right) - u \cdot \frac{P_{1} - P_{2}}{G} \\ &\alpha := 1 \qquad \alpha := \operatorname{root}\left(\operatorname{fnc}\left(\alpha\right), \alpha\right) \qquad \alpha = 0.015 \\ &t := 0, 30..240 \\ &h(t) := 2 \cdot \alpha \cdot \sqrt{b \cdot t} \qquad h_{0} := 0.1 \end{aligned}$$



Рисунок 3 – Розподіл висоти шару осаду при фільтації

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 наяавною матрицею експериментальних даних розраховано коефіціенти 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 технологічий процес фільтраційної консолідації (віджиму водомістких пористих матеріалів). Процес фільтраційного віджиму відбувається за законом Дарсі-Шірато. 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 консолідуються 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 фільтруваному 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:

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

з крайовими умовами:

$$P_{s}(t,z)\Big|_{z=0} = P_{E} - P_{2}, \qquad P_{s}(t,z)\Big|_{z=h(t)} = 0,$$

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{1}{\mu r} \frac{\partial P}{\partial z} \frac{\partial P}{\partial z}\Big|_{z=h(t)}$$
(2)

Тут $P_s(t, z)$ – розподіл тиску в рідинній фазі фільтрувального середовища від часу t і координати довжини робочого каналу z; b, μ, r - коефіціенти 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 кінетичих констант фільтраційного середовища;

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

<i>PE</i> :=	30 60 90 120 150 180 210	0.21 0.28 0.31 0.32 0.325 0.33 0.333	— матриця експериментальних значень тиску в твердій фазі фільтрувального середовища, перша колонка –час, друга – значення тиску в цей помент часу;
	210	0.333	$\mathbf{r}_{\mathbf{r}}$
	240	0.337	

З матриці експериментальних значень тиску створимо два масива даних:

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

— масив значень часу

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

— кільскість досліджуваних експериментальних
 $n := 7, \qquad i := 0..n.$

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:

точок

$$P_{s}(t,z) = \cdot \left(P_{E} - P_{2}\right) \left(1 - \frac{erf\left(\frac{z}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}{erf\left(\frac{h(t)}{2\sqrt{b \cdot t}}\right)}\right).$$
(4)

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

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{b}_{\exp} := 10^{-4}$$
 $\mathbf{b}_{\exp_i} := \operatorname{root}(\mathbf{F}(\mathbf{b}_{\exp}, \mathbf{i}), \mathbf{b}_{\exp})$ $\mathbf{b} := \mathbf{b}_{\exp_2}$



Рисунок 1 - Розподіл розрахункових коефіціентів 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:

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

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



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 $\lambda = \frac{z}{2\sqrt{bt}}$:

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

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

Крайова умова (3) матиме такий вигляд:

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

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

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

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

Рівняння (7) також трансцендентне.

$$\operatorname{fnc}(\alpha) := \alpha \cdot \sqrt{\pi} \cdot \exp(\alpha^{2}) \cdot \operatorname{erf}(\alpha) - u \cdot \frac{P_{2} - P_{sol}}{G}$$
$$\alpha := 0.01 \ \alpha := \operatorname{root}(\operatorname{fnc}(\alpha), \alpha) \qquad \alpha = 4.854 \times 10^{-3}$$
$$t := 0, 30..240$$
$$h(t) := 2 \cdot \alpha \cdot \sqrt{b \cdot t} \qquad h_{0} := 0.1$$



Рисунок 3 – Розподіл висоти шару осаду при віджимі

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

$$\begin{split} \tau := 0, 30..240 \qquad z := 0, 0.001..0.1 \qquad & i := 0..100 \qquad j := 0..100 \qquad \Delta \tau := 20 \qquad \Delta z := 0.00000 \\ P(t,z) := \left(P_E - P_2\right) \cdot \left(1 - \frac{\text{erf}\left(\frac{z}{2 \cdot \sqrt{b \cdot t}}\right)}{\text{erf}\left(\frac{h(t)}{2 \cdot \sqrt{b \cdot t}}\right)}\right) \\ q_i := \Delta \tau \cdot (i+1) \qquad & w_j := \Delta z \cdot (j+1) \\ M_{i,j} := P(q_i, w_j) \end{split}$$



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 наяавною матрицею експериментальних даних розраховано коефіціенти 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 нестаціонарного процесу адсорбції в технологіях очищення рідин»

1. Фізична постановка задачі. Розглядається один із технологічних процесів нестаціонарного 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 нестаціонарної математичної моделі дифузійного типу з використанням диференціальних рівнянь в частинних похідних у вигляді такої крайової задачі:

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

з початковою умовою:

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

та крайовими умовами по координаті z:

$$C(t,z)\Big|_{t=0} = 0;$$
 $\frac{\partial C(t,z)}{\partial z}\Big|_{z=h} = 0$ (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;

α := 0.29581 — параметр, що симулює ступінь імпульсивності випадкових вимірювань концентрацій;

rnd(**t**) — генератор випадкових величин.

