

Використання системи комп'ютерної математики MathCAD у фармації



© НФаУ, кафедра фармакоінформатики, Харків – 2011



Зміст

ЗМІСТ	2
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №1	3
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №2	13
<i>Завдання для самостійної роботи</i>	25
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №3	30
<i>Завдання для самостійної роботи</i>	39
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №4	46
<i>Завдання для самостійної роботи</i>	56
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №5	59
<i>Завдання для самостійної роботи</i>	80
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:	85


Лабораторна робота №1

Основні функції системи комп'ютерної математики MathCAD. Обчислення в системі MathCAD

Тема: Знайомство з пакетом MathCAD й огляд можливостей програми.

Мета: Набути основних навичок роботи в системі MathCAD.

Завдання 1

Запустіть програму MathCAD за допомогою ярлику на робочому столі або меню *Пуск*  ► *Всі програми* ► *MathSoft Apps* ► *MathCAD* ► *MathCAD 13*.

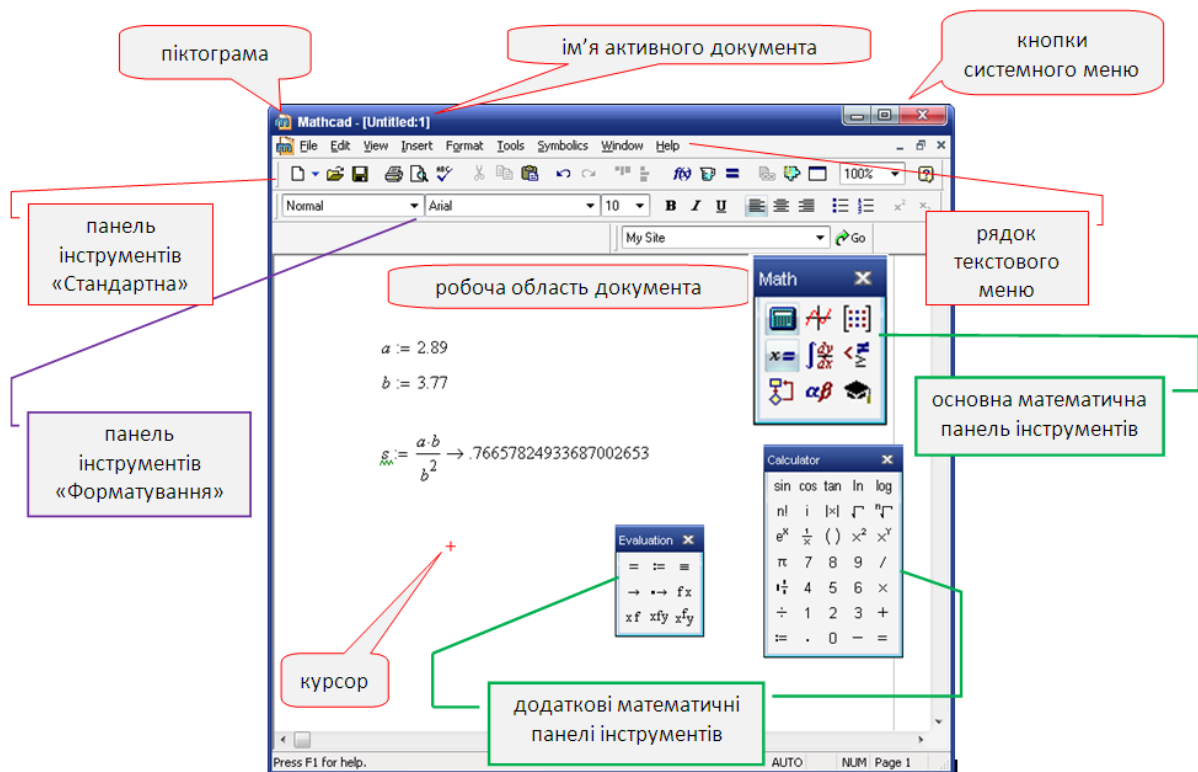





Рис.1. Структура робочого вiкна програми MathCAD.

Уважно ознайомтеся з виглядом робочого вiкна програми, звернiть увагу на елементи iнтерфейсу, що спiвпадають з вiдомими Вам програмами Office й на вiдмiннi особливостi iнтерфейсу математичного пакета.

Довiдкава iнформацiя:

Структуру робочого вiкна MathCAD можна бачити на рис.1. Воно, як i вiкно будь-якої програми Windows, складається з наступних основних елементiв: заголовок вiкна – верхнiй рядок вiкна, де розташованi (злiва напра-

во) піктограма та назва програми, ім'я відкритого документа, справа – кнопки системного меню (зміни розмірів, згортання, закриття).

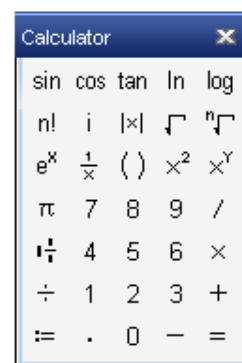
У рядку текстового меню MathCAD згруповані команди за розділами: Файл (File), Редагування (Edit), Вигляд (View), Вставка (Insert), Формат (Format), Сервіс (Tools), Символіка (Symbolics), Вікно (Window), Довідка (Help). Нижче рядку меню розташовані панелі інструментів Стандартна й Форматування. Панель інструментів Стандартна містить кнопки для здійснення стандартних операцій з файлами документів (відкриття, збереження, створення нового документа, друк, попередній перегляд, масштаб, команди роботи с буфером обміну і т.ін.). Слід зазначити характерні саме для MathCAD операції, що віднесені на цю панель. Це вставка вбудованої функції – , вставка одиниць вимірювання –  й обчислення робочого аркуша – .


За допомогою панелі інструментів Форматування можна налаштувати параметри шрифту та абзацу.

Найбільшу частину вікна займає аркуш документа – робоча область програми, де виконуються всі обчислення. Розрахунки в MathCAD дуже полегшуються, якщо використовувати математичні панелі інструментів, кнопки виклику яких знаходяться на панелі інструментів Математика (Math). Кожна з цих панелей призначена для виконання операцій певної категорії.

Калькулятор (**Calculator**) містить набір арифметичних інструментів, а також кнопки деяких найбільш часто вживаних функцій.

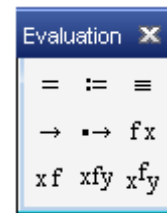
Панель графіків – **Graph**, складається з кнопок виклику шаблонів побудови різноманітних видів графіків: декартових, полярних, ліній рівня, поверхонь і т.ін.



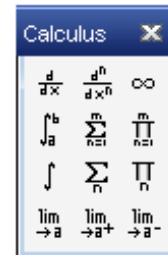
Панель векторних та матричних операцій (**Matrix**) призначена для введення матриць і векторів та виконання з ними стандартних операцій (обернення, транспонування, вибір компоненти, обчислення векторного й скалярного добутку, і т.ін.) На цій самій панелі знаходиться кнопка вводу дискретного аргументу .



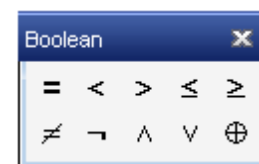
Панель **Evaluation** (обчислення) містить кнопки операторів локального й глобального присвоєння, знаки рівності й символічної рівності (обчислення), і т.ін.



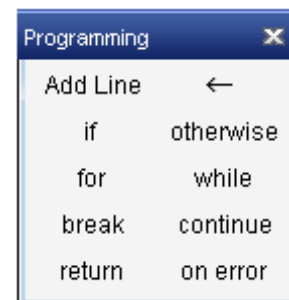
Панель операцій математичного аналізу (**Calculus**) дозволяє знаходити границі, похідні й первісні (інтеграли) функцій, визначені інтеграли, а також добутки та суми рядів. На ній також знаходиться кнопка введення знаку ∞ (нескінченність).



Панель відношень (**Boolean**) містить знаки операцій булевої алгебри (логічні оператори): оператори порівняння, заперечення, кон'юнкції (логічне І), диз'юнкції (логічне АБО) та інші логічні оператори.



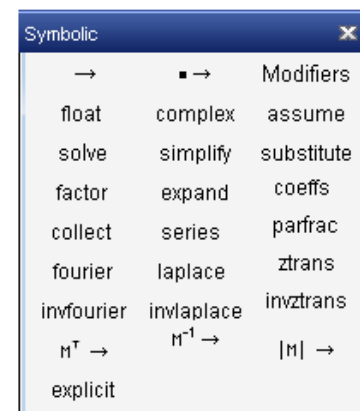
За допомогою кнопок панелі програмування (**Programming**) безпосередньо у документі MathCAD можна створювати підпрограми для виконання тих чи інших операцій з обчислення або виконання інших дій. Кожна кнопка цієї панелі викликає той чи інший оператор програмування.



Панель грецьких літер (**Greek**) дозволяє використовувати в іменах змінних (чи функцій користувача) символи не тільки латинці або кирилиці.



Ключові слова символічних обчислень розташовані на математичній панелі інструментів **Symbolic**. Це кнопки найбільш часто вживаних вбудованих функцій MathCAD.



Завдання 2

Засвойте порядок проведення простих арифметичних обчислень в MathCAD. Обчисліть значення таких виразів:

$$25 + \frac{12}{3}; \quad \frac{7}{13} + 35; \quad \frac{45^3}{255 - 46 \cdot 2}; \quad \frac{\sqrt[3]{125 + \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)}}{0.82^4};$$
$$\frac{78.4 + e^{\frac{1}{2} \cdot \pi^2}}{\log(5)}; \quad \frac{\sqrt{\sin\left(\frac{\pi}{5}\right) + 4}}{(\ln|e^5| + 3)^2}.$$

Для отримання першого результату наберіть з клавіатури послідовно: 25, +, 12, /, 3, =. Для введення можна також використовувати математичну панель інструментів Calculator. Після введення знаку рівності на екрані повинен з'явитися результат (29). Якщо цього не сталося, перевірте, чи увімкнено в Вашому документі *автоматичну калькуляцію* (Automatic Calculation) – ця опція знаходиться у розділі **Tools** ► **Calculate** ► **Automatic Calculation** головного меню MathCAD.

Другий результат обчисліть двома способами: з використанням стандартного знаку рівності (=) й символічного (→), що знаходиться на математичній панелі інструментів Evaluations (Обчислення). Зверніть увагу, що в першому випадку розрахунки виконуються приблизно з точністю 0.0001, а в другому точно й результат відображається у вигляді неправильного дробу.

При обчисленнях можна відображати одночасно обидва результати, використовуючи послідовно спочатку символічний знак рівності, а потім звичайний:

$$\frac{7}{13} + 35 \rightarrow \frac{462}{13} = 35.538$$

Значення останніх чотирьох виразів знайдіть у символічному й чисельному (приблизному) вигляді.

Завдання 3

Щоб ознайомитися з правилами використання змінних в MathCAD розв'яжіть задачу за описом, що наведено нижче:

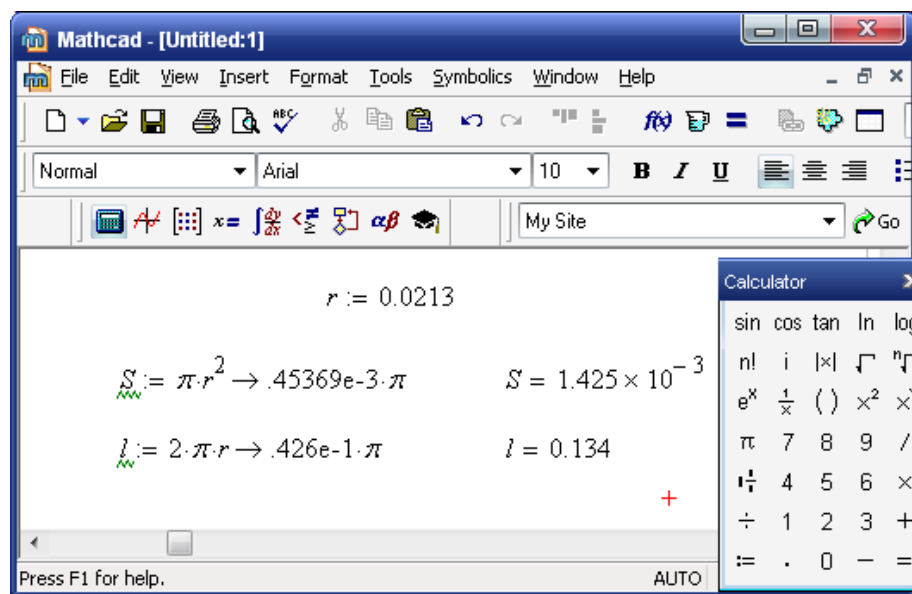
Знайти площу й довжину кола, що має радіус 0,0213. (Площа кола S обчислюється за формулою $\pi \cdot r^2$, довжина кола ℓ дорівнює $2 \cdot \pi \cdot r$, де r – радіус кола)

Почнемо з вводу змінної r . Для цього введіть з клавіатури послідовно $r, :$ (після вводу символу двокрапка на екрані з'явиться знак присвоєння $:=$), потім число 0.0213. Знак присвоєння можна також ввести, використовуючи панель Calculator (Калькулятор) або панель Evaluation (Обчислення).

Далі введемо змінну S , що позначає площу: $S := \pi \cdot r^2$. В цьому ж блоці можна й обчислити значення S у символічному вигляді, натиснувши знак \rightarrow після формули. Якщо необхідно отримати чисельний результат, наберіть окремо $S =$.

Аналогічно вводимо змінну l й обчислюємо її значення.

Якщо Ви виконали правильно всі вказівки, повинні отримати таке:



Примітка: Якщо Ви використовуєте при обчисленнях змінні, то задання змінної (надання їй якого-небудь значення) обов'язково повинно передувати (тобто бути розташовано вище чи зліва) її використанню у формулах.

Завдання 4

Знайдіть площу й довжину кола, що має радіус 0,2;
площу та довжину кола, що має радіус 5,55.

Завдання 5

Знайдіть відстань h , що здолана матеріальним тілом при падінні у вакуумі, якщо час падіння τ дорівнює 5 секунд, прискорення вільного падіння g прийміть рівним $9,8 \text{ м/сек}^2$. (Відстань дорівнює $\frac{g\tau^2}{2}$.)

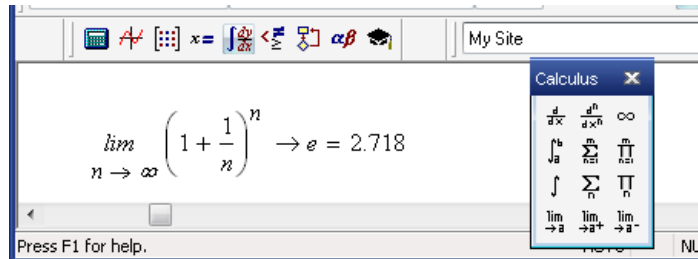
Завдання 6

Знайдіть значення границь у символічному і чисельному вигляді:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n, \quad \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\operatorname{atan}(2 \cdot x)^2}{3 \cdot x \cdot \sin(x)}, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \left(\frac{2 \cdot x + 3}{2 \cdot x - 1}\right)^{x+4},$$
$$\lim_{x \rightarrow 1} \left(\frac{2}{x^2 - 1} - \frac{1}{x - 1}\right).$$

Для введення спеціальних знаків використовуйте математичну панель інструментів Calculus.

Приклад обчислень:



Завдання 7

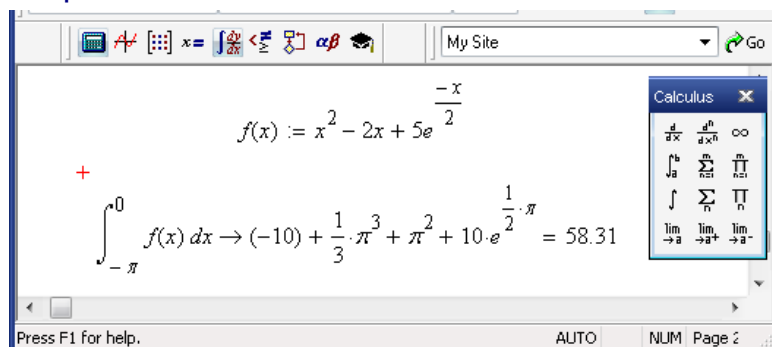
Обчисліть визначені інтеграли:

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos\left(\frac{x}{2}\right) dx; \quad \int_{-3}^2 \sin(x) dx; \quad \int_0^2 f(x) dx, \text{ де } f(x) = x^2 - 6x + 5;$$

$$\int_{-\pi}^0 f(x) dx, \text{ де підінтегральна функція дорівнює } x^2 - 2x + 5 \cdot e^{-\frac{x}{2}}.$$

Скористайтесь математичною панеллю інструментів Calculus та знаками символічної та звичайної рівності.

Приклад обчислень:



Завдання 8

Знайдіть первісні функції:

$$\exp\left(\frac{x}{2}\right) + x, \quad \frac{-1}{1+x^2}, \quad \sin\left(x - \frac{1}{2}\right).$$

Скористайтеся математичною панеллю інструментів Calculus для введення знаку інтеграла й символічним знаком рівності для отримання результату.

Завдання 9


Знайдіть похідні першого та другого порядку від наступних функцій:

$$\exp\left(\frac{x}{2}\right) + x, \quad \frac{-1}{1+x^2}, \quad \sin\left(x - \frac{1}{2}\right).$$

Використовуйте математичну панель інструментів Calculus для введення оператора похідної та символічний знак рівності для отримання результату.

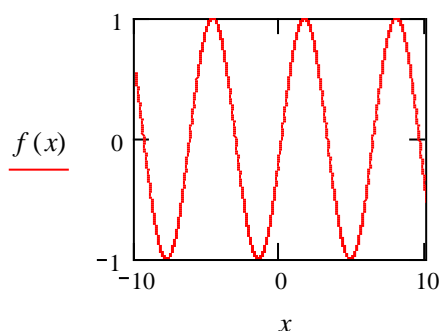
Завдання 10

Побудуйте графік функції $\sin(x)$ на інтервалі зміни аргументу від -2π до 2π .

Для цього спочатку визначте функцію $f(x) := \sin(x)$. Потім увімкніть математичну панель інструментів Graph й виберіть на ній інструмент "декартов графік" (**X-Y Plot**) – . На аркуші з'явиться шаблон для побудови графіка з пустими полями знизу та зліва від області побудови графіку. У полі, що нижче необхідно ввести ім'я аргументу (x), а в полі, що зліва – ім'я функції ($f(x)$). Потім натиснути <Enter> на клавіатурі.

Якщо Ви виконали інструкції вірно, на аркуші документа MathCAD відобразиться наступне:

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



Зверніть увагу, що за замовчанням використовується діапазон зміни аргументу x від -10 до 10 , а діапазон зміни функції – від її мінімального до її максимального значення на цьому інтервалі (від -1 до 1).

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

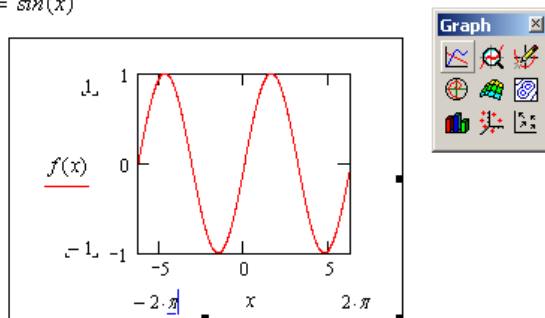


Рис.2. Зміна діапазону значень аргументу функції для відображення на декартовому графіку.

Щоб змінити діапазон аргументу, клікніть один раз лівою клявішею миші на області побудови графіка. При цьому активуються для редагування поля для лівої та правої границь діапазону (дивись позицію курсору на рис.2). Введіть в ці поля нові значення. Аналогічно можливі змінити верхню та нижню границі діапазону значень функції.

Завдання 11

Побудуйте графіки функцій:

$$a \sin(x-1) \cdot x^2; \quad a \cos(x+5) \cdot x^2 - \frac{\pi}{8}; \quad x \cdot \sin\left(x + \frac{\pi}{2}\right);$$

$$e^{-x^2} \text{ при } x \text{ від } -2,5 \text{ до } 2,5;$$

$$\frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \text{ при } x, \text{ що змінюється від } -2,5 \text{ до } 2,5, \text{ та діапазоні зміни значень функції від } -0,1 \text{ до } 0,5.$$

Завдання 12

Побудуйте графіки функцій $f(x) := \sin\left(2x + \frac{\pi}{3}\right)$ й $g(x) := \cos\left(\frac{x}{2} - \frac{\pi}{5}\right) + \frac{1}{2}$, розташували лінії графіків в одній області побудови.

Для того щоб відобразити графіки декількох функцій на одній області побудови, вкажіть імена функцій у відповідному полі через кому. Наприклад, як показано на рис.3.

$$f_1(x) := e^{-x^2} \quad f_2(x) := \sin\left(3x - \frac{\pi}{8}\right) + 0.95 \quad f_3(x) := \frac{x^2}{6}$$

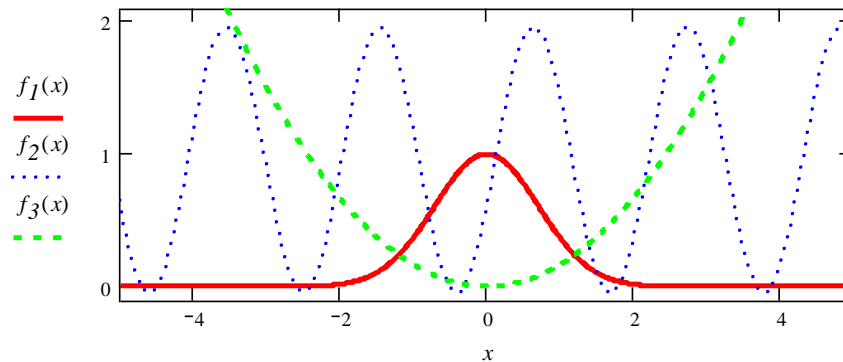


Рис.3. Відображення декартових графіків декількох функцій на одній області побудови.

Примітка: Щоб змінити параметри форматування графіка, необхідно виконати подвійний клік лівою клавiшею миші на області побудови, викликавши таким чином вікно його параметрів. За допомогою вкладки **X-Y Axes** (Осі X-Y) цього вікна налаштовуються вигляд осей, шкали, ліній сітки (grids), і т.ін. Відкривши вкладку **Traces** (Лінії), можна змінити вигляд кожної лінії з тих, що відображені на графіку. Вкладка **Labels** (Заголовки чи Примітки) дозволить задати заголовок графіку або підписи до координатних осей.

Завдання 13

Розв'яжіть систему нелінійних рівнянь:
$$\begin{cases} x^3 + \sin y = 25 \\ y^2 - \cos x = 27 \end{cases}$$

Стандартний метод розв'язку рівнянь та систем – конструкція (блок розв'язку) Given—Find. Для її коректного використання виконайте наступні кроки.

1. задайте початкові значення змінним x та y , що їх треба відшукати:

$$x := 1 \quad y := 1$$

2. введіть оператор Given за допомогою клавіатури, а потім саму систему:

Given

$$x^3 + \sin(y) = 25$$

$$y^2 - \cos(x) = 27$$

Коли друкуєте рівняння, використовуйте знак так званого «жирного» рівняння – логічний оператор «дорівнює». Його треба вводити за допомогою відповідної кнопки на математичній панелі інструментів **Boolean** (Булево, Логічне) або сполучення клавіш Ctrl + =.

3. використайте функцію Find для знаходження розв'язку системи:

$$Find(x, y) = \begin{pmatrix} 2.96 \\ 5.101 \end{pmatrix} .$$

Аргументами функції Find слугують невідомі змінні (в нашому випадку вказуємо через кому x та y). Після натиснення знака рівності на екрані з'явиться вектор відповідей, перша компонента якого – значення невідомої змінної x , друга – значення невідомої змінної y .

Завдання 14

Знайдіть розв'язки таких систем:

$$\begin{cases} t^2 + \cos w^3 = 5 \\ w^3 - \sin t^2 = -1 \end{cases} ; \quad \begin{cases} 5 \cdot z + 30 \cdot q = 22 \cdot 4.25 \\ 85 \cdot z = 16 \cdot 4.25 \\ 10 \cdot z + 100 \cdot h + 70 \cdot q = 62 \cdot 4.25 \end{cases} .$$

Лабораторна робота №2

Побудова математичних моделей і розв'язок медико-фармацевтичних задач на основі систем лінійних рівнянь

Тема: *Різні методи розв'язання систем лінійних рівнянь засобами пакету MathCAD.*

Мета: *Набути навичок побудови математичних моделей задач, що дозволяють представлення у вигляді систем лінійних рівнянь, їх розв'язання в MathCAD та вірного трактування результатів.*

Завдання 1

Складіть математичну модель наступної задачі та розв'яжіть її засобами MathCAD.

*Для виробництва препаратів **A**, **B** та **C** використовуються компоненти (сировина) **1**, **2** та **3**. Запас цих компонентів в тоннах складає Z_1 , Z_2 і Z_3 відповідно. Для виготовлення однієї таблетки препарату **A** необхідно a_1 мг компоненту **1**, a_2 мг компоненту **2** й a_3 мг компоненту **3**. Аналогічні величини відомі для препаратів **B** та **C**: b_1 , b_2 , b_3 й c_1 , c_2 , c_3 .*

Необхідно визначити, скільки таблеток кожного препарату можна виготовити, якщо використати усі запаси сировини, що є у наявності.

Значення параметрів a_i , b_i , c_i та Z_i ($i=1, 2, 3$) наведені в таблиці 1.

Таблиця 1.

	Витрати сировини (мг) на одну таблетку препарату			Запаси сировини (т)
	Препарат A	Препарат B	Препарат C	
Сировина 1	1	2	3	9
Сировина 2	3	2	1	12
Сировина 3	2	3	1	9

Складання математичної моделі задачі, що поставлено, почнемо з введення невідомих, які треба визначити. Позначимо x – кількість таблеток препарату **A**, які можна виготовити з сировини, що є у наявності, y – кількість таблеток препарату **B** та z – кількість таблеток препарату **C**. Тоді кількість мг сировини **1**, що використовується для виготовлення x таблеток препарату **A**, y таблеток препарату **B** та z таблеток препарату **C** може бути підрахована як сума доданків: $a_1 \cdot x + b_1 \cdot y + c_1 \cdot z$. Аналогічно, кількість мг сировини **2**, що використовується для виготовлення x таблеток препарату

A , y таблеток препарату B та z таблеток препарату C дорівнює $a_2 \cdot x + b_2 \cdot y + c_2 \cdot z$; а також кількість мг сировини Z , що використовується для виготовлення x таблеток препарату A , y таблеток препарату B та z таблеток препарату C дорівнює $a_3 \cdot x + b_3 \cdot y + c_3 \cdot z$. Виходячи з умови, що використані усі запаси компонентів 1 , 2 та 3 , що складають Z_1 , Z_2 та Z_3 тонн відповідно, можемо прирівняти $a_1 \cdot x + b_1 \cdot y + c_1 \cdot z = Z_1 \cdot 10^6$; $a_2 \cdot x + b_2 \cdot y + c_2 \cdot z = Z_2 \cdot 10^6$ та $a_3 \cdot x + b_3 \cdot y + c_3 \cdot z = Z_3 \cdot 10^6$.

Таким чином, підставляючи конкретні значення параметрів a_i , b_i , c_i та Z_i з таблиці 1, отримуємо математичну модель нашої задачі у вигляді системи лінійних рівнянь:

$$\begin{cases} x + 2 \cdot y + 3 \cdot z = 9 \cdot 10^6 \\ 3 \cdot x + 2 \cdot y + z = 12 \cdot 10^6 \\ 2 \cdot x + 3 \cdot y + z = 9 \cdot 10^6 \end{cases}$$

Розв'язок отриманої системи засобами MathCAD можливий декількома способами:

1-й спосіб (блок розв'язку Given—Find). Застосування конструкції Given—Find для розв'язку системи лінійних рівнянь показано на рис.4.

