

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня

бакалавр

(назва освітнього ступеня)

на тему: Розробка програмного забезпечення для реалізації математичних
моделей із ідентифікації параметрів обернених задач дифузії на основі мови
програмування C++ та хмарної технології Wolfram Cloud

Виконала: студентка IV курсу, групи СП-42
спеціальності

121 Інженерія програмного забезпечення

(шифр і назва спеціальності)

	(підпис)	Прачук М. В. (прізвище та ініціали)
Керівник	(підпис)	Бойко І. В. (прізвище та ініціали)
Нормоконтроль	(підпис)	Стоянов Ю. М. (прізвище та ініціали)
Завідувач кафедри	(підпис)	Петрик М.Р (прізвище та ініціали)
Рецензент	(підпис)	(прізвище та ініціали)

АНОТАЦІЯ

Кваліфікаційна робота бакалавра. Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, кафедра програмної інженерії, спеціальність 121 «Інженерія програмного забезпечення». ТНТУ, 2025, Сторінок 64, рисунків 20, презентація.

Тема: Розробка програмного забезпечення для реалізації математичних моделей із ідентифікації параметрів обернених задач дифузії на основі мови програмування C++ та хмарної технології Wolfram Cloud.

У даній кваліфікаційній роботі виконано дослідження процесів дифузії в мікропористих функціональних матеріалах, зокрема у зразках цеолітів із циліндричною геометрією. Проведено аналіз сучасних методів математичного моделювання та чисельної ідентифікації параметрів дифузійного масопереносу. Побудовано математичні моделі прямої та оберненої задач дифузії, які реалізовано у вигляді скінченно-різницевих схем. На основі розроблених моделей створено програмну систему в середовищі Wolfram Mathematica, яка дозволяє здійснювати аналіз експериментальних даних, ідентифікацію коефіцієнтів дифузії та верифікацію розрахункових результатів.

Запропонована програмна система включає модулі для попередньої обробки вхідних даних, реалізації оберненої задачі, побудови концентраційних профілів, а також 3D-візуалізації просторових розподілів концентрації. Проведено верифікацію результатів моделювання на основі експериментальних даних для бензену та гексану. Показано ефективність застосування розроблених програмних засобів для аналізу масопереносу в мікропористих зразках та можливість їх подальшого розширення.

Ключові слова: коефіцієнт дифузії, мікропористі матеріали, математичне моделювання, обернена задача, дифузія, експериментальні дані, програмна система.

ABSTRACT

Bachelor's Qualification Thesis. Ternopil National Technical University named after Ivan Puluj, Department of Software Engineering, Specialty 121 "Software Engineering". TNTU, 2025. 64 pages, 20 figures, presentation.

Title: Development of Software for the Implementation of Mathematical Models for Identifying Parameters of Inverse Diffusion Problems Using C++ and Wolfram Cloud Technology.

This bachelor's qualification thesis investigates diffusion processes in microporous functional materials, particularly in zeolite samples with cylindrical geometry. A comprehensive analysis of modern methods for mathematical modeling and numerical identification of diffusion mass transfer parameters was conducted. Mathematical models of the direct and inverse diffusion problems were constructed and implemented using finite difference schemes. Based on these models, a software system was developed in the Wolfram Mathematica environment, enabling the analysis of experimental data, identification of diffusion coefficients, and verification of the computed results.

The proposed software system includes modules for preprocessing input data, solving the inverse problem, generating concentration profiles, and providing 3D visualization of spatial concentration distributions. The modeling results were verified using experimental data for benzene and hexane. The effectiveness of the developed software tools for analyzing mass transfer in microporous samples and their potential for further extension was demonstrated.

Keywords: diffusion coefficient, microporous materials, mathematical modeling, inverse problem, diffusion, experimental data, software system.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ.....	8
ВСТУП.....	9
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ ТА АКТУАЛІЗАЦІЯ ПОСТАВЛЕНОЇ ПРОБЛЕМИ	11
1.1. Аналіз моделей та методів, які застосовуються до ідентифікації параметрів технологічних задач. Застосування методів інженерії програмного забезпечення у системах моніторингу тепло- і масопереносу.....	11
1.2. Аналіз програмних засобів та систем комп'ютерної математики, що застосовуються до моделювання прямих та обернених задач дифузії у мікропористих матеріалах.....	17
1.3 Постановка задачі. Отримання експериментальних даних із дифузії в досліджуваних зразках	19
РОЗДІЛ 2. РОЗРОБКА ПРЯМОЇ ТА ОБЕРНЕНОЇ ЗАДАЧ ДЛЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ ДИФУЗІЇ У МІКРОПОРИСТИХ МАТЕРІАЛАХ. ПРОЕКТУВАННЯ АРХІТЕКТУРИ ПРОГРАМНОЇ СИСТЕМИ РЕАЛІЗУЮЧОЇ МАТЕМАТИЧНУ МОДЕЛЬ	22
2.1. Математична модель дифузії мікропористих матеріалах. Опис процесу дифузії всередині мікропор та масивному середовищі кристалічного зразка	22
2.2 Числова реалізація математичної моделі дифузії у мікропористих зразках. Розробка різницевої схеми для прямої та оберненої задач дифузії.....	24
2.2.1 Різницева схема для оберненої задачі дифузії за наявності повного набору даних просторових та часових розподілів концентрації в зразку.....	24
2.2.2 Різницева схема для оберненої задачі дифузії за відсутності набору даних просторових та часових розподілів концентр. в мікропорах зразка.....	28

2.3 Розробка архітектури програмної системи, виконуючої математичне моделювання процесу дифузії та ідентифікації параметрів робочого агента із експериментальних параметрів	32
РОЗДІЛ 3. ПРАКТИЧНА РЕАЛІЗАЦІЯ ПРОГРАМНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ ПРЯМОЇ ТА ОБЕРНЕНОЇ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ДИФУЗІЇ У МІКРОПОРИСТИХ ЗРАЗКАХ.....	37
3.1 Підготовка та обробка даних з експериментально отриманого процесу дифузії. Сортування даних у вигляді доступному для реалізації оберненої сіткової задачі.....	37
3.2 Робота з експериментальними кривими дифузії, отримання коефіцієнтів дифузії на довільних часових інтервалах. Порівняння різного типу зразків та робочих агентів. Перевірка та верифікація математичної моделі оберненої задачі дифузії.....	41
3.3 Робота з програмною системою реалізуючої пряму математичну модель дифузії. Використання параметрів дифузії отриманих з оберненої задачі дифузії. Налаштування та оптимізація роботи програмної системи. Оцінка її надійності, гнучкості та області застосування.....	44
РОЗДІЛ 4. БЕЗПЕКА ЖИТТЄДІЯЛЬНОСТІ, ОСНОВИ ОХОРОНИ ПРАЦІ	47
4.1 Долікарська допомога при ураженні електричним струмом.....	47
4.2 Вимоги ергономіки до організації роб. місця оператора ПК, агрегату	49
ВИСНОВКИ.....	54
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	55
ДОДАТКИ.....	59
Додаток А. Програмна реалізація побудови просторової залежності концентрації для процесу масопереносу у циліндричному зразку	60
Додаток Б. Тези доповіді на конференції	61
Додаток В. Диск з роботою	64

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ,
СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

$C(t, z)$ – концентрація робочого агента в масивному середовищі, кг/м^3

$Q(t, x, z)$ – концентрація агента всередині мікропори, кг/м^3

D_1 – коефіцієнт дифузії в масивному середовищі, $\text{м}^2/\text{с}$

D_2 – коефіцієнт дифузії всередині мікропори, $\text{м}^2/\text{с}$

R – радіус мікропори, м

l – довжина зразка, м

t – час, с

x, z – координати в просторі, м

ВСТУП

Обробка значної кількості даних, які отримуються в ході експериментальних досліджень більшості точних та природничих дисциплін, а також під час супроводу технологічних процесів фактично завжди приводить до необхідності встановлення загальної сукупності активних параметрів, що виступають в якості чинників, визначаючих просторові залежності та часові залежності досліджуваних процесів. Такі проблеми вже давно вийшли за межі класичних дисциплін та напрямів, для ефективної роботи доводиться застосовувати та розробляти нові методи, які належать до предметних областей інженерії програмного забезпечення та комп'ютерних наук.

Згадані проблеми в останні роки все частіше виникають про дослідженні процесів дифузійного переносу в різноманітних функціональних матеріалах – цеолітах, що мають складну мікропористу структуру. Робота із даними, отриманими від досліджень таких матеріалів потребує спеціалізованого програмного забезпечення, яке часто слід розробляти під кожен тип матеріалів окремо і яке характеризується слабкою варіативністю до маніпуляції вхідними параметрами.

Стає очевидним, що щоб підійти до вирішення проблеми розробки такого програмного забезпечення слід виконати розбиття його на складові підсистеми, а самий процес розбити на декілька кроків. В загальному випадку необхідні параметри можуть бути встановлені у кілька етапів. На першому етапі слід виконати побудову математичних моделей процесів й шляхом підстановки експериментально отриманих даних виконати розв'язати обернену задачу, що дозволить ідентифікувати необхідні параметри, зокрема коефіцієнти дифузії. На другому етапі слід використати отримані параметри для верифікації більш загальних моделей, змінюючи вхідні параметри матеріалів, їхні прецизійні характеристики. Завершальним етапом є розробка архітектури програмної системи, інтерфейсу забезпечуючого взаємодію користувачів із програмною системою, що

дозволить здійснити її специфікацію та в певній мірі забезпечити її загальний характер.

В даній дипломній роботі згадані проблеми вирішено шляхом розробки математичних моделей для прямої та оберненої задач дифузії у мікропористих функціональних матеріалах із циліндричною геометрією. Для розроблених математичних моделей виконано їх представлення у вигляді скінченно-різницевих схем, що апроксимують вихідні рівняння масопереносу, початкові та граничні умови до них. Розроблено архітектуру програмної системи, що полягає у розподіленій роботі із її компонентами, зміні вхідних параметрів зразків, можливості обробки вхідних даних, необхідних для роботи із проблемами із ідентифікації параметрів. Передбачено можливість прямого використання ідентифікованих параметрів дифузії у прямому математичному моделюванні масопереносу вуглеводнів для різноманітних зразків, а також можливість подальшого ускладнення цих моделей як і самого функціоналу програмної системи.

РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ ТА АКТУАЛІЗАЦІЯ ПОСТАВЛЕНОЇ ПРОБЛЕМИ

1.1. Аналіз моделей та методів, які застосовуються до ідентифікації параметрів технологічних задач. Застосування методів інженерії програмного забезпечення у системах моніторингу тепло- і масопереносу

Дифузійні процеси та тепло- і масо- перенос у різноманітних метаматеріалах відіграють значну роль у сучасній інженерній діяльності людини. Зокрема такі матеріали, які містять у своїй структурі мікропористі утворення (так звані цеоліти [1-3]) знайшли своє застосування у різноманітних напрямках твердотільної електроніки [4], оптоелектронної техніки [5], фільтрах та очисниках повітря від шкідливих викидів промислових виробництв [6, 7], а також в двигунах внутрішнього згорання [8, 9].

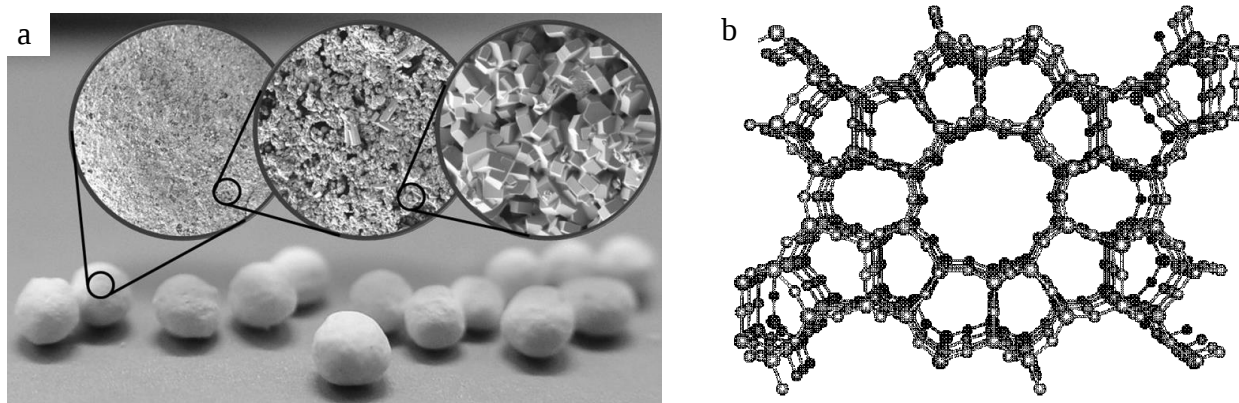


Рис. 1.1 – Приклад нанопористого матеріалу – цеоліт ZSM-5 (а. макрознімок, б. мікроскопічна структура)

Приклад типового мікропористого матеріалу наведено на рис. 1, де подано макро- та мікроструктуру типового цеоліту ZSM-5, що має дуже поширене застосування у системах очистки відпрацьованих газів [7-9]. В загальному випадку для промисловості інженерне застосування цеолітів пов'язано з значною енергозатратністю, де необхідністю контролю за процесами дифузійного тепло- та

масопереносу у реальному режимі часу. Оскільки безпосередньо на практиці доводиться мати справу з різноманітними сумішами газів – це здебільшого вуглеводні, а також органічні сполуки такі, як: бензен чи гексан, то необхідно мати завжди можливість безпосередньо встановити, з якими саме сполуками ми маємо справу. Це дозволить оптимізувати роботу використовуваних фільтрів та очисників та допоможе контролювати сам дифузійний процес. Згадані вище речі не можуть бути розв’язані в межах застосування елементарних електронних пристроїв чи датчиків. Такі задачі в останні десятиліття вже давно переросли в галузь інформаційних технологій та безпосередньо становлять одну з швидко прогресуючих предметних областей інженерії програмного забезпечення [10-12]. Це насамперед пов’язано з такими чинниками. Насамперед процеси дифузійного переносу летких сумішей вуглеводнів потребують побудови актуальних математичних моделей, які б дозволяли описувати ці процеси в широкому діапазоні зміни параметрів задач на довільних інтервалах часу. Як було встановлено [10, 11] такі базові побудови математичних моделей потребують або чисто числового їх розв’язання або вимагають застосування спеціального математичного апарату, зокрема інтегральних перетворень Бесселя, Ханкеля чи Неймана [10-12].

Один із базових підходів до побудови прямих математичних моделей дифузійного переносу у цеолітних зразках було запропоновано авторами праць [10-12]. В цих працях окрім побудови математичних моделей було запропоновано архітектуру програмного комплексу, що дозволяє широко варіювати вхідними параметрами математичних моделей та досліджуваних зразків. З використанням цього програмного забезпечення було виконано розпаралелення процесу обчислення концентраційних кривих та враховано можливість наявності у дифундованій компоненті сумішей кількох газів. Архітектура програмного комплексу у пропонованій роботі дозволяє виділити окремий процес або окреме ядро процесора для розрахунку концентрації кожної з компонент. Приклад такої архітектури подано на рис. 1.2.

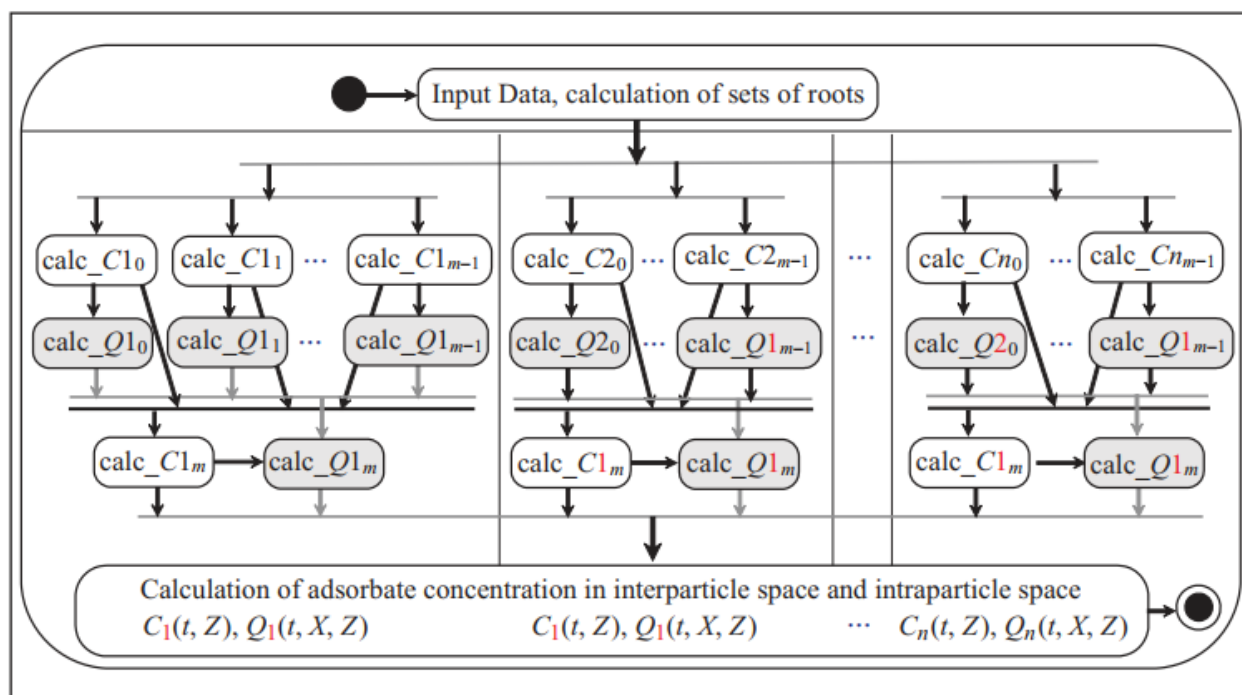


Рис. 1.2 – Архітектура програмного комплексу для розподілених та розпаралелених обчислень концентраційних розподілів

На рис. 1.2 подана UML-діаграма діяльності паралельного обчислювального процесу для програмної реалізації моделі компететивної абсорбції.