$$m := 0..50$$

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



Рисунок 1 - Експериментальні дані розподілу концентрації дифундованого продукту

5. Алгоритмізація побудови математичного розв'язку моделі. Аналітичний розв'язок математичної моделі (1)-(3) будуємо з допомогою методу скінченних інтегральних перетворень Фур'є (Sin-Фур'є), визначеного такими інтегральними операторами:

- прямої дії:

$$F_{s}[C(t,z)] = \int_{0}^{h} C(t,z) \cdot \cos(\lambda_{m}z) dz = C_{m}(t), \qquad (4)$$

- зворотньої дії:

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

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

$$F_{s}\left[\frac{\partial^{2}C(t,z)}{\partial z^{2}}\right] = -\lambda_{m}^{2} \cdot C_{m}(t), \qquad (6)$$

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); $\lambda_m \coloneqq \frac{2 \cdot m + 1}{2 \cdot h} \cdot \pi, m = 0, \infty$ - власні числа інтегрального перетворення.

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

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

Значення коефіціенту 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 :

$$\mathbf{D}_{i} := \operatorname{root}\left[C_{exp_{i}} - C_{0} \cdot \frac{2}{h} \cdot \left[\sum_{m=0}^{10} \left[e^{\left[-D1 \cdot \left(\lambda_{m}\right)^{2} \cdot \tau_{i}\right]} \cdot \sin\left(\lambda_{m} \cdot \frac{h}{2}\right)\right]\right], D1\right]$$

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

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

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



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

6. Чисельне та графічне моделювання кінетики протікання процесу. Використовуючи результат перевірки математичної моделі на адекватність, визначивши значення ефективного коефіціенту дифузії D_0 як розв'язок зворотньої задачі (1)-(3), одержуємо модельний розподіл концентрації дифундованої речовини (рис.3), записаний у формі матриці і функції двох змінних:

$$\begin{split} & C_{\text{mod}_{i}} := C_{0} \cdot \frac{2}{h} \cdot \left[\sum_{m=0}^{20} \left[e^{\left[-D_{0} \left(\lambda_{m}\right)^{2} \cdot \tau_{i} \right]} \cdot \sin\left(\lambda_{m} \cdot \frac{h}{2}\right) \right] \right] \\ & C_{\text{mode}I}(t,z) := C_{0} \cdot \frac{2}{h} \cdot \sum_{m=0}^{10} \left[e^{\left[-D_{0} \left(\lambda_{m}\right)^{2} \cdot t \right]} \cdot \sin\left(\lambda_{m} \cdot z\right) \right] \end{split}$$



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 корелюватися 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 (забруднеь води) з даними фізичного експерименту



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 нестаціонарності 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 коефіціенту 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 експериментальих досліджень, підвищити їх якість, отримати оптимальні енерго-зберігаючі технологічні параметри,що забезпечуює інтенсифікацю процесу в цілому.

1. Петрик М. Mathcad-технології в інженерних задачах теорії розрахунку і конструювання. Тернопіль: Вид-во ТДТУ ім. Ів.Пулюя, 2000, 154с.

2. Lebovka N., Cieśla M., Petryk M., Vygornitskii N. Cooperative sequential adsorption of monomers on a square lattice in the presence of repulsive interactions between near neighbors. Physical Review E. 110, 064801 (2024). <u>https://doi.org/10.1103/PhysRevE.110.064801</u>

3. *Boyko I., Petryk M., Lebovka N.* Tunnel transport problem for open multilayer nitride nanostructures with an applied constant magnetic field and time-dependent potential: An exact solution. Physical Review B. Vol. 110, 045438. Published 24 July 2024. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.110.045438

4. Lebovka N.I., Bulavin L.A., Kovalchuk V.I., Petryk M.R., Vygornitskii N.V. Impact of ageing on structure of random sequential adsorption packings of discorectangles. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol. 57 (33), 335001(2024). DOI 10.1088/1751-8121/ad6652

5. Lebovka, N.I., Bulavin, L.A., Petryk, M.R., Vygornitskii, N.V. Random sequential adsorption of discorectangles covered with repulsive shells. Ukrainian Journal of Physics, 2024, 69(5), 357–36. 1DOI 10.15407/ujpe69.5.357

6. Lebovka, N.I., Petryk, M.R., Vygornitskii, N.V. Percolation connectivity in deposits obtained using competitive random sequential adsorption of binary disk mixtures. Condensed Matter Physics, 2024, 27(1), 13201. DOI10.5488/CMP.27.13201

7. *Boyko I., Petryk M., Lebovka N.* Application of the Lewis-Riesenfeld quantum mechanical invariant method for description of electron tunneling transport in nitride multilayer quantum well nanostructures. Physics Letters A. Vol. 489, 129152 (2023) https://doi.org/10.1016/j.physleta.2023.129152

8. 3. Самойленко А.М. Диференціальні рівняння та їх застосування.-К.: Вища школа, 1992, 196с.

9. Булавацький В. М., Кривонос Ю. Г., Скопецький В. В. Некласичні математичні моделі процесів тепло – та масопереносу. К.: Наукова думка, 2005, 282с.

10. 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.

11. 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.