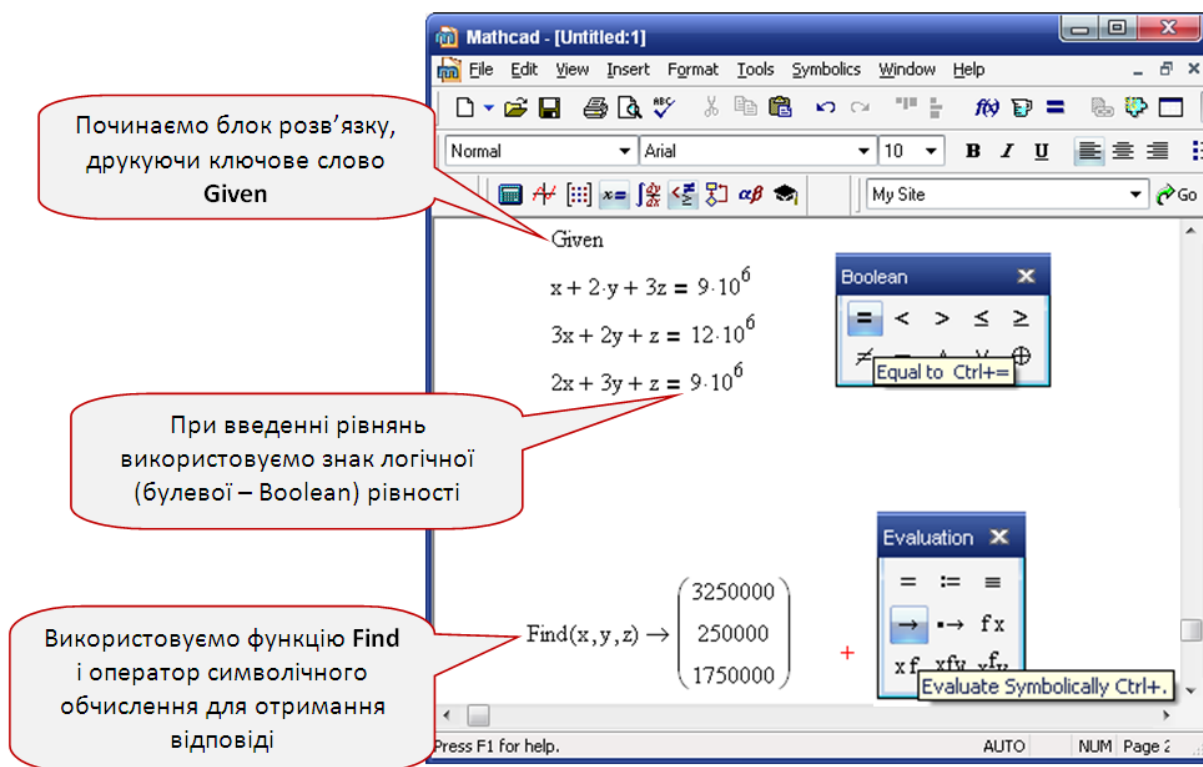
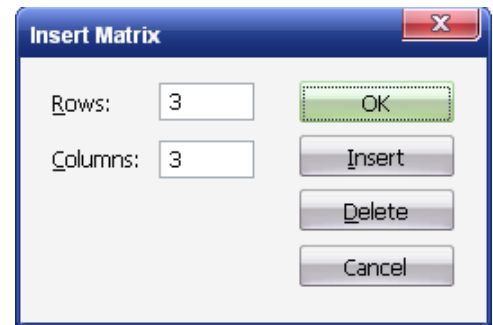
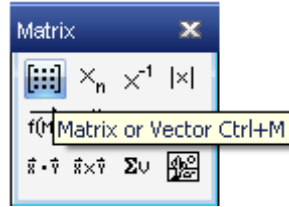


Рис.4. Використання конструкції Given—Find для розв'язку системи лінійних рівнянь.

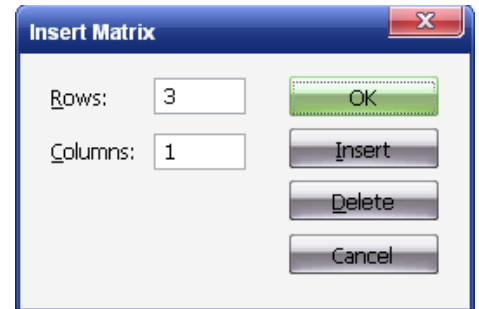
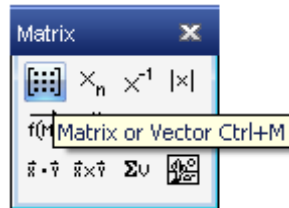
2-й спосіб (Метод Крамера). Реалізація методу Крамера в системі MathCAD виглядає наступним чином.

Записуємо матрицю системи A та вектор правих частин рівнянь b :

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$



$$b := \begin{pmatrix} 9 \\ 12 \\ 9 \end{pmatrix} \cdot 10^6 +$$

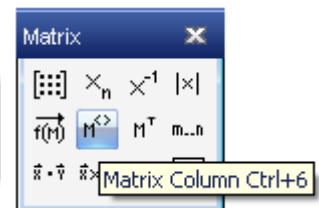


Зарезервованій змінній $ORIGIN$, що відповідає за початок відліку нумерації компонент матриці, задаємо значення 1:

$$ORIGIN := 1$$

За допомогою вбудованої функції $augment$ складаємо 3×3 –матрицю $A1$, яка є матрицею системи, перший стовпчик якої замінено на вектор b :

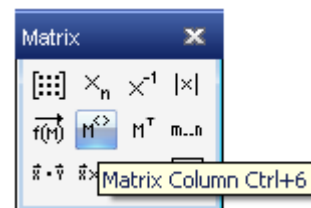
$$A1 := augment(b, A^{(2)}, A^{(3)}) \rightarrow \begin{pmatrix} 9000000 & 2 & 3 \\ 12000000 & 2 & 1 \\ 9000000 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$



Аналогічно визначаємо матриці $A2$ та $A3$, в яких вектор b підставляється замість другого та третього стовпчика матриці системи відповідно:

$$A2 := augment(A^{(1)}, b, A^{(3)}) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 9000000 & 3 \\ 3 & 12000000 & 1 \\ 2 & 9000000 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A3 := augment(A^{(1)}, A^{(2)}, b) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 9000000 \\ 3 & 2 & 12000000 \\ 2 & 3 & 9000000 \end{pmatrix}$$



Далі обчислюємо визначники (детермінанти) матриць A , $A1$, $A2$, $A3$ та знаходимо розв'язок системи за правилом Крамера:

$\Delta := |A| \rightarrow 12$

$\Delta 1 := |A1| \rightarrow 39000000$

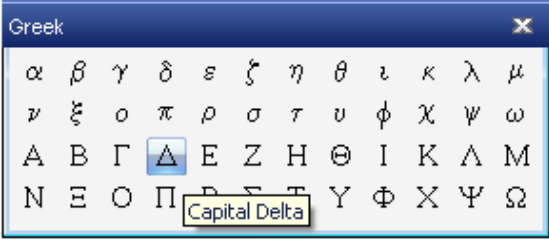
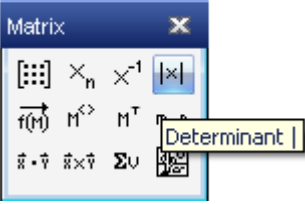
$\Delta 2 := |A2| \rightarrow 3000000$

$\Delta 3 := |A3| \rightarrow 21000000$

$x := \frac{\Delta 1}{\Delta} \rightarrow 3250000$

$y := \frac{\Delta 2}{\Delta} \rightarrow 250000$

$z := \frac{\Delta 3}{\Delta} \rightarrow 1750000$





3-й спосіб (Метод Гауса). У лінійній алгебрі метод Гауса зводиться до приведення розширеної матриці системи до діагонального виду за допомогою лінійних перетворень над її рядками. Розв'язком системи є останній стовпчик діагоналізованої матриці. У MathCAD'і діагоналізацію матриці може бути здійснено за допомогою вбудованої функції *rref*, а її стовпчик вилучено за допомогою кнопки $M^{<>}$ на панелі інструментів векторних та матричних операцій (**Matrix**).

Таким чином, необхідно ввести матрицю системи й вектор правих частин рівнянь:

$A := \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$

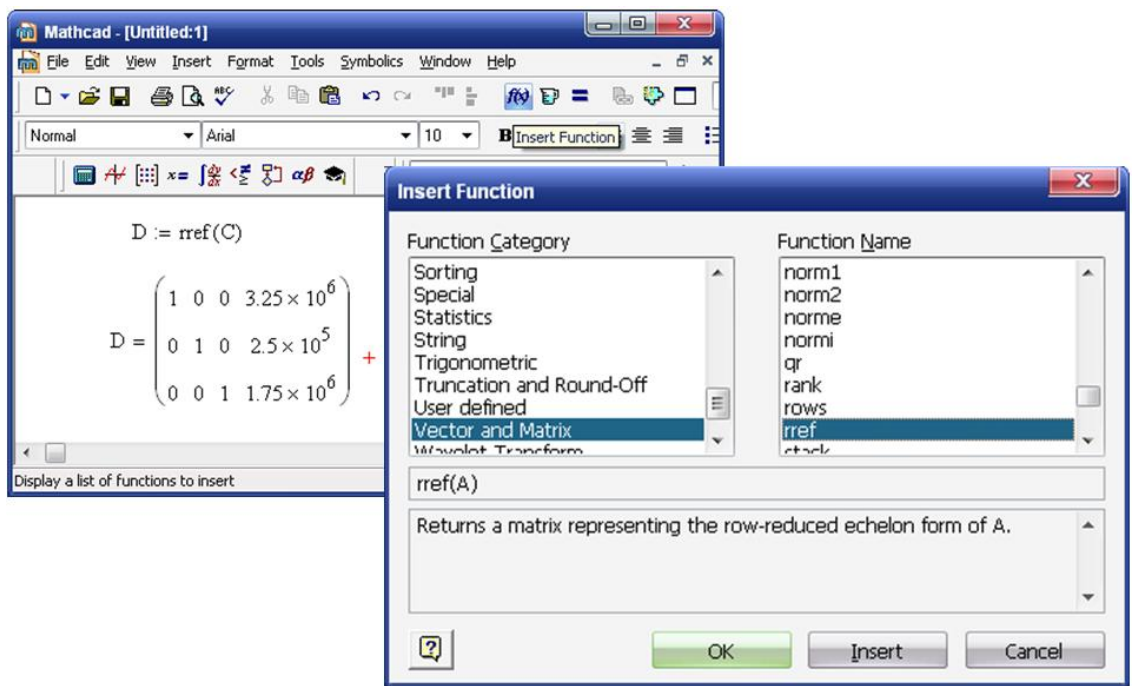
$b := \begin{pmatrix} 9 \\ 12 \\ 9 \end{pmatrix} \cdot 10^6$



скласти розширену матрицю системи:

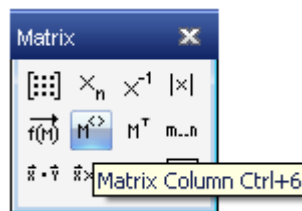
$$C := \text{augment}(A, b) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 9000000 \\ 3 & 2 & 1 & 12000000 \\ 2 & 3 & 1 & 9000000 \end{pmatrix}$$

та діагоналізувати її:



потім вивести на екран відповідь за допомогою вилучення останнього стовпця отриманої матриці:

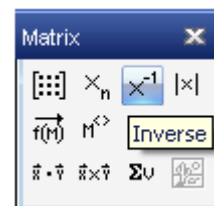
$$D^{(4)} = \begin{pmatrix} 3.25 \times 10^6 \\ 2.5 \times 10^5 \\ 1.75 \times 10^6 \end{pmatrix}$$



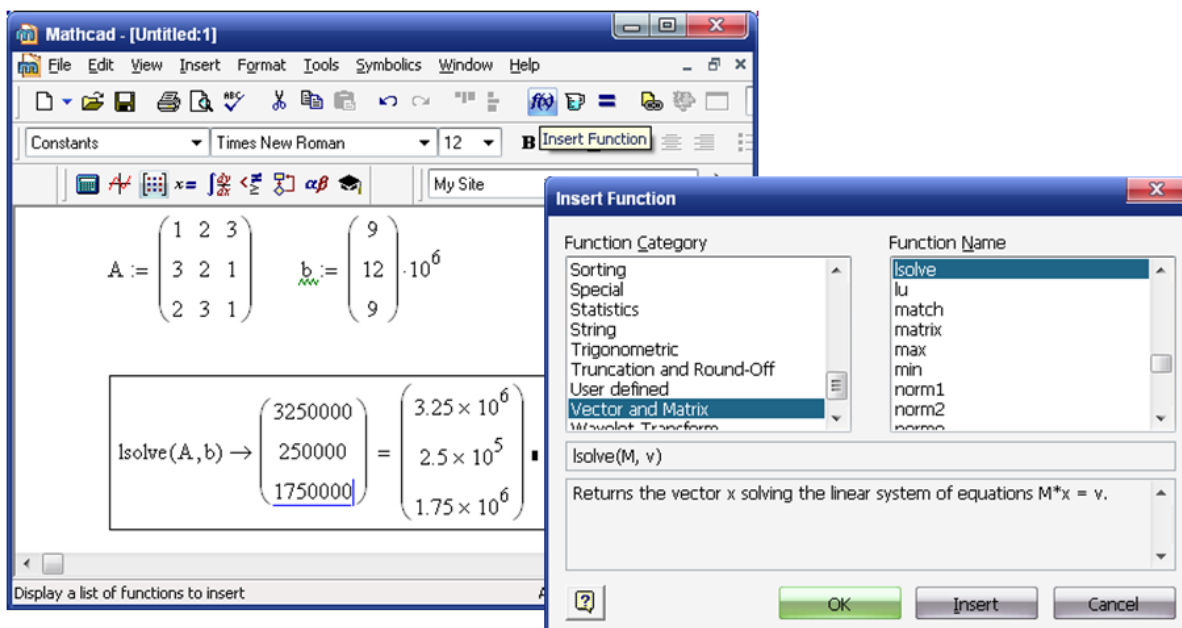
4-й спосіб (матричний). Сутність матричного методу міститься в тому, що система лінійних рівнянь записується у вигляді: $A \cdot s = b$, де A – матриця системи, b – вектор-стовпчик правих частин рівнянь, s – вектор невідомих змінних (в нашому випадку це вектор-стовпчик із компонентами x , y , z). Тоді розв’язок системи знаходиться за формулою: $s = A^{-1} \cdot b$. Реалізація в MathCAD матричного методу розв’язку системи лінійних рівнянь виглядає таким чином:

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \quad b := \begin{pmatrix} 9 \\ 12 \\ 9 \end{pmatrix} \cdot 10^6$$

$$s := A^{-1} \cdot b \rightarrow \begin{pmatrix} 3250000 \\ 250000 \\ 1750000 \end{pmatrix}$$



5-й спосіб (функція *lsolve*). Задавши матрицю системи (A) і вектор правих частин рівнянь (b), можна знайти її розв'язок за допомогою вбудованої функції *lsolve*:



Таким чином, відповідь задачі така: використавши усі запаси трьох видів сировини можна виготовити 3 250 000 таблеток препарату A , 250 000 таблеток препарату B та 1 750 000 таблеток препарату C .

Довідкова інформація:

Як легко побачити, останні два способи розв'язання систем лінійних рівнянь є найпростішими (нетрудоемними) для реалізації в системі MathCAD. Реалізація конструкції Given—Find потребує в порівнянні з цими методами набагато більше часу, однак вона є достатньо наочною й незамінною, якщо треба знайти розв'язок системи у випадку, коли він не є єдиним.

Завдання 2

Складіть математичну модель наступної задачі та розв'яжіть її засобами MathCAD.

Визначити, яка кількість меланжу (суміш H_2O – 8%, HNO_3 – 83% й H_2SO_4 – 9%), оленуму (H_2SO_4 – 100%) й відробки сірчаної кислоти (суміш H_2O – 24% та H_2SO_4 – 76%) потрібно для формування 1,2 кг нітруючої суміші з такими параметрами: H_2O – 22%, HNO_3 – 16%, H_2SO_4 – 62%.

Позначимо x – вагу (кг) меланжу, яка необхідна для виготовлення нітруючої суміші із параметрами, що потрібні, y – вагу (кг) оленуму, z – вагу (кг) відробки сірчаної кислоти. Тоді вага води у готовій нітруючій суміші

дорівнює $0,08 \cdot x + 0 \cdot y + 0,24 \cdot z$ кг (як вага води, отриманої з кожного компонента суміші), що з іншого боку повинно дорівнювати $0,22 \cdot 1,2$ кг. Аналогічно, вага азотної кислоти (HNO_3) у готовій нітруючій суміші дорівнює $0,83 \cdot x + 0 \cdot y + 0 \cdot z$ кг (як вага азотної кислоти, що отримана з кожного компонента суміші), що з іншого боку повинно дорівнювати $0,16 \cdot 1,2$ кг; вага сірчаної кислоти (H_2SO_4) в готовій нітруючій суміші дорівнює $0,09 \cdot x + 1,00 \cdot y + 0,76 \cdot z$ кг (як вага сірчаної кислоти, отриманої з кожного компонента суміші), що з іншого боку повинно дорівнювати $0,62 \cdot 1,2$ кг.

Таким чином, отримуємо математичну модель нашої задачі у вигляді системи лінійних рівнянь:

$$\begin{cases} 0,08 \cdot x + 0 \cdot y + 0,24 \cdot z = 0,22 \cdot 1,2 \\ 0,83 \cdot x + 0 \cdot y + 0 \cdot z = 0,16 \cdot 1,2 \\ 0,09 \cdot x + 1 \cdot y + 0,76 \cdot z = 0,62 \cdot 1,2 \end{cases} .$$

Розв'яжіть цю систему одним з описаних у попередньому завданні способів (будь-яким). (Розв'язок системи матричним способом наведено на рис.5.)

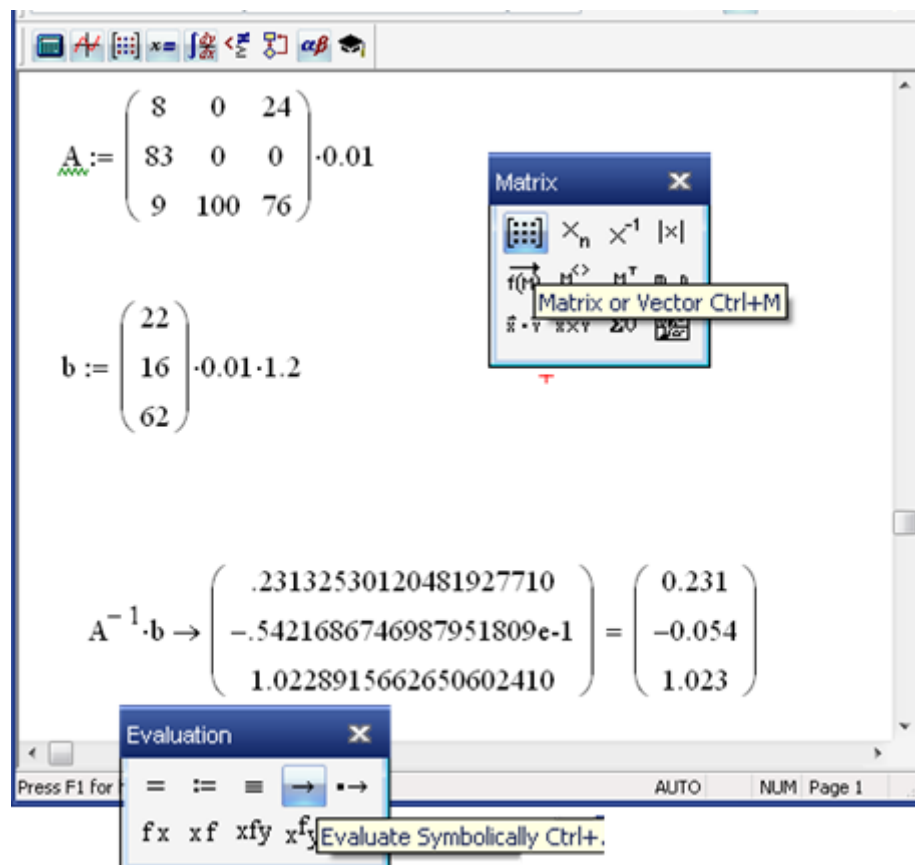


Рис.5. Матричний спосіб розв'язку системи лінійних рівнянь.

Як бачимо, розв'язок системи: $x=0,2313$, $y= -0,0542$, $z=1,0229$. Беручи до уваги фізичний сенс невідомих (це вага компонентів нітруючої суміші) і

те, що компонента y , що позначає вагу оленуму, є від'ємною, робимо висновок, що задача не має розв'язку (нітруючу суміш із завданими параметрами приготувати неможливо).

Завдання 3

Складіть математичну модель поданої задачі й розв'яжіть її засобами MathCAD.

В аптеці є запас чотирьох видів лікарських трав: листя кропиви, квіти ромашки лікарської, листя подорожника та шишки хмелю. Визначити, скільки кілограмів кожного виду трав має в запасі аптека, якщо відомо, що:

1) *якби шишок хмелю було б у 9 разів більше, то сумарна вага шишок хмелю й подорожника складала б 1 кг;*

2) *загальна вага листя кропиви й подорожника на 12 кг більше, ніж подвоєна вага квітів ромашки й вага шишок хмелю, помножена на чотири;*

3) *вага листя подорожника на 4 кг менше, ніж вага квітів ромашки й потроєна вага шишок хмелю;*

4) *якби шишок хмелю було б у 12 раз більше, то сумарна вага шишок хмелю й квітів ромашки лікарської складала б 7 кг.*

Для складання математичної моделі задачі позначимо x_1 – вагу листя кропиви, x_2 – вагу квітів ромашки лікарської, x_3 – вагу листя подорожника, x_4 – вагу шишок хмелю й запишемо відомі умови 1) – 4) у вигляді рівнянь:

$$1) \quad 9 \cdot x_4 + x_3 = 1;$$

$$2) \quad x_1 + x_3 - 12 = 2 \cdot x_2 + 4 \cdot x_4;$$

$$3) \quad x_3 + 4 = x_2 + 3 \cdot x_4;$$

$$4) \quad 12 \cdot x_4 + x_2 = 7.$$

Перенісши невідомі змінні до лівих частин рівнянь, отримуємо математичну модель задачі у вигляді системи лінійних рівнянь:

$$\begin{cases} x_3 + 9x_4 = 1 \\ x_1 - 2x_2 + x_3 - 4x_4 = 12 \\ x_2 - x_3 + 3x_4 = 4 \\ x_2 + 12x_4 = 7 \end{cases}.$$

Довідкова інформація (існування і єдиність розв'язку системи лінійних рівнянь):

Не усі системи лінійних рівнянь мають розв'язок. З іншого боку зустрічаються й такі системи, що мають нескінчену множину розв'язків. То-

му, строго кажучи, перед розв'язанням будь-якої системи лінійних рівнянь необхідно перевірити існування та єдиність її розв'язку (чого ми не робили при вирішенні перших двох задач цього заняття). Далі наведемо необхідні відомості з лінійної алгебри, що стосуються існування та єдиності розв'язку системи лінійних рівнянь.

Нехай є система n лінійних рівнянь з n невідомими (x_1, x_2, \dots, x_n) :

$$\begin{cases} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1n} \cdot x_n = b_1 \\ a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + \dots + a_{2n} \cdot x_n = b_2 \\ \dots \quad \dots \quad \dots \\ a_{n1} \cdot x_1 + a_{n2} \cdot x_2 + \dots + a_{nn} \cdot x_n = b_n \end{cases}.$$

Матриця $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$ розміру $n \times n$, що складається з коефіцієнтів

рівнянь при невідомих змінних x_1, x_2, \dots, x_n називається **матрицею системи лінійних рівнянь**.

Матриця $A^* = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$, стовпчиками якої є стовпчики матриці A і вектор-стовпчик вільних членів, називається **розширеною матрицею системи лінійних рівнянь**.

Матриця A і вектор-стовпчик вільних членів, називається **розширеною матрицею системи лінійних рівнянь**.

Рангом матриці називається максимальна кількість її лінійно незалежних стовпчиків (чи рядків). (Два вектори є лінійно незалежними, якщо один не може бути отримано з іншого шляхом елементарних перетворень, тобто додаванням та/або множенням на скаляр.)

Теорема Кронекера—Капелі (існування розв'язку системи лінійних рівнянь). Необхідною і достатньою умовою існування розв'язку системи лінійних рівнянь $A \cdot x = b$ є умова рівності рангів матриці системи й розширеної матриці системи.

Теорема (єдиність розв'язку системи лінійних рівнянь). Якщо в системі лінійних рівнянь $A \cdot x = b$ визначник квадратної матриці A не дорівнює нулю, то система має єдиний розв'язок $x = A^{-1} \cdot b$.

Перевіримо існування розв'язку системи лінійних рівнянь, що лежить в основі нашої задачі. Для цього виконаємо такі дії (дивись рис.6) :

- 1) запишемо матрицю системи A і вектор-стовпчик b правих частин системи;
- 2) потім за допомогою функції **augment** складемо розширену матрицю системи C ;
- 3) використавши функцію **rank** знайдемо ранги матриць A та C

Як бачимо, ранги матриці системи й розширеної матриці системи лінійних рівнянь не є рівними, звідки витікає, що задача не має розв'язку в силу не-сумісності системи лінійних рівнянь, що лежить в основі її математичної моделі.

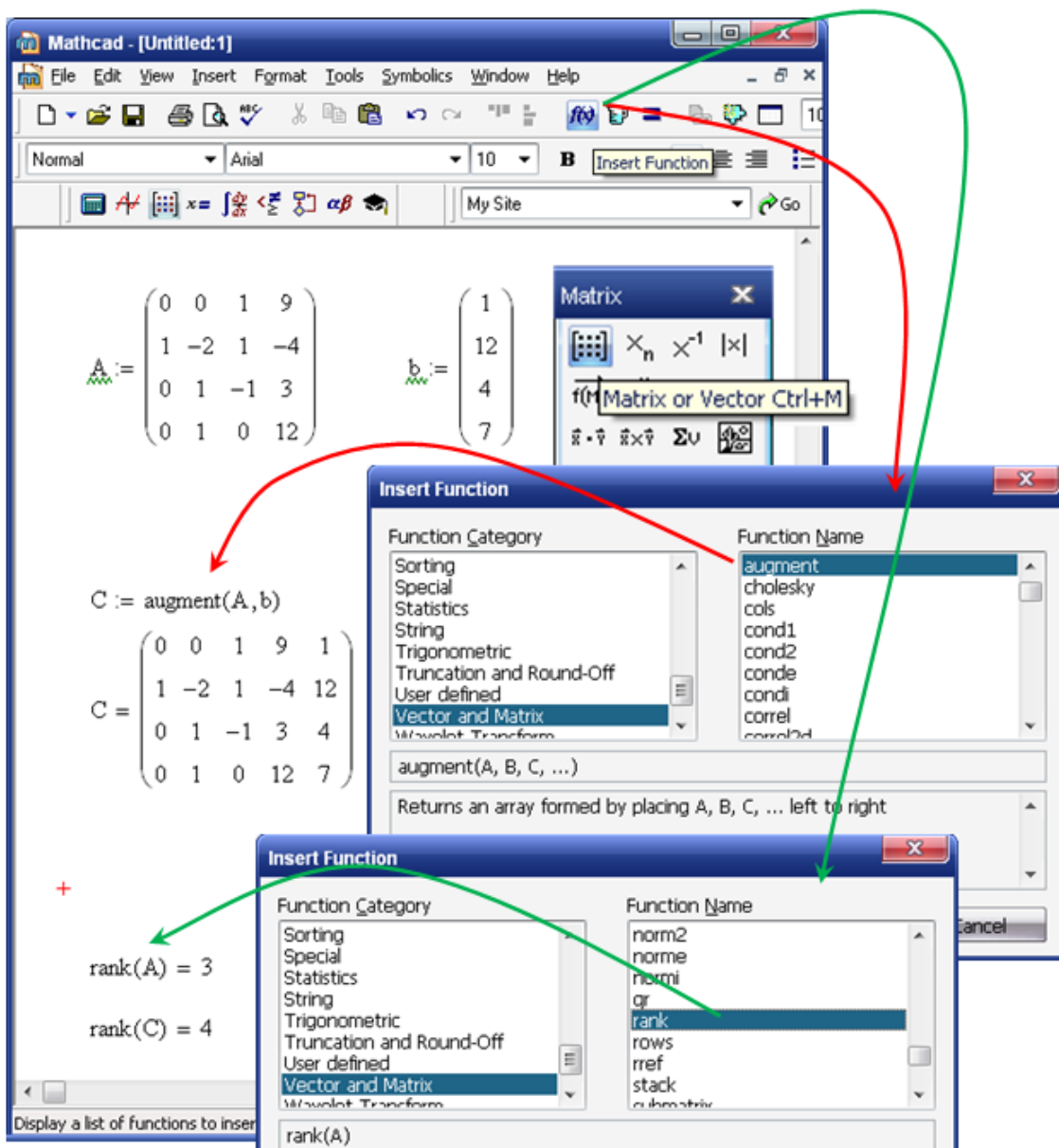


Рис.6. Перевірка сумісності системи лінійних рівнянь.