Обчислювальні шаблони PPL є такими:

```

vector<float> a_t; // vector of time values
vector<float> a_Z; // vector of particle position values in nanolayer
vector<float> a_X; // vector of values of dimensionless radius of nanoporous
  
```

Окремі заголовні класи та імена об'єкти предметної області мають такий опис:

```

Macro_Pores_Concentration oC1, oC2; // distribution of concentrations of
components
// (1,2) in interparticle space
Nano_Pores_Concentration oQ1, oQ2; // distribution of concentrations of
components
// (1,2) in intraparticle space
  
```

Паралельні структури даних на основі класу concurrent sub vector PPL, що використовується в алгоритмах паралельних обчислень:

```

concurrent_vector<Macro_Pores_Concentration> v_cZ;
concurrent_vector<tuple<int, concurrent_vector
                    <Macro_Pores_Concentration_C> > > v_c_t_Z;
concurrent_vector<concurrent_vector<Macro_Pores_Concentration> >,
concurrent_vector<Nano_Pores_Concentration> > > mass_flow;

```

Згаданий програмний комплекс та суміжні з ним можуть бути застосованими до складних технологічних процесів з попередньої їх модифікацією. Побудова кожного з компонентів таких програмних комплексів здійснювалося за допомогою середовища Wolfram Mathematica, компіляція кінцевого програмного продукту може здійснюватися за допомогою довільної С-подібної мови програмування для прикладу це може бути С або С++ (в пропонованих працях [11] використовувалася мова С#, з метою зручності). Слід зауважити, що використання системи комп'ютерної математики Wolfram Mathematica дає фактично необмежені можливості в плані складності досліджуваних та розраховуваних систем оскільки забезпечується можливість використання хмарних обчислень за допомогою Wolfram Cloud [13].

Сучасні підходи орієнтовані на розробку математичних моделей, що дозволяють точно ідентифікувати фізичні параметри, такі як коефіцієнти теплопровідності, густина, в'язкість та інші. Для цього використовуються методи чисельної оптимізації, зворотні задачі, байєсівські методи, машинне навчання, а також спеціалізоване програмне забезпечення

Основні моделі для ідентифікації параметрів технологічних процесів обираються залежно від типу задачі, характеристик системи і доступних даних:

- Фізичні (аналітичні) моделі. Використовуються при наявності детальної інформації про систему, коли фізичні закони добре описують процеси.
- Моделі тепло- і масопереносу створюються на основі рівнянь теплопровідності, рівнянь Нав'є-Стокса, рівнянь дифузії.
- Емпіричні моделі. Ефективні для систем з високою варіативністю параметрів, де фізичний опис складний або недостатньо точний. Для їх побудови використовують статистичні методи аналізу даних.

- Моделі типу чорної скриньки (наприклад, нейронні мережі). Застосовуються, коли потрібно швидко оцінювати параметри в реальному часі. Чорноящиківі моделі забезпечують високу точність, але не розкривають фізичних закономірностей, що може бути обмеженням таких математичних моделей.
- Методи ідентифікації параметрів. Для ідентифікації параметрів у технологічних задачах тепло- і масопереносу застосовуються такі методи:
- Методи чисельної оптимізації. Сюди входять методи градієнтного спуску, методи Ньютона-Рафсона, генетичні алгоритми. Вони використовуються для мінімізації різниці між виміряними та розрахованими даними, що дозволяє визначити параметри системи.
- Метод найменших квадратів (МНК). Застосовується для лінійних та нелінійних математичних моделей. Зазвичай цей метод є ефективним у поєднанні з ітеративними процедурами, такими як метод Ньютона або градієнтні методи.
- Зворотні задачі. Їх суть полягає у визначенні параметрів шляхом аналізу вихідних даних. Вони широко використовуються для визначення теплофізичних параметрів матеріалів та характеристик теплообміну.
- Байєсівські методи. Дозволяють вводити апріорні ймовірнісні знання про систему, що допомагає стабілізувати процес ідентифікації. Байєсівські підходи ефективні в умовах високої невизначеності або коли обсяг даних обмежений.
- Методи машинного навчання. Сюди належать методи глибокого навчання, регресійні моделі, дерева рішень. Такі моделі навчаються на великих масивах даних, що дозволяє їм виявляти складні залежності між параметрами.

Застосування методів інженерії програмного забезпечення. Інженерія програмного забезпечення має ключову роль у розробці систем моніторингу та аналізу для процесів тепло- і масопереносу. Використовуються такі основні підходи:

- Модульне проектування і об'єктно-орієнтований підхід. Забезпечує гнучкість і масштабованість, дозволяючи ефективно управляти складними процесами.

Методи тестування та валідації. Вони є важливі для підтвердження достовірності моделей і точності ідентифікації параметрів. Наприклад, стрес-тестування допомагає оцінити стійкість системи реалізуючої математичну модель під час інтенсивного використання.

- Реалізація оптимізаційних алгоритмів та чисельних методів. Спеціалізовані програмні системи, такі як MATLAB, Wolfram Mathematica, а також спеціалізовані бібліотеки на основі мови програмування Python (наприклад, SciPy, TensorFlow) підтримують розв'язання складних рівнянь і задач оптимізації, що особливо важливо для точного визначення параметрів.
- Інтеграція з системами реального часу. У випадку систем моніторингу тепло- і масопереносу є потреба в інтеграції з сенсорами і обладнанням. Інженерні методи дозволяють побудувати архітектуру для обробки великої кількості даних у реальному часі, використовуючи паралельні обчислення, що особливо важливо для промислових додатків. Системи контролю та візуалізації. Програмне забезпечення для моніторингу (наприклад, SCADA-системи) надає візуальні інструменти для аналізу процесів тепло- і масопереносу, що спрощує контроль і дозволяє оперативно реагувати на відхилення.

Загалом, застосування методів інженерії програмного забезпечення та ідентифікаційних моделей у задачах тепло- і масопереносу дозволяє значно підвищити ефективність управління технологічними процесами. Завдяки сучасним чисельним методам, машинному навчанню та інтеграції з реальними виробничими системами стає можливим не тільки точно визначати параметри, але й адаптивно налаштовувати системи під потреби виробництва.

1.2. Аналіз програмних засобів та систем комп'ютерної математики, що застосовуються до моделювання прямих та обернених задач дифузії у мікропористих матеріалах

Для програмної реалізації задач кінцевого математичного моделювання зручно застосовувати як прямі обчислювальні програмні системи, так і пакети складних комп'ютерних програм. Як показує практика [14-18] найбільш ефективними програмними засобами в плані моделювання процесів що відбуваються у низьковимірних системах є такі пакети комп'ютерної математики: Matlab, Maple, Wolfram Mathematica, Scilab, а також мова програмування Python, яка разом із своїми пакетами розширень таки як NumPy і SciPy розпочинала свою еволюцію як системи комп'ютерної алгебри.

Головною перевагою згаданих вище програмних систем є чітка та інтерактивна візуалізація розвинутих математичних моделей, можливість застосування динамічних змінних. Крім того за своєю взаємодією із користувачем середовище комп'ютерної математики є фактично середовищами та засобами об'єктно-орієнтованого програмування. Єдина різниця в парадигмі об'єктно-орієнтованого програмування, що застосовуються у системах комп'ютерної математики є те що фактично вони є мовами програмування вищого рівня, а об'єктами тут виступають специфічні шаблони, які за своєю суттю є аналітичними виразами, об'єктами графіки, відео чи навіть окремими процедурами, що забезпечують роботу із параметрами вихідної математичної моделі на Рис. 1.3 а, б, в подано приклади шаблонів вбудованих об'єктів у системах Matlab, Maple, Wolfram Mathematica.

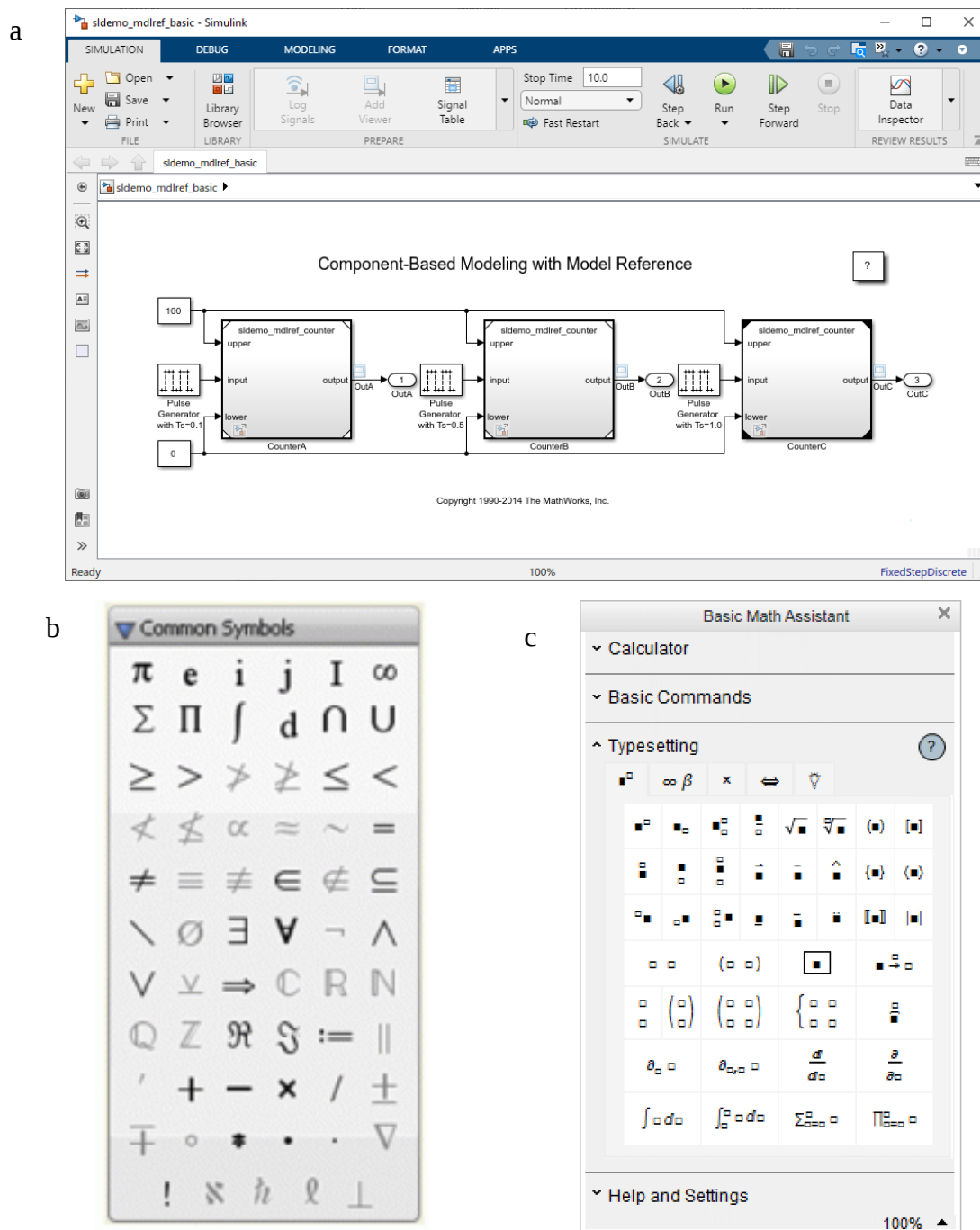


Рис. 1.3 Наочна різниця між палітрами вбудованих символів та середовищами моделювання Matlab (Simulink (a)), Maple (b), Wolfram Mathematica (c)

1.3 Постановка задачі. Отримання експериментальних даних із дифузії в досліджуваних зразках

Експериментальні дані, які стосуються масопереносу у зразках цеоліту при різних температурних режимах зазвичай стосуються дифузії сумішей газів [8-10], часто це суміші летких вуглеводнів: метану і пропану, або ж бензену та гексану, що взяті у різних пропорціях. Основною проблемою таких досліджень є те, що експериментально чи якимось чином технологічно неможливо встановити реальне співвідношення між компонентами робочого агента та домішками.

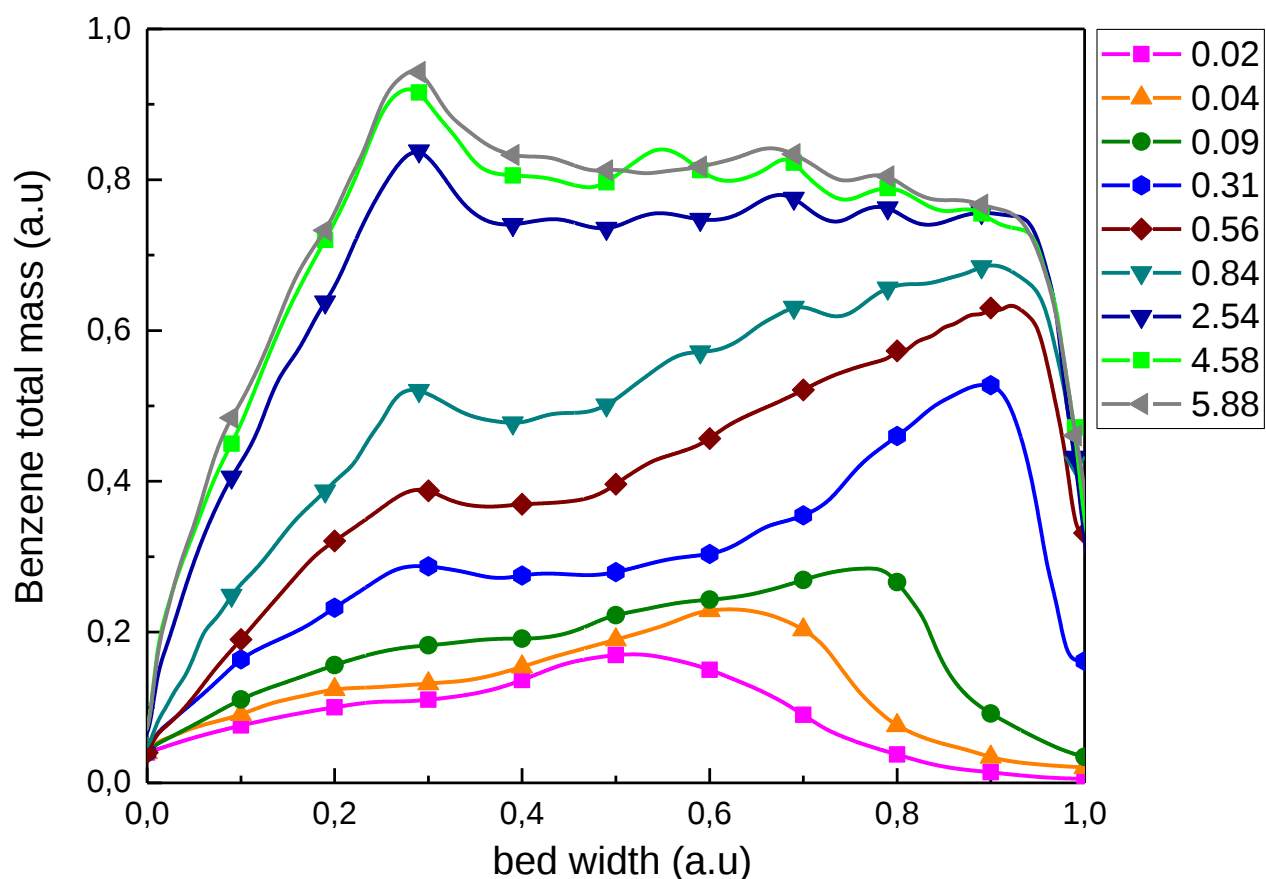


Рис. 1.4 – Експериментальні криві абсорбції суміші вуглеводню з перевагою бензену

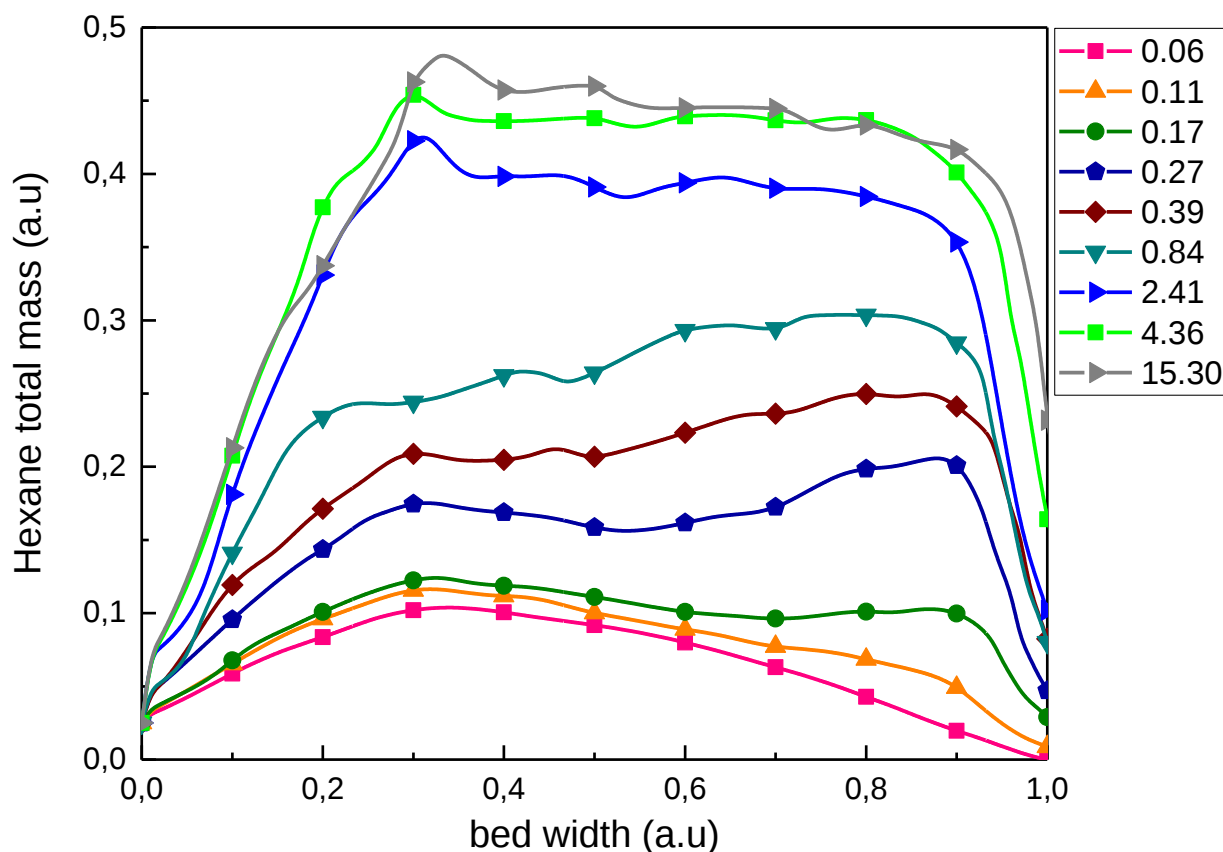


Рис. 1.5 – Експериментальні криві абсорбції суміші вуглеводню з перевагою гексану

На рис.1.4 і рис.1.5 подано типові залежності концентраційних розподілів для дифузії бензену та гексану у різні моменти часу у залежності від геометричних розмірів досліджуваного зразка цеоліту. Ці експериментальні дані представляють собою результати, які нам би могла дати математична модель для прямої задачі дифузії. Тепер ж за відомими концентраціями підставляючи експериментальні дані у систему рівнянь дифузії можна розв'язувати задачу по встановленню її основних параметрів.

Основною проблемою математичного моделювання в даному випадку є встановлення параметрів дифузії у досліджуваних системах в різні моменти часу. Такими характеристиками є коефіцієнти дифузії у середовищі мікропор та середовищі кристалічного зразка. Встановлення цих параметрів з експериментальними даними дозволило б вирішити проблему ідентифікації дифузії сумішей та надійно прогнозувати кінетику масопереносу у досліджуваних

зразках. Поставлена проблема фактично зводиться до ідентифікації коефіцієнтів дифузії із оберненої задачі для математичної моделі із зворотними зв'язками. Фактично нашою кінцевою метою є розробка такої програмної системи, що по-перше реалізує обернену задачу для математичної моделі дифузії і по-друге дозволяє не вдаючись у фізико-хімічну суть процесу за концентраційним розподілом встановити коефіцієнти дифузії та ефективно прогнозувати з якою речовиною ми маємо справу.

Розробка математичної моделі оберненої математичної моделі та програмної системи, що реалізує цю модель та її архітектуру ідеться далі.

РОЗДІЛ 2. РОЗРОБКА ПРЯМОЇ ТА ОБЕРНЕНОЇ ЗАДАЧ ДЛЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ ДИФУЗІЇ У МІКРОПОРИСТИХ МАТЕРІАЛАХ. ПРОЕКТУВАННЯ АРХІТЕКТУРИ ПРОГРАМНОЇ СИСТЕМИ РЕАЛІЗУЮЧОЇ МАТЕМАТИЧНУ МОДЕЛЬ

2.1. Математична модель дифузії мікропористих матеріалів. Опис процесу дифузії всередині мікропор та масивному середовищі кристалічного зразка

Для опису процесу дифузії у мікропористому матеріалі слід побудувати адекватну математичну модель, яка описує масоперенесення у широкому часовому режимі та в усіх підсистемах досліджуваного зразка. Як відомо [10-12] дифузія у мікропористих матеріалах відбувається одночасно в межах двох підсистем. Перша підсистема характеризує дифузію у загальному середовищі кристалічного континууму, будемо вважати, що це середовище характеризується коефіцієнтом дифузії D_{inter} . Друга підсистема описує важливий процес захоплення робочого агента мікропорами, тобто процес масоперенесення всередині самої пори. Прийmemo до уваги, що це середовище характеризується коефіцієнтом дифузії D_{intra} .

Будемо вважати, що досліджуваний зразок характеризується циліндричною симетрією та має характеристичну довжину l . Також будемо вважати, що мікропори, які містяться всередині зразка мають однакові розміри та сферичну форму радіуса R . Приклад такого цеолітного зразка разом із мікропорами подано на рис. 2.1. Відповідно до постановки задачі дифузійний процес нерозривно відбувається в обох підсистемах зокрема на границі кожної мікропори з загальним середовищем. При цьому сферичні поверхні мікропор приймаються межею поділу середовищ: об'ємного середовища кристалу та середовища всередині мікропор зразка. Будемо характеризувати концентрацію робочого агента у масивному середовищі величиною $C(t, z)$, а концентрацію всередині мікропори характеризуватимемо величиною $Q(t, x, z)$, причому $0 \leq x \leq R$, а $0 \leq z \leq l$.

Оскільки ми займаємося побудовою математичної моделі оберненої задачі дифузії, то нашою першочерговою проблемою є встановлення згаданих вище коефіцієнтів дифузії в обох підсистемах на основі наявних у нас експериментальних результатів. Ці експериментальні результати мають бути такими, що повністю описують сумарні концентрації робочого агента у всьому зразку.

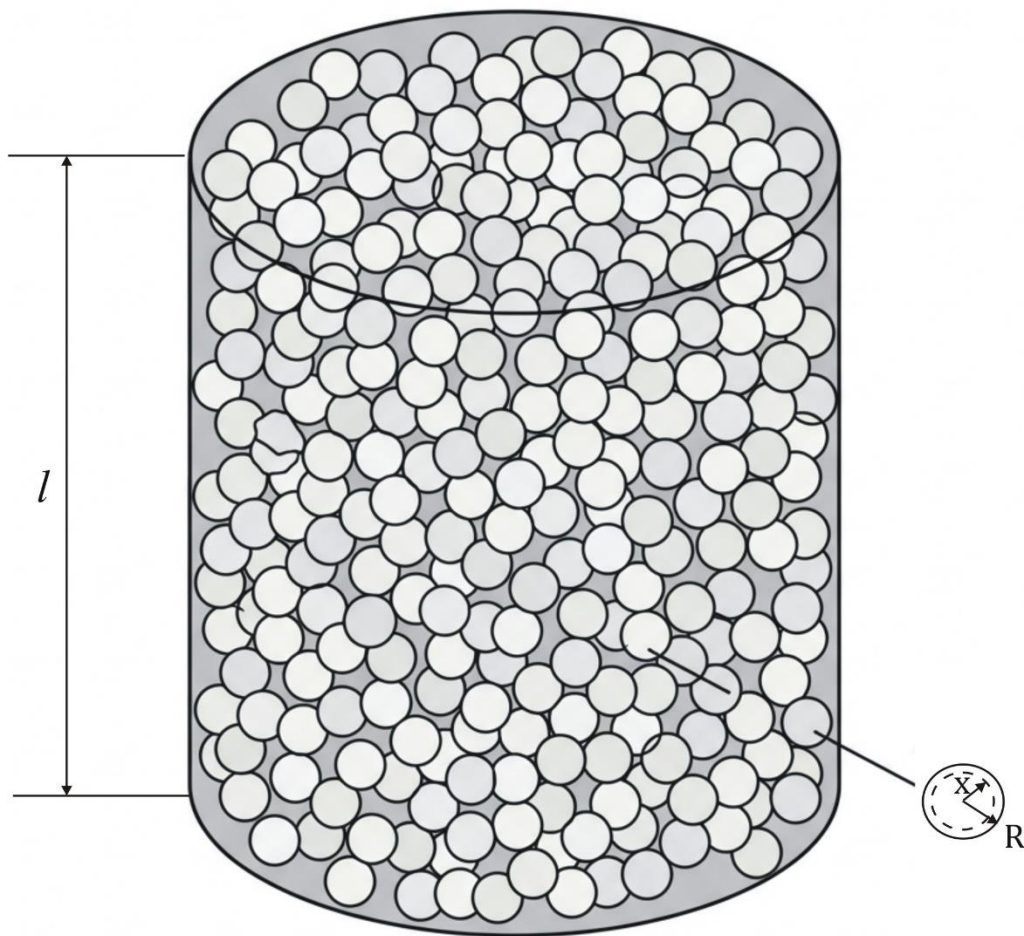


Рис. 2.1. Модель досліджуваного зразка із порами, апроксимованими сферичними поверхнями. Дифузійний процес відбувається на меж поділу середовищ відповідаючому сферичні поверхні мікропор

Поточна концентрація у зразку в довільний момент часу характеризується величиною:

$$N(t, z) = C(t, z) + \frac{1}{R} \int_0^R Q(t, x, z) dx \quad (2.1)$$

тобто це фактично сума концентрацій у загальному середовищі масивного зразка, та концентрація адсорбованого агента, що міститься у середовищі мікропор.

Далі розглянемо процес дифузії в обох підсистемах, щоб описати кінетику масопереносу в довільний момент часу t . З цієї метою ми використаємо загальні модельні рівняння, що описують дифузію в матеріалі цеоліту та його мікропорах. Ці рівняння мають такий вигляд [10-12]:

$$\frac{\partial C(t, z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{inter}}}{l^2} \frac{\partial^2 C(t, z)}{\partial z^2} - \Gamma \frac{D_{\text{intra}}}{R^2} \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial x}; \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{intra}}}{R^2} \left[\frac{\partial^2 Q(t, x, z)}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial x} \right]. \quad (2.3)$$

де $D_{\text{inter}} = D_0$; $D_{\text{intra}} = D_1$ – це згадані коефіцієнти дифузії, які треба знайти. Як видно із рівнянь (2.2) і (2.3), то вони є пов'язаними між собою, що вказує на те, що вони формують собою систему самоузгоджених рівнянь у частинних похідних. З іншого боку це зумовлює необхідність перевірки збіжності розв'язків обох рівнянь та обчислювальної складності при реалізації числового підходу. Не обмежуючи загальності ми приймемо перше рівняння основним – воно описує кінетику дифузії у масивному середовищі. Тоді друге рівняння виступатиме у ролі поправки на наявність процесів, що описують кінетику дифузії у мікропорах.

2.2 Числова реалізація математичної моделі дифузії у мікропористих зразках.
Розробка різницевої схеми для прямої та оберненої задач дифузії

2.2.1 Різницева схема для оберненої задачі дифузії за наявності повного набору даних просторових та часових розподілів концентрації в зразку

Почнемо із розробки числової математичної моделі для оберненої задачі дифузії. При цьому ми скористаємося двома підходами. У першому підході ми приймаємо до уваги, що в нас є наявними усі концентраційні розподіли у визначених інтервалах часу, а також градієнти концентрації у масивному

середовищі кристали та всередині мікропори. Другий підхід підрозуміває відсутність частини інформації про концентрацію робочого агента у мікропорах, проте ця інформація може бути відновлена шляхом усереднення величини концентрації всередині кожної окремо взятої мікропори. В кожному з цих випадків нам буде достатньо лише рівнянь (2.2) і (2.3).

Будемо працювати у триточковій апроксимації похідних, згідно якої усі похідні замінюються скінчено різницевиими величинами. Для прикладу розглянемо функцію від двох змінних $f(x, t)$. Апроксимація її першої та другої похідних за змінною x є такою:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x, t)}{\partial x} &\rightarrow \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x_i} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}, \\ \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} &\rightarrow \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{\Delta x_i^2} = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2}.\end{aligned}\quad (2.4)$$

У виразах (2.4) величина $h = \Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ - є одиничними кроком лінійної сітки, а “ i ” – ціле число, що нумерує вузли цієї сітки.

Застосуємо тепер співвідношення (2.4) до рівнянь (2.2) і (2.3), замінюючи усі похідні в них різницевиими величинами. Будемо мати:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C(t, z)}{\partial t} &= \frac{C_{k+1, sm} - C_{k, s, m}}{\Delta t_k} = \frac{C[k+1, s, m] - C[k, s, m]}{\Delta t_k}, \\ \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial x} &= \frac{Q_{k, s+1, m} - Q_{k, s, m}}{\Delta x_s} = \frac{Q[k, s+1, m] - Q[k, s, m]}{\Delta x_s}, \\ \frac{\partial^2 C(t, z)}{\partial z^2} &= \frac{C[k, s, m-1] - 2C[k, s, m] + C[k, s, m+1]}{(\Delta z_m)^2}, \\ \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial t} &= \frac{Q_{k+1, s, m} - Q_{k, s, m}}{\Delta t_k} = \frac{Q[k+1, s, m] - Q[k, s, m]}{\Delta t_k}, \\ \frac{\partial^2 Q(t, x, z)}{\partial x^2} &= \frac{Q[k, s-1, m] - 2Q[k, s, m] + Q[k, s+1, m]}{(\Delta x_s)^2}, \\ \frac{1}{x} \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial x} &= \frac{Q[k, s+1, m] - Q[k, s, m]}{s(\Delta x_s)^2}.\end{aligned}\quad (2.5)$$

Якщо підставити результат (2.5) у вихідні рівняння (2.2) і (2.3) після виконання простих перетворень будемо мати:

$$\begin{aligned}
& \frac{C[k+1, s, m] - C[k, s, m]}{\Delta t_k} = \\
& = \frac{D_0}{l^2} \frac{C[k, s, m-1] - 2C[k, s, m] + C[k, s, m+1]}{(\Delta z_m)^2} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} \frac{Q[k, s+1, m] - Q[k, s, m]}{\Delta x_s}, \\
& \frac{Q[k+1, s, m] - Q[k, s, m]}{\Delta t_k} = \\
& = \frac{D_1}{R^2} \left(\frac{Q[k, s-1, m] - 2Q[k, s, m] + Q[k, s+1, m]}{(\Delta x_s)^2} + \frac{2Q[k, s+1, m] - 2Q[k, s, m]}{s(\Delta x_s)^2} \right).
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Різницєва схема, яка задається згідно із співвідношеннями (2.6) будується на тривимірній сітці, яка відповідає дискретизації рівнянь (2.2) і (2.3) за координатами x, z та часовій змінній t . В результаті просторова область на якій задається різницєва схема (2.6) є такою:

$$\Omega = \begin{cases} T \cup X \cup Z, T = \{k\Delta t_k, k = 1..k_{\max}\}; \Delta t_k = t_{\max} / k_{\max} = \Delta t_k = t[k+1] - t[k]; \\ X = \{s\Delta x_s, s = 1..s_{\max}\}; \Delta x_s = X_{\max} / s_{\max} = X[m+1] - X[m]; X_{\max} = 1; \\ Z = \{m\Delta z_m, m = 1..m_{\max}\}; \Delta z_m = Z_{\max} / m_{\max} = Z[m+1] - Z[m]; Z_{\max} = 1, \end{cases} \tag{2.7}$$

$(k; s; m) \in Z^+$.

також ми уважатимемо, що: $k_{\max} = s_{\max} = m_{\max} = 100$, а інтервал часу може бути отриманий з експериментальних даних: $T = (0, t_{\max})$. Отримана різницєва схема і тривимірна сітка можуть бути візуалізовані так як це подано на рис. 2.2.