Завдання 4

Складіть математичну модель наступної задачі й вирішіть її засобами MathCAD.

В процесі приготування мікстури використовуються три компоненти **A**, **B** і **C**, що складаються з однакових субстанцій **r**, **p** та **q**. Компонент **A** складається з трьох частин субстанції **r**, шости частин субстанції **p** і шости частин субстанції **q**. Компонент **B** складається з двох частин субстанції **r** й чотирьох частин субстанції **q**. Компонент **C** складається з однієї частини субстанції **r**, однієї частини субстанції **p** і двох частин субстанції **q**. В результаті змішування компонентів субстанції **r** та **q** взаємно нейтралізуються, і в результаті отримують мікстуру, що містить тільки 7 частин субстанції **p**.

Визначте, кількість кожного компонента, необхідного для приготування мікстури.

Перед складанням математичної моделі задачі спочатку для наочності внесемо дані про склад компонентів і мікстури до таблиці (дивись таблицю 2).

Таблиця 2.

Склад мікстури та її компонентів			
	Субстанція r	Субстанція p	Субстанція q
Компонент A	3	6	6
Компонент B	2	0	4
Компонент C	1	1	2
Мікстура	0	7	0

Якщо позначимо x_1 – невідому кількість компонента **A**, необхідного для приготування мікстури, x_2 – невідому кількість компонента **B**, x_3 – невідому кількість компонента **C**, то математична модель задачі може бути записана у вигляді системи лінійних рівнянь, кожне з яких відповідає вмісту субстанцій **r**, **p** і **q** в мікстурі:

$$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \\ 6x_1 + x_3 = 7 \\ 6x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 0 \end{cases} .$$

Перевірка існування і єдиності розв'язку системи лінійних рівнянь, що лежить в основі нашої задачі, наведена на рис.7.

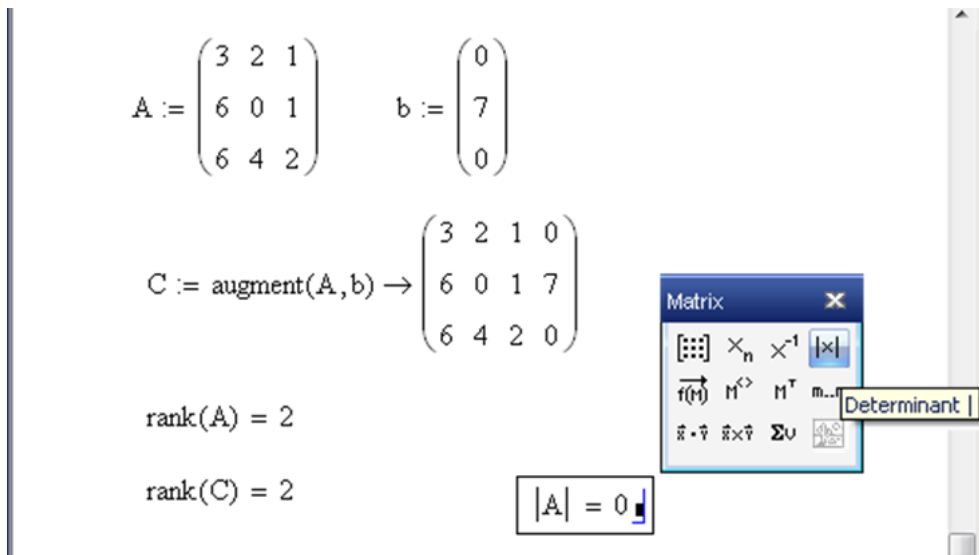


Рис.7. Перевірка існування і єдиності розв'язку системи лінійних рівнянь.

Як бачимо, розв'язок існує (ранги матриць A і C рівні), але він не єдиний (визначник матриці системи дорівнює нулю).

Усі розв'язки системи можна знайти, виразивши дві з невідомих через третю, наприклад, виразити x_1 та x_2 через x_3 . Для цього з усіх перелічених вище способів розв'язку систем лінійних рівнянь підійде лише блок розв'язку Given—Find. Його використання показано на рис.8.

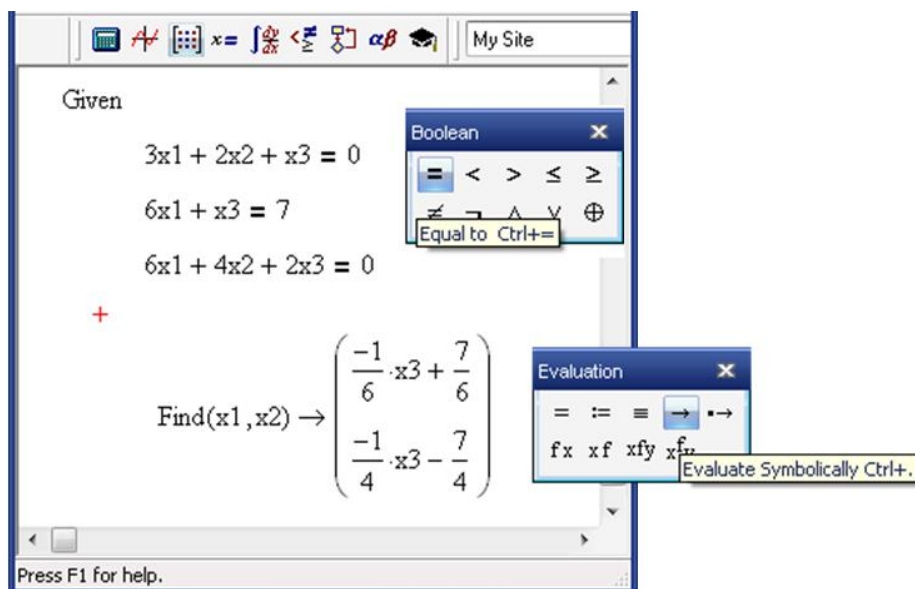


Рис.8. Розв'язок системи лінійних рівнянь у випадку нескінченної множини розв'язків.

Таким чином, можемо сказати, що для приготування описаної мікстури можна брати будь-яку кількість компонента C (x_3), а кількості компонентів

A і B брати у відповідності до кількості x_3 за отриманими співвідношеннями:

$$\text{Кількість компонента } A: \quad x_1 = -\frac{1}{6} \cdot x_3 + \frac{7}{6}.$$

$$\text{Кількість компонента } B: \quad x_2 = -\frac{1}{4} \cdot x_3 - \frac{7}{4}.$$

Однак, враховуючи, що кількість компонента C (x_3) не може бути від'ємною, нескладно помітити, що за другою формулою ми завжди будемо отримувати від'ємну кількість компонента B (x_2). Звідси випливає, що мікстуру з описаними в цій задачі параметрами приготувати неможливо.

Завдання для самостійної роботи

Варіант 1

Визначте витрати меланжу (суміш H_2O – 5%, HNO_3 – 85% та H_2SO_4 – 10%), оленуму (H_2SO_4 – 100%) і відробки сірчаної кислоти (суміш H_2O – 30% і H_2SO_4 – 70%) для приготування 1,2 кг нітруючої суміші з наступними параметрами: H_2O – 25%, HNO_3 – 15%, H_2SO_4 – 60%.

Варіант 2

Таблиця 3.

Тип сировини	Запас сировини, кг	Витрати сировини у мг на 1 таблетку препарату			
		P_1	P_2	P_3	P_4
S_1	49,033	20,3	2,8	35	5,4
S_2	47,562	12,2	24,8	3,5	14,7
S_3	35,886	2,4	15,3	12,8	20,5
S_4	50,883	8,5	5,8	28,4	32,3

Для виготовлення лікарських препаратів P_1 , P_2 , P_3 та P_4 використовується сировина чотирьох типів S_1 , S_2 , S_3 та S_4 . Дані про запаси сировини на фабриці й витратам сировини на одну таблетку кожного препарату наведені в таблиці 3. Визначте, яку кількість таблеток P_1 , P_2 , P_3 та P_4 можна випустити, використавши усю сировину, що є в наявності.

Варіант 3

Аптека №2 заковує бальзам «Бітнера» у трьох постачальників: у головного аптечного складу по 5,50 грн. за флакон, у ВАТ «Здоров'я-М» по 4,95 грн. за флакон, й у фірми «Фармас'ютикалз Ltd.» по 5,70 грн. за флакон. В попередньому місяці аптека зверталася до всіх трьох постачальників й ви-

тратила на закупку бальзаму «Бітгнера» 4,095 тис. грн.; однак, якби вона не робила закупки на головному складі, витрачено було б всього 3,27 тис. грн. Відомо також, що якби всі три фірми продавали препарат по 5 грн., то на закупку тієї ж самої кількості флаконів витрачено було б 3,75 тис. грн. Скільки флаконів бальзаму «Бітгнера» було закуплено в кожного з поставальників?

Варіант 4

На підприємство, де працюють співробітники чотирьох категорій привезли заробітну платню в купюрах такого номіналу: по 100 гривень – 1850 купюр, по 50 гривень – 230 купюр, по 10 гривень – 250 купюр, по 1 гривні – 740 купюр. Заробітна платня робітника 1-ї категорії складає 962 грн., 2-ї категорії – 713 грн., 3-ї категорії – 452 грн., 4-ї категорії – 261 грн. Визначте, скільки співробітників кожної категорії працює на підприємстві, якщо кожному співробітнику видали зарплату мінімальною кількістю купюр. Розподіл купюр для заробітної платні кожної категорії наведено в таблиці 4.

Таблиця 4.

Номінал купюр	Загальна кількість купюр	Розподіл купюр за категоріями			
		1-ша кат.	2-га кат.	3-тя кат.	4-та кат.
100 грн.	1850	9	7	4	2
50 грн.	230	1	0	1	1
10 грн.	250	1	1	0	1
1 грн.	740	2	3	2	1

Варіант 5

В одному з цехів на хіміко-фармацевтичному виробництві працюють співробітники наступних спеціальностей: хіміки-технологи, оператори верстатів із ЧПУ, інженери хімічної промисловості та робітники. Відомо, що зарплата технолога складає 113 у.о., оператора верстатів із ЧПУ – 167 у.о., інженера – 3080 у.о., робітника – 99 у.о. Щоб видати зарплату співробітникам цеху привезли купюри номіналом по 50, 10, 5 та 1 у.о., причому таким чином, щоб кожному співробітнику видати заробітну платню мінімальною кількістю купюр. Купюр номіналом по 50 у.о. було 97 штук, купюр номіналом по 10 у.о. – 122, купюр номіналом по 5 у.о. – 38, й купюр номіналом по 1 у.о. – 165 штук. Визначте кількість хіміків-технологів, операторів верстатів із ЧПУ, інженерів хімічної промисловості і робітників у цеху.

Варіант 6

Покупець придбав від кашлю 1 упаковку «Льодяників Доктора Тайса» і 1 упаковку льодяників «Доктор Мом» й заплатив за покупку 14 гривень 50 копійок. Однак за ту ж саму суму він міг би придбати 3 упаковки льодяників «Доктор Мом» й 2 упаковки таблеток «Пектусин», або, за ту ж саму суму, – 29 упаковок таблеток «Пектусин». Яка вартість кожного зі згаданих в задачі препаратів?

Варіант 7

В таблиці 5 наведена поживна та енергетична цінність чотирьох продуктів, в таблиці 6 – добова потреба людини у поживних речовинах й енерговитрати в залежності від віку та роду занять. Визначте, якою кількістю даних у таблиці 5 продуктів можна забезпечити добові потреби дітей до 7 років у білках, жирах, вуглеводах і компенсувати енерговитрати.

Таблиця 5.

Продукти	У 100 г продукту			
	Білки, г	Жири, г	Вуглеводи, г	Енергетична цінність, ккал
Хліб пшеничний	7,0	0	55	230
Молоко	5,0	2,5	4,8	60
Масло вершкове	1,0	97	0	780
Картопля	2,0	0,1	19,7	90

Таблиця 6.

Вік та рід занять	Добові потреби			
	Білки, г	Жири, г	Вуглеводи, г	Енерговитрати, ккал
Діти до 7 років	70	65	250	1800
Студенти	105	100	415	2900
Дорослі (тяжка фізична праця)	132	140	635	4100

Варіант 8

В таблиці 5 наведена поживна та енергетична цінність чотирьох продуктів, в таблиці 6 – добова потреба людини у поживних речовинах й енерговитрати в залежності від віку та роду занять. Визначте, якою кількістю даних

у таблиці 5 продуктів можна забезпечити добові потреби студентів у білках, жирах, вуглеводах і компенсувати енерговитрати.

Варіант 9

В таблиці 5 наведена поживна та енергетична цінність чотирьох продуктів, в таблиці 6 – добова потреба людини у поживних речовинах й енерговитрати в залежності від віку та роду занять. Визначте, якою кількістю даних у таблиці 5 продуктів можна забезпечити добові потреби дорослих людей, що займаються тяжкою фізичною працею, у білках, жирах, вуглеводах і компенсувати енерговитрати.

Варіант 10

В аптеці «36,6» покупець витратив 8,80 грн., придбавши 2 упаковки аспірину, 1 пачку чаю «Нефрофіт» і 1 флакон сиропу від кашлю «Пертуссін». Відомо, що в аптеці за рогом чай дешевше на 10%, а сироп дешевше на третину, й уся покупка обійшлась б у 7,44 грн. Однак, в центральній аптеці аспірин дорожче на 25 копійок, які складають третю частину його вартості в аптеці «36,6». Яка ціна за упаковку (флакон) кожного із згаданих препаратів в аптеці «36,6»?

Варіант 11

Підприємством НВО «Фарм» використовується щодобово чотири види однакової сировини для виробництва чотирьох найменувань лікарських препаратів. Витрати сировини (мг) на одну упаковку кожного препарату наведені в таблиці 7. Щодобово витрачається сировини I – 240 г, сировини II – 250 г, сировини III – 340 г, сировини IV – 420 г. Визначте, скільки упаковок кожного препарату виробляється кожної доби.

Таблиця 7.

Препарати	Види сировини			
	I	II	III	IV
Аспаркам	2	3	4	5
Бісептол	1	2	5	6
Валідол	7	2	3	2
Цитрамон	4	5	6	8

Варіант 12

Виробнича фірма «Доктор—А», що випускає п'ять найменувань лікарських препаратів, працює увесь рік в режимі п'ятидобового робочого тижня. В таблиці 8 вказана виробнича потужність підприємства (упаковок за день). Всього в минулому році було випущено 124,4 тис. упаковок амідопірину, 47,1 тис. упаковок барбамілу, 161,2 тис. упаковок стоптуссіну, 146,9 тис. упаковок дриксенолу й 95,2 тис. упаковок фуросеміду. Визначте, скільки в минулому році було робочих понеділків, вівторків, серед, четвергів та п'ятниць.

Таблиця 8.

Лікарські препарати	День тижня				
	Пн	Вт	Ср	Чт	Пт
Амідопірин	400	500	300	600	700
Барбаміл		200	400	300	
Стоптуссін	800	1500		400	600
Дриксенол	300	1000	700	500	400
Фуросемід	700	300	500	200	300

Варіант 13

Таблиця 9.

Лікарські препарати	Середня кількість продажів (100 упаковок в день)				
	Пн	Вт	Ср	Чт	Пт
Анальгін	1	1	3		3
Сустанк		1	4	3	
Простаплан	3	5		4	3
Димедрол	1	1	5		2
Но-шпа	2	3	2	2	3

Аптека «Таблетки на Блюхера» працює п'ять днів на тиждень. В таблиці 9 наведено середнедобову кількість продажів п'яти препаратів аптекою за останній рік. Всього в минулому році було 53 робочих тижня, за які було продано 41,9 тис. упаковок анальгіну, 41,8 тис. упаковок сустанку, 77,2 тис. упаковок простаплану, 47,2 тис. упаковок димедролу й 62,2 тис. упаковок но-шпа. Визначте, скільки свят в минулому році випало на понеділок, вівторок, середу, четвер і п'ятницю.

Лабораторна робота №3

Побудова математичних моделей і розв'язання медико-фармацевтичних задач на основі нелінійних й трансцендентних рівнянь

Тема: Чисельне розв'язання нелінійних рівнянь в пакеті MathCAD.

Мета: Набути навичок складання математичних моделей задач у вигляді нелінійних рівнянь, їх символного й чисельного розв'язання засобами системи комп'ютерної математики MathCAD, правильного тлумачення й графічного відображення результатів.

Завдання 1

Складіть математичну модель поданої нижче задачі та розв'яжіть її.

Зростання популяції мурашок описується рівнянням:

$$P(t) = \frac{P_L}{1 + c \cdot e^{-k \cdot t}},$$

де P – розмір популяції,

t – час розвитку популяції (місяці),

P_L – гранична кількість комах у популяції,

c та k – параметри, що характеризують умови виживаності мурашника.

Визначте, через скільки місяців популяція досягне 98% від свого граничного розміру при $k=1,5$, $c=0,99$ і $P_L=4000$.

Як бачимо, задача зводиться до знаходження невідомого t з рівняння: $\frac{P_L}{1 + c \cdot e^{-k \cdot t}} = 0,98 \cdot P_L$ за відомих значень параметрів k , c та P_L .

Довідкова інформація:

Найпростіший спосіб відшукування кореня (чи коренів) будь-якого (в тому числі й нелінійного) рівняння – символний розв'язок. Перевагою символного розв'язку є те, що MathCAD видає значення одразу всіх коренів рівняння (якщо рівняння має декілька коренів), причому с достатньо високою точністю. Для символного розв'язку рівнянь у MathCAD 13 можна використовувати блок розв'язку Given—Find, або функцію solve.

Використання конструкції Given—Find для розв'язку даної задачі показано на рис.9. Використання функції solve для розв'язку даної задачі показано на рис.10.

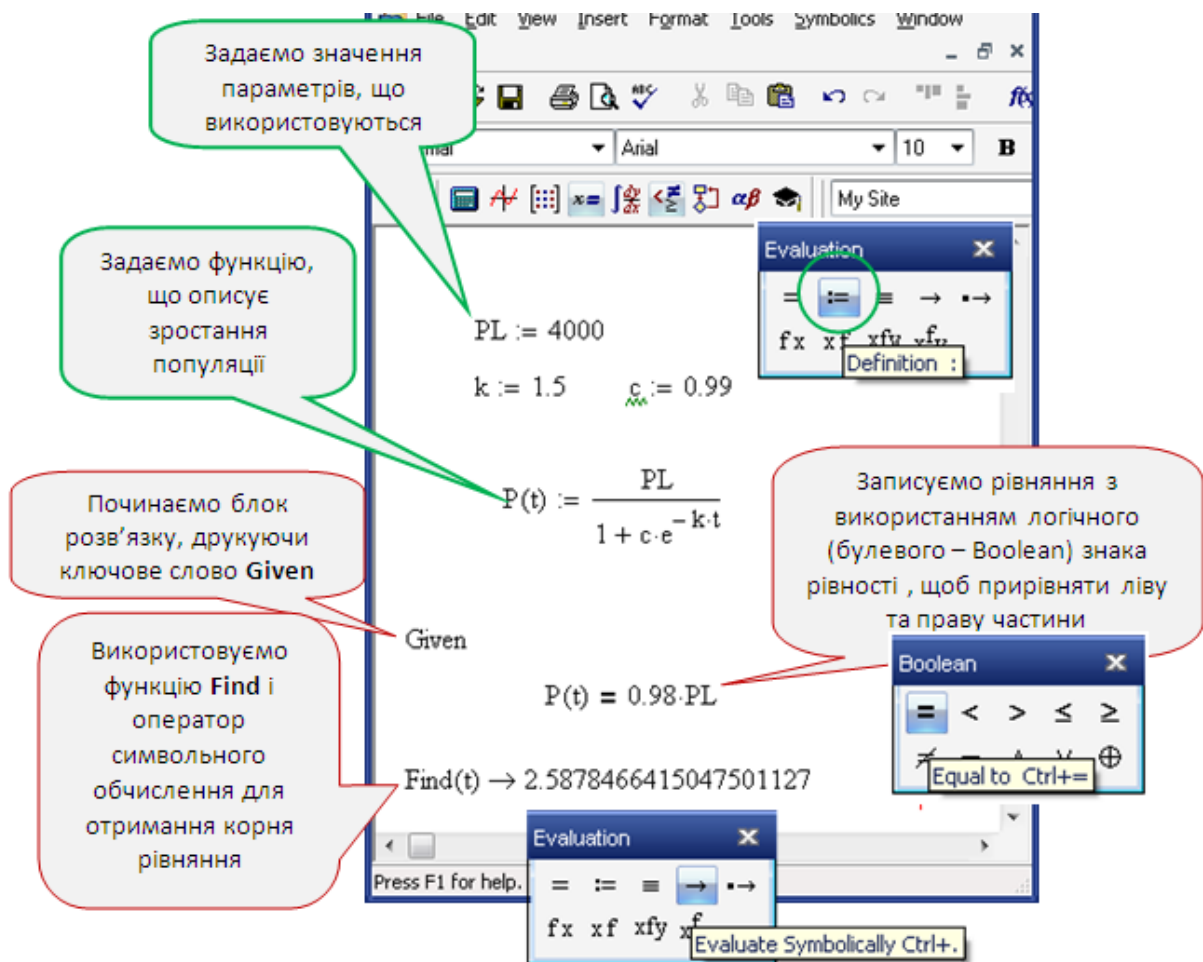


Рис.9. Символьний розв'язок нелінійного рівняння за допомогою блока розв'язку Given-Find.

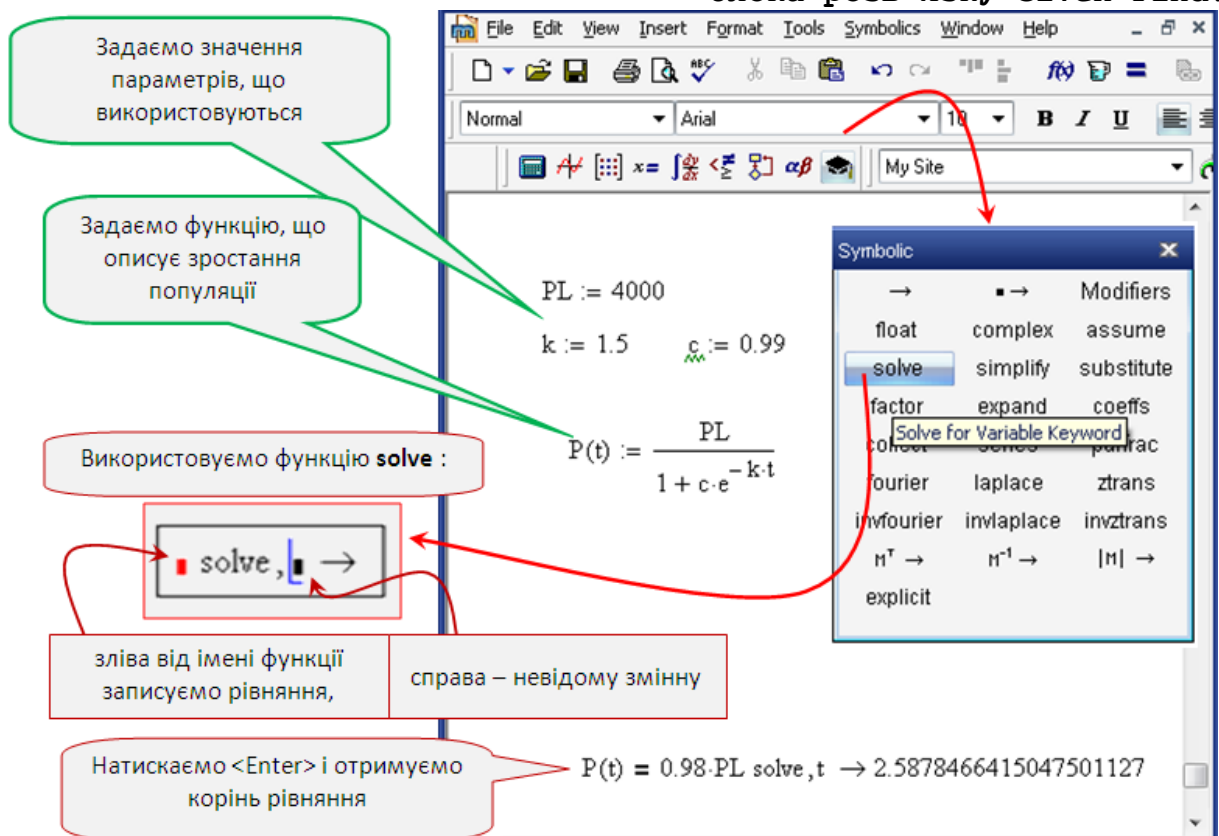


Рис.10. Символьний розв'язок нелінійного рівняння про популяцію комах з використанням функції solve.

Таким чином, можемо дати відповідь, що популяція досягне 98% від свого граничного розміру через приблизно 2,59 місяця.

Завдання 2

Складіть математичну модель даної нижче задачі у вигляді нелінійного рівняння. Розв'яжіть нелінійне рівняння, що Ви отримали, за допомогою символічних обчислень (відшукайте усі корені).

Динаміки концентрацій амфетаміну й метілфенідау гідрохлориду у плазмі крові за певного рівня кислотності ph описуються рівняннями:

$$C_{амфетаміна}(t) = e^{\frac{-0,693t}{7 \cdot ph - 37,5}},$$

$$C_{метілфенідау}(t) = e^{-0,365t},$$

де C – концентрація препарату,
 t – час після введення препарату (години),
 ph – кислотність.

За умови, що спочатку пацієнтові було введено амфетамін, а рівно через 2,5 години – метілфенідау гідрохлорид, визначте, через скільки годин після введення другого препарату концентрації в плазмі крові амфетаміну й метілфенідау гідрохлориду співпадуть, якщо рівень кислотності $ph=6,5$.

Математична модель задачі 2 може бути сформульована так: знайти невідоме (чи невідомі) значення часу t з рівняння $C_{амфетаміна}(t+2,5) = C_{метілфенідау}(t)$. Її розв'язок за допомогою функції solve наведено на рис.11.

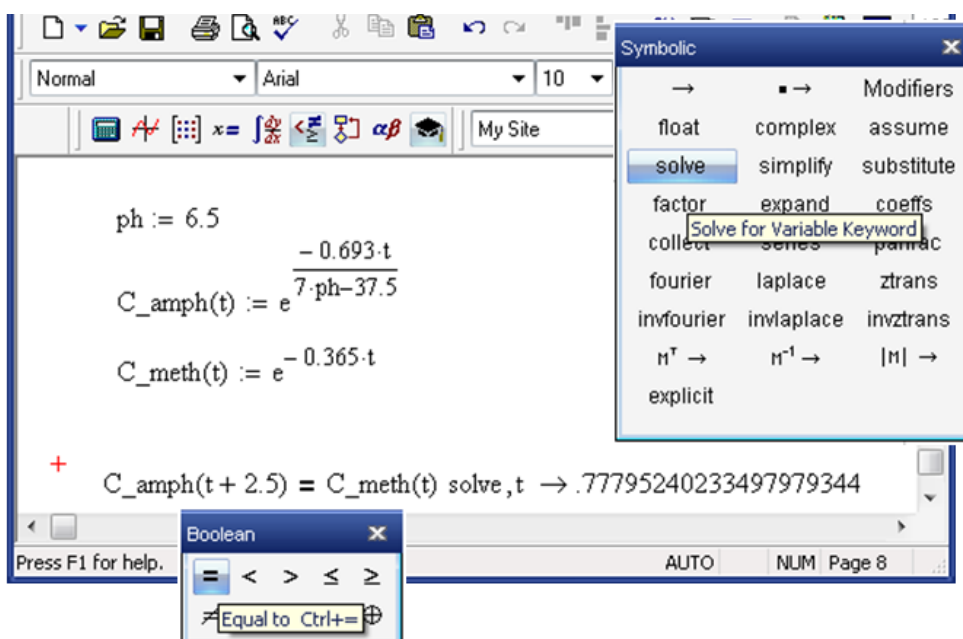


Рис.11. Символьний розв'язок нелінійного рівняння про концентрацію препаратів у плазмі крові з використанням функції solve.