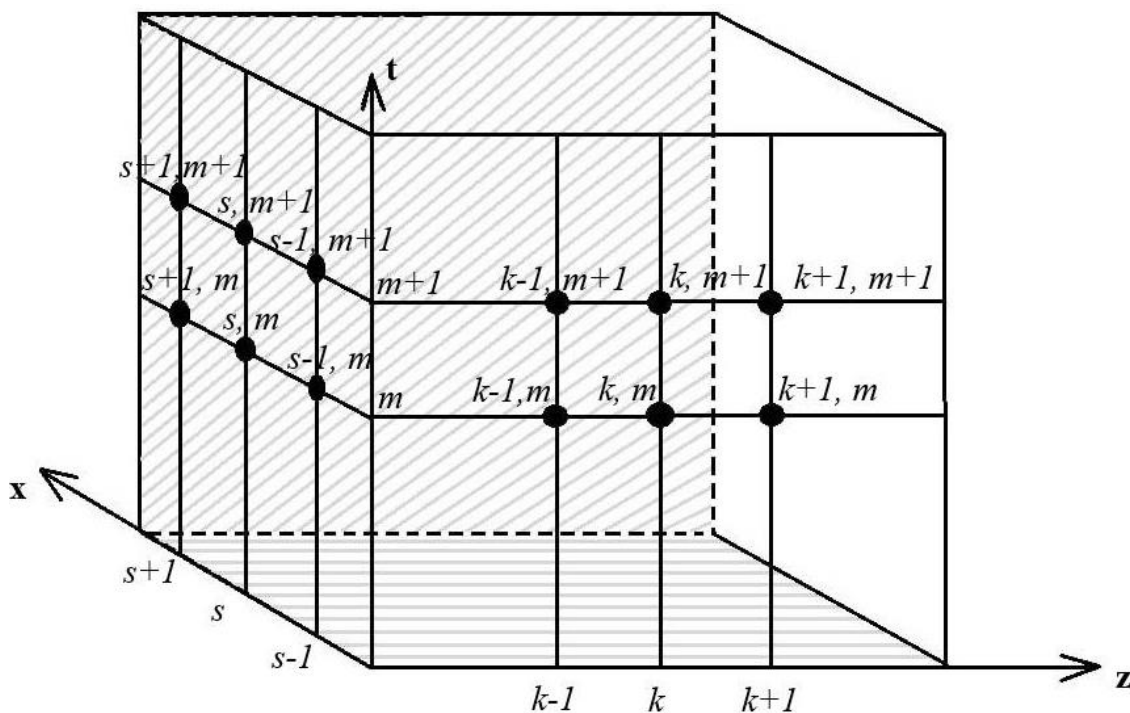


Рис. 2.2. Тривимірна сітка і реалізована на ній різницева схема

У межах кожного вузла $[k, s, m]$ тривимірної сітки різницева схема (2.6) представляє собою систему двох рівнянь для визначення коефіцієнтів дифузії D_0 і D_1 . Ця система рівнянь може бути приведеною до такого вигляду:

$$\begin{cases} a_{ksm}D_0 + b_{ksm}D_1 = c_{ksm}; \\ d_{ksm}D_1 = e_{ksm}, \end{cases} \quad (2.8)$$

де

$$\begin{aligned} a_{ksm} &= \frac{C[k, s, m-1] - 2C[k, s, m] + C[k, s, m+1]}{(l\Delta z_m)^2}; \quad b_{ksm} = -\frac{\Gamma}{R^2} \frac{Q[k, s+1, m] - Q[k, s, m]}{\Delta x_s}; \\ c_{ksm} &= \frac{C[k+1, s, m] - C[k, s, m]}{\Delta t_k}; \\ d_{ksm} &= \frac{1}{R^2} \left(\frac{Q[k, s-1, m] - 2Q[k, s, m] + Q[k, s+1, m]}{(\Delta x_s)^2} + \frac{2Q[k, s+1, m] - 2Q[k, s, m]}{s(\Delta x_s)^2} \right); \\ e_{ksm} &= \frac{Q[k+1, s, m] - Q[k, s, m]}{\Delta t_k}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Із системи рівнянь (2.8) тепер безпосередньо отримуємо:

$$D_0 = \frac{c_{ksm}}{a_{ksm}} - \frac{b_{ksm}}{a_{ksm}} D_1 = \frac{c_{ksm}}{a_{ksm}} - \frac{b_{ksm} e_{ksm}}{a_{ksm} d_{ksm}}; D_1 = \frac{e_{ksm}}{d_{ksm}}. \quad (2.10)$$

Знайдені у кожному вузлі $[k, s, m]$ дискретної сітки значення коефіцієнтів дифузії дозволяють в ітеративному підході перейти до будь-якого із таких вузлів:

$$\begin{aligned} &[k-1, s, m]; [k+1, s, m]; [k, s-1, m]; [k, s+1, m]; [k, s, m-1]; [k, s, m+1]; \\ &[k-1, s-1, m]; [k-1, s+1, m]; [k+1, s-1, m]; [k+1, s+1, m]; \\ &[k-1, s-1, m-1]; [k-1, s-1, m+1]; [k-1, s+1, m-1]; [k+1, s+1, m+1] \end{aligned} \quad (2.11)$$

в результаті чого стає зрозумілим, що кожен із вузлів буде враховано відповідно k, s, m разів за кожним напрямом дискретної сітки. Таким чином в результатів прямого проходження сітки отримані значення коефіцієнтів дифузії будуть такими:

$$\begin{aligned} D_0 &= \frac{1}{k!s!m!} \sum_{k=1}^{k_{\max}} \sum_{s=1}^{s_{\max}} \sum_{m=1}^{m_{\max}} \left(\frac{c_{ksm}}{a_{ksm}} - \frac{b_{ksm} e_{ksm}}{a_{ksm} d_{ksm}} \right); \\ D_1 &= \frac{1}{k!s!m!} \sum_{k=1}^{k_{\max}} \sum_{s=1}^{s_{\max}} \sum_{m=1}^{m_{\max}} \frac{e_{ksm}}{d_{ksm}}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

де наявність множника $\frac{1}{k!s!m!}$ вирішує проблему з багатократним врахуванням одних і тих же самих вузлів різницевої схеми.

2.2.2 Різницева схема для оберненої задачі дифузії за відсутності набору даних просторових та часових розподілів концентрації в мікропорах зразка

У багатьох випадках значення концентрацій усередині мікропор важко визначати, або ж воно безпосередньо не було метою дослідження в експерименті. В такому випадку систему рівнянь дифузії макро- і мікро- рівнях також можна замінити різницевою схемою. Проте слід апроксимувати значення концентрації усередині мікропор їх усередненими величинами за об'ємом зразка. Ми знову виходимо і такої системи рівнянь

$$\begin{cases} \frac{\partial C(t, z)}{\partial t} = \frac{D_0}{l^2} \frac{\partial^2 C(t, z)}{\partial z^2} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial x}; \\ \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial t} = \frac{D_1}{R^2} \left[\frac{\partial^2 Q(t, x, z)}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial x} \right]. \end{cases} \quad (2.13)$$

За теоремою Лагранжа для рівняння, що описує баланс речовини у зразку маємо:

$$M(t, z) = C(t, z) + \int_0^{\bar{X}} Q(t, x, z) dx = C(t, z) + Q(t, \bar{X}, z) \bar{X}, \quad (2.14)$$

й у такий спосіб ми позбавились від змінної x замінивши концентрацію всередині мікропори усередненим значенням за її радіусом $\bar{X}$.

Розглянемо тепер допоміжну систему рівнянь дифузії, гомологічну системі (2.13):

$$\begin{cases} \frac{\partial C(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{inter}}}{l^2} \frac{\partial^2 C(t, Z)}{\partial Z^2} - \Gamma \frac{D_{\text{intra}}}{R^2} \frac{\partial Q(t, X, Z)}{\partial X}; \\ \int_0^{\bar{X}} \frac{\partial Q(t, X, Z)}{\partial t} dX = \frac{D_{\text{inter}}}{l^2} \int_0^{\bar{X}} \frac{\partial^2 Q(t, X, Z)}{\partial Z^2} dX - \Gamma \frac{D_{\text{intra}}}{R^2} \int_0^{\bar{X}} \frac{\partial C(t, Z)}{\partial X} dX. \end{cases} \quad (2.15)$$

де друге рівняння усереднюється за радіусом $\bar{X}$.

Виконуючи послідовно обчислення за теоремою Лагранжа, будемо мати:

$$\begin{aligned} \int_0^{\bar{X}} \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial t} dx &= \frac{\partial Q(t, \bar{X}, z)}{\partial t} \bar{X}; \\ \int_0^{\bar{X}} \frac{\partial^2 Q(t, x, z)}{\partial z^2} dX &= \frac{\partial^2 Q(t, \bar{X}, z)}{\partial z^2} \bar{X}; \quad \int_0^{\bar{X}} \frac{\partial C(t, z)}{\partial x} dx = C(t, z). \end{aligned} \quad (2.16)$$

В результаті цих перетворень система (2.15) набуває такого вигляду:

$$\begin{cases} \frac{\partial C(t, z)}{\partial t} = \frac{D_0}{l^2} \frac{\partial^2 C(t, z)}{\partial z^2} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} \frac{\partial Q(t, x, z)}{\partial X}; \\ \frac{\partial Q(t, \bar{X}, z)}{\partial t} \bar{X} = \frac{D_0}{l^2} \frac{\partial^2 Q(t, \bar{X}, z)}{\partial z^2} \bar{X} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} C(t, z). \end{cases} \quad (2.17)$$

Після спрощень з використанням співвідношення (2.14) будемо мати,

$$\begin{aligned}
& \left\{ \begin{aligned} \frac{\partial C(t,z)}{\partial t} &= \frac{D_0}{l^2} \frac{\partial^2 C(t,z)}{\partial z^2} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} \frac{\partial Q(t,x,z)}{\partial x}; \\ \frac{\partial Q(t,\bar{X},z)}{\partial t} \bar{X} &= \frac{D_1}{l^2} \frac{\partial^2 Q(t,\bar{X},z)}{\partial z^2} \bar{X} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} C(t,z). \end{aligned} \right. \\
& \frac{\partial (C(t,z) + Q(t,\bar{X},z) \bar{X})}{\partial t} = \\
& = \frac{D_0}{l^2} \frac{\partial^2 (C(t,z) + Q(t,\bar{X},z) \bar{X})}{\partial z^2} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} (C(t,z) + Q(t,\bar{X},z) \bar{X}); \\
& \frac{\partial M(t,z)}{\partial t} = \frac{D_0}{l^2} \frac{\partial^2 M(t,z)}{\partial z^2} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} M(t,z).
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Допоміжна система (2.17) тепер набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \begin{aligned} \int_0^{\bar{X}} \frac{\partial Q(t,x,z)}{\partial t} dx &= \frac{D_0}{R^2} \left(\int_0^{\bar{X}} \frac{\partial^2 Q(t,x,z)}{\partial x^2} dx + \int_0^{\bar{X}} \frac{2}{x} \frac{\partial Q(t,x,z)}{\partial x} dx \right); \\ \frac{\partial C(t,z)}{\partial t} &= \frac{D_1}{R^2} \left[\frac{\partial^2 C(t,z)}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial C(t,z)}{\partial x} \right]. \end{aligned} \right.
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Застосовуючи теорему Лагранжа до величин сумарної концентрації будемо мати:

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\bar{X}} \frac{\partial^2 Q(t,x,z)}{\partial x^2} dx = \frac{\partial^2 Q(t,\bar{X},z)}{\partial x^2} \bar{X}; \quad \int_0^{\bar{X}} \frac{2}{x} \frac{\partial Q(t,x,z)}{\partial x} dx = \frac{2 \partial^2 Q(t,\bar{X},z)}{\partial x^2} \bar{X}; \\
& \frac{\partial Q(t,\bar{X},z)}{\partial t} \bar{X} = \frac{3 \partial^2 Q(t,\bar{X},z)}{\partial x^2} \bar{X}; \quad \frac{\partial^2 C(t,z)}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial C(t,z)}{\partial x} = \frac{3 \partial^2 C(t,z)}{\partial x^2}.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Це дає такі еквівалентні рівняння для усередненої величини сумарної концентрації:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial (C(t,z) + Q(t,\bar{X},z) \bar{X})}{\partial t} = \frac{3 \partial^2 (C(t,z) + Q(t,\bar{X},z) \bar{X})}{\partial x^2}; \\
& \frac{\partial M(t,z)}{\partial t} = \frac{3 D_0}{R^2} \frac{\partial^2 M(t,z)}{\partial x^2}; \quad D_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2} = (D_0 + D_1) \frac{\partial^2}{\partial z^2};
\end{aligned} \tag{2.21}$$

$$\frac{\partial M(t,z)}{\partial t} = \frac{3(D_0 + D_1)}{R^2} \frac{\partial^2 M(t,z)}{\partial z^2}. \tag{2.22}$$

Еквівалентні рівняння вже є рівняннями в частинних похідних лише по змінних t і z :

$$\begin{cases} \frac{\partial M(t, z)}{\partial t} = \frac{D_0}{l^2} \frac{\partial^2 M(t, z)}{\partial Z^2} - \Gamma \frac{D_1}{R^2} M(t, z); \\ \frac{\partial M(t, z)}{\partial t} = \frac{3(D_0 + D_1)}{R^2} \frac{\partial^2 M(t, z)}{\partial z^2}. \end{cases} \quad (2.23)$$

Використовуючи співвідношення (2.4) отримується така різницева схема:

$$\begin{cases} \frac{M[k, s, m] - M[k, s, m-1]}{\Delta t_k} = \frac{D_0}{l^2} \frac{M[k, s, m-1] - 2M[k, s, m] + M[k, s, m+1]}{(\Delta z_m)^2} - \Gamma \frac{D_1 M[k, s, m]}{R^2}, \\ \frac{M[k, s, m] - M[k, s, m-1]}{\Delta t_k} = \frac{3(D_0 + D_1)}{R^2} \frac{M[k, s, m-1] - 2M[k, s, m] + M[k, s, m+1]}{(\Delta z_m)^2}. \end{cases} \quad (2.24)$$

Отриманий інтегративний цикл тільки виконується тільки по змінній m . Індекси k, s можна не писати, оскільки вони виконують роль мовчазних індексів у різницевій схемі. В результаті ми знову отримуємо систему лінійних рівнянь відносно коефіцієнтів дифузії D_0 і D_1 у кожному вузлі одновимірної дискретної сітки:

$$\Omega = \left(\{m \Delta z_m, m = 1..m_{\max}\}; \Delta z_m = Z_{\max} / m_{\max} = Z[m+1] - Z[m]; Z_{\max} = 1, m \in Z^+. \right) \quad (2.25)$$

а сама система є такою:

$$\begin{cases} \frac{M[k, s, m] - M[k, s, m-1]}{\Delta t_k} = \frac{D_0}{l^2} \frac{M[k, s, m-1] - 2M[k, s, m] + M[k, s, m+1]}{(\Delta z_m)^2} - \Gamma \frac{D_1 M[k, s, m]}{R^2}, \\ \frac{M[k+1, s, m] - M[k, s, m-1]}{\Delta t_k} = \frac{3(D_0 + D_1)}{R^2} \frac{M[k, s, m-1] - 2M[k, s, m] + M[k, s, m+1]}{(\Delta z_m)^2}. \end{cases} \quad (2.26)$$

$$\begin{cases} A_{ksm} = D_0 B_{ksm} + D_1 C_{ksm}; \\ D_{ksm} = (D_0 + D_1) E_{ksm}. \end{cases}$$

де

$$\begin{aligned}
A_{ksm} &= \frac{M[k, s, m]}{\Delta t_k}; B_{ksm} = \frac{M[k, s, m-1] - 2M[k, s, m] + M[k, s, m+1]}{(l \Delta z_m)^2}; \\
C_{ksm} &= -\Gamma \frac{M[k, s, m]}{R^2}; D_{ksm} = \frac{M[k+1, s, m]}{\Delta t_k}; \\
E_{ksm} &= \frac{3(M[k, s, m-1] - 2M[k, s, m] + M[k, s, m+1])}{(R \Delta z_m)^2}.
\end{aligned} \tag{2.27}$$

У співвідношеннях (2.2.4)-(2.27) - $M[k, s, m]$ - це значення сумарних концентрацій, які найбільш часто отримуються на експерименті у результатів виконання прямих вимірювань.

Розв'язки системи (2.26) такі:

$$\begin{aligned}
D_0 &= \frac{A_{ksm}}{B_{ksm}} - \frac{C_{ksm} D_{ksm}}{E_{ksm} (A_{ksm} - C_{ksm} + B_{ksm})}; \\
D_1 &= \frac{D_{ksm} B_{ksm}}{E_{ksm} (A_{ksm} - C_{ksm} + B_{ksm})}.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

2.3 Розробка архітектури програмної системи, виконуючої математичне моделювання процесу дифузії та ідентифікації параметрів робочого агента із експериментальних параметрів

Важливим аспектом роботи із вхідними даними, які застосовуються у реалізації математичної моделі оберненої задачі є формат подання цих даних. Оскільки ми в нашій програмній системі будемо використовувати середовище Wolfram Mathematica, безпосередньо програмування в якій здійснюється за допомогою C-подібної мови, то необхідним фактором є забезпечення можливості зчитування даних порядково. Це також зумовлено тим, що дані експериментальних досліджень, які ми використовуємо в якості вхідних даних, мають вигляд двох колонок. Для прикладу вхідні дані за концентрацією задаються у вигляді $c(a) = b$, де a і b це відповідні стовпці файлу із розширенням .txt, .doc, .rtf. Для того, щоб

наша кінцева програмна системи могла працювати із цими даними необхідно виконати форматування текстового формату вхідних даних у підтримуваний MS-DOS цифровий формат. Здійснити це можна переведенням цих даних у формат з розширенням .dat із підтримкою зчитування даних за допомогою команд:

$$c \rightarrow \tilde{c} = CForm(c); DosTextFormat \rightarrow True \quad (2.29)$$

це дозволить подати вхідні дані у форматі з плаваючою комою та виконувати зчитування їх із вхідного файлу порядково. Приклад програмного коду реалізуючого дане форматування подано далі:

```
(* Імпорт даних *)
rawData = Import["data.txt", "Table"];

(* Витягування заголовків *)
headers = First[rawData];
data = Rest[rawData];

(* Створення Dataset *)
dataset = Dataset[AssociationThread[headers -> #] & /@ data];

(* Відображення результату *)
dataset
```

Рис. 2.3 – Приклад форматування вхідних даних із текстового формату у формат із розширення .dat

З огляду на безпосередню структуру математичних моделей вхідної та обернених задач та різницевих схем, що їх реалізують, виконувалась побудова архітектури програмної системи та архітектури клієнт-системи.