Таким чином, бачимо, що концентрації препаратів співпадуть тільки в один момент часу (рівняння має один корінь), а саме, через 0,77795 годин після введення метілфенідату гідрохлориду.

Завдання 3

Складіть математичну модель даної нижче задачі у вигляді нелінійного рівняння. Розв'яжіть нелінійне рівняння, що Ви отримали (відшукайте всі корені).

Дано каскад з N послідовних нейронів, що передають синаптичний сигнал. Сигнал передається від одного нейрона іншому з однаковою затримкою у часі τ . В цьому випадку швидкість розповсюдження сигналу R як функція від часу t (у секундах) задається формулою:

$$R(t) = \frac{1}{\tau \cdot 10!} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^N \cdot e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Визначте, в які моменти часу в каскаді з трьох нейронів швидкість розповсюдження сигналу складе $5,27 \cdot 10^{-7}$, якщо затримка $\tau=0,5$.

Математична модель задачі може бути сформульована так: знайти невідомі значення часу t з рівняння $R(t) = 5,27 \cdot 10^{-7}$.

Примітка. Тому що значення швидкості в цій задачі дуже малі (порядку 10^{-7}), для отримання точної відповіді при розв'язанні рівняння в MathCAD, обидві його частини слід помножити на 10^7 , тобто розв'язувати рівняння $R(t) \cdot 10^7 = 5,27$.

При розв'язанні цієї задачі символьним способом (дивись рис. 12) ми стикаємося з одним з його недоліків – серед отриманих коренів рівняння складно відокремити один корінь від іншого, а комплексні корені від дійсних. У подібних випадках, а також, коли символьні способи розв'язку не працюють взагалі, корені рівняння знаходять приблизно.

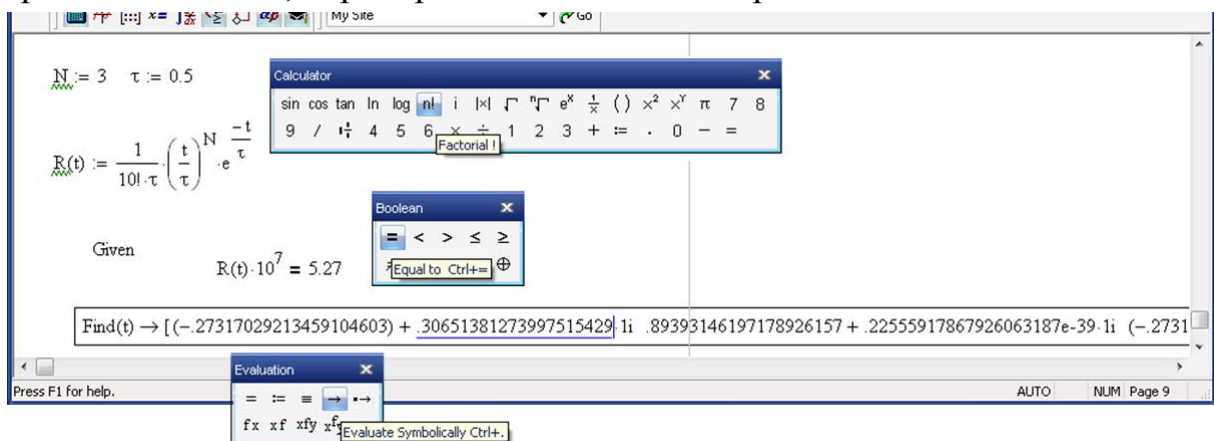


Рис.12. Символьний розв'язок нелінійного рівняння в задачі про каскад нейронів.

Довідкова інформація. (Приблизне відшукування коренів нелінійних рівнянь.)

При приблизному відшуванні коренів нелінійного рівняння спочатку визначають кількість дійсних коренів, а також їхні інтервали ізоляції. Для цього на одному графіку відображають криві, що відповідають лівій та правій частинам рівняння. Кількість точок перетину цих кривих, співпадає з числом дійсних коренів рівняння, а за значеннями абсцис цих точок можна сказати, чому приблизно дорівнюють корені, тобто зробити висновок про їхні інтервали ізоляції. Якщо ж криві, що відповідають лівій та правій частинам рівняння, взагалі не перетинаються, це означає, що рівняння не має дійсних коренів.

Далі невідомій змінній, що відшукується, задають деяке початкове припущення, що дорівнює приблизному значенню одного з коренів (абсцисі однієї з точок перетину кривих на графіку). За заданого початкового припущення розв'язують нелінійне рівняння чисельно з використанням блоку Given—Find або функції root (при обчисленні використовується звичайний знак рівності = замість символічного \rightarrow). При чисельному розв'язанні в результаті ми отримуємо тільки один з коренів рівняння – той, що знаходиться ближче за всіх до заданого початкового припущення. Значення усіх коренів рівняння можна отримати послідовно, змінюючи початкове припущення.

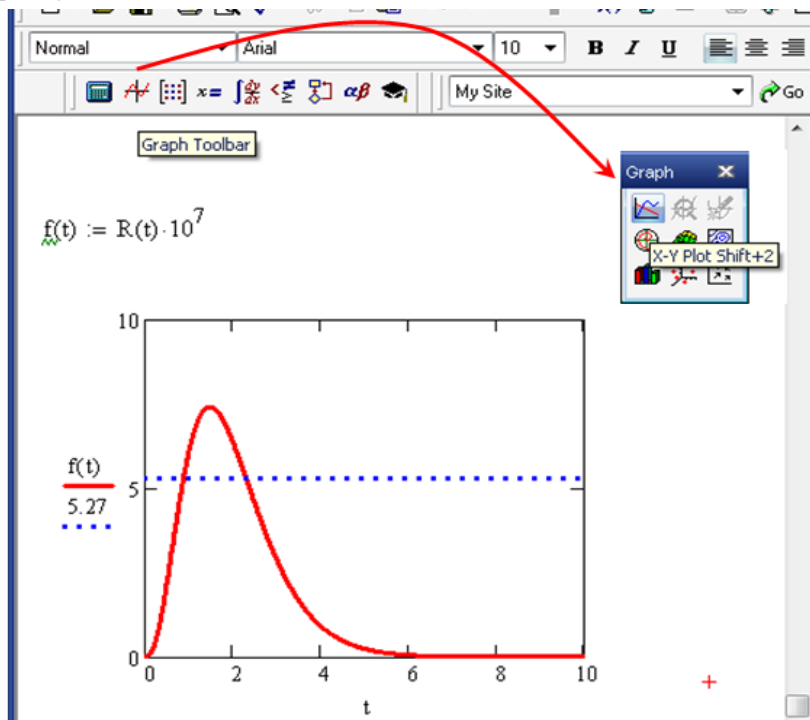


Рис.13. Графік лівій та правій частин рівняння в задачі про каскад нейронів.

Відобразимо на одному графіку криву функції $f(t) = R(t) \cdot 10^7$ й пряму $y = 5,27$. Змінивши діапазони зміни аргументу для осей абсцис й ординат, настроїмо графік таким чином, щоб чітко побачити точки перетину ліній $f(t)$ і $y = 5,27$ (дивись рис. 13).

Таким чином, після побудови графіків бачимо, що рівняння має два дійсних корені; перший корінь знаходиться біля значення 1, другий – більше 2, до 3.

Примітка. Для того, щоб більш точно узнати значення абсцис точок перетину ліній $f(t)$ й $y(t)$, можна використати інструмент **Trace**. Користуватися ним треба таким чином: натисніть на графіку праву клавішу миші й в контекстному меню виберіть команду **Trace...** З'явиться вікно **X-Y Trace**. Мишею на графіку відмітьте точку, що Вас цікавить, й у вікні **X-Y Trace** Ви побачите її координати (дивись рис. 14).

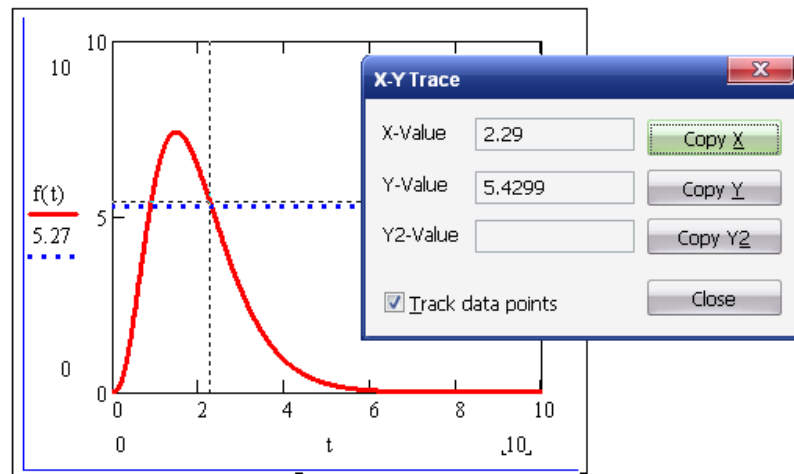


Рис.14. Використання інструменту Trace для визначення координат точки на графіку.

Чисельне відшукування коренів нелінійного рівняння в нашій задачі про каскад нейронів з використанням блоку розв'язку Given—Find показано на рис.15. Як бачимо, для відшукування двох коренів рівняння конструкція Given—Find була використана двічі з різними початковими припущеннями кореня.

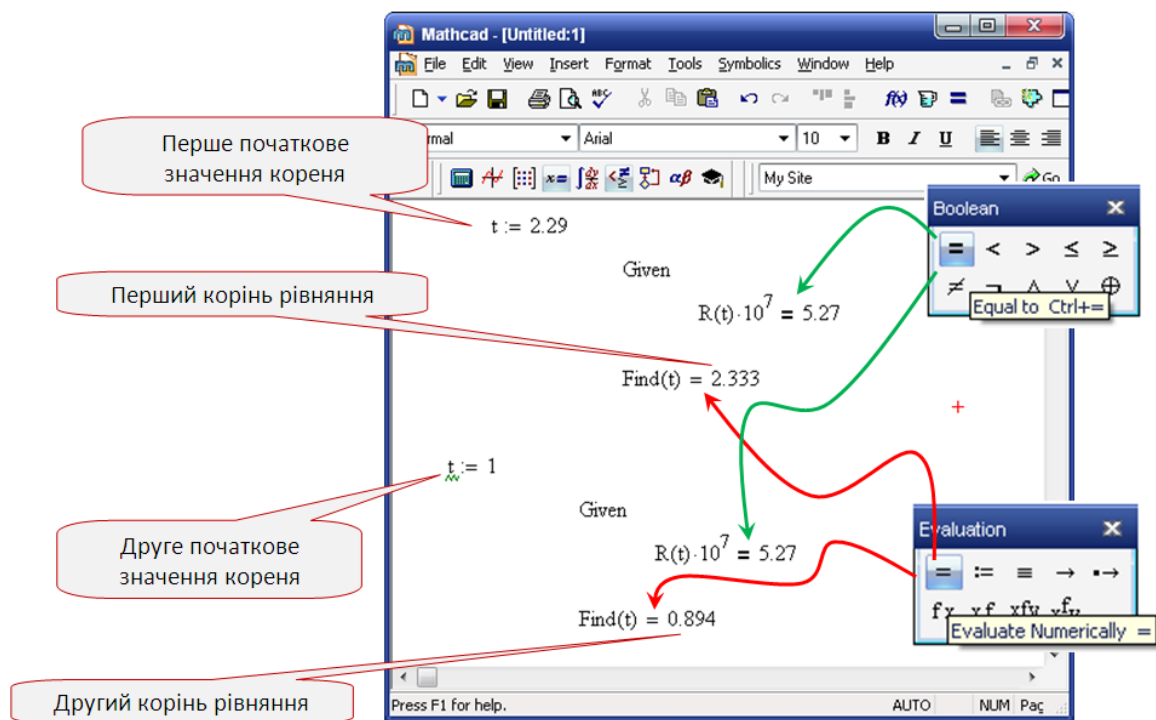


Рис.15. Використання конструкції Given–Find для чисельного (приблизного) відшукування коренів рівняння в задачі про каскад нейронів.

Довідкова інформація. (Використання функції root для приблизного відшукування коренів рівнянь.)

Синтаксис функції root для відшукування кореня x рівняння $f(x)=0$, що знаходиться на інтервалі $[a; b]$ такий: $\text{root}(f(x), x, a, b)=$.

Можна не вказувати границі інтервалу ізоляції кореня a і b , але тоді перед викликом root необхідно задати змінній x деяке початкове припущення.

Чисельне відшукування коренів нелінійного рівняння в нашій задачі про каскад нейронів з використанням функції root показано на рис.16 та 17.

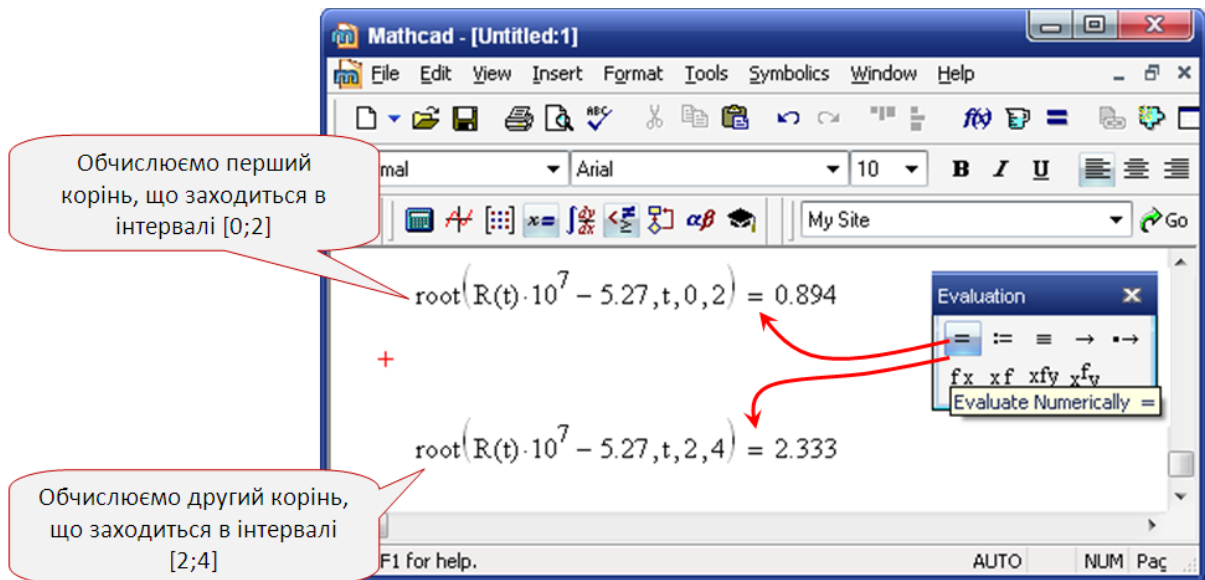


Рис.16. Використання функції `root` для відшукування корнів рівняння на заданому інтервалі в задачі про каскад нейронів.

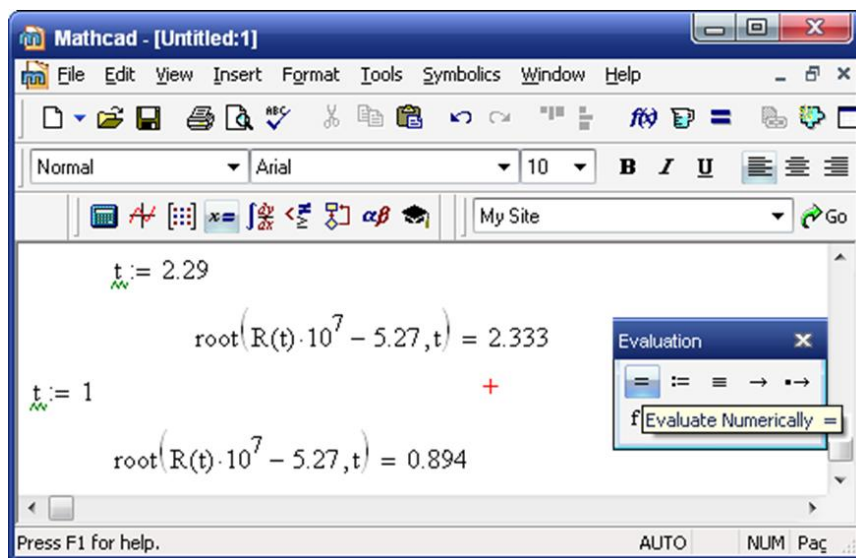


Рис.17. Використання функції `root` для чисельного (приблизного) відшукування корнів рівняння в задачі про каскад нейронів.

Зверніть увагу, що перед розв'язанням рівняння $R(t) \cdot 10^7 = 5,27$ за допомогою функції `root`, ми привели його до вигляду: $R(t) \cdot 10^7 - 5,27 = 0$, та записали його ліву частину в якості першого аргументу функції `root`.

Для відшукування двох корнів рівняння функцію `root`, як і блок `Given—Find`, також необхідно використовувати двічі, вказуючи різні інтервали ізоляції кореня (рис.16) або різні початкові припущення (рис.17).

Таким чином, можемо дати відповідь на поставлену задачу: існує два моменти часу t_1 і t_2 , в які швидкість розповсюдження сигналу в каскаді з 3 нейронів складе $5,27 \cdot 10^{-7}$: $t_1=0,894$ й $t_2=2,333$.

Завдання 4

Складіть математичну модель наведеної нижче задачі та розв'яжіть її.

Вживаність деякої популяції мікроорганізмів $\theta(t)$ залежить від часу t розвитку популяції (дні) й описується функцією:

$$\theta(t) = 2,13 \cdot t^6 - 19,17 \cdot t^5 + 57,51 \cdot t^3 + 0,753 \cdot t^2 - 123,41 \cdot t - 57,50$$

Визначте, через скільки днів вживаність популяції мікроорганізмів буде складати 0,5.

Математична постановка цієї задачі може бути сформульована так: знайти усі дійсні невід'ємні корені рівняння $\theta(t) = 0,5$, що рівнозначне відшукуванню усіх дійсних невід'ємних коренів рівняння

$$2,13 \cdot t^6 - 19,17 \cdot t^5 + 57,51 \cdot t^3 + 0,753 \cdot t^2 - 123,41 \cdot t - 58 = 0.$$

Відмітимо, що в правій частині рівняння стоїть поліном шостого ступеня, а в лівій 0.

Довідкова інформація. (Використання функції *polyroots* для розв'язання поліноміальних рівнянь.)

Для відшукування коренів многочленів в MathCAD є вбудована функція *polyroots*. Її синтаксис такий: $\text{polyroots}(v) =$, де v – вектор-стовпчик коефіцієнтів поліному.

Якщо ступінь полінома дорівнює n , то вектор v має $n+1$ компонентів й формується за правилом: i -та компонента вектора v дорівнює коефіцієнту полінома при невідомій змінній у i -му ступені.

Використання функції *polyroots* для розв'язання поліноміального рівняння в задачі, що розглядається, показане на рис.18.

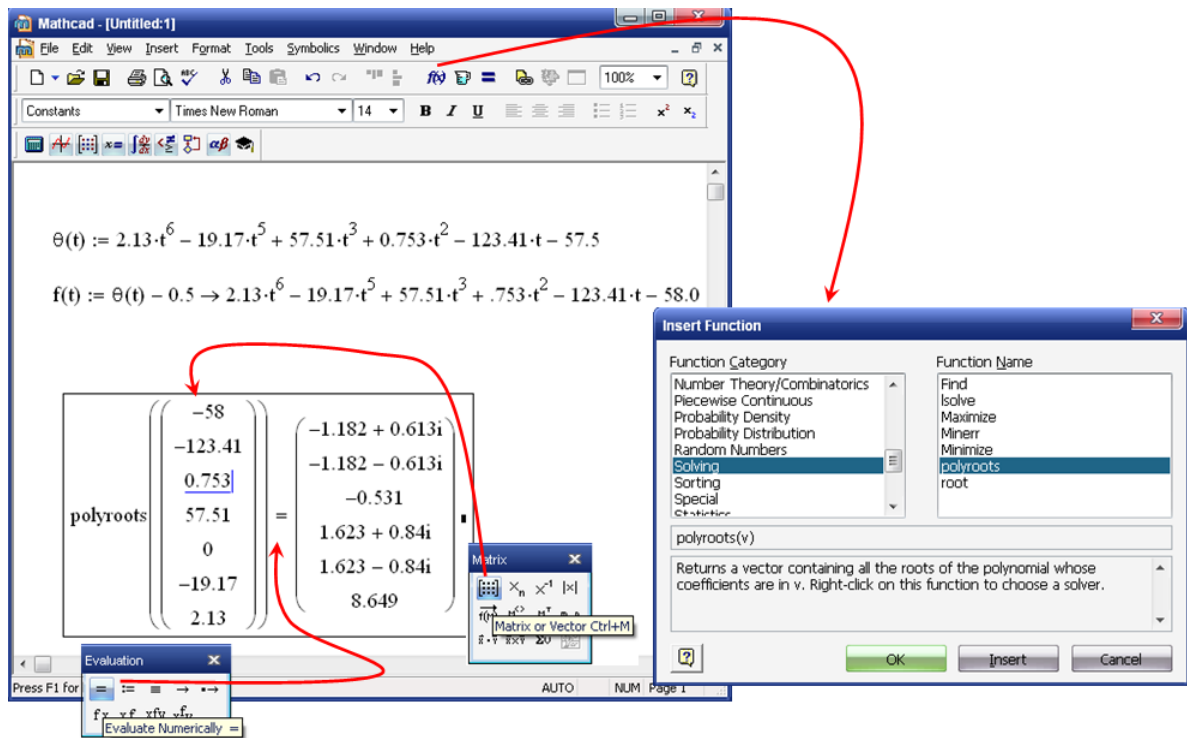


Рис.18. Використання функції polyroots для відшукування коренів поліному.

Як бачимо, рівняння має шість коренів, чотири з яких (перший, другий, четвертий і п'ятий) є комплексними. Третій корінь ($t = -0,531$) дійсний, але від'ємний. Таким чином, задача про виживаність популяції мікроорганізмів має єдину відповідь: виживаність популяції буде складати 0,5 через 8,649 днів.

Завдання для самостійної роботи

Варіант 1

Формула, що описує проникність клітинної мембрани по відношенню до іонів натрію, виглядає так:

$$pNa(t) = pNa_{зовн} \cdot m^3(t) \cdot h(t) + INa .$$

Тут t – час (у мілісекундах),

$pNa_{зовн}$ – проникність мембрани зовні клітини для іонів натрію,

INa – канали у мембрані для іонів натрію,

$m(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau_m}}$, $h(t) = e^{-\frac{t}{\tau_h}}$ – рівняння кінетики відкриття й зачинення воріт каналу мембрани по відношенню до іонів натрію,

τ_m , τ_h – константи воріт каналу мембрани.

- ☞ Визначте момент часу, в який проникність мембрани по відношенню до іонів натрію складе 2 одиниці, при наступних значеннях параметрів: $\tau_m=2$, $\tau_h=0,75$, $INa=0,05$, $pNa_{зовн}=200$.
- ☞ Відобразьте на одному графіку функцію $pNa(t)$ та пряму $y(t)=2$.

Варіант 2

Формула, що описує проникність клітинної мембрани по відношенню до іонів калію, виглядає так:

$$pK(t) = pK_{зовн} \cdot n^4(t) \cdot i(t) + IK.$$

Тут t – час (у мілісекундах),

$pK_{зовн}$ – проникність мембрани зовні клітини для іонів калію,

IK – канали у мембрані для іонів калію,

$n(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau_n}}$, $i(t) = e^{-\frac{t}{\tau_i}}$ – рівняння кінетики відкриття й зачинення воріт каналу мембрани по відношенню до іонів калію,

τ_n , τ_i – константи воріт каналу мембрани.

- ☞ Визначте моменти часу, в які проникність мембрани по відношенню до іонів калію буде дорівнювати 1, за наступних значень параметрів: $\tau_n=3$, $\tau_i=4$, $IK=0,75$, $pK_{зовн}=5$.
- ☞ Відобразьте на одному графіку функцію $pK(t)$ та пряму $y(t)=1$.

Варіант 3

Формули, що описують проникність клітинної мембрани по відношенню до іонів натрію та калію, виглядають так:

$$pNa(t) = pNa_{зовн} \cdot m^3(t) \cdot h(t) + INa,$$

$$pK(t) = pK_{зовн} \cdot n^4(t) \cdot i(t) + IK.$$

Тут t – час (у мілісекундах),

$pNa_{зовн}$, $pK_{зовн}$ – проникність мембрани зовні клітини для іонів натрію та калію,

INa , IK – канали в мембрані для іонів натрію та калію,

$m(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau_m}}$, $h(t) = e^{-\frac{t}{\tau_h}}$ – рівняння кінетики відкриття й зачинення воріт каналу мембрани по відношенню до іонів натрію,

$n(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau_n}}$, $i(t) = e^{-\frac{t}{\tau_i}}$ – рівняння кінетики відкриття й зачинення воріт каналу мембрани по відношенню до іонів калію,

τ_m , τ_h , τ_n , τ_i – константи воріт каналу мембрани.

- ☞ Визначте момент часу, в який проникності мембрани по відношенню до іонів натрію та калію будуть дорівнювати одна одній, за таких значень параметрів: $\tau_m=2$, $\tau_h=0,75$, $\tau_n=3$, $\tau_i=4$, $INa=0,05$, $IK=0,75$, $pNa_{зовн}=200$, $pK_{зовн}=5$.
- ☞ Відобразьте на одному графіку функції $pNa(t)$ і $pK(t)$.

Варіант 4

Рівняння Гольдмана—Ходкінга—Каца для потенціалу клітинної мембрани по відношенню до її проникності іонами натрію та калію, виглядає так:

$$E(t) = -R \cdot \frac{T}{F} \cdot \ln \left(\frac{pNa(t) \cdot Na_{внутр} + pK(t) \cdot K_{внутр}}{pNa(t) \cdot Na_{зовн} + pK(t) \cdot K_{зовн}} \right).$$

Тут t – час (у мілісекундах),
 R – універсальна газова константа, $R=8,314$ Дж/(К·моль),
 T – температура клітини (у Кельвінах),
 F – константа Фарадея, $F=96500$ С/моль,
 $Na_{зовн}$, $Na_{внутр}$, $K_{зовн}$, $K_{внутр}$ – концентрації іонів натрію та калію зовні та всередині клітини,
 $pNa(t)$, $pK(t)$ – проникності мембрани по відношенню до іонів натрію та калію:

$$pNa(t) = pNa_{зовн} \cdot m^3(t) \cdot h(t) + INa,$$

$$pK(t) = pK_{зовн} \cdot n^4(t) \cdot i(t) + IK,$$

де $pNa_{зовн}$, $pK_{зовн}$ – проникність мембрани зовні клітини для іонів натрію та калію,

INa , IK – канали у мембрані для іонів натрію та калію,

$m(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau_m}}$, $h(t) = e^{-\frac{t}{\tau_h}}$ – рівняння кінетики відкриття й зачинення воріт каналу мембрани по відношенню до іонів натрію,

$n(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau_n}}$, $i(t) = e^{-\frac{t}{\tau_i}}$ – рівняння кінетики відкриття й зачинення воріт каналу мембрани по відношенню до іонів калію,

τ_m , τ_h , τ_n , τ_i – константи воріт каналу мембрани.

- ☞ Визначте момент часу, в який потенціал проникності мембрани по відношенню до іонів натрію та калію буде дорівнювати нулю, за наступних значень параметрів: $T=310$, $Na_{зовн}=145$, $Na_{внутр}=14$, $K_{зовн}=4,5$, $K_{внутр}=157$, $\tau_m=2$, $\tau_h=0,75$, $\tau_n=3$, $\tau_i=4$, $INa=0,05$, $IK=0,75$, $pNa_{зовн}=200$, $pK_{зовн}=5$.