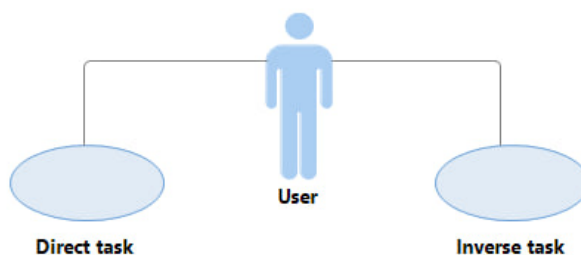


Рис. 2.4 – Загальна архітектура програмної системи без розгалуження

На рис. 2.4 подано загальну архітектуру програмної системи. У відповідності до неї користувач може на вході вибрати роботу із оберненою або прямою задачею для математичних моделей дифузії. Програмний блок прямої та оберненої задач розроблявся окремо та має різну структуру у відповідності до задач, які вирішують компоненти програмної системи. Деталізація архітектури кожного з блоків програмної системи подано на рис. 2.5.

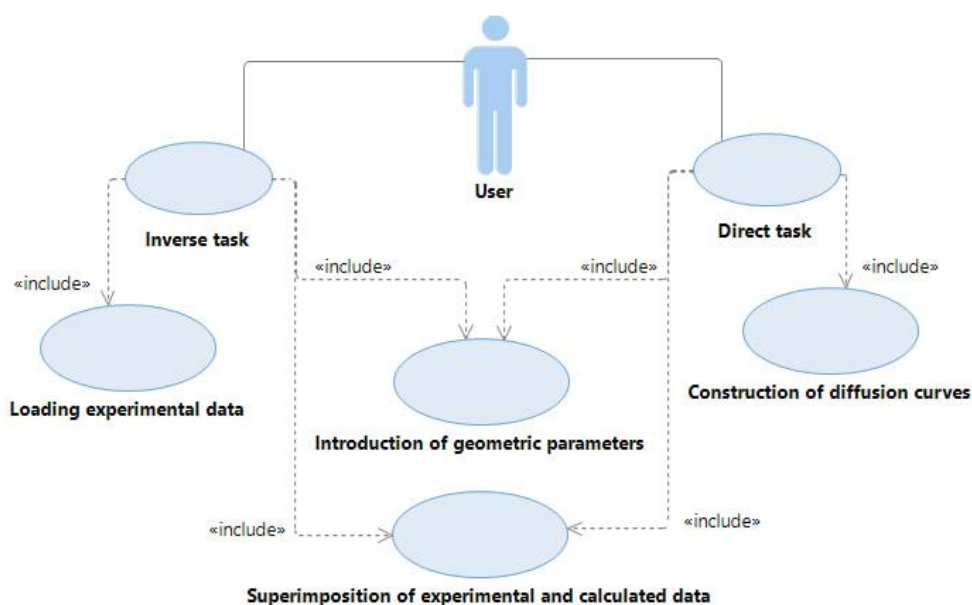


Рис. 2.5 – Деталізація архітектури програмної системи із представленням можливостей користувацького інтерфейсу

У відповідності до розробленої архітектури програмної системи для математичної моделі оберненої задачі передбачено виконання таких дій:

- Завантаження експериментальних вхідних даних та за необхідності форматування їх у .dat формат з плаваючою комою;
- Введення геометричних параметрів зразка;
- Візуалізація експериментальних даних;
- Ідентифікація параметрів дифузії із оберненої задачі;
- Візуалізація часової залежності коефіцієнтів дифузії.

Більш повна деталізація цього програмного блоку подана на рис. 2.6. На цьому рисунку найбільш повно описано архітектуру кожної із його компонент та продемонстровано її функціонал, призначений для різного кола задач.

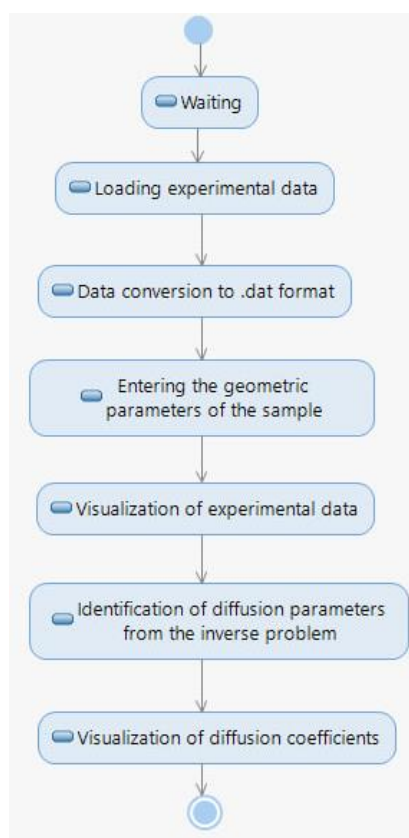


Рис. 2.6 – Деталізація архітектури програмного блоку реалізуючого математичну модель оберненої задачі

Далі розроблялась архітектура програмного блоку, що відносяться до реалізації прямих математичних моделей. При розробці архітектури ключовими уважались питання забезпечення можливості ефектно змінювати вхідні параметри

математичної моделі, а також функціонал забезпечуючий візуалізацію отриманих результатів, їх порівняння між собою з метою забезпечення верифікації. У відповідності до розробленої архітектури програмної системи для математичної моделі прямої задачі передбачено виконання таких дій:

- Введення геометричного параметра зразка;
- Введення фізичного параметра зразка;
- Побудова кривих дифузії;
- Накладання (співставлення) експериментальних розрахункових та їх інтерполяція;
- Розрахунки точності реалізації математичної моделі.

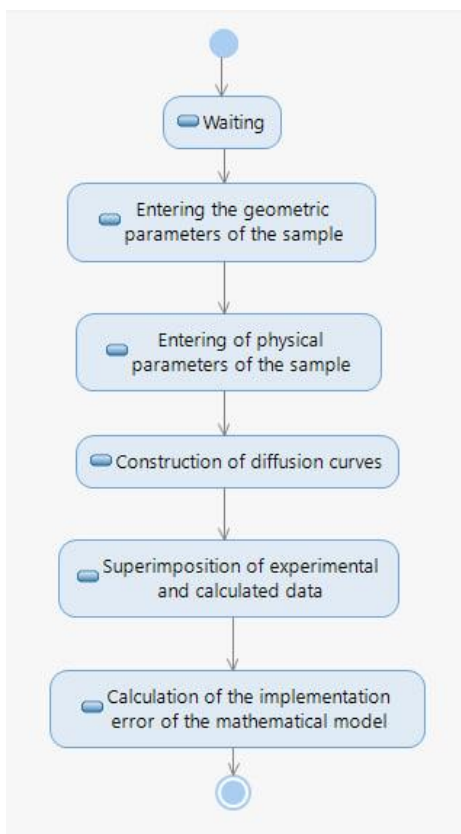


Рис. 2.7 – Деталізація архітектури програмного блоку реалізуючого математичну модель прямої задачі

РОЗДІЛ 3. ПРАКТИЧНА РЕАЛІЗАЦІЯ ПРОГРАМНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ ПРЯМОЇ ТА ОБЕРНЕНОЇ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ДИФУЗІЇ У МІКРОПОРИСТИХ ЗРАЗКАХ

3.1 Підготовка та обробка даних з експериментально отриманого процесу дифузії. Сортування даних у вигляді доступному для реалізації оберненої сіткової задачі

Уся побудова інформаційної системи та її складових виконувалась у середовищі Wolfram Mathematica 12.

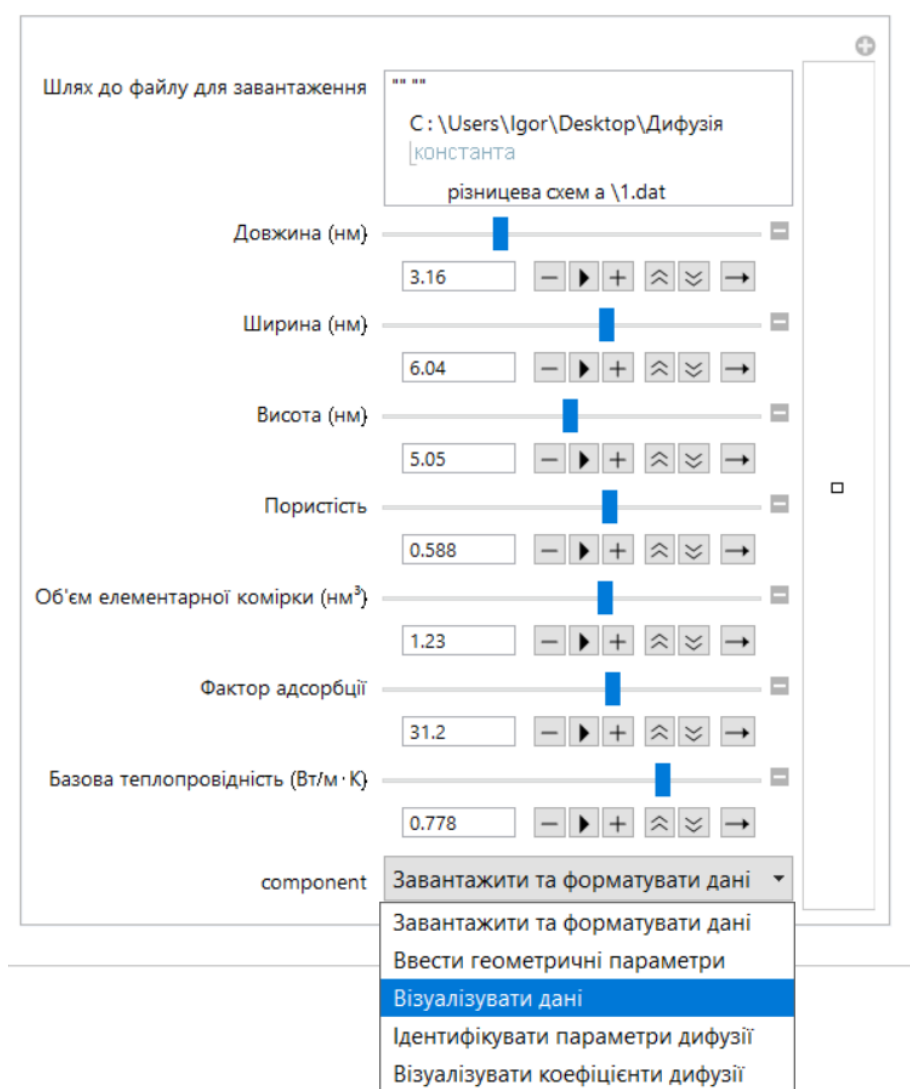


Рис. 3.1 – Приклад роботи із програмний блоком, призначеним для оберненої задачі дифузії

На першому етапі із розробки роботи із розробленою інформаційною системою виконуються попередня підготовка та обробка вхідних даних, що відповідають експериментальному дослідженню розроблених безпосередньо зразків. Розроблений функціонал блоку програмної системи, який призначений для роботи із даними отримуваними від оберненої задачі математичної моделі дифузії та обробки експериментальних даних такий, як показано на рис. 3.1.

Далі, на рис. 3.2 подано приклади концентраційних кривих отриманих в результаті прямих вимірювань для експериментально створеного зразка цеоліту. Побудова концентраційних кривих виконувалась за допомогою вхідного блоку програмної системи з використанням директив функції List Plot та List Line Plot після їх попередньої обробки. Ці необхідні дані брали безпосередньо із списку експериментальних робіт [19-25.]

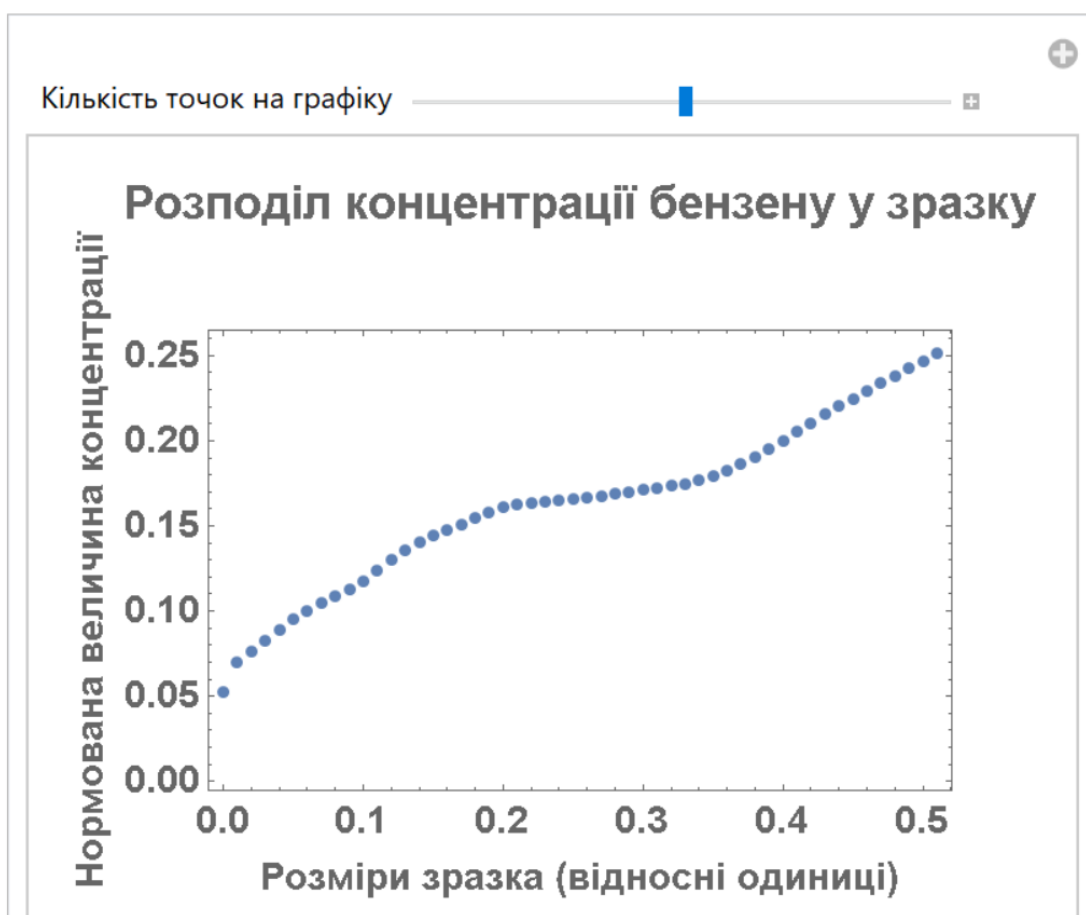


Рис. 3.2 – Приклад експериментально реалізованого концентраційного розподілу у зразку бензену

Після обробки отриманої інформації про концентрацію отримується залежність розподілу для бензену у зразку, для зручності розміри зразка та величини концентрації подано у відносних одиницях.

Аналогічні підготовчі дії з опрацювання експериментально отриманої концентрації виконувалися для дифузійної концентрації гексану на аналогічному зразку. Результати виконання програмного блоку інформаційної системи подано на рис. 3.2.

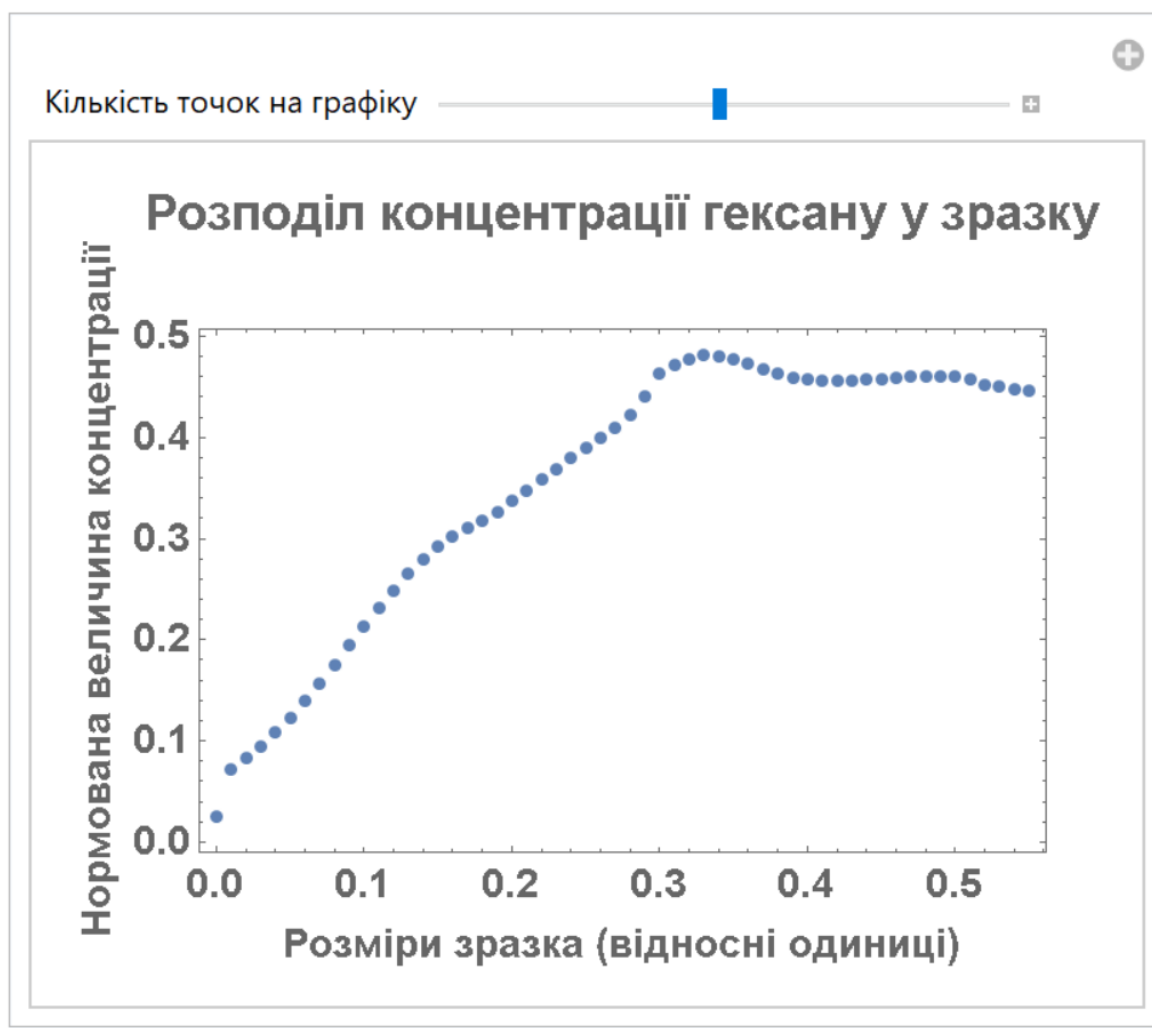


Рис. 3.3 – Приклад експериментально реалізованого концентраційного розподілу у зразку гексану

Програмна реалізація блоку інформаційної системи, який опрацьовує експериментальні дані є такою як подано на наступному рисунку (див. рис. 3.4). На етапі опрацювання вхідних даних є можливість корегувати вхідну кількість точок

концентраційних кривих, що значно полегшує роботу з випадками, коли ми маємо дуже велику кількість вхідних даних із заданим статичним відхиленням.