☞ Відобразьте на одному графіку функцію $E(t)$ та пряму $y(t)=0$.

Варіант 5

Зростання кількості бактерій у популяції описується рівнянням:

$$f(t) = \frac{a}{1 + b \cdot e^{-at}},$$

де f – кількість бактерій у популяції (в тисячах),

t – час розвитку популяції (дні),

a – гранична кількість бактерій у популяції (в тисячах),

b – параметр, пов'язаний зі швидкістю розмноження бактерій.

☞ Визначте, через скільки днів популяція буде нараховувати 1100 бактерій, за таких значень параметрів: $a=1,2$, $b=15,33$.

☞ Відобразьте на одному графіку ліву та праву частини рівняння, що Ви розв'язали.

Варіант 6

Розвиток деякої популяції мікроорганізмів можна описати рівнянням:

$$f(t) = \frac{k}{e^{\theta(t)} + 1},$$

де f – кількість мікроорганізмів у популяції (в тисячах),

t – час розвитку популяції (дні),

k – гранична кількість мікроорганізмів у популяції (у тисячах),

$$\theta(t) = \frac{3}{7}t^2 - 2,5t + 0,1.$$

☞ Визначте, через скільки днів популяція буде нараховувати 3300 мікробів, при $k=5,3$.

☞ Відобразьте на одному графіку функцію $f(t)$ та пряму $y(t)=3,3$.

Варіант 7

В умовах задачі попереднього варіанту визначте моменти часу t , у які функція $\theta(t) = 0,8$. Використайте функцію polyroots.

Варіант 8

☞ В умовах задачі з варіанту 6 визначте, через скільки днів кількість мікроорганізмів у популяції буде дорівнювати 95% від граничного розміру популяції, якщо $k=8,97$ й $\theta(t) = 2,13 \cdot (t-3)^3 + 0,01$.

☞ Відобразьте на одному графіку функцію $f(t)$ та пряму на рівні 95% від граничної кількості мікроорганізмів у популяції.

Варіант 9

В умовах попередньої задачі визначте моменти часу t , у які функція $\theta(t) = 0,07$. Використайте функцію polyroots.

Варіант 10

Динаміка концентрації амфетаміну в плазмі крові при певному рівні кислотності ph описується рівнянням:

$$C(t) = e^{\frac{-0,693 \cdot t}{7 \cdot ph - 37,5}},$$

де C – концентрація препарату,
 t – час після введення препарату (години),
 ph – кислотність.

- ☞ Визначте, через скільки годин концентрація амфетаміну в плазмі крові впаде до 80% від початкової при $ph=6,5$.
- ☞ Відобразьте на одному графіку функцію $C(t)$ та пряму на рівні 80% від початкової концентрації амфетаміну.

Варіант 11

- ☞ В умовах попередньої задачі визначте, через скільки годин концентрація амфетаміну в плазмі крові впаде до 10% від початкової, якщо $ph=7,5$.
- ☞ Відобразьте на одному графіку функцію $C(t)$ та пряму на рівні 10% від початкової концентрації амфетаміну.

Варіант 12

- ☞ В умовах попередньої задачі визначте, через скільки годин концентрація амфетаміну в плазмі крові зменшиться вдвічі в порівнянні з початковою його концентрацією, якщо кислотність $ph=8,5$.
- ☞ Відобразьте на одному графіку функцію $C(t)$ та пряму на рівні половини початкової концентрації амфетаміну.

Варіант 13

Динаміки концентрацій амфетаміну й метілфенідату гідрохлориду у плазмі крові при певному рівні кислотності ph описуються рівняннями:

$$C_{\text{амфетаміну}}(t) = e^{\frac{-0,693 \cdot t}{7 \cdot ph - 37,5}},$$

$$C_{\text{метілфенідату}}(t) = e^{-0,365 \cdot t},$$

де C – концентрація препарату,
 t – час після введення препарату (години),
 ph – кислотність.

- ☞ За умови, що спочатку пацієнтові було введено амфетамін, а рівно через 3 години – метілфенідату гідрохлорид, визначте, через скільки годин після введення першого препарату концентрації у плазмі крові амфетаміну й метілфенідату гідрохлориду співпадуть, якщо рівень кислотності $ph=7,5$.
- ☞ Відобразьте на одному графіку функції $C_{амфетаміну}(t)$ та $C_{метілфенідату}(t)$.

Варіант 14

Сила струму іонів кальцію на поверхні клітинної мембрани описується формулою:

$$I_{Ca}(v) = P_{Ca} \cdot 2 \cdot v \cdot F \cdot \frac{Ca_{внутр} - Ca_{зовн} \cdot e^{-v}}{1 - e^{-v}}.$$

У цій формулі: I_{Ca} – сила струму іонів кальцію, v – напруга,
 P_{Ca} – проникність мембрани по відношенню до іонів кальцію,
 $Ca_{внутр}$, $Ca_{зовн}$ – щільність іонів кальцію всередині та зовні клітини (кількість іонів на одиницю площі поверхні клітинної мембрани),

$$F = F(v) = \frac{v \cdot R \cdot T}{2 \cdot V_m},$$

де V_m – одинична напруга частки активації,
 R – універсальна газова константа, $R=8,314$ Дж/(К·моль),
 T – температура клітини (у Кельвінах).

- ☞ Визначте значення напруги v , за яких сила струму іонів кальцію на поверхні клітинної мембрани буде нульовою, якщо $P_{Ca}=0,3$, $Ca_{внутр}=0,002$, $Ca_{зовн}=0,00005$, $V_m = -20$, $T=310$.
- ☞ Відобразьте на одному графіку функцію $I_{Ca}(v)$ та пряму $y(v)=0$.

Варіант 15

- ☞ В умовах попередньої задачі визначте значення напруги v , за яких сила струму іонів кальцію на поверхні клітинної мембрани буде дорівнювати 0,02, якщо $P_{Ca}=0,3$, $Ca_{внутр}=0,002$, $Ca_{зовн}=0,00005$, $V_m = -20$, $T=310$.

☞ Відобразьте на одному графіку функцію $I_{Ca}(v)$ та пряму $y(v)=0,02$.

Варіант 16

Дано каскад з N послідовних нейронів, що передають синаптичний сигнал. Сигнал передається від одного нейрона до іншого з однаковою затримкою у часі τ . В цьому випадку швидкість розповсюдження сигналу R як функція від часу t (у секундах) задається формулою:

$$R(t) = \frac{1}{\tau \cdot 10!} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^N \cdot e^{-\frac{t}{\tau}}.$$

☞ Визначте, у які моменти часу в каскаді з 5 нейронів швидкість розповсюдження сигналу складе $1,53 \cdot 10^{-6}$, якщо $\tau=2$.

☞ Відобразьте на одному графіку функцію $R(t)$ та пряму $y(t)=1,53 \cdot 10^{-6}$.

Примітка. Тому що значення швидкості в цій задачі дуже малі (порядку 10^{-6}), для отримання точної відповіді при розв'язанні рівняння, обидві його частини слід помножити на 10^6 .

Варіант 17

☞ Визначте кислотність ph слабкокислого розчину з рівняння:

$$\frac{(e^{-ph \cdot 2,3})^2 - K_w}{K_a} + e^{-ph \cdot 2,3} - \frac{K_w}{e^{-ph \cdot 2,3}} - E_w = 0,$$

де E_w – концентрація кислоти дорівнює 0,1;

K_a – константа дисоціації дорівнює $1,85 \cdot 10^{-5}$;

K_w – іонний добуток води дорівнює $1 \cdot 10^{-14}$.

Варіант 18

В умовах попередньої задачі визначте іонний добуток води, якщо кислотність дорівнює 2,5.

Лабораторна робота №4

Побудова математичних моделей та розв'язання медико-фармацевтичних задач на основі диференційних рівнянь

Тема: *Різні способи чисельного інтегрування диференційних рівнянь засобами комп'ютерної математики MathCAD.*

Мета: *Набути навичок складання математичних моделей задач у вигляді диференційних рівнянь, їхнього чисельного розв'язання засобами системи комп'ютерної математики MathCAD, правильного тлумачення й графічного відображення результатів.*

Ознайомтеся з різними способами розв'язання диференційних рівнянь у системі MathCAD на прикладі наведених нижче задач.

Завдання 1

Побудуйте модель динаміки щільності популяції бактерій за наступних параметрів:

- ☞ початкова кількість бактерій у популяції дорівнює 20;
- ☞ коефіцієнт середнього періоду генерації $a=2,2$;
- ☞ коефіцієнт смертності $c=0,002$.

Довідкова інформація. (Динаміка популяцій.)

Зміна кількості бактерій у популяції може бути описана диференціальним рівнянням Ферхюльста:

$$\frac{dB}{dt} = a \cdot B - c \cdot B^2, \quad (4.1)$$

де a – коефіцієнт, що залежить від середнього періоду генерації, c – коефіцієнт смертності, $B=B(t)$ – кількість бактерій у популяції в момент часу t . Таким чином, похідну $\frac{dB}{dt}$ можна трактувати як швидкість зміни числа бактерій у популяції. Доданок $-c \cdot B^2$ описує внутрішньовидову конкуренцію й обумовлений обмеженістю ресурсів екологічної ніші, що займає популяція.

Рівняння Ферхюльста з'явилося при дослідженні цим бельгійським математиком моделі росту чисельності населення (1838). Воно не враховує усі реальні фактори зміни кількості людської популяції та підходить для моделювання динаміки щільності популяції тільки у випадку поколінь, що

не перетинаються (тобто, коли батьки не живуть в той же час, що й нащадки). Така ситуація характерна не тільки для популяцій деяких бактерій, але й для деяких (не всіх) жуків, метеликів, кальмарів и рыб.

За відсутності факторів негативного впливу на популяцію (немає внутрішньовидової конкуренції, смертність $c=0$) її чисельність зростає у відповідності до закону Мальтуса:

$$\frac{dB}{dt} = a \cdot B \quad (4.2)$$

Часто в літературі ця модель називається мальтузіанським зростанням. Вона була історично першою математичною моделлю, що описує біологічні суспільства (якщо не брати до уваги дослідження Фібоначчі популяції кроликів, що привели до його відомих чисел).

Таким чином, нам необхідно знайти чисельний розв'язок диференційного рівняння (4.1) за параметрів $a=2,2$, $c=0,002$ та початкового значення функції $B(0)=20$. Чисельний розв'язок цієї задачі на основі методу Ейлера представлено на рис.19. Інший спосіб розв'язку на основі методу Рунге—Кутта з використанням функції **Odesolve** показано на рис.20.

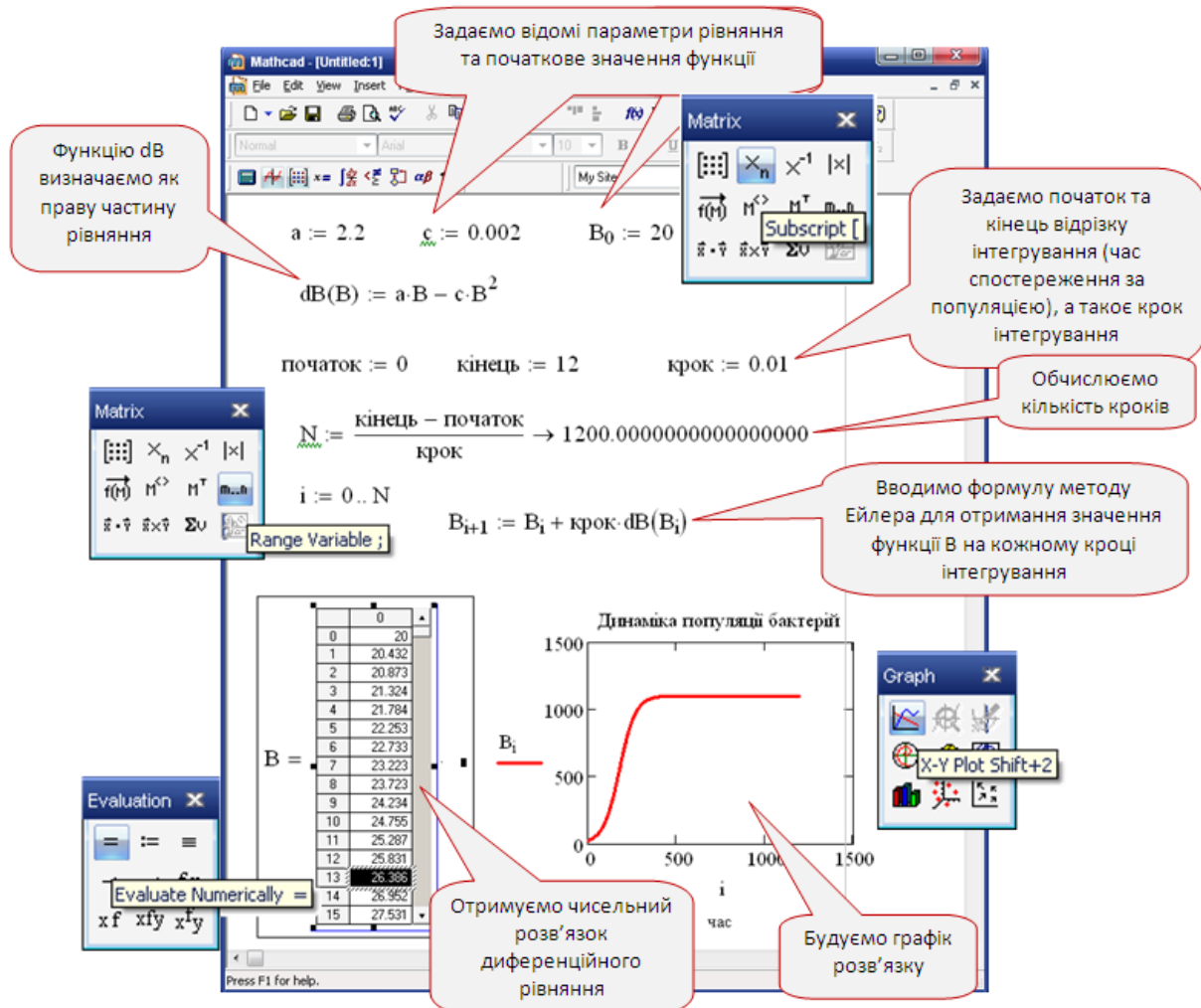


Рис.19. Чисельний розв'язок диференційного рівняння методом Ейлера.

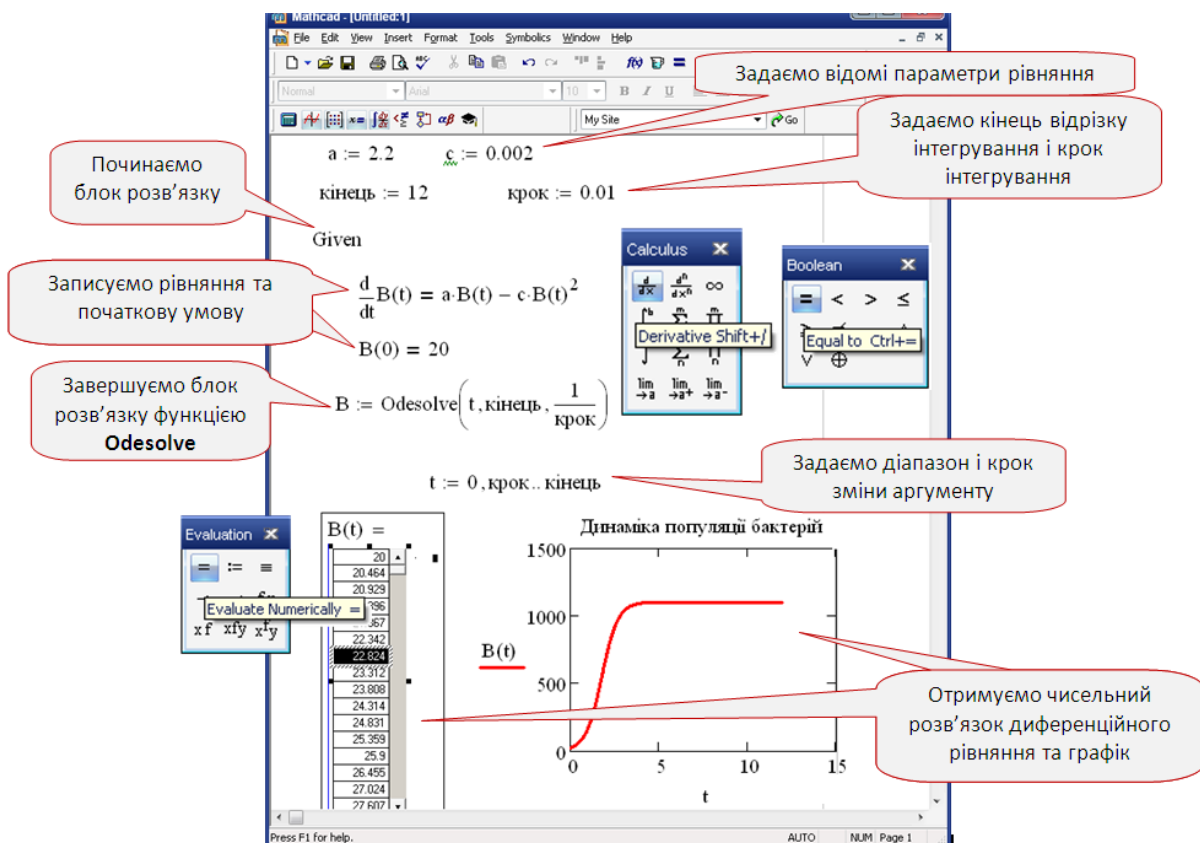


Рис.20. Чисельний розв'язок диференційного рівняння за допомогою функції Odesolve.

Завдання 2

Створіть математичну модель зменшення концентрації основної речовини глюкозаміну гідрохлориду протиартрозного препарату «Глюкопирин для ін'єкцій 1.0» в процесі зберігання. На основі створеної моделі визначте, через скільки днів від початку зберігання концентрація основної речовини стане дорівнювати 90% від початкової (цей момент вважається закінченням терміну придатності препарату). Вихідні дані:

- ☞ початкова концентрація глюкозаміну гідрохлориду 480 мг/г;
- ☞ температура оточуючого середовища 293 К;
- ☞ енергія активації процесу термічного розкладання $E=2,438 \cdot 10^{-3}$ Дж/моль;
- ☞ константа швидкості процесу $K_0=2,189 \cdot 10^{-3}$ доба⁻¹.

Довідкова інформація.

При зберіганні протиартрозного препарату «Глюкопирин для ін'єкцій 1.0» вміст основної речовини глюкозаміну гідрохлориду зменшується в результаті термічного розкладання. Цей процес можна описати наступним диференційним рівнянням:

$$\frac{dC}{dt} = -K \cdot C, \quad (4.3)$$

де $C=C(t)$ – концентрація основної речовини як функція від часу t (у добах), K – коефіцієнт швидкості процесу термічного розкладання.

Коефіцієнт швидкості K може бути знайдено з рівняння Арреніуса: $K = K_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}}$, де E – енергія активації процесу термічного розкладання, K_0 – константа швидкості процесу, T – температура оточуючого середовища, $R=8,31451$ кДж/(кмоль·К) – універсальна газова константа.

Відмітимо, що рівняння (4.3) також може бути застосовано до опису зміни концентрації лікарських препаратів у крові. В такому випадку $C(t)$ позначає концентрацію препарату в крові як функція від часу t (як правило, у годинах), коефіцієнт K знаходиться також з рівняння Арреніуса, в якому значення енергії активації E залежить від типу хімічної реакції, а константа K_0 швидкості процесу зменшення вмісту препарату у крові – від складу конкретного лікарського препарату.

Таким чином, нам необхідно спочатку на основі рівняння Арреніуса обчислити значення коефіцієнту швидкості розкладання K (дивись рис.21), а потім знайти чисельний розв'язок диференційного рівняння $\frac{dC}{dt} = -K \cdot C$ за заданої початкової умови. Враховуючи постановку задачі, в даному випадку зручніше буде скористуватися методом Ейлера (дивись рис.22).

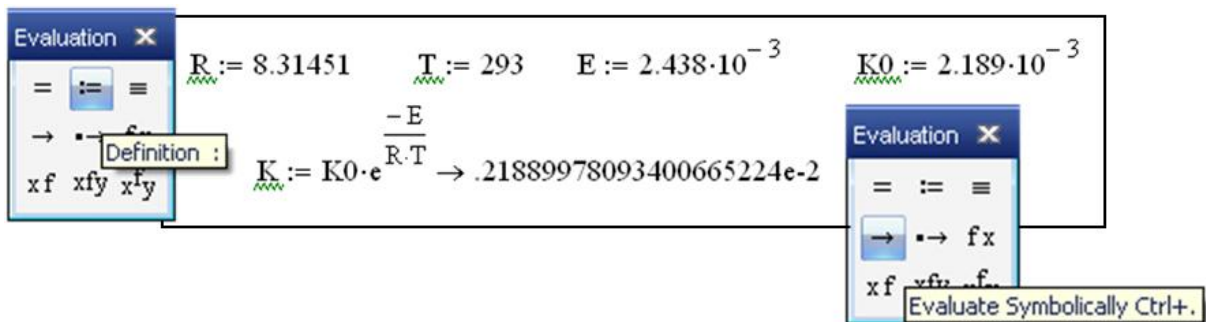


Рис.21. Введення вихідних даних задачі й обчислення коефіцієнту швидкості процесу термічного розкладення глюкозаміну гідрохлориду.

Після відшукування чисельного розв'язку приступаємо до з'ясування терміну придатності препарату, тобто до визначення того моменту часу (кількості діб, що минули від початку зберігання), коли концентрація глюкозаміну гідрохлориду досягне 90% від свого початкового значення. При вирішенні цього питання можливі декілька підходів.

1-й спосіб (рутинний). Обчисліть, чому дорівнює 90% від початкової концентрації глюкозаміну гідрохлориду, а потім знайдіть це значення в отриманому масиві чисельного розв'язку, користуючись полоєю прокрутки (дивись рис.23).

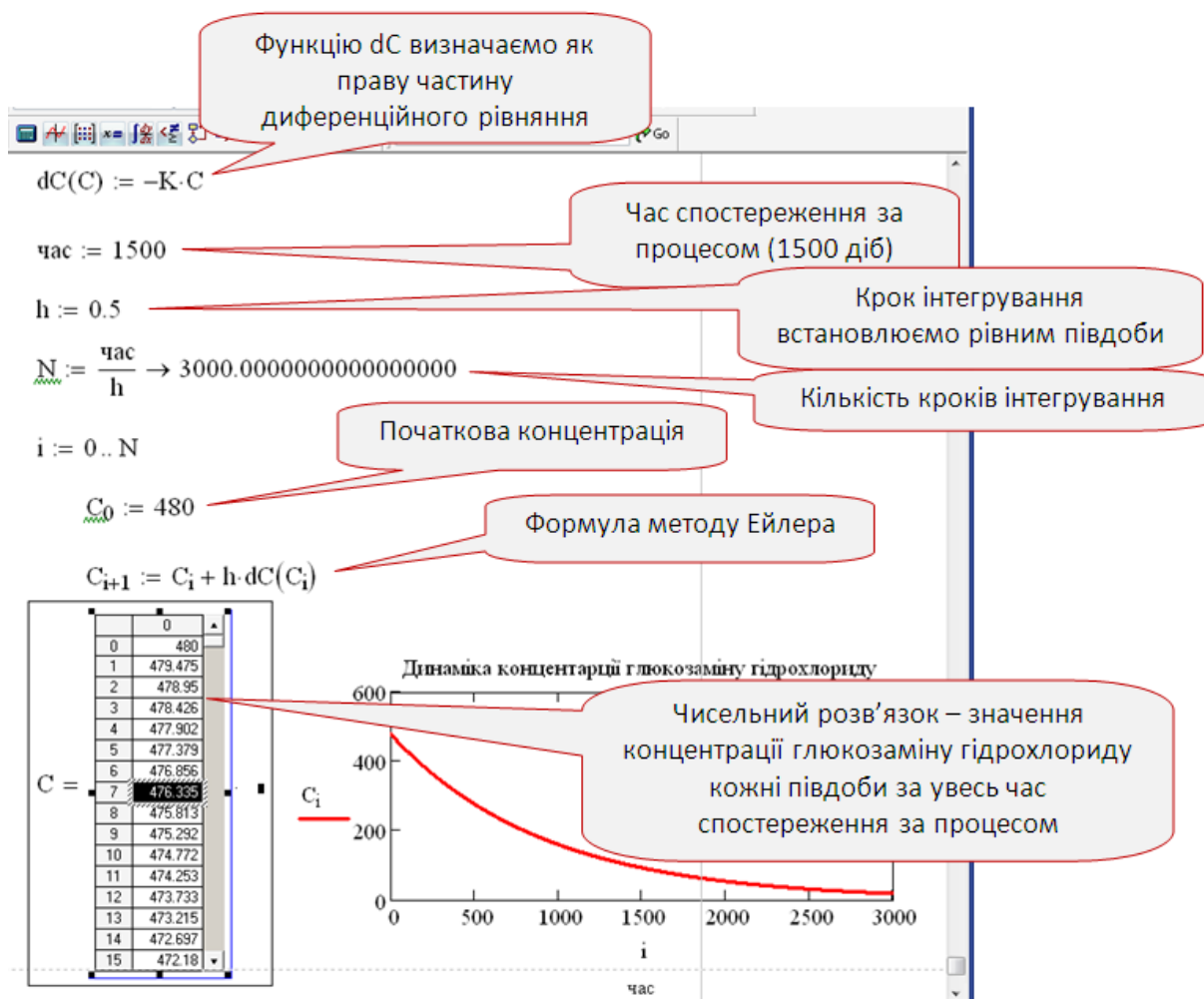


Рис.22. Метод Ейлера розв'язку задачі про процес термічного розкладення глюкозаміну гідрохлориду.

Примітка: Хоча це здається й простою справою, дуже часто знайти конкретне число серед десятків сотень або тисяч інших чисел доволі складно, особливо, коли функція розв'язку не є монотонною або крок інтегрування дуже малий.

Як бачимо на малюнку 23, на 96-ому кроці вимірювання концентрація глюкозаміну гідрохлориду ще перевищувала 432 мг/г, а на 97-му вже менше за це значення. Враховуючи, що для кожної доби зберігання препарату у масиві розв'язку маємо по 2 значення концентрації основної речовини, робимо висновок, що термін зберігання препарату повинен складати не більше 48 діб ($96/2=48$).

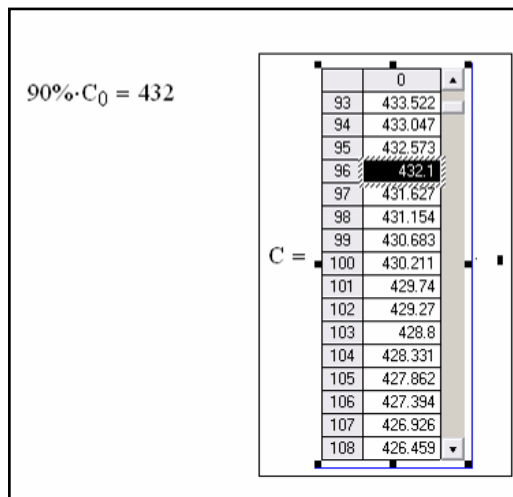


Рис.23. Визначення моменту часу, коли концентрація глюкозаміну гідрохлориду стане дорівнювати 90% від початкової, вручну.

2-й спосіб (з використанням логічної змінної). Кожному значенню масиву розв'язку C ставимо у відповідність значення 1, якщо C_i більше за 90% від початкової концентрації глюкозаміну гідрохлориду, і значення 0, якщо C_i менше ніж 90% від початкової концентрації глюкозаміну гідрохлориду. Створюємо масив b, що містить ці 0 та 1. Потім рахуємо кількість одиниць у масиві b та, з поправкою на величину кроку інтегрування (h), отримуємо кількість діб, в які концентрація основної речовини препарату була меншою ніж 90% від свого початкового значення. Схему розв'язку, що описана, показано на рис.24.