Це дозволяє при кінцевій обробці експериментальних даних лише використовуючи вхідний блок розробленої нами програмної системи, застосовувати апроксимацію даних за допомогою сплайнів чи інтерполяційних поліномів, виключно за бажанням користувача. Це є корисною практичною властивістю нашої розробки.

```
Module[{data, xList, CmList, x, Cm, Y},
|програмний модуль
  (*Крок 1:Завантаження даних з файлу*)data =
    Import["C:\\Users\\User\\OneDrive\\Desktop\\дипломна
|імпорт
\\Обернена задача\\Identification_Hexane\\216.dat", "Table"];
  (*Крок 2:Збереження даних у вигляді списку*)xList = data[[All, 1]];
|всє
  CmList = data[[All, 2]];
|всє
  (*Крок 3:Створення функцій для доступу до окремих значень x та Cm*)
  x[i_] := xList[[i]];
  Cm[i_] := CmList[[i]];
  (*Крок 4:Ініціалізація списку Y*)Y = Table[0, {Length[xList]}];
|таблиця з... |довжина
  (*Крок 5:Обчислення Y[i] у циклі for*)
  For[i = 1, i ≤ Length[xList], i++, Y[[i]] = Cm[i]];
|цикл ДЛЯ |довжина
  (*Крок 6:Побудова графіка*)
  ListPlot[Table[{x[i], Y[[i]]}, {i, 1, Length[xList]}], PlotStyle → PointSize[Medium],
|діаграма... |таблиця значень |довжина |стиль графіка |розмір точки |середній
  Frame → True, AxesLabel → {"x", "Y"}, PlotLabel → "Концентраційний розподіл у зразку гексану"]]
|рамка |істина |позначення на осях |позначка графіка
```

Рис. 3.4 – Програмна реалізація блоку інформаційної системи

Даний програмний блок реалізований у вигляді модуля, який дозволяє імпортувати вхідні експериментальні дані, поточно будувати їхню залежність, а також виконувати нормування цієї залежності по осях. Це дає змогу користувачу незалежно від геометрії вхідного зразка наочно спостерігати та працювати з типовими концентраційними профілями гексану та бензену.

Оскільки після обробки програмною системою вхідні експериментальні дані тепер є посорттованими в лінійному масиві за принципом $C[1], C[2], \dots, C[k]$, то кожній точці концентрації тепер відповідає певна точка у нормованій шкалі розмірів зразка. За відсутності часозалежного розподілу для концентрації на часовій кривій вхідні дані апроксимувались Гаусовими кривими. Для прикладу в нас відомими є концентраційні розподіли в моменту часу t_1, t_2, t_3 , то апроксимовані часові залежності будуть такі:

$$C_1(t) = C_0 e^{-\alpha(t-t_1)^2}$$

$$C_2(t) = C_0 e^{-\alpha(t-t_2-t_1)^2}$$

$$C_3(t) = C_0 e^{-\alpha(t-t_3-t_2-t_1)^2}$$

де константа α знаходиться з умови:

$$C_1(t) = C_{max}, \text{ звідки: } \alpha = \frac{1}{(t_1+t_2+t_3)^2} \ln\left(\frac{C_0}{C_{max}}\right).$$

3.2 Робота з експериментальними кривими дифузії, отримання коефіцієнтів дифузії на довільних часових інтервалах. Порівняння різного типу зразків та робочих агентів. Перевірка та верифікація математичної моделі оберненої задачі дифузії

Для експериментальних даних обробка яких виконувалася за допомогою програмного блоку поданого у попередньому підрозділі дипломної роботи застосовувалась різницева схема для оберненої задачі дифузії, що задана співвідношеннями (2.13), (2.24), (2.28). В результаті отримуються шукані значення коефіцієнтів дифузії D_{in} та D_{intra} . Розраховані із різницевої схеми залежності коефіцієнтів дифузії для бензену від часу подано на рис. 3.5.

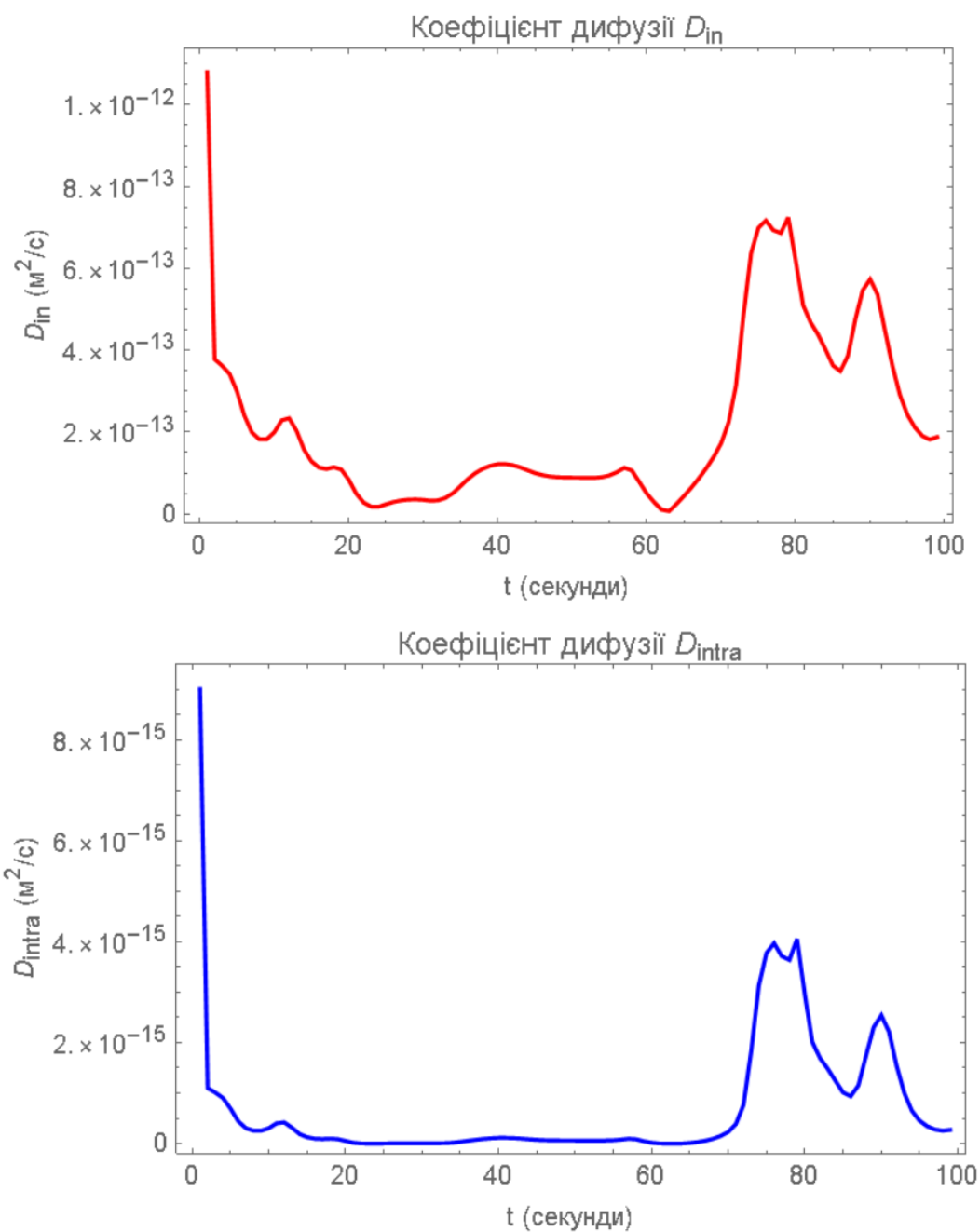


Рис. 3.5 – Залежності коефіцієнтів дифузії D_{in} та D_{intra} для бензену від часу

Аналогічні розраховані залежності для гексану подано на рис. 3.6.

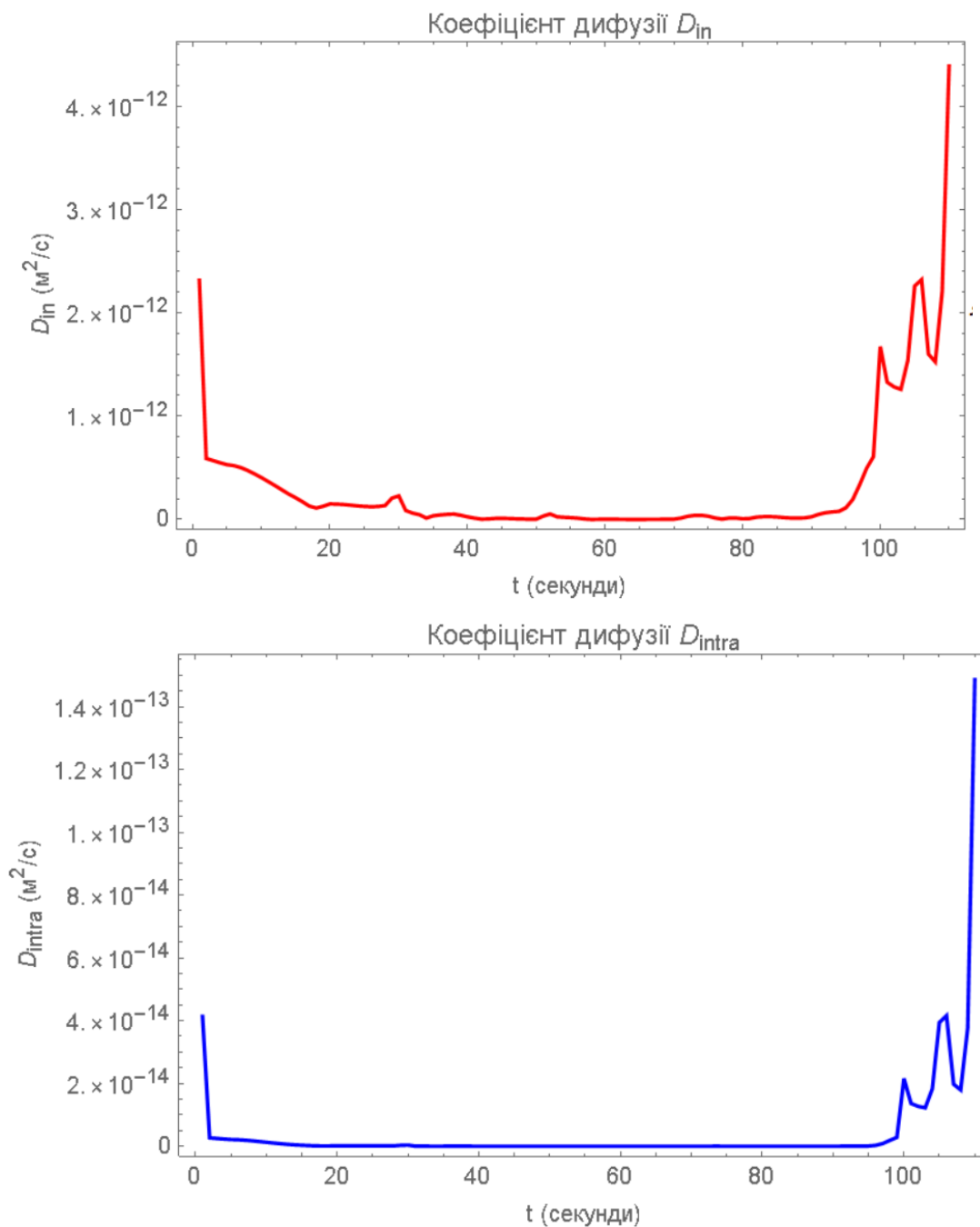


Рис. 3.6 – Залежності коефіцієнтів дифузії D_{in} та D_{intra} для бензену від часу

Як можна бачити, розвинені математичні моделі для оберненої задачі дифузії дозволяють візуально встановити відмінності у залежностях коефіцієнтів дифузії різного типу летких агентів (бензену та гексану відповідно), а також порівняти їхні числові значення.

3.3 Робота з програмною системою реалізуючої пряму математичну модель дифузії. Використання параметрів дифузії отриманих з оберненої задачі дифузії. Налаштування та оптимізація роботи програмної системи. Оцінка її надійності, гнучкості та області застосування

Для верифікації розвинених математичних моделей та розробленого програмного забезпечення виконувалось шляхом моделювання різнотипних зразків на основі отриманих параметрів дифузії бензену та гексану, що отримані із інших зразків того ж типу та інших робіт. При відомих коефіцієнтах дифузії, співвідношення (2.8), (2.9) та (2.26) представляють собою сіткову задачу для прямої математичної моделі дифузії й дозволяють виконувати розрахунки концентраційних розподілів бензену та гексану й порівнювати отримані результати з експериментальними.

На рис 3.7 подано для порівняння розраховані концентраційні криві бензену та гексану із праць [19, 20, 24] і їх експериментальні дані, при цьому коефіцієнти дифузії розраховувались на основі експериментальних даних, взятих із зовсім інших робіт [21-23, 25]. Як можна бачити із поданих рисунків, ідентифіковані параметри дифузії забезпечують хороше узгодження результатів, що їх дає пряма математична модель дифузії із експериментом. Таким чином, можна говорити про адекватність запропонованого підходу до отримання параметрів дифузії та верифікації прямої математичної моделі масопереносу, що дозволяє поширити розвинену методологію на цілий ряд типових зразків, результати математичного моделювання для яких є ще не відомими. Також можна ствердно говорити про можливість ідентифікації параметрів дифузії для різних летких агентів на основі збору експериментальних даних про їх концентраційні профілі.

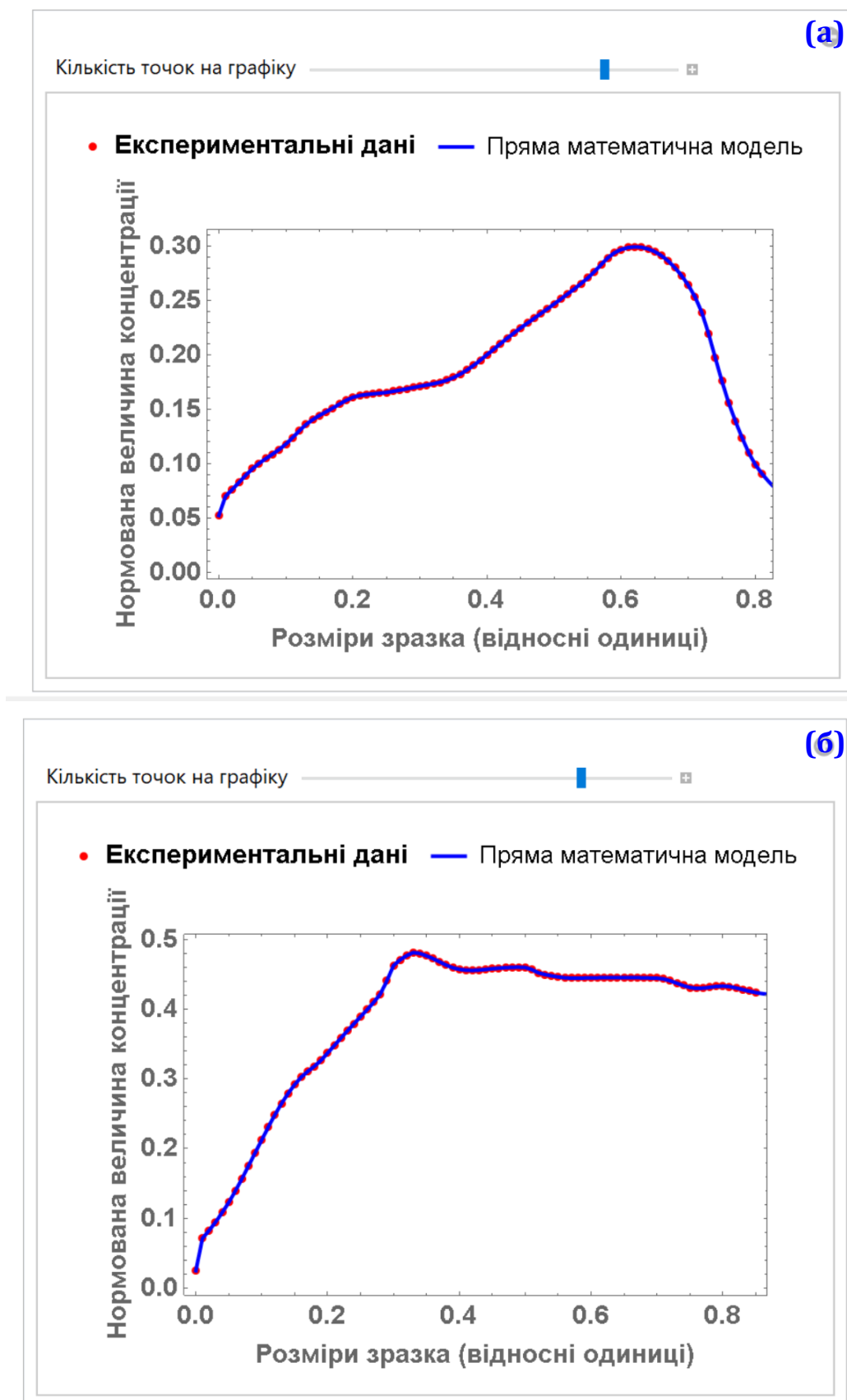


Рис. 3.7 – Концентраційні профілі, розраховані із прямої математичної моделі дифузії і їх порівняння з експериментальними даними для бензену (а) та гексану

(б)

Завершальним етапом верифікації є реалізація блоку програмної системи що реалізує побудову просторової залежності концентрації для процесу масопереносу у циліндричному зразку. Програмна реалізація такого процесу подана на рис. 3.8.