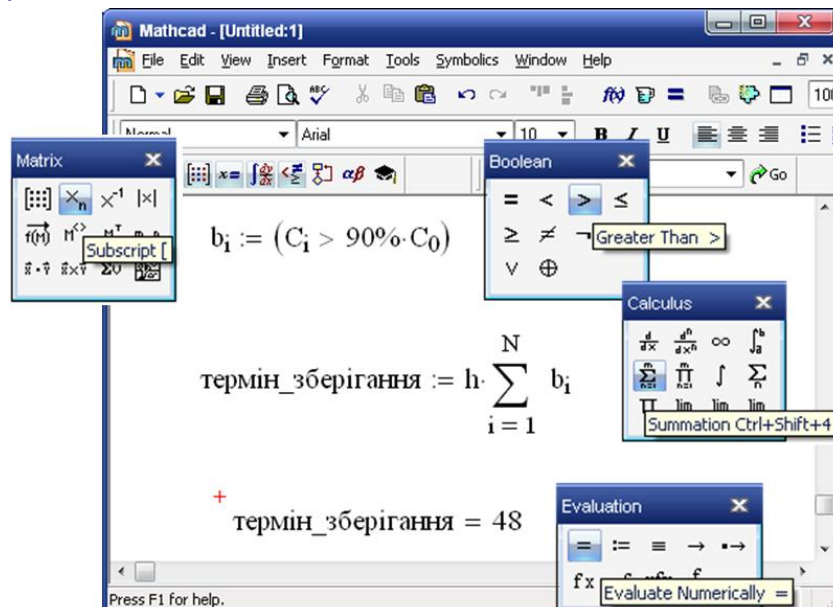


Рис.24. Визначення моменту часу, коли концентрація глюкозаміну гідрохлориду стане дорівнювати 90% від початкової, за допомогою логічної змінної.

3-й спосіб (з використанням знань з вищої математики ;-). Загальний розв'язок диференційного рівняння $\frac{dC}{dt} = -K \cdot C$ виглядає так: $C(t) = e^{-K \cdot (t+a)}$, де a – деяка константа ($a \in \mathbb{R}$). Частинний розв'язок (значення параметру a , відповідно до нашої задачі) знаходимо з умови $C(0)=480$ (початкової концентрації). Значення часу t , що відповідає кінцю терміну придатності препарату знаходимо з рівняння. Схему розв'язку, що описана, показано на рис.25.

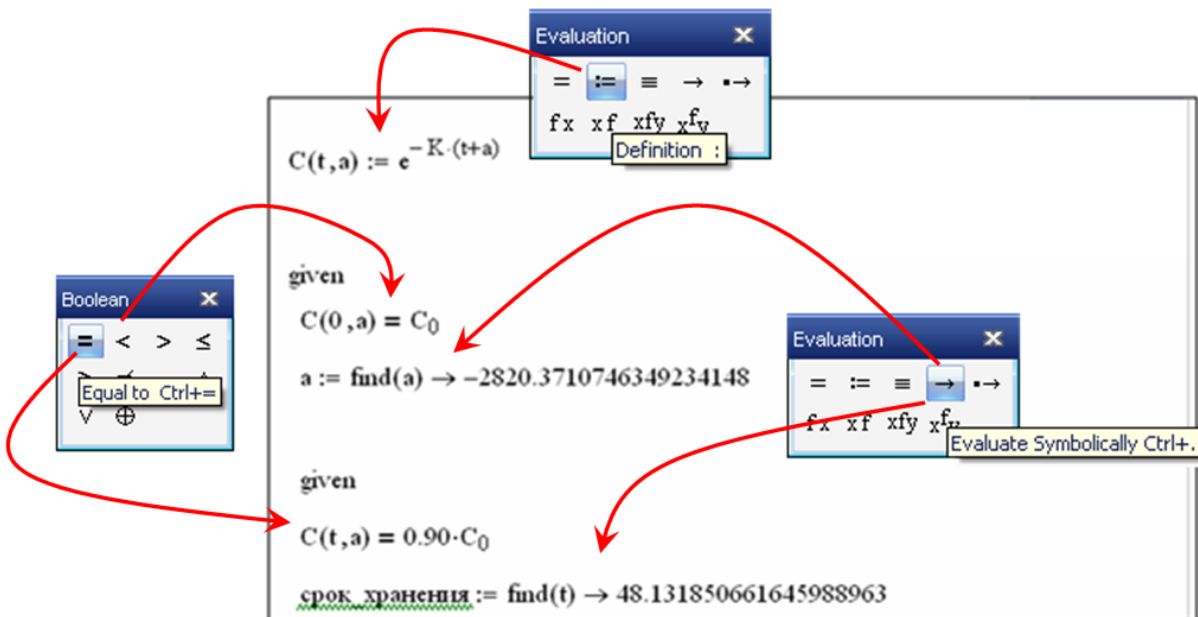


Рис.25. Визначення моменту часу, коли концентрація глюкозаміну гідрохлориду стане дорівнювати 90% від початкової, за допомогою аналітичного розв'язку диференційного рівняння.

Завдання 3

Фармацевтична фірма випускає у продаж новий препарат і потребує реклами цього лікарського засобу. Маркетологами фірми була підрахована загальна кількість N потенційних покупців нового препарату, з яких на початку рекламної кампанії проінформовано про нього x_0 чоловік. Подальша інформація розповсюджується серед покупців в процесі спілкування одного з іншим. Визначте, через скільки місяців новий препарат стане загальновідомим, якщо вихідні дані такі:

- ☞ загальна кількість потенційних покупців $N=300\ 000$;
- ☞ початкова кількість покупців, поінформованих про препарат, $x_0=100$;

☞ коефіцієнт інтенсивності спілкування між поінформованими на непоінформованими покупцями $k=2 \cdot 10^{-6}$.

Довідкова інформація.

Якщо позначити $x=x(t)$ кількість покупців, що знають про новий препарат на момент часу t , тоді $(N - x)$ це кількість покупців, що на момент часу t ще не поінформовані про нього. Швидкість зростання кількості покупців, що знають про новий товар, (тобто похідна $\frac{dx}{dt}$) пропорційна кількості зустрічей між поінформованими та непоінформованими покупцями (тобто добутку $x \cdot (N - x)$). З цих міркувань отримуємо диференціальне рівняння:

$$\frac{dx}{dt} = k \cdot x \cdot (N - x), \quad (4.4)$$

де k – додатний коефіцієнт пропорційності, що характеризує інтенсивність спілкування між поінформованими та непоінформованими покупцями.

Розв'язок рівняння (4.4) в економічній літературі називають рівнянням логістичної кривої. За її вигляд (дивись рис. 26) цю криву часто називають S-образною кривою. Вона з високою вірогідністю описує розвиток різних систем, а конкретніше – залежність показників системи від затрат, що вкладаються в неї, в частному випадку під затратами мається на увазі час.

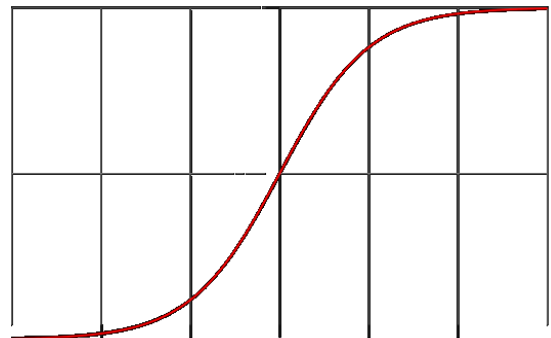


Рис. 26. Логістична крива.

До рівняння (4.4) зводиться також задача про розповсюдження технологічних нововведень.

Відмітимо, що рівняння (4.4) з точністю до фізичного смислу коефіцієнтів є рівнянням Ферхюльста (4.1).

Таким чином, щоб відповісти на питання задачі, нам необхідно знайти чисельний розв'язок диференціального рівняння (4.4) за відомих значень k та N і заданої початкової умови $x(0)=x_0$. Формалізацію математичної моделі задачі для розв'язання її методом Рунге—Кутта за допомогою функції Radau наведено на рис.27. На рис.28 показано, як отримати чисельний розв'язок рівняння та вилучити з масиву розв'язку значення часу та кількості покупців.

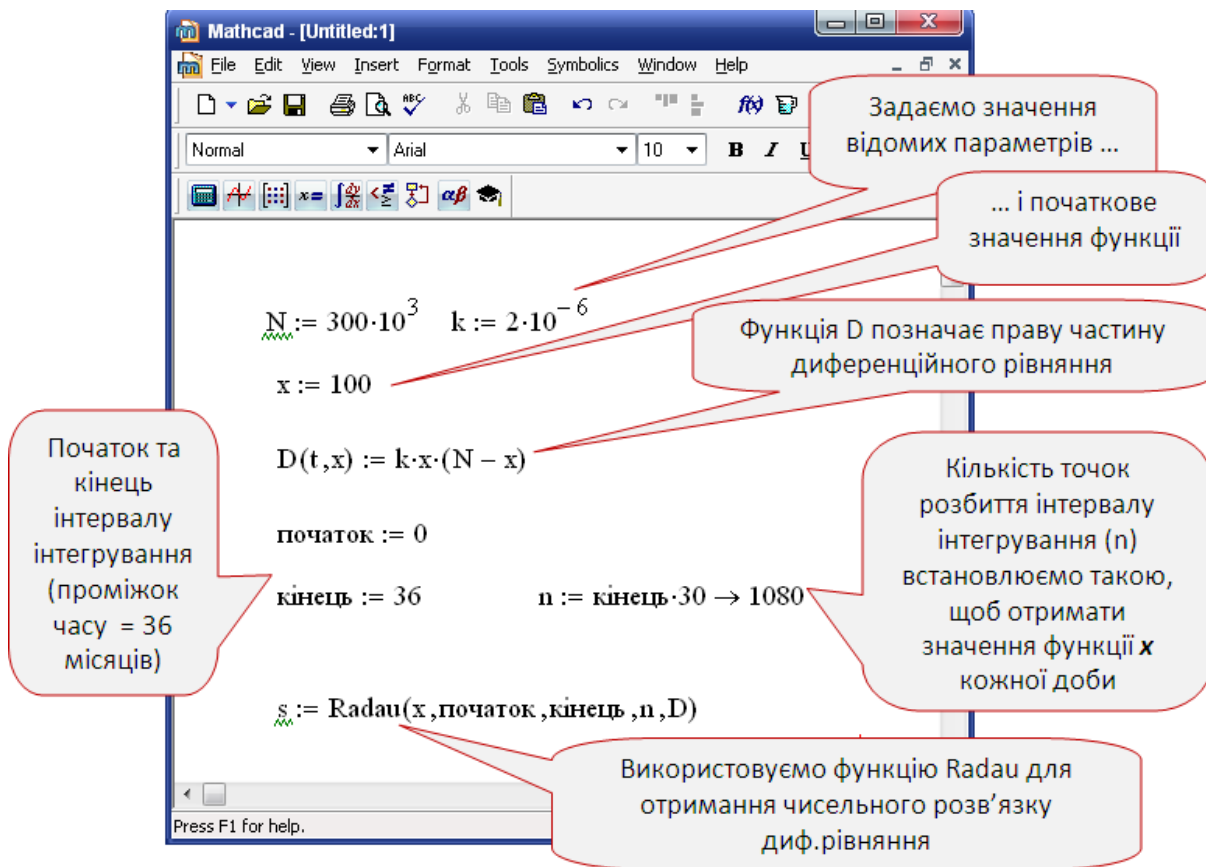


Рис.27. Розв'язок диференційного рівняння в задачі про ефективність реклами методом Рунге–Кутта.

На рис.29 наведено графік розв'язку рівняння, що показує динаміку зміни кількості покупців, що вже знають про новий препарат, протягом 36 місяців від початку рекламної кампанії.

З графіку видно, що кількість покупців, поінформованих про новий препарат, добіжить максимально можливої (тобто загальної кількості потенційних покупців $N=300\,000=3 \cdot 10^5$) десь між 20-м та 30-м місяцями від початку рекламної кампанії. Це і є час, коли новий препарат стане загальновідомим.

Щоб більш точно визначити час, коли новий препарат стане загальновідомим, скористайтеся масивами значень часу t та кількості покупців x . Спочатку в масиві значень t , скориставшись полозою прокрутки, відшукайте значення, більше 20 місяців (вони починаються приблизно з 610-го кроку інтегрування, тобто номеру строки масиву). Потім з того ж (610) номеру строки в масиві x починайте більш ретельно відстежувати зміну кількості покупців доки вона не збільшиться до максимально можливої ($3 \cdot 10^5$).

Відповідь на питання задачі показана на рис.30.

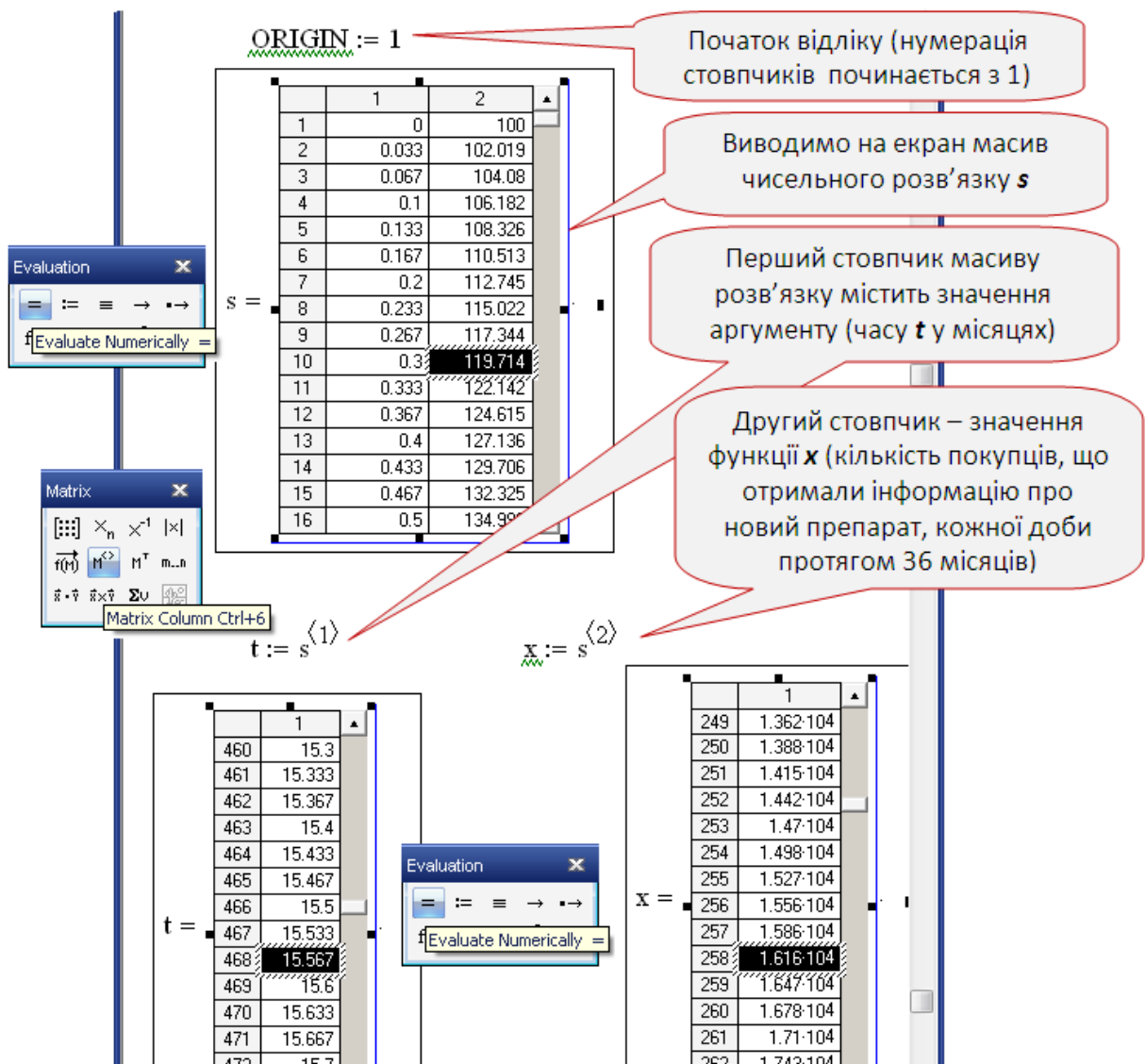


Рис.28. Розв'язок диференційного рівняння в задачі про ефективність реклами методом Рунге–Кутта.

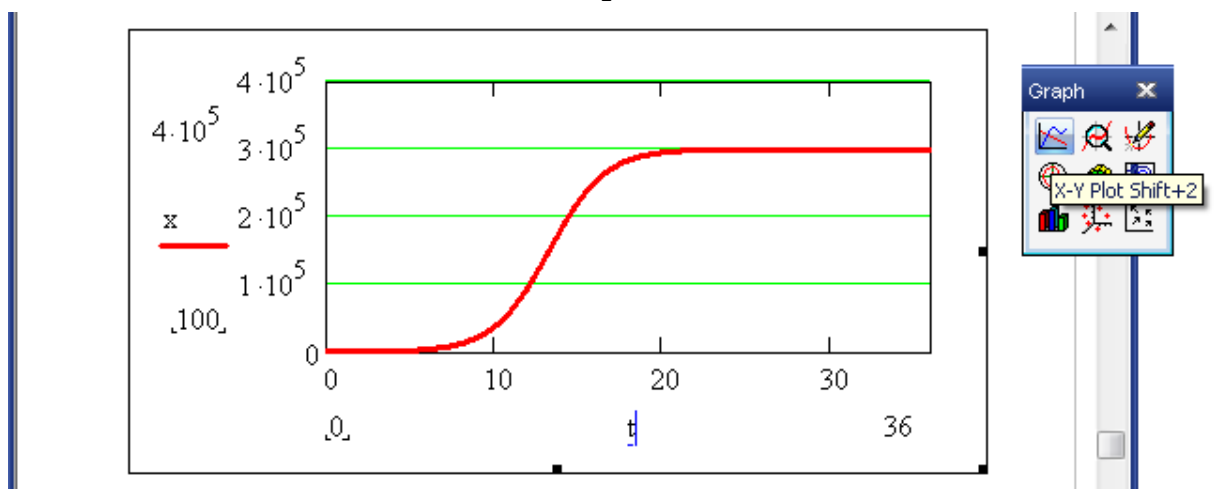


Рис.29. Графік розв'язку диференційного рівняння в задачі про ефективність реклами.

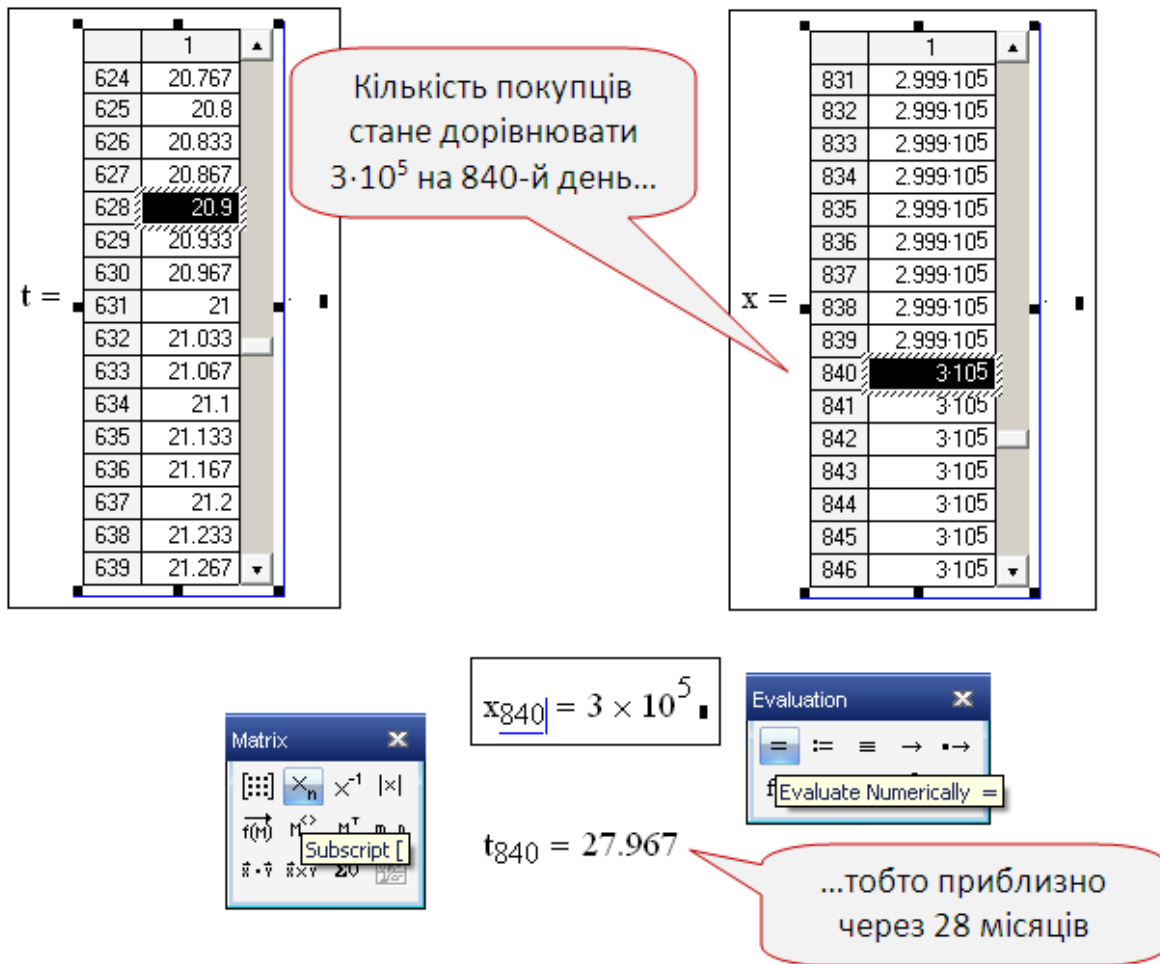


Рис.30. Відповідь на питання задачі про ефективність реклами.

Завдання для самостійної роботи

Варіант 1

Створіть модель розвитку популяції на основі диференційного рівняння Ферхюльста (4.1), якщо:

- ☞ коефіцієнт середнього періоду генерації $a=4$,
- ☞ коефіцієнт смертності $c=0,0035$,
- ☞ початковий розмір популяції 40.
- ☞ Отримайте значення розміру популяції в кожен день спостереження протягом 12 місяців.
- ☞ Побудуйте графік розв'язку.
- ☞ Визначте день, в який популяція досягне граничного (максимального) розміру.

Варіант 2

Створіть модель розвитку популяції на основі диференційного рівняння Ферхюльста (4.1), якщо:

- ☞ коефіцієнт середнього періоду генерації $a=5$,
 - ☞ коефіцієнт смертності $c=0,0007$,
 - ☞ початковий розмір популяції 30.
- ☞ Отримайте значення розміру популяції в кожен день спостереження протягом 6 місяців.
- ☞ Побудуйте графік розв'язку.
- ☞ Визначте день, в який популяція збільшиться у 12,5 разів у порівнянні зі своїм початковим розміром.

Варіант 3

Створіть модель розвитку популяції на основі диференційного рівняння Ферхюльста (4.1), якщо:

- ☞ коефіцієнт середнього періоду генерації $a=3,1$,
 - ☞ коефіцієнт смертності $c=0,0044$,
 - ☞ початковий розмір популяції 15.
- ☞ Отримайте значення розміру популяції в кожен день спостереження протягом 12 місяців.
- ☞ Побудуйте графік розв'язку.
- ☞ Визначте день, в який популяція досягне розміру 500 осіб.

Варіант 4

Створіть модель розвитку популяції на основі диференційного рівняння Ферхюльста (4.1), якщо:

- ☞ коефіцієнт середнього періоду генерації $a=1,5$,
 - ☞ коефіцієнт смертності $c=0,00013$,
 - ☞ початковий розмір популяції 80.
- ☞ Отримайте значення розміру популяції в кожен день спостереження протягом 18 місяців.
- ☞ Побудуйте графік розв'язку.
- ☞ Визначте день, в який популяція досягне розміру на 85% більше від початкового.

Варіант 5

Створіть модель розвитку популяції на основі рівняння Мальтуса (4.2), якщо:

- ☞ коефіцієнт середнього періоду генерації $a=0,5$,
- ☞ початковий розмір популяції 80 000.
- ☞ Отримайте значення розміру популяції в кожен день спостереження протягом 9 місяців.
- ☞ Побудуйте графік розв'язку.
- ☞ Визначте день, в який популяція досягне розміру на 70% більше від початкового.

Варіант 6

Створіть модель зміни концентрації лікарського препарату в крові пацієнта на основі диференційного рівняння (4.3), якщо:

- ☞ коефіцієнт швидкості зменшення концентрації в крові даного препарату $K=0,0018$,
- ☞ початкова концентрація 0,5 мг.
- ☞ Отримайте значення концентрації кожної хвилини протягом доби (24 годин).
- ☞ Побудуйте графік розв'язку.
- ☞ Визначте час, коли концентрація препарату стане дорівнювати 0,2 мг.

Варіант 7

Створіть модель розвитку популяції на основі рівняння Мальтуса (4.2), якщо:

- ☞ коефіцієнт середнього періоду генерації $a=1,47$,
- ☞ початковий розмір популяції 1 000.
- ☞ Отримайте значення розміру популяції в кожен день спостереження протягом 12 місяців.
- ☞ Побудуйте графік розв'язку.
- ☞ Визначте день, в який популяція досягне розміру 30 тисяч осіб.

Лабораторна робота №5

Побудова математичних моделей і розв'язок медико-фармацевтичних задач на основі систем диференційних рівнянь

Тема: *Різні способи чисельного інтегрування систем диференційних рівнянь засобами системи комп'ютерної математики MathCAD.*

Мета: *Набути навичок складання математичних моделей задач, що допускають представлення у вигляді систем диференційних рівнянь, їх чисельного розв'язку засобами системи комп'ютерної математики MathCAD, правильного тлумачення й графічного відображення результатів.*

Завдання 1

Складіть модель взаємодії популяцій біологічних систем в моделі Лоткі—Вольтерри, що описується системою диференційних рівнянь

$$\begin{cases} x_1' = (4 - 3,5 \cdot x_2) \cdot x_1 \\ x_2' = (-2 + x_1) \cdot x_2 \end{cases}$$

за початкового співвідношення жертв x_1 до хижаків x_2 3:1.

Довідкова інформація. (Динаміка популяцій. Рівняння Лоткі—Вольтерри, рівняння Холлінга — Теннера.)

Диференційні рівняння широко використовуються для моделювання реальних систем, що залежать від часу, в тому числі, для опису та дослідження економічних та біологічних систем.

В динаміці популяцій є багато прикладів, коли зміна чисельності популяцій у часі має характер коливань. Одним з найбільш відомих прикладів опису динаміки взаємозалежних популяцій є рівняння Лоткі—Вольтерри. Розглянемо модель взаємодії хижаків та їхньої здобичі, коли між особами одного виду немає суперництва.

Нехай x_1 і x_2 — кількість жертв і хижаків відповідно. Припустимо, що відносний приріст жертв $\frac{x_1'}{x_1}$ дорівнює $a - b \cdot x_2$, $a > 0$, $b > 0$, де a — швидкість розмноження жертв за умови відсутності хижаків, $-b \cdot x_2$ — втрати від хижаків. Розвиток популяції хижаків залежить від кількості їжі (тобто жертв), за відсутності їжі ($x_1 = 0$) відносна швидкість зміни популяції хижаків дорі-

внЮЄ $\frac{x_2'}{x_2} = -c$, $c > 0$, наявність їжі компенсує зменшення, й при $x_1 > 0$ маємо

$$\frac{x_2'}{x_2} = -c + d \cdot x_1, \quad d > 0.$$

Таким чином, система Лоткі—Вольтерри має вигляд:

$$\begin{cases} x_1' = (a - b \cdot x_2) \cdot x_1 \\ x_2' = (-c + d \cdot x_1) \cdot x_2 \end{cases}, \quad \text{де } a, b, c, d > 0. \quad (5.1)$$

Оскільки в реальних популяціях присутні багато інших чинників, які не враховуються в моделі Лоткі—Вольтерри, ця модель навряд чи може претендувати на адекватний опис реальності. Цього недоліку позбавлена модель Холлінга—Теннера, що бере до уваги більшу кількість реальних факторів. В цій моделі швидкість зміни популяції хижаків задається виразом $a \cdot x_1 - b \cdot x_1^2 / x_2 = (a - b \cdot x_1 / x_2) \cdot x_1$. Він складений виходячи із наступних міркувань. Коли їжі (жертв) багато ($x_2 \rightarrow +\infty$), популяція хижаків росте за правилом Мальтуса із показником a . Зі зменшенням кількості жертв швидкість росту популяції хижаків спадає й при $x_2 < \frac{b}{a} \cdot x_1$ стає від'ємною (останнє, грубо кажучи, є наслідком припущення, що для підтримки життя одного хижака необхідно $k = b/a$ жертв). Швидкість зміни популяції жертв складається з трьох компонент: $c \cdot x_2 - d \cdot x_2^2 - p \cdot x_1 \cdot x_2 / (q + x_2)$. Перший член $c \cdot x_2$ відповідає закону Мальтуса, другий $-d \cdot x_2^2$ описує внутрішньовидову конкуренцію та інші (екологічні) умови виживаності популяції жертв, третій $-p \cdot x_1 \cdot x_2 / (q + x_2)$ описує взаємодію популяції жертв із хижаками. Цей вираз більш правдоподібно відбиває міжвидову взаємодію, ніж відповідний член $-d \cdot x_1 \cdot x_2$ моделі Лоткі—Вольтерри. В останній кількість жертв, що вбиває один хижак за одиницю часу, дорівнює $d \cdot x_2$ і зростає пропорційно кількості жертв, що не є правдоподібним. У моделі Холлінга—Теннера коефіцієнт хижацтва дорівнює $p \cdot x_2 / (q + x_2)$. Він не може перевищувати величини p/q і за необмеженого зростання популяції жертв добігає, монотонно зростаючи, до числа p/q , що виражає природну потребу хижаків у їжі.

Таким чином, система Холлінга—Теннера має вигляд:

$$\begin{cases} x_1' = (a - b \cdot x_1 / x_2) \cdot x_1 \\ x_2' = (c - d \cdot x_2 - p \cdot x_1 / (q + x_2)) \cdot x_2 \end{cases}, \quad \text{де } a, b, c, d, p, q > 0. \quad (5.2)$$

Моделі, що розглянуто, можуть описувати поведінку конкуруючих

фірм, зростання народонаселення, чисельність армій, що воюють, зміну екологічного середовища, розвиток науки, тощо.

Модель чисельного розв'язку задачі 1 методом Ейлера наведено на рис.26.

початок := 0 кінець := 20 крок := 0.001

$N := \frac{\text{кінець} - \text{початок}}{\text{крок}} \rightarrow 20000.0000000000000000$

$x1_0 := 9$ $x2_0 := \frac{x1_0}{3}$ $t_0 := \text{початок}$

$Dx1(x1, x2) := (4 - 3.5 \cdot x2) \cdot x1$
 $Dx2(x1, x2) := (-2 + x1) \cdot x2$

$i := 0..N$

$t_{i+1} := t_i + \text{крок}$
 $x1_{i+1} := x1_i + \text{крок} \cdot Dx1(x1_i, x2_i)$
 $x2_{i+1} := x2_i + \text{крок} \cdot Dx2(x1_i, x2_i)$

$x1 =$

0	9
1	8.941
2	8.883
3	8.824
4	8.764
5	8.705
6	8.645
7	8.585
8	8.525
9	8.464
10	8.404
11	8.343

$x2 =$

0	3
163	4.629
164	4.627
165	4.625
166	4.623
167	4.621
168	4.619
169	4.617
170	4.614
171	4.612
172	4.609
173	4.607
174	4.604

Вводимо початкові значення невідомих функцій та змінної

Це система диференціальних рівнянь (функції Dx1 та Dx2 позначають похідні $\frac{dx1}{dt}$ та $\frac{dx2}{dt}$)

Отримуємо чисельний розв'язок системи диференціальних рівнянь

Задаємо початок та кінець відрізка інтегрування (спостереження за системою) і крок інтегрування

Обчислюємо кількість точок на інтервалі інтегрування, в яких будуть обчислені значення невідомих функцій

Задаємо ітераційні формули методу Ейлера для отримання кожного наступного значення функцій $x1$ та $x2$ і змінної t через попередні

Рис.26. Чисельний розв'язок системи диференціальних рівнянь методом Ейлера.

Графічно розв'язок задачі можна зобразити на координатній площині, як показано на рис.27. Зверніть увагу, що перший графік показує динаміку зміни відшуканих функцій від часу, а другий є фазовим портретом системи диференціальних рівнянь.

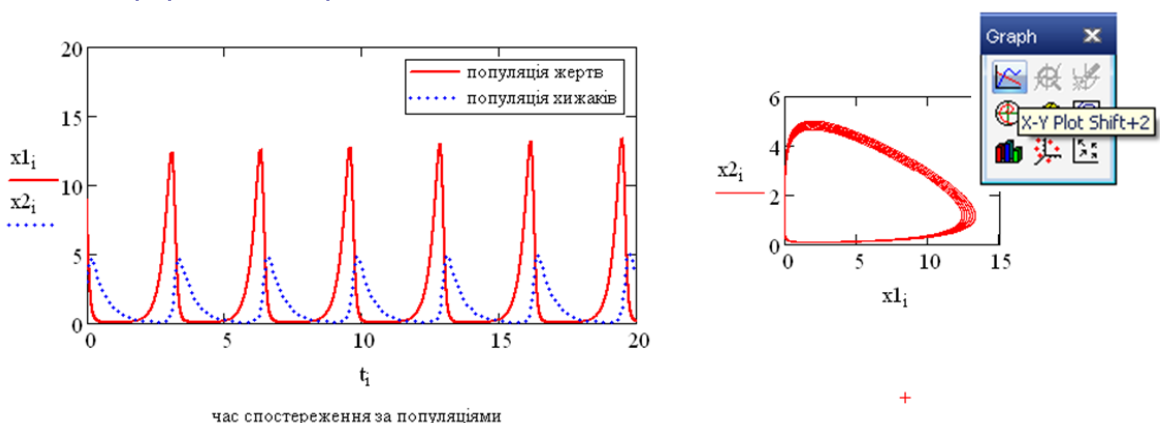


Рис.27. Графіки розв'язку і фазова траєкторія системи диференціальних рівнянь.

Модель чисельного розв'язку задачі методом Рунге—Кутта наведено на рис.28, а графіки розв'язку на рис.29.

Mathcad - [Untitled:1]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Arial 10 B I U

Початок відріку (нумерація індексів починається з 1)

Початкові значення невідомих функцій

Початок та кінець інтервалу інтегрування та кількість точок розбиття інтервалу (N)

Вектор правих частин системи диференціальних рівнянь

Використовуючи функцію rkfixed, отримуємо чисельний розв'язок системи

Значення аргументу (час спостереження за популяціями)

Значення функції x_1 (чисельність популяції жертв)

Значення функції x_2 (чисельність популяції хижаків)

Matrix

Matrix or Vector Ctrl+M

Matrix Column Ctrl+6

```

ORIGIN := 1
x1 := 9   x2 := 3
початок := 0   кінець := 20   N := 1000
D(t,x) := [ (4 - 3.5*x2) * x1
            (-2 + x1) * x2 ]
S := rkfixed(x, початок, кінець, N, D)

```

t	x1	x2
1	0	9
2	0.02	7.789
3	0.04	6.559
4	0.06	5.391
5	0.08	4.346
6	0.1	3.455
7	0.12	2.721
8	0.14	2.133
9	0.16	1.67
10	0.18	1.311
11	0.2	1.033
12	0.22	0.819
13	0.24	0.654
14	0.26	0.527
15	0.28	0.428
16	0.3	0.351

Рис.28. Чисельний розв'язок системи диференціальних рівнянь методом Рунге—Кутта.

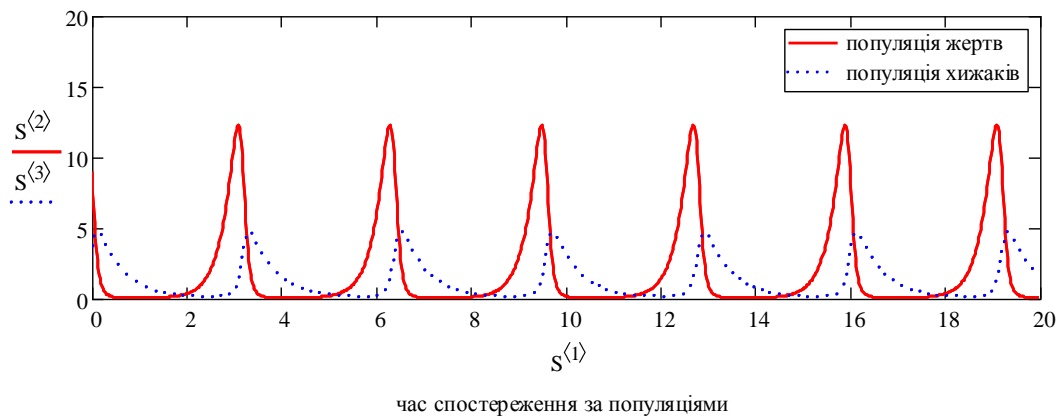


Рис.29. Графіки розв'язку системи диференціальних рівнянь.

Відмітимо, що аналогічних параметрів потребують також функції, що реалізують деякі інші обчислювальні методи розв'язання систем диференціальних рівнянь. Так, замість функції rkfixed (реалізує метод Рунге—Кутта 4-го порядку з фіксованим кроком інтегрування) в даному прикладі можна було використати функцію Rkadapt (реалізує метод Рунге—Кутта 4-го порядку з адаптивним кроком інтегрування), Bulstoer (метод точніший за ме-

тод Рунге—Кутта, але працює тільки на гладких системах), або Radau (ця функція працює навіть на жорстких системах, коли rkfixed або Rkadapt можуть не давати результату).

Модель чисельного розв'язку системи диференційних рівнянь за допомогою блоку розв'язку з функцією Odesolve наведено на рис.30, а графіки розв'язку на рис.31.

За замовчанням Odesolve використовує обчислювальний метод Рунге—Кутта з фіксованим кроком інтегрування (**Fixed**), але, якщо він не працює, можна скористатися методом з адаптивним кроком (**Adaptive**) або, для дуже «поганих» систем, жорстким (**Stiff**). Вибір методу інтегрування здійснюється правою клавішею миші на функції (дивись рис.32).

початок := 0 кінець := 20 крок := 0.001

$x1_поч := 9$ $x2_поч := \frac{x1_поч}{3}$

Початок блоку розв'язку

Given

Calculus

$\frac{d}{dt} x1(t) = (4 - 3.5 \cdot x2(t)) \cdot x1(t)$

$\frac{d}{dt} x2(t) = (-2 + x1(t)) \cdot x2(t)$

Система диференційних рівнянь

Boolean

Початкові значення невідомих функцій

$x1(початок) = x1_поч$

$x2(початок) = x2_поч$

Вектор розв'язку знаходимо за допомогою функції Odesolve

$\begin{pmatrix} x1 \\ x2 \end{pmatrix} := \text{odesolve} \left[\begin{pmatrix} x1 \\ x2 \end{pmatrix}, t, \text{кінєць}, \frac{1}{\text{крок}} \right]$

Задаємо діапазон зміни аргументу...

$t := \text{початок}, \text{початок} + \text{крок} .. \text{кінєць}$

Matrix

... і отримуємо чисельний розв'язок (значення функцій $x1(t)$ та $x2(t)$)

$x1(t)$	$x2(t)$
9	3
8.94	3.021
8.88	3.042
8.82	
8.759	3.083
8.699	3.104
8.639	3.125
8.579	3.146
8.518	3.166
8.458	3.187
8.398	

Рис.30. Чисельний розв'язок системи диференційних рівнянь за допомогою функції Odesolve.

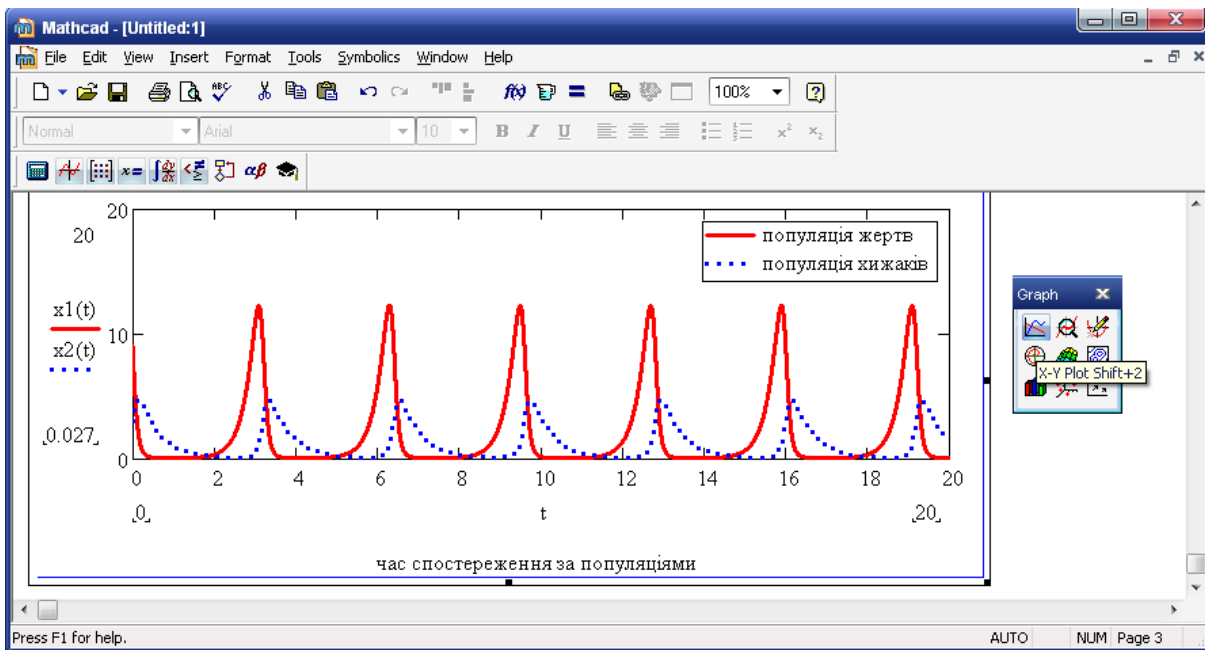


Рис.31. Графіки розв'язку системи диференціальних рівнянь.

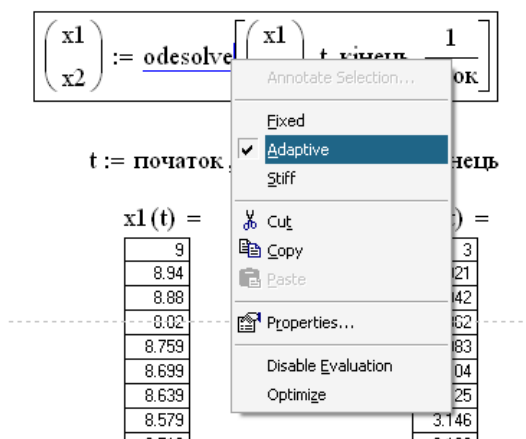


Рис.32. Вибір методу інтегрування для функції Odesolve.

Завдання 2

Дослідити взаємодію популяцій «хижак—жертва» у моделі Холлінга—Теннера (5.2) протягом трьох років співіснування за таких умов:

- ☞ початкова кількість хижаків (x_1) дорівнює 10,
 - ☞ початкова кількість жертв (x_2) дорівнює 150,
 - ☞ значення параметрів $a=25$, $b=1,5$, $c=5,5$, $d=0,2$, $p=0,5$, $q=15$.
- ☞ Отримайте чисельний розв'язок системи (5.2) – кількість хижаків та жертв у кожний день протягом трьох років співіснування популяцій.
- ☞ Побудуйте графіки розв'язку та фазові траєкторії системи.
- ☞ Визначте моменти часу, **1** коли чисельності популяцій хижаків та

жертв співпадуть; ❷ коли популяція хижаків досягне максимальної кількості.

Модель чисельного розв'язку системи диференційних рівнянь Холлінга—Теннера для даної задачі за допомогою функції Bulstoer наведено на рис.33. Аналогічно значенням, що видають функції, які реалізують метод Рунге—Кутта, масив розв'язку системи диференційних рівнянь X складається з трьох стовпців. Номери строк масиву в наведеній на малюнку моделі відповідають дням спостереження за популяціями. Перший стовпчик містить значення часу t (долі року), другий – значення кількості популяції хижаків (функції $x_1(t)$) у кожен момент часу t , третій – значення кількості популяції жертв (функції $x_2(t)$) у кожен момент часу t . Як вилучити з масиву розв'язку значення чисельності популяцій хижаків та жертв показано на рис.34.

ORIGIN := 1 (Початок відліку (нумерація індексів починається з 1))

$a := 25$ $b := 1.5$ $c := 5.5$ $d := 0.2$ $p := 0.5$ $q := 15$ (Відомі значення параметрів системи)

$x_1 := 10$ $x_2 := 150$ (Початкові значення невідомих функцій)

початок := 0 кінець := 3 (Початок та кінець інтервалу інтегрування)

$N := \text{кінєць} \cdot 365 \rightarrow 1095$ (N – кількість точок розбиття інтервалу (днів))

$$D(t,x) := \begin{bmatrix} \left(a - b \cdot \frac{x_1}{x_2}\right) \cdot x_1 \\ \left(c - d \cdot x_2 - p \cdot \frac{x_1}{q + x_2}\right) \cdot x_2 \end{bmatrix}$$

(Вектор правих частин системи диф.рівнянь Холлінга—Теннера)

$X := \text{Bulstoer}(x, \text{початок}, \text{кінєць}, N, D)$

	1	2	3
1	0	10	150
2	2.74·10 ⁻³	10.706	140.619
3	5.479·10 ⁻³	11.461	132.457
4	8.219·10 ⁻³	12.269	125.291
5	0.011	13.133	118.95
6	0.014	14.057	113.298
7	0.016	15.046	108.231
8	0.019	16.103	103.661
9	0.022	17.232	99.519
10	0.025	18.44	95.748
11	0.027	19.731	92.3
12	0.03	21.11	89.135
13	0.033	22.594	86.22

(Використовуючи функцію Bulstoer, отримуємо чисельний розв'язок системи)

Рис.33. Розв'язок системи диференційних рівнянь Холлінга—Теннера за допомогою функції Bulstoer.

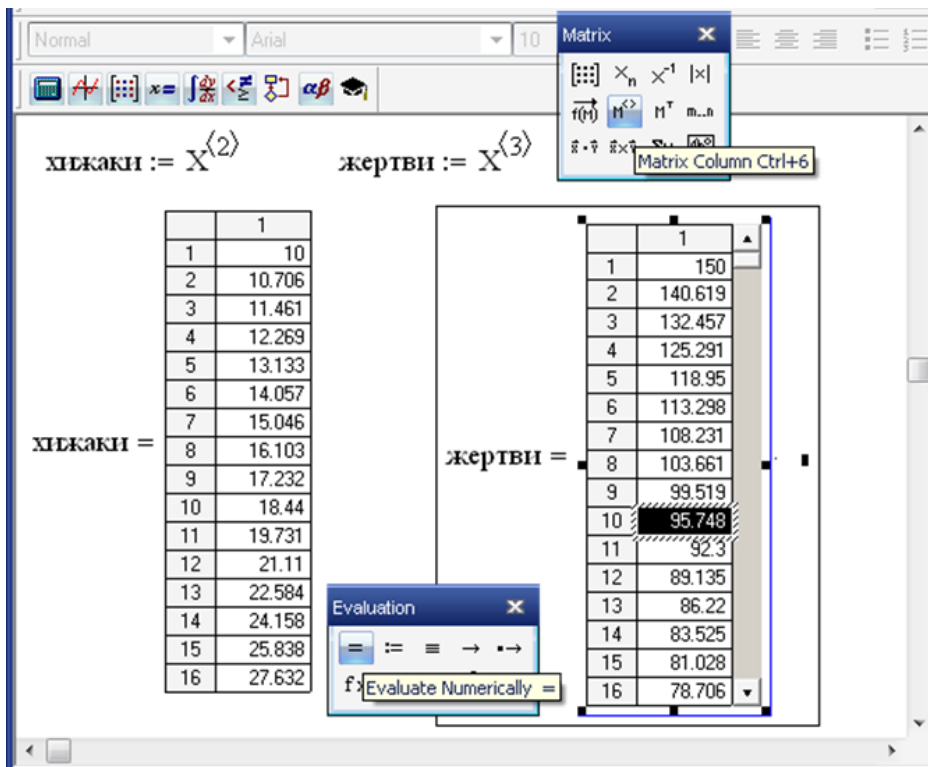


Рис.34. Інтерпретація розв'язку системи Холлінга–Теннера, отриманого за допомогою функції *Bulstoer*.

Порядок побудови графіків розв'язку наведено на рис.35. Зверніть увагу, що на графіку відображено вертикальні лінії сітки, які відповідають часовим інтервалам тривалістю 1 місяць. Щоб зробити такі ж, виконайте подвійний клік лівою клавішею миші на графіку; з'явиться вікно форматування графіку "Formatting Currently Selected X-Y Plot", в якому перейдіть на вкладку **X-Y Axes** (Осі X-Y) і в розділі **X Axis** (Вісь X) відключіть позначку *Auto grid* (Автоматична сітка) та встановіть кількість ділень сітки (*Number of grids*) рівним 36 (ми спостерігаємо за популяціями 3 роки тобто $3 \times 12 = 36$ місяців).

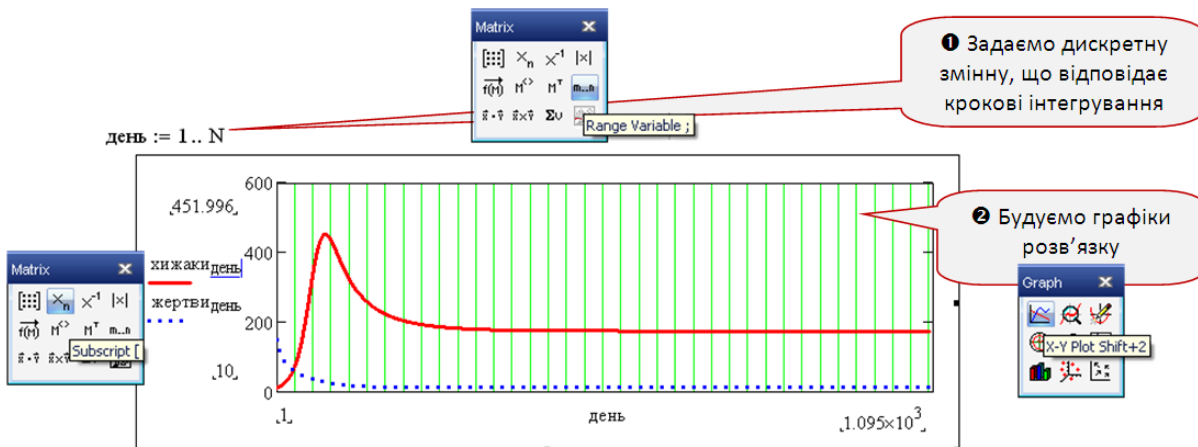


Рис.35. Порядок побудови графіків розв'язку.

Виходячи з вигляду отриманих графіків, можемо описати взаємодію популяції «хижак—жертва» в даній моделі Холлінга—Теннера таким чином: на початку спостереження популяція хижаків починає стрімко зростати, зростання продовжується десь до кінця третього місяця, коли чисельність хижаків досягає свого піку, потім чисельність хижаків спадає і приблизно на дев'ятий місяць спостережень практично стабілізується на рівні трохи нижче двохсот осіб, що триває до кінця періоду спостереження. Щодо популяції жертв, то вона убуває спочатку спостереження та десь на сьомий-восьмий місяць кількість жертв стає сталою і залишається на рівні 10 осіб до кінця періоду спостереження.

Для визначення моменту часу, коли кількості популяцій жертв та хижаків співпадуть, скористаємося графіками розв'язку та масивами значень кількості популяцій в кожен день спостереження. Так, з графіків видно, що рівність чисельності двох популяцій спостерігається приблизно наприкінці першого місяця їхнього співіснування. Скориставшись масивами значень популяцій хижаків та жертв, бачимо (дивись рис.36), що на 27-й день популяція хижаків, що в цей час зростає, має біля 57 осіб, в той же час популяція жертв, що убуває, має більше 60 осіб; на 28-й день маємо зворотну ситуацію – хижаків вже більше 60, а жертв менше ніж 60. Звідси робимо висновок, що кількості хижаків та жертв були рівними десь між 27 та 28 днями спостереження, тобто у 27-й день.

хижаки =	
21	38.561
22	41.195
23	44.001
24	46.985
25	50.16
26	53.534
27	57.117
28	60.921
29	64.956
30	69.231
31	73.759
32	78.549
33	83.611
34	88.955
35	94.591
36	100.527

жертви =	
24	64.701
25	63.365
26	62.097
27	60.891
28	59.742
29	58.645
30	57.597
31	56.594
32	55.632
33	54.708
34	53.82
35	52.964
36	52.139
37	51.342
38	50.571
39	49.823

Рис.36. Визначення дня, в який чисельності популяцій хижаків та жертв співпадають.

Для визначення дня, коли популяція хижаків досягне максимального розміру, можна також скористатися масивом значень кількості популяції хижаків та за допомогою полоси прокрутки знайти день, після якого кількість хижаків починає зменшуватися (як видно з графіків, це станеться приблизно наприкінці третього місяця). Але ту ж задачу можна вирішити швидше, застосувавши логічні вирази, як це показано на рис.37.

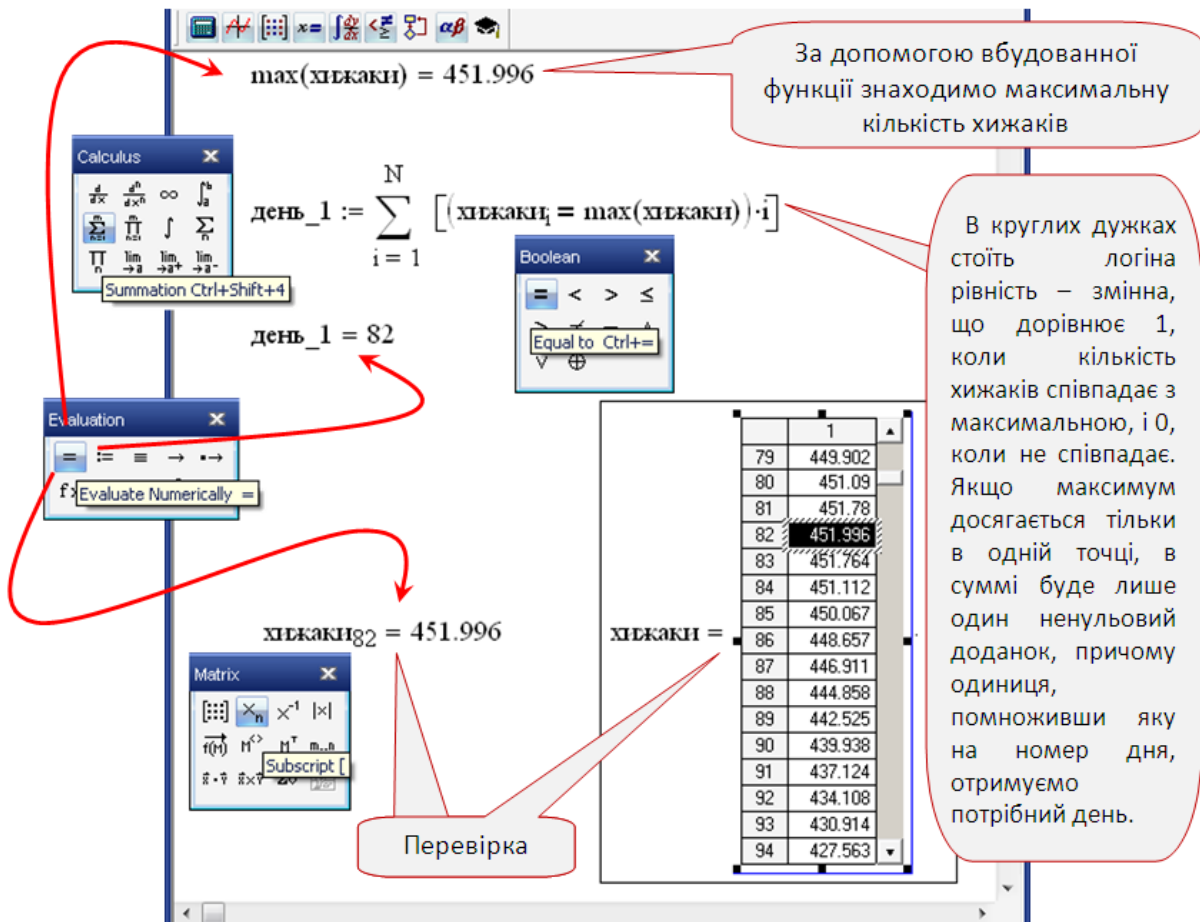


Рис.37. Визначення дня, в який чисельність популяції хижаків досягне максимального розміру.