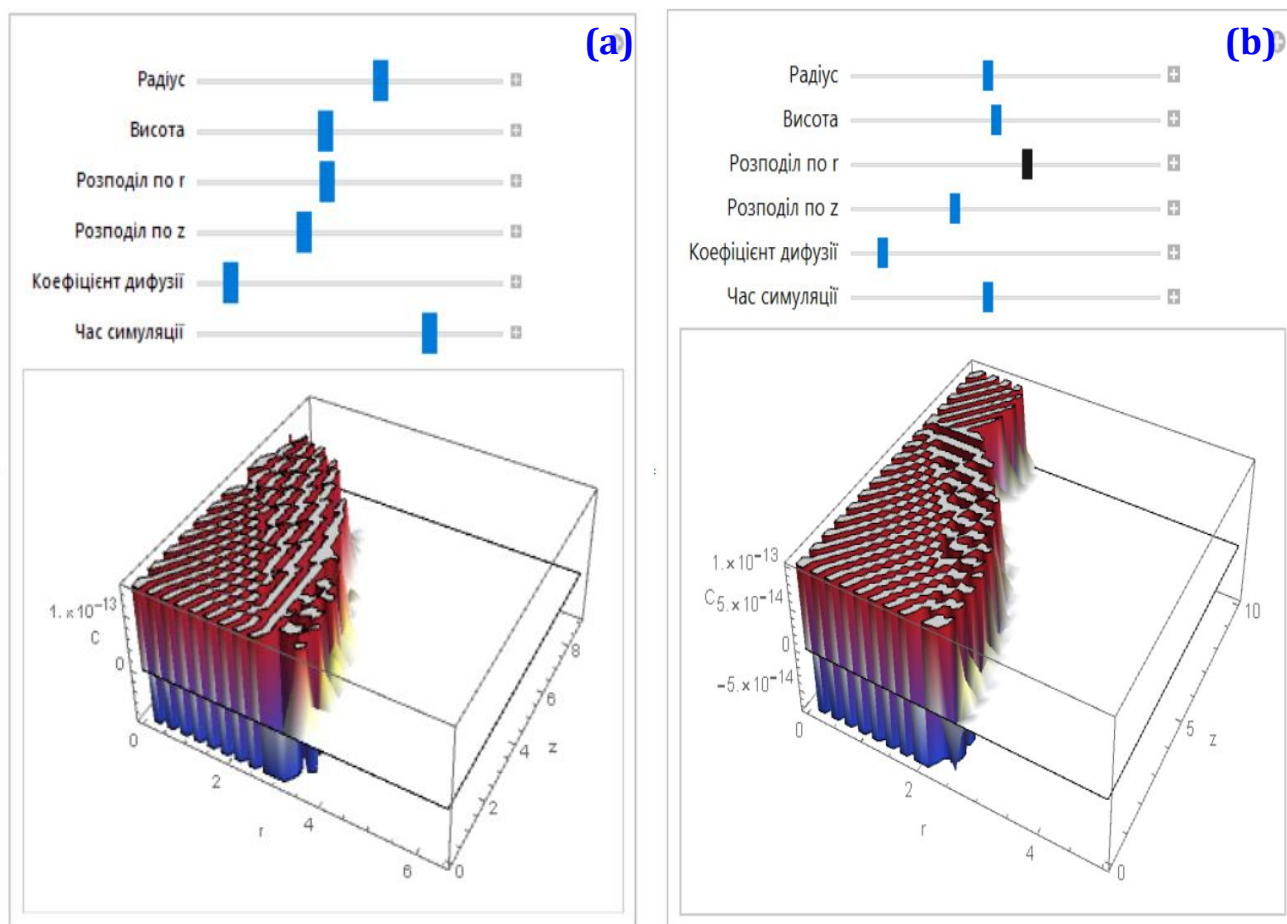


Рис. 3.8 – Моделювання просторової концентрації бензену та гексану у зразку із циліндричною симетрією

Даний блок програмної системи реалізовано таким чином, щоб в безпосередньому моделюванні можна було використовувати отримані з оберненої задачі коефіцієнти дифузії, а також вибирати необхідні нам геометричні та фізичні параметри зразка. В результаті отримується алгоритмізована математична модель із можливістю інтегративної зміни її параметрів та реалізованою можливістю 3D-візуалізації результатів, зокрема подані результати демонструються відмінності між просторовими концентраційними розподілами бензену (а) та гексану (б).

РОЗДІЛ 4. БЕЗПЕКА ЖИТТЄДІЯЛЬНОСТІ, ОСНОВИ ОХОРОНИ ПРАЦІ

4.1 Долікарська допомога при ураженні електричним струмом

Електричний струм широко використовується в промисловості, побуті, медицині, аграрному секторі, тому питання електробезпеки є надзвичайно актуальним. Відповідно до ДСТУ 6309:2007, а також ДСН 3.3.6.042-99, необхідно дотримуватись вимог безпеки при роботі з електроустановками.

Аналіз статистичних даних показує, що нещасні випадки на виробництві від ураження електричним струмом, які супроводжуються тимчасовою втратою працездатності складають близько 1-го %, а нещасні випадки, які закінчуються при ураженні електричним струмом смертельним наслідком – складають близько 40 % від загальної кількості. Найчастіше всього травми одержує персонал, який безпосередньо обслуговує електроустановки (це близько 60 % від загального числа електротравм).

Знаки електробезпеки згідно ДСТУ 6309:2007 фарбуються у чорний або червоний колір на світлому фоні.

Практика показує, що в усіх областях застосування електричної енергії на підприємствах і в організаціях мають місце випадки ураження людини електричним струмом.

Згідно закону затвердженого наказом Міністерства охорони здоров'я України від 09 березня 2022 року № 441 [32] у разі ураження струмом необхідно якнайшвидше усунути джерело струму, вимкнувши живлення або відтягнувши постраждалого за сухий одяг, не торкаючись відкритих ділянок тіла. Якщо це неможливо, варто використовувати ізольовані предмети — дерев'яні палиці, гумові вироби, тощо. Після звільнення потерпілого від струму важливо якнайшвидше оцінити його стан — перевірити свідомість, наявність дихання, пульсу на сонній артерії та стан зіниць. Усі дії повинні бути проведені за 15–20 секунд.

Заходи першої допомоги при оживленні людини залежать від її стану. Тому цикл реанімації складається з двох частин:

1. швидко визначення стану потерпілого.
2. енергійне кваліфіковане надання долікарської допомоги.

Для визначення стану постраждалого потрібно укласти його на спину й перевірити наявність дихання і серцевих скорочень. Наявність дихання в потерпілого визначають за підйомом і опусканням грудної клітки під час самостійного вдиху й видиху. При порушенні дихання потерпілий має потребу в проведенні штучного дихання.

При наявності серцевих скорочень пульс найкраще перевіряти по сонній артерії. Відсутність пульсу на ній свідчить, як правило, про припинення руху крові в організмі.

Про відсутність кровообігу в організмі можна судити за станом очних зіниць, які в цьому випадку розширені. При відсутності пульсу необхідний зовнішній масаж серця.

Отже, допомога потерпілому повинна бути зроблена кваліфіковано, протягом перших 5...6 хв. Основні методи долікарської допомоги включають: штучне дихання «рот у рот», «рот у ніс», а також зовнішній масаж серця.

Для проведення штучного дихання потерпілого потрібно укласти на спину на тверду основу, розстебнути одяг і забезпечити прохідність верхніх дихальних шляхів, які можуть бути закриті запалим язиком, сторонньою речовиною або предметом у порожнині рота. Голову потерпілого треба повернути набік, очистити рот пальцем, обгорненим марлею або хусткою. Після цього той, хто надає допомогу, одну руку підсуває потерпілому під шию, а долонею іншої надавлює на чоло, максимально закидаючи голову назад. При цьому корінь язика відходить від задньої стінки гортані, відкриваючи вільний доступ повітря в легені, а рот відкривається.

При зупинці серця, не втрачаючи ні секунди, потерпілого треба укласти на тверду основу і звільнити від одягу, оголити груди. Далі прощупуванням потрібно визначити місце натиснення: воно повинне знаходитися на два пальці вище м'якого кінця грудини. Після цього той, хто надає допомогу, повинен покласти на це місце долоню однієї руки, а поверх неї під кутом 90° – долоню другої руки. Надавлювати

треба швидким поштовхом, злегка допомагаючи нахилом усього корпусу. Нижня частина груднини у потерпілого при натисненні повинна зміститися вниз на 3...5 см. Тривалість натиснення – не більше 0,5 с, з інтервалом 0,5 с. З появою самостійного пульсу, що свідчить про відновлення серцевої діяльності, потрібно негайно припинити масаж серця, але продовжувати проведення штучного дихання.

Штучне дихання і непрямий масаж серця необхідно проводити до відновлення стійкого самостійного дихання й діяльності серця в потерпілого або до передачі його медичному персоналу.

4.2 Вимоги ергономіки до організації робочого місця оператора ПК, агрегату

Однією із характерних особливостей сучасного розвитку суспільства є зростання сфер діяльності людини, в яких використовуються інформаційні технології. Широке розповсюдження отримали персональні комп'ютери. Однак їх використання загострило проблеми збереження власного та суспільного здоров'я, вимагає удосконалення існуючих та розробки нових підходів до організації робочих місць, проведення профілактичних заходів для запобігання розвитку негативних наслідків впливу ПК на здоров'я користувачів. Конструкція виробничого обладнання має забезпечувати оптимальний розподіл функцій між людиною і машиною з метою створення сприятливих умов праці, зниження важкості та напруженості праці, досягнення високої ефективності функціонування системи [30].

Заходи з охорони праці користувачів ПК необхідно розглядати в трьох основних аспектах:

- соціальному;
- психологічному;
- медичному.

У соціальному плані розв'язання цих проблем пов'язане з оптимізацією умов життя, праці, відпочинку, харчування, побуту, розвитком культури, транспорту.

Психологічний аспект. Значне місце у профілактиці розладів здоров'я належить психології праці. Тому заходи, пов'язані з формуванням раціональних виробничих колективів, у яких відсутня психологічна несумісність, сприяють зменшенню нервово-психічного перенапруження, підвищенню працездатності та ефективності праці. Особливої значущості у користувачів відеодисплейних терміналів набуває психоемоційний стрес, який більшою або меншою мірою проявляється у кожного з них.

Медичний аспект. Значна роль у профілактиці захворювань користувачів ПК відводиться медицині. Існує перелік профілактичних заходів для користувачів ПК, що включає як складові первинної профілактики здоров'я (професійний відбір), так і вторинної, яка направлена на зниження ймовірності розвитку перевтоми та перенапруження. Ці комплексні заходи спрямовані на відновлення функціонального стану зорового та опорно-рухового апарату.

Гігієнічні вимоги до організації та обладнання робочих місць з ПК.

Згідно з ДСТУ 7299:2013 та ДСТУ 7951:2015, робоче місце оператора ПК повинно відповідати таким вимогам:

- Розташування обладнання: екран монітора слід розміщувати на відстані 600–700 мм від очей користувача, з кутом нахилу, що забезпечує зручне зорове спостереження. Висота верхнього краю екрана не повинна перевищувати рівень очей користувача. Ідеально, щоб центр екрана знаходився на 10–15° нижче горизонтальної лінії погляду.
- Клавіатура та миша: клавіатура повинна бути розташована на відстані 100–300 мм від краю столу, з можливістю регулювання кута нахилу в межах 5–15°. Миша в свою чергу має розташовуватись на одному рівні з клавіатурою та в зоні легкої досяжності, щоб уникати зайвих рухів та перенапруження кистей.

- Крісло оператора: відповідно до ДСТУ 7951:2015, крісло має бути регульованим по висоті, з підлокітниками та спинкою, що забезпечують підтримку правильної постави.
- Освітлення: природне світло повинно надходити збоку, переважно зліва. Штучне освітлення має відповідати нормам ДСТУ EN 12464-1:2016, забезпечуючи рівномірне освітлення без відблисків на екрані.
- Мікроклімат: параметри мікроклімату в приміщенні повинні відповідати вимогам ДСН 3.3.6.042-99, тобто температура повітря в межах 22–24°C в холодну пору року і 23–25°C в теплу, відносна вологість повітря 40–60%, окрім того, повітря не повинно містити пилу, газів, шкідливих парів чи запахів, концентрації яких перевищують ГДК.

Вимоги до режимів праці і відпочинку при роботі з ПК. При організації праці, пов'язаної з використанням ЕОМ і ПЕОМ, для збереження здоров'я працюючих, запобігання професійним захворюванням і підтримки працездатності передбачаються внутрішньозмінні регламентовані перерви для відпочинку. Внутрішньозмінні режими праці і відпочинку містять додаткові нетривалі перерви в періоди, що передують появі об'єктивних і суб'єктивних ознак стомлення і зниження працездатності. Впродовж робочої зміни мають передбачатися:

- перерви для відпочинку і вживання їжі (обідні перерви);
- перерви для відпочинку і особистих потреб (згідно з трудовими додаткові
- перерви, що вводяться для окремих професій з урахуванням особливостей трудової діяльності.

За характером трудової діяльності розрізняють три професійні групи, згідно з діючим класифікатором професій (ДК-003-95 і Зміна N1 до ДК-00395):1):

- розробники програм (інженери-програмісти) виконують роботу з ЕОМ та документацією при необхідності інтенсивного обміну інформацією з ЕОМ і високою частотою прийняття рішень. Робота характеризується інтенсивною розумовою творчою працею з підвищеним напруженням зору, концентрацією уваги на фоні нервово-емоційного напруження, вимушеною робочою позою, загальною гіподинамією, періодичним навантаженням на

- кисті верхніх кінцівок. Робота виконується в режимі діалогу з ЕОМ у вільному темпі з періодичним пошуком помилок в умовах дефіциту часу;
- оператори електронно-обчислювальних машин виконують роботу, пов'язану з обліком інформації, одержаної з ВДТ за попереднім запитом, або тієї, що надходить з нього, супроводжується перервами різної тривалості, пов'язана з виконанням іншої роботи і характеризується напруженням зору, невеликими фізичними зусиллями, нервовим напруженням середнього ступеня та виконується у вільному темпі;
 - оператор комп'ютерного набору виконує одноманітні за характером роботи з документацією та клавіатурою і нечастими нетривалими переключеннями погляду на екран дисплея, з введенням даних з високою швидкістю. Робота характеризується як фізична праця з підвищеним навантаженням на кисті верхніх кінцівок на фоні загальної гіподинамії з напруженням зору (фіксація зору переважно на документи), нервово-емоційним напруженням. Правилами встановлюються такі внутрішньо змінні режими праці та відпочинку при роботі з ЕОМ при 8-годинній денній робочій зміні в залежності від характеру праці: - для розробників програм із застосуванням ЕОМ слід призначати регламентовану перерву для відпочинку тривалістю 15 хвилин через кожну годину роботи за ВДТ;

Для операторів із застосуванням ЕОМ слід призначати регламентовані перерви для відпочинку тривалістю 15 хвилин через кожні дві години; - для операторів комп'ютерного набору слід призначати регламентовані перерви для відпочинку тривалістю 10 хвилин після кожної години роботи за ВДТ. У всіх випадках, коли виробничі обставини не дозволяють застосувати регламентовані перерви, тривалість безперервної роботи з ВДТ не повинна перевищувати 4 години. При 12-годинній робочій зміні регламентовані перерви повинні встановлюватися в перші 8 годин роботи аналогічно перервам при 8-годинній робочій зміні, а протягом останніх 4-х годин роботи, незалежно від характеру трудової діяльності, через кожну годину тривалістю 15 хвилин.

Для зниження нервово-емоційного напруження, стомлення зорового аналізатора, поліпшення мозкового кровообігу, подолання несприятливих наслідків гіподинамії, запобігання втомі доцільно деякі перерви використовувати для виконання комплексу вправ, які наведені у Державних санітарних правилах і нормах роботи з ПК електронно обчислювальних машин ДСанПІН 3.3.2.007-98.

ВИСНОВКИ

Основні практичні результати, що подано в дипломній роботі є наступними.

Розроблено математичні моделі, що відповідають прямій та оберненій задачі дифузії у мікропористих зразках, що мають циліндричну симетрію. Для отриманих математичних моделей розроблено скінченно-різницеві схеми, апроксимуючі їх у вигляді сіткових задач.

Шляхом алгоритмізації скінченно-різницевих схем у програмному середовищі Wolfram Mathematica, розроблено програмну систему, яку було застосовано до ідентифікації коефіцієнтів дифузії на основі аналізу масивів експериментально отриманих даних розподілу концентрації бензену та гексану.

Виконано верифікацію розвинених математичних моделей шляхом застосування отриманих із оберненої задачі дифузії параметрів до моделювання концентраційних розподілів у інших зразках з порівнянням модельних результатів із експериментальними. Крім того розроблено програмні компоненти, що дозволяють виконувати просторову візуалізацію концентрації летких сполук у циліндричних зразках та змінювати їхні прецизійні параметри.

Для розроблених програмних компонент розроблено об'єднуючу їх архітектуру програмного комплексу, що забезпечує окрім роботи з основним складовими, що реалізують пряму та обернену задачі дифузії можливість здійснювати попередню обробку вхідних даних, порівнювати числові та візуалізовані результати. Розроблений людино-машинний інтерфейс полегшує роботу із складовими програмного комплексу, дозволяючи змінювати вхідні параметри математичних моделей та експортувати отримані результати як в числовому так і графічному форматах.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. C. Wang, T. Aztiria, P. Rzepka. Structural Changes of ZSM-5 Catalysts during Methanol-to-Hydrocarbons Conversion Processes // ACS Catalysis. 2024. №14. P. 12410–12424.
2. S. Zhao, W. David, W. Lizhuo. Tuning Hierarchical ZSM-5 Zeolite for Both Gas- and Liquid-Phase Biorefining // ACS Catalysis. 2020. №2. P. 1185–1194.
3. H. Zhang, Z. Hu, L. Huang, H. Zhang, K. Song. Dehydration of Glycerol to Acrolein over Hierarchical ZSM-5 Zeolites: Effects of Mesoporosity and Acidity // ACS Catalysis. 2015. №5. P. 2548–2558.
4. F. Martinovic, S. Ballauri, N. Blangetti, S. Bensaid. Dehydration of Glycerol to Acrolein over Hierarchical ZSM-5 Zeolites: Solid-state ion exchange of Fe in small pore SSZ-13 zeolite: Characterization of the exchanged species and their relevance for the NO_x SCR reaction // Applied Catalysis A: General. 2023. №25. P. 119160.
5. F. Martinovic, S. Ballauri, N. Blangetti, S. Bensaid. Effect of Fe addition on the structure and SCR reactivity of one-pot synthesized Cu-SSZ-13 // Journal of Environmental Chemical Engineering. 2022. №10. P. 107888.
6. M.R. Wicaksono , I.P. Handayani , L. Andiani , I. Chandra , S.A. Muminati , N.P.E. Kusuma Wardhani , T. Verasta. Molecular sieve 13X activated zeolite for CO₂ filter in air purifier // Materials Today: Proceedings. 2024 №3. P. 16.
7. Y. Zhang, Y. Zhou. Optimal design of silver-loaded zeolite filter structure based on porous media model // Separation and Purification Technology. 2024 №334. P. 125905.
8. S. Yoo, G. H. Jang, D. H. Kim. Effects of dealumination on the methane-combustion activity of Pd/SSZ-13 catalysts // Applied Catalysis A: General. 2024 №670. P. 119528.
9. H. Hazar, R. Tekdogan , H. Sevinc. Determination of the effects of oxygen-enriched air with the help of zeolites on the exhaust emission and performance of a diesel engine // Energy. 2021 №1. P. 121455.

10. М. Р. Петрик, І. В. Бойко, О. М. Хіміч, М. М. Петрик. Високопродуктивні суперкомп'ютерні технології моделювання та ідентифікації складних нанопористих кіберсистем зі зворотними зв'язками для багатокомпонентної конкуритивної адсорбції // Кібернетика та системний аналіз. 2020. в. 5. с. 174-186.

11. М. Р. Петрик, І. В. Бойко, О. М. Хіміч, М. М. Петрик. Високопродуктивні суперкомп'ютерні технології моделювання та ідентифікації складних нанопористих кіберсистем зі зворотними зв'язками для п-компонентної конкуритивної адсорбції // Кібернетика та системний аналіз. 2021. т. 57. №2. с. 170-183.

12. М. Р. Петрик, О. М. Хіміч, М. М. Петрик. Моделювання адсорбції та десорбції вуглеводнів нанопористих каталізаторів систем нейтралізації вихлопних газів з використанням нелінійної ізотерми Ленгмюра з урахуванням енергії активації // Міжнародний науково-технічний журнал Проблеми керування та інформатики. 2018. №5. с.59-72.

13. Trott, M. (2024) The Mathematica GuideBook for Programming. Springer. Available at: <https://doi.org/10.1007/978-1-4419-8503-3>.

14. Villalobos Alva, J. (2024) Beginning Mathematica and Wolfram for Data Science: Applications in Data Analysis, Machine Learning, and Neural Networks. 2nd edn. Berkeley, CA: Apress. Available at: <https://doi.org/10.1007/979-8-8688-0348-2>.

15. Xue, D. and Pan, F. (2024) MATLAB and Simulink in Action. Singapore: Springer Nature Singapore. Available at: <https://doi.org/10.1007/978-981-99-1176-9>.

16. Nagar, S. (2017) Introduction to MATLAB for Engineers and Scientists: Solutions for Numerical Computation and Modeling. Berkeley, CA: Apress. Available at: <https://doi.org/10.1007/978-1-4842-3189-0>

17. Gander, W., Gander, M.J. and Kwok, F. (2014) Scientific Computing: An Introduction Using Maple and MATLAB. Cham: Springer. Available at: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-04325-8>

18. Nagar, S. (2017) Introduction to Scilab: For Engineers and Scientists. Berkeley, CA: Apress. Available at: <https://doi.org/10.1007/978-1-4842-3192-0>.

19. Rungsirisakun, R., Jansang, B., Pantu, P., Limtrakul, J. The adsorption of benzene on industrially important nanostructured catalysts (H-BEA, H-ZSM-5, and H-FAU): confinement effects // *Journal of Molecular Structure*. 2005. №733 (1-3). P. 239-246.
20. Meng, X., Lin, C., Zhang, Y., Qin, H., Shui, M. Mass Transfer Behavior of Benzene in Hierarchically Structured ZSM-5 // *Frontiers in Chemistry*. 2019. №7. P. 502.
21. Wang, D., Sun, H., Liu, W., et al. Hierarchical ZSM-5 zeolite with radial mesopores: Preparation, formation mechanism and application for benzene alkylation. *Front. Chem. Sci. Eng.* 2020. №14. P. 248–257.
22. Ouyang, C., Li, Y., & Li, J. The ZSM-5-Catalyzed Oxidation of Benzene to Phenol with N₂O: Effect of Lewis Acid Sites // *Catalysts*. 2019. №9(1). P. 44.
23. Castagnola, N., Kropf, A., Marshall, C. Studies of Cu-ZSM-5 by X-ray absorption spectroscopy and its application for the oxidation of benzene to phenol by air. // *Applied Catalysis A: General*. 2005. №290(1-2), P. 110–122.
24. Ji, Y., Yang, H., & Yan, W. Catalytic cracking of n -hexane to light alkene over ZSM-5 zeolite: Influence of hierarchical porosity and acid property. // *Molecular Catalysis*. 2018. № 448, P. 91–99.
25. Zhang, Q., Liu, X., Hu, S., Ye, G., Zhou, X., & Yuan, W. Optimal Design of Hierarchically Structured ZSM -5 Zeolites for n -Hexane Isomerization. // *AIChE*. 2021.№67, P. e17355.
26. ДСТУ 7299:2013 Дизайн і ергономіка. Робоче місце оператора. Взаємне розташування елементів робочого місця. Загальні вимоги ергономіки.
27. ДСТУ 7951:2015 Дизайн і ергономіка. Крісло оператора. Загальні ергономічні вимоги.
28. ДСТУ EN 12464-1:2016 Світло та освітлення. Освітлення робочих місць. Частина 1. Внутрішні робочі місця (EN 12464-1:2011, IDT).
29. ДСН 3.3.6.042-99 Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень.
30. Стищенко Т.Є., Пронюк Г.В., Сердюк Н.М., Хондак І.І. «Безпека життєдіяльності»: навч. посібник / Т.Є Стищенко, Г.В. Пронюк, Н.М. Сердюк, І.І. Хондак. – Харків: ХНУРЕ, 2018. – 336 с

31. ДСТУ ISO 6309:2007 Протипожежний захист. Знаки безпеки. Форма та колір.

32. Порядок надання домедичної допомоги постраждалим при ураженні електричним струмом або блискавкою: затв. наказом МОЗ України від 29.03.2022р. № 554, зареєстр. в Мін'юсті 06.04.2022 р. за № 356/37792 [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0356-22>

33. Надання долікарської допомоги при ураженні електричним струмом / уклад. О.Я. Гурик, І.Б. Окіпний. Тернопіль: Тернопільський національний технічний університет ім. І. Пулюя, 2019. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://dl.tntu.edu.ua/content.php?cid=289206>

ДОДАТКИ

**Додаток А. Програмна реалізація побудови просторової залежності концентрації
для процесу масопереносу у циліндричному зразку**

```
Manipulate[
Module[{dr, dz, dt, r, z, timeSteps, sol, D, u,
  maxU}, (*Просторові та часові кроки*)dr = rMax/nr;
dz = zMax/nz;
dt = 0.9 Min[dr^2, dz^2]/D0;
(*Область моделювання*)r = Range[0, rMax, dr];
z = Range[0, zMax, dz];
timeSteps = Ceiling[tMax/dt];
(*Початковий розподіл концентрації*)
u = Table[Exp[-(ri^2 + zi^2)], {ri, r}, {zi, z}];
(*Розв'язок методом скінченних різниць*)
Do[u = Table[
  If[i == 1 || i == nr + 1 || j == 1 ||
    j == nz + 1, (*Граничні умови*)0,
    u[[i, j]] +
    D0 dt ((u[[i + 1, j]] - 2 u[[i, j]] + u[[i - 1, j]])/
      dr^2 + (1/
        r[[i]] (u[[i + 1, j]] - u[[i - 1, j]])/(2 dr)) + (u[[i,
          j + 1]] - 2 u[[i, j]] + u[[i, j - 1]])/dz^2)), {i,
      nr + 1}, {j, nz + 1}];, {t, timeSteps}];
(*Обчислення максимального значення концентрації*)
maxU = Max[Flatten[u]];
(*Візуалізація*)
ListPlot3D[u/maxU, DataRange -> {{0, rMax}, {0, zMax}},
  ColorFunction -> "TemperatureMap", Mesh -> False,
  AxesLabel -> {"r", "z", "C"}], {{rMax, 5, "Радіус"}, 1, 10,
0.5}, {{zMax, 10, "Висота"}, 1, 20, 1}, {{nr, 20, "Розподіл по r"},
10, 50, 1}, {{nz, 40, "Розподіл по z"}, 10, 100,
1}, {{D0, 0.1, "Коефіцієнт дифузії"}, 0.01, 1,
0.01}, {{tMax, 5, "Час симуляції"}, 1, 10, 1},
ControlPlacement -> Top]
```

Додаток Б. Тези доповіді на конференції

Міністерство освіти і науки України
 Тернопільський національний технічний університет
 імені Івана Пулюя
 Маріборський університет (Словенія)
 Технічний університет в Кошице (Словаччина)
 Каунаський технологічний університет (Литва)
 Львівський національний університет
 імені Івана Франка,
 Гірничо-металургійна академія ім. Станіслава Сташиця (Польща)
 Луцький національний технічний університет,
 Чернівецький національний університет
 імені Юрія Федьковича,
 Вроцлавський економічний університет (Польща)
 Університет технологій та економіки
 імені Хелени Ходковської (Польща)
 Донбаська державна машинобудівна академія



*Студентське наукове
товариство*



VIII МІЖНАРОДНА
студентська науково - технічна конференція

**"ПРИРОДНИЧІ ТА ГУМАНІТАРНІ
 НАУКИ.**

АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ"

24-25 квітня 2025 р.

(збірник тез конференції)

Тернопіль 2025

Мицак В. ДОЦІЛЬНІСТЬ ВЛАСНОГО АВТОМОБІЛЯ В СУЧАСНИХ МІСТАХ	178
Монастирський М. РОЗРОБКА СЕРВІСУ-ПОРТФОЛІО ДЛЯ РОЗРОБНИКІВ ПРОГРМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ З ВИКОРИСТАННЯМ FLASK	179
Мордованець А. КОМП'ЮТЕРНА СИСТЕМА БЛОКУВАННЯ РЕКЛАМИ В ЛОКАЛЬНІЙ МЕРЕЖІ НА БАЗІ RASPBERRY PI	180
Мульський С. СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО СТВОРЕННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ СИСТЕМ ДЛЯ УПРАВЛІННЯ КОМАНДНИМИ ПРОЦЕСАМИ	182
Ништа І. РОЗРОБКА МОБІЛЬНОГО ЗАСТОСУНКУ ДЛЯ РЕКОМЕНДАЦІЙ ФІЛЬМІВ З ВИКОРИСТАННЯМ REACT NATIVE	183
Олійник І. ТЕХНОЛОГІЇ ВЕБ-РОЗРОБКИ КЛІЄНТ-СЕРВЕРНОГО РІШЕННЯ ДЛЯ ІНТЕРНЕТ-КОМЕРЦІЇ	184
Недошитко Л., Пйонтковський О. НЕЙРОМОРФНІ ЧИПИ	186
Підлипський Р. ПРОГРАМНИЙ МОДУЛЬ АНАЛІЗУ ФАЙЛІВ ЛОГУВАННЯ АНТИВІРУСНОГО ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ	188
Прачук М. ПРОГРАМНА СИСТЕМА ДЛЯ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ПАРАМЕТРІВ ДИФУЗІЇ В МІКРОПОРИСТИХ ЗРАЗКАХ	190
Пришляк В. РОЗРОБКА ІНФОРМАЦІЙНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ РЕМОНТУ І ПРОДАЖУ АВТОМОБІЛЬНИХ ДЕТАЛЕЙ ЗА ДОПОМОГОЮ PHP	191
Пясецький Д. ПРОЕКТУВАННЯ ТА РОЗРОБКА МАРКЕТПЛЕЙСУ З МЕХАНІЗМОМ РЕКОМЕНДОВАНИХ ТОВАРІВ НА БАЗІ REACT ТА C#	192
Боднарчук І., Ралік І. CRM-СИСТЕМА ЯК ВИСОКОПРОДУКТИВНА ОБЧИСЛЮВАЛЬНА СИСТЕМА	193
Романський С. ПРОЕКЦІЇ ПАНОРАМНИХ ЗОБРАЖЕНЬ	194

УДК 004.942

Прачук М.—ст. гр. СП-42

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

ПРОГРАМНА СИСТЕМА ДЛЯ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ПАРАМЕТРІВ ДИФУЗІЇ В МІКРОПОРИСТИХ ЗРАЗКАХ

Науковий керівник: к.ф.-м.н., доцент Бойко І. В.

Prachuk M.

Ternopil Ivan Puluj National Technical University

SOFTWARE SYSTEM FOR IDENTIFYING DIFFUSION PARAMETERS IN MICROPOROUS SAMPLES

Supervisor: Ph.D. in Physics and Mathematics, associate professor Boyko I.V.

Ключові слова: обернена задача, математична модель, ідентифікація параметрів дифузії
 Keywords: inverse problem, mathematical model, identification of diffusion parameters

Обробка значної кількості даних, які отримуються в ході експериментальних досліджень більшості точних та природничих дисциплін, а також під час супроводу технологічних процесів фактично завжди приводить до необхідності встановлення загальної сукупності активних параметрів, що виступають в якості чинників, визначаючих просторові залежності та часові залежності досліджуваних процесів. Такі проблеми вже давно вийшли за межі класичних дисциплін та напрямів, для ефективної роботи доводиться застосовувати та розробляти нові методи, які належать до предметних областей інженерії програмного забезпечення та комп'ютерних наук. Згадані проблеми в останні роки все частіше виникають про дослідженні процесів дифузійного переносу в різноманітних функціональних матеріалах – цеолітах, що мають складну мікропористу структуру.

Щоб підійти до вирішення проблеми розробки такого програмного забезпечення слід виконати розбиття його на складові підсистеми, а самий процес розбити на декілька кроків. В загальному випадку необхідні параметри можуть бути встановлені у кілька етапів. На першому етапі слід виконати побудову математичних моделей процесів й шляхом підстановки експериментально отриманих даних виконати розв'язати обернену задачу, що дозволить ідентифікувати необхідні параметри, зокрема коефіцієнти дифузії. На другому етапі слід використати отримані параметри для верифікації більш загальних моделей, змінюючи вхідні параметри матеріалів, їхні прецизійні характеристики. Завершальним етапом є розробка архітектури програмної системи, інтерфейсу забезпечуючого взаємодію користувачів із програмною системою, що дозволить здійснити її специфікацію та в певній мірі забезпечити її загальний характер. В даній роботі згадані проблеми вирішено шляхом розробки математичних моделей для прямої та оберненої задач дифузії у мікропористих функціональних матеріалах із циліндричною геометрією. Для розроблених математичних моделей виконано їх представлення у вигляді скінченно-різницевої схем, що апроксимують вихідні рівняння масопереносу, початкові та граничні умови до них. Розроблено архітектуру програмної системи, що полягає у розподіленій роботі із її компонентами, зміні вхідних параметрів зразків, можливості обробки вхідних даних, необхідних для роботи із проблемами із ідентифікації параметрів.

Додаток В. Диск з роботою