Як бачимо, максимальна кількість популяції хижаків становить ≈ 452 та досягається на 82-й день спостереження.

Завдання 3

Одна з математичних моделей взаємодії лікарських препаратів може бути описана системою диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dx_0}{dt} = 10 \cdot x_2^{-k} \cdot I - 5 \cdot x_0^I \\ \frac{dx_1}{dt} = 5 \cdot x_0^I - 10 \cdot x_1^I \\ \frac{dx_2}{dt} = 2 \cdot x_1^I - 1,25 \cdot x_2^I \\ \frac{dx_3}{dt} = 8 \cdot x_1^I - 5 \cdot x_3^I \end{cases},$$

де t – час взаємодії препаратів, $x_i(t)$ – концентрації речовин, що взаємодіють, k – показник дії інгібітору, I – коефіцієнт кінетики реакції взаємодії.

- ☞ Дослідить запропоновану модель взаємодії при $I=5$ та різних значеннях $k=2, k=8, k=16, k=25, k=80$. Початкові концентрації субстанцій, що взаємодіють: $x_0(0)=1,1, x_1(0)=0,5, x_2(0)=0,9, x_3(0)=0,75$.
- ☞ Побудуйте графіки концентрацій субстанцій x_0, x_1, x_2 і x_3 , що взаємодіють, та фазові траєкторії системи.

$k := 20$ $I := 2$
 час_спостереження := 1 крок := 0.0001

Given

$$\frac{d}{dt}x_0(t) = 10 \cdot x_2(t)^{-k} \cdot I - 5 \cdot x_0(t)^I \quad x_0(0) = 1.1$$

$$\frac{d}{dt}x_1(t) = 5 \cdot x_0(t)^I - 10 \cdot x_1(t)^I \quad x_1(0) = 0.5$$

$$\frac{d}{dt}x_2(t) = 2 \cdot x_1(t)^I - 1.25 \cdot x_2(t)^I \quad x_2(0) = 0.9$$

$$\frac{d}{dt}x_3(t) = 8 \cdot x_1(t)^I - 5 \cdot x_3(t)^I \quad x_3(0) = 0.75$$

$$\begin{pmatrix} X_0 \\ X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left[\begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, t, \text{час_спостереження}, \frac{1}{\text{крок}} \right]$$

$t := 0, \text{крок}.. \text{час_спостереження}$

X0(t) =	X1(t) =	X2(t) =	X3(t) =
1.1	0.5	1.402	0.75
1.116	0.5	1.402	0.75
1.132	0.501	1.402	0.75
1.148	0.501	1.401	0.75
1.163	0.502	1.401	0.75
1.179	0.502	1.401	0.75
1.195	0.502	1.401	0.75
1.211	0.503	1.401	0.749
1.227	0.503	1.401	0.749

Для функції Odesolve використайте «жорсткий» режим обчислень (Stiff)

Чисельний розв'язок системи – значення концентрацій препаратів у крові через кожну 0,0001 долю години протягом усього часу спостереження

Рис. 38. Чисельний розв'язок системи диференціальних рівнянь за допомогою функції Odesolve.

Довідкова інформація:

Система диференціальних рівнянь у задачі 2 може розглядатися як набір послідовних взаємодій, через які повинні пройти препарати, щоб потрапити під дію ферментного субстрату.

Показчик k повинен бути від'ємним, бо в іншому разі це призведе скоріше до активації чи аугментації, чим до інгібіції. Зростання величини k веде до більш сильних коливань і, в решті решт, система виходить з-під контролю.

Приклад чисельного розв'язку системи диференційних рівнянь, що описує взаємодію лікарських препаратів при $I=5$ та $k=20$, наведено на рис.38.

Графіки концентрацій наведено на рис.39. Судячи з їх вигляду, можна зробити висновок, що на початку взаємодії концентрації речовин змінювалися доволі різко, з великими коливаннями, потім коливання концентрацій ставали все більш слабкими і вже після половини періоду спостереження концентрації практично стали. Більш детально дослідити початок взаємодії можна, змінивши на графіку праву границю інтервалу значень аргументу (дивись рис.40).

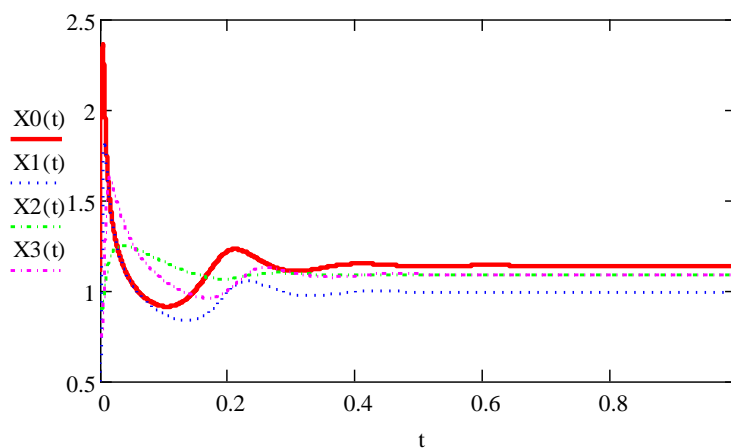


Рис.39. Динаміка концентрацій лікарських препаратів, що взаємодіють.

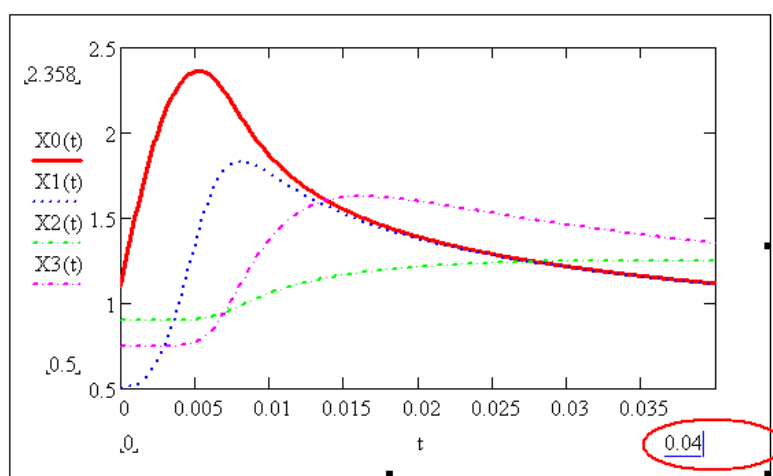


Рис.40. Динаміка концентрацій лікарських препаратів на початку взаємодії.

Фазові траєкторії системи наведено на рис.41.

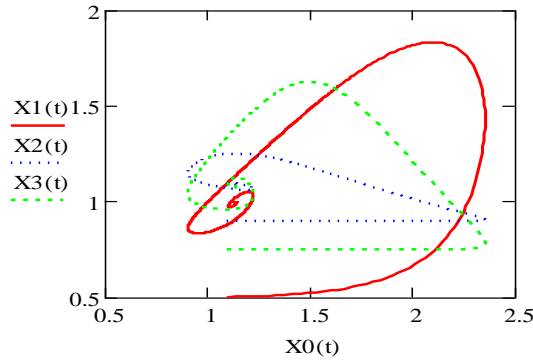
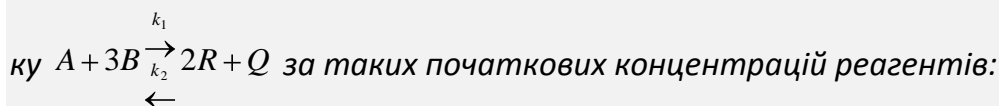


Рис.41. Фазові траєкторії.

Змінюючи значення показчика дії інгібітору k , відстежте поведінку концентрацій препаратів, що взаємодіють, і фазових траєкторій. Зробіть висновки.

Завдання 4

Побудуйте модель кінетики оборотної хімічної реакції другого поряд-



☞ $A - 0,8 \text{ кмоль/м}^3$, $B - 0,6 \text{ кмоль/м}^3$,
 $R - 0,1 \text{ кмоль/м}^3$, $Q - 0,2 \text{ кмоль/м}^3$.

☞ Енергія активації першої стадії реакції $E_1 = 40 \cdot 10^3 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{сек})$,

☞ енергія активації другої стадії реакції $E_2 = 44 \cdot 10^3 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{сек})$;

☞ передекспоненційні множники для відшукування коефіцієнтів швидкості реакції k_1 та k_2 дорівнюють $k_{10} = 5 \cdot 10^6 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{сек})$, $k_{20} = 4 \cdot 10^6 \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{сек})$;

☞ універсальна газова константа $R = 8,31451 \text{ кДж}/(\text{кмоль} \cdot \text{К})$.

☞ Температуру оточуючого середовища вважати сталою і такою, що дорівнює $T = 298 \text{ К}$.

Довідкова інформація. (Моделювання кінетики хімічних реакцій.)

В простій необоротній хімічній реакції $a \cdot A \xrightarrow{k} b \cdot B$, де A – реагент, B – продукт реакції, a і b – деякі стехіометричні коефіцієнти, k – коефіцієнт швидкості реакції; зміна концентрацій реагенту та продукту може бути описана системою диференційних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dA}{dt} = -a \cdot k \cdot A^a \\ \frac{dB}{dt} = b \cdot k \cdot A^a \end{cases} \quad (\text{тут великими літерами } A \text{ і } B \text{ ми позначили концентрації відповідних речовин}).$$

Якщо під час реакції змінюється температура (Т), то до цієї системи необхідно додати рівняння теплового балансу:

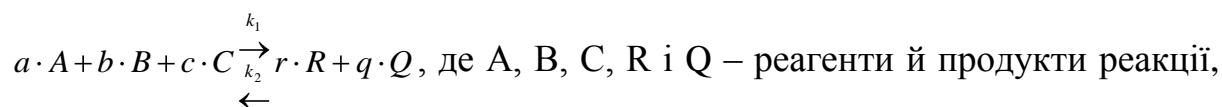
$$\frac{dT}{dt} = \pm \frac{Q_p}{c_p} \cdot k \cdot A^a, \quad \text{де } Q_p \text{ – внутрішній тепловий ефект реакції, } c_p \text{ – питома теплоємність реакційної суміші.}$$

Знак «плюс» перед рівнянням відповідає зростанню температури в процесі реакції (екзотермічна реакція), знак «мінус» – її зменшенню (ендотермічна реакція).

Коефіцієнт швидкості реакції може бути розрахований на підставі рівняння Арреніуса за формулою:

$$k = k(T) = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}}, \quad \text{де } E \text{ – енергія активації, } T \text{ – температура, } R \text{ – універсальна газова константа, } R=8,31451 \text{ кДж/(кмоль}\cdot\text{К), } k_0 \text{ – деякий передекспоненційний множник.}$$

Оборотну реакцію другого порядку на кшталт:



a, b, c, r, q – стехіометричні коефіцієнти, k_i – коефіцієнти швидкості i -ї стадії реакції; можна представити як суперпозицію двох простих реакцій і, відповідно, описати наступною системою диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dA}{dt} = a \cdot (-k_1 \cdot A^a \cdot B^b \cdot C^c + k_2 \cdot R^r \cdot Q^q) \\ \frac{dB}{dt} = b \cdot (-k_1 \cdot A^a \cdot B^b \cdot C^c + k_2 \cdot R^r \cdot Q^q) \\ \frac{dC}{dt} = c \cdot (-k_1 \cdot A^a \cdot B^b \cdot C^c + k_2 \cdot R^r \cdot Q^q) \\ \frac{dR}{dt} = r \cdot (k_1 \cdot A^a \cdot B^b \cdot C^c - k_2 \cdot R^r \cdot Q^q) \\ \frac{dQ}{dt} = q \cdot (k_1 \cdot A^a \cdot B^b \cdot C^c - k_2 \cdot R^r \cdot Q^q) \end{cases}$$

Так само, як і у випадку простої реакції, якщо спостерігається зміна температури (Т), то до цієї системи додаємо рівняння теплового балансу (для екзотермічних реакцій зі знаком «плюс», для ендотермічних зі знаком «мінус»):

$$\frac{dT}{dt} = \pm \frac{Q_p}{c_p} \cdot (k_1 \cdot A^a \cdot B^b \cdot C^c - k_2 \cdot R^r \cdot Q^q).$$

Коефіцієнти швидкості реакції розраховуються за формулами:

$$k_i = k_i(T) = k_{0i} \cdot e^{-\frac{E_i}{R \cdot T}},$$

де E_i – енергія активації i -ї стадії реакції, T – температура, R – універсальна газова константа, k_{0i} – передекспоненційні множники.

Як витікає із сказаного вище, оборотній хімічній реакції другого порядку $A + 3B \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} 2R + Q$, що протікає за сталої температури, відповідає така система диференціальних рівнянь, яка описує динаміку зміни концентрацій речовин-реактивів:

$$\begin{cases} \frac{dA}{dt} = -k_1 \cdot A \cdot B^3 + k_2 \cdot R^2 \cdot Q \\ \frac{dB}{dt} = 3 \cdot (-k_1 \cdot A \cdot B^3 + k_2 \cdot R^2 \cdot Q) \\ \frac{dR}{dt} = 2 \cdot (k_1 \cdot A \cdot B^3 - k_2 \cdot R^2 \cdot Q) \\ \frac{dQ}{dt} = k_1 \cdot A \cdot B^3 - k_2 \cdot R^2 \cdot Q \end{cases}$$

Перед тим, як розв'язувати систему, необхідно задати значення відомих параметрів та обчислити за наведеними вище формулами коефіцієнти кінетики k_1 і k_2 (дивись рис.42). Зверніть увагу, що усі нижні індекси у позначеннях змінних тут є текстовими (наприклад, k_1 друкується на клавіатурі введенням послідовності з трьох символів: k, крапка, 1).

The screenshot shows a software window with a toolbar and a text area. The text area contains the following definitions and calculations:

```

T := 298      R := 8.31451      E1 := 40·103      k10 := 5·106
E2 := 44·103      k20 := 4·106

k1 := k10·e-E1/(R·T) → .48728807333826837650
k2 := k20·e-E2/(R·T) → .77581352522415479328e-1
    
```

Two callout boxes are present:

- Top callout: "Спочатку задаємо значення відомих величин" (First we set the values of known quantities)
- Bottom callout: "Потім обчислюємо значення коефіцієнтів кінетики 1-ї та 2-ї стадій реакції" (Then we calculate the values of the kinetic coefficients of the 1st and 2nd stages of the reaction)

Рис.42. Моделювання кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку (введення значень й попередні обчислення параметрів, що використовуються).

Після того, як обчислені коефіцієнти кінетики, переходимо безпосередньо до розв'язку системи диференціальних рівнянь, що описує зміну концентрацій реагентів у часі. Реалізація в MathCAD моделі розв'язку цієї системи за допомогою функції Odesolve наведена на рис.43. Графіки розв'язку наведені на рис.44.

$\text{час_реакції} := 100$ $\text{крок} := 0.001$

Починаємо блок розв'язку

Given

$$\frac{d}{dt} A(t) = -k_1 \cdot A(t) \cdot B(t)^3 + k_2 \cdot R(t)^2 \cdot Q(t)$$

$$\frac{d}{dt} B(t) = 3 \cdot (-k_1 \cdot A(t) \cdot B(t)^3 + k_2 \cdot R(t)^2 \cdot Q(t))$$

$$\frac{d}{dt} R(t) = 2 \cdot (k_1 \cdot A(t) \cdot B(t)^3 - k_2 \cdot R(t)^2 \cdot Q(t))$$

$$\frac{d}{dt} Q(t) = k_1 \cdot A(t) \cdot B(t)^3 - k_2 \cdot R(t)^2 \cdot Q(t)$$

Задаємо час спостереження за реакцією та крок інтегрування

Записуємо систему диференціальних рівнянь

Boolean

Задаємо початкові значення концентрацій

$$A(0) = 0.8 \quad B(0) = 0.6 \quad R(0) = 0.1 \quad Q(0) = 0.2$$

Знаходимо вектор розв'язку за допомогою функції Odesolve

$$\begin{pmatrix} A \\ B \\ R \\ Q \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left[\begin{pmatrix} A \\ B \\ R \\ Q \end{pmatrix}, t, \text{час_реакції}, \frac{1}{\text{крок}} \right]$$

Задаємо діапазон зміни аргументу

$$t := 0, \text{крок}.. \text{час_реакції}$$

Matrix

Чисельний розв'язок системи – значення концентрацій реагентів

A(t) =	B(t) =	R(t) =	Q(t) =
0.8	0.6	0.1	0.2
0.8	0.6	0.1	0.2
0.8	0.6	0.1	0.2
0.8	0.599	0.1	0.2
0.8	0.599	0.101	0.2
0.8	0.599	0.101	0.2
0.8	0.599	0.101	0.2
0.8	0.599	0.101	0.2
0.799	0.598	0.101	0.201
0.799	0.598	0.101	0.201

Рис.43. Моделювання кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку (чисельний розв'язок системи диференціальних рівнянь за допомогою функції Odesolve).

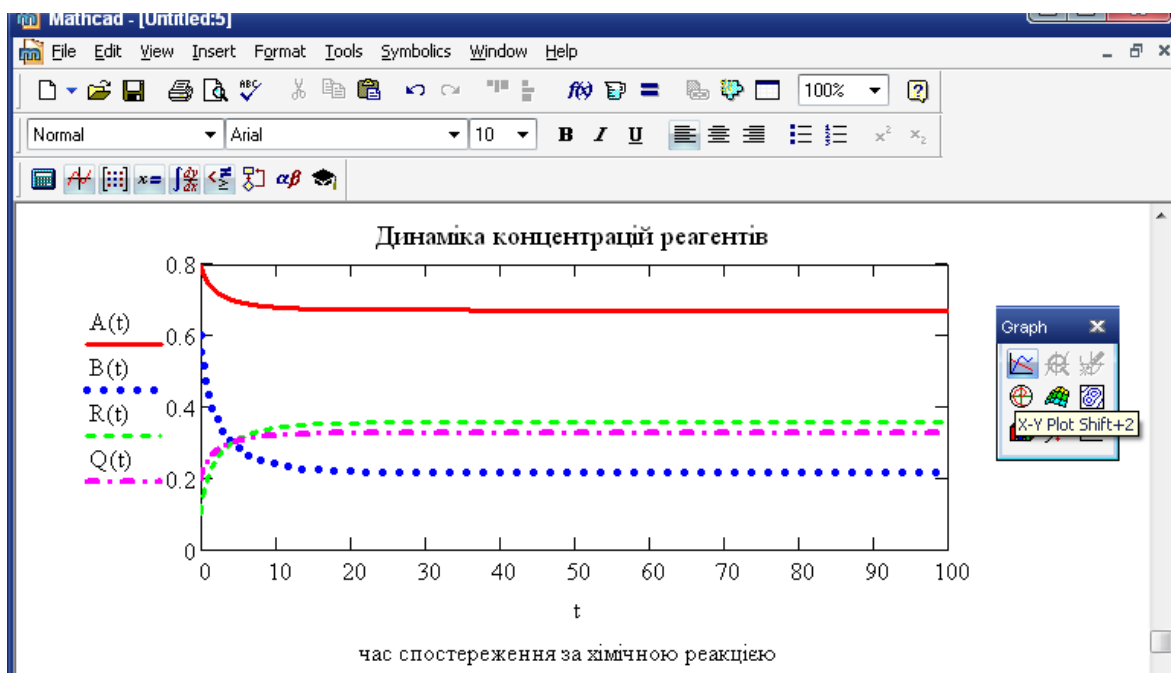


Рис.44. Графіки розв'язку системи.

Завдання 5

Розв'яжіть чисельно систему диференціальних рівнянь, що описує динаміку концентрацій реагентів оборотної хімічної реакції другого порядку із попереднього завдання за допомогою функції Rkadapt. Знайдіть момент часу, коли концентрації реагентів B та Q співпадуть.

Завдання 6

Реалізуйте метод Ейлера чисельного інтегрування системи диференціальних рівнянь для моделі кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку з попереднього завдання. Знайдіть момент часу, коли концентрація реагенту B досягне 60% від своєї початкової концентрації.

Завдання 7

Побудуйте математичну модель розвитку епідемії за наступних параметрів:

- ☞ Початкова кількість інфікованих осіб 1 тис.,*
- ☞ початкова кількість сприйнятливих до інфекції осіб, що можуть заразитися, 200 тис.,*
- ☞ несприйнятливих до інфекції осіб (з імунітетом) на початку епідемії немає.*
- ☞ Коефіцієнт захворюваності $\alpha = 1 \cdot 10^{-5}$,*
- ☞ коефіцієнт одужання $\beta = 0,3$.*

☞ Отримайте значення кількості хворих (інфікованих), сприйнятливих

(здорових) та несприйнятливих (тих, що набули імунітет) осіб у кожен день протягом 24 місяців розвитку епідемії за допомогою методу Рунге—Кутта та побудуйте графіки.

☞ Визначте, на який день від початку епідемії ❶ станеться пік захворюваності, ❷ кількість хворих співпаде з кількістю здорових осіб, сприйнятливих до інфекції, ❸ кількість осіб, сприйнятливих до інфекції, співпаде з кількістю осіб, несприйнятливих до інфекції.

Довідкова інформація. (Математична модель розвитку епідемії.)

У найпростішій математичній моделі розвитку епідемії описується розповсюдження інфекційного захворювання в ізольованій популяції. Особи популяції підрозділяються на три класи. Інфікований клас чисельністю $x(t)$ (t — час) складається з інфікованих осіб (тих, що захворіли), кожна з цих осіб заразлива (припускається, що інкубаційний період захворювання такий короткий, що їм можна знехтувати). Другий клас чисельністю $y(t)$ складають сприйнятливі особи, тобто особи, що є здоровими, але можуть заразитися при контакті з інфікованими особами. І, нарешті, третій клас складається з несприйнятливих до інфекції осіб (тих, що набули імунітет або загинули внаслідок захворювання). Його чисельність позначається $z(t)$. Припускається також, що загальна чисельність популяції n є сталою (тобто не враховуються народження, природні смерті й міграція). Дві гіпотези, що лежать в основі моделі такі:

1) захворюваність в момент часу t дорівнює $x(t) \cdot y(t)$ (ця гіпотеза базується на правдоподібному припущенні, що кількість осіб, що захворіли, пропорційна кількості зустрічей між хворими й сприйнятливими до інфекції особами, яка в свою чергу в першому наближенні пропорційна $x(t) \cdot y(t)$); таким чином чисельність класу x зростає, а чисельність класу y зменшується зі швидкістю $\alpha \cdot x(t) \cdot y(t)$. Константу пропорційності α ($\alpha > 0$) називають коефіцієнтом захворюваності;

2) чисельність осіб, що стають несприйнятливими (набувають імунітет чи помирають) росте зі швидкістю, що пропорційна чисельності хворих, тобто зі швидкістю $\beta \cdot x(t)$. Константу пропорційності β ($\beta > 0$) називають коефіцієнтом одужання.

В результаті отримуємо систему рівнянь:

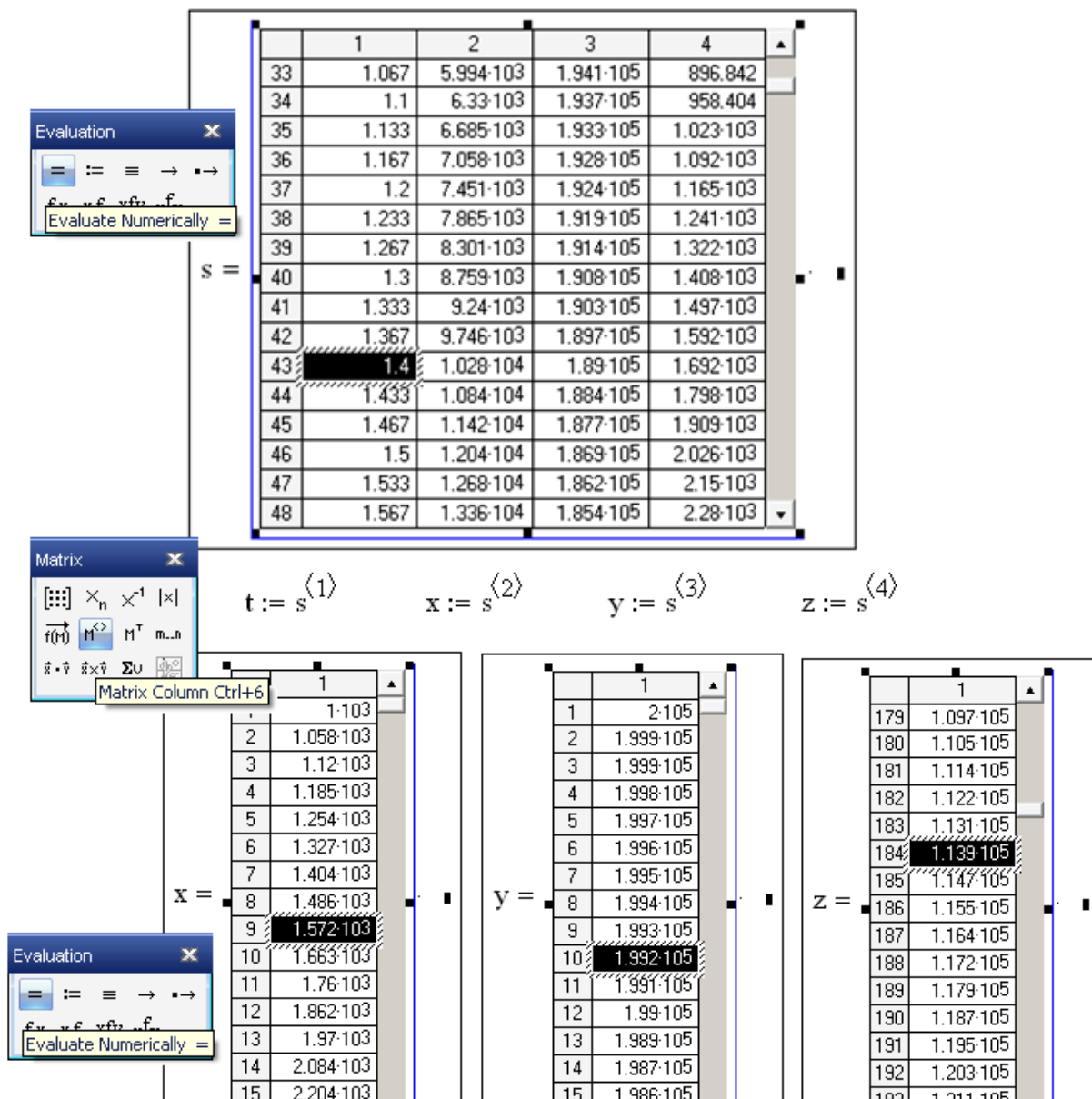


Рис.46. Розв'язок системи диференційних рівнянь в математичній моделі епідемії методом Рунге–Кутта.

Як бачимо, масив розв'язку s складається з чотирьох стовпців, перший з яких містить значення аргументу – часу t (у місяцях) на кожному кроці інтегрування, другий – значення функції $x(t)$, тобто кількості хворих (інфікованих) осіб на кожному кроці інтегрування (у кожен день спостереження за розвитком епідемії), третій – значення функції $y(t)$, тобто кількості здорових осіб, сприйнятливих до інфекції, у кожен день спостереження за розвитком епідемії, четвертий стовпчик – значення функції $z(t)$, тобто кількість осіб, вже несприйнятливих до інфекції, у кожен день спостереження за розвитком епідемії.

Графіки розв'язку показано на рис. 47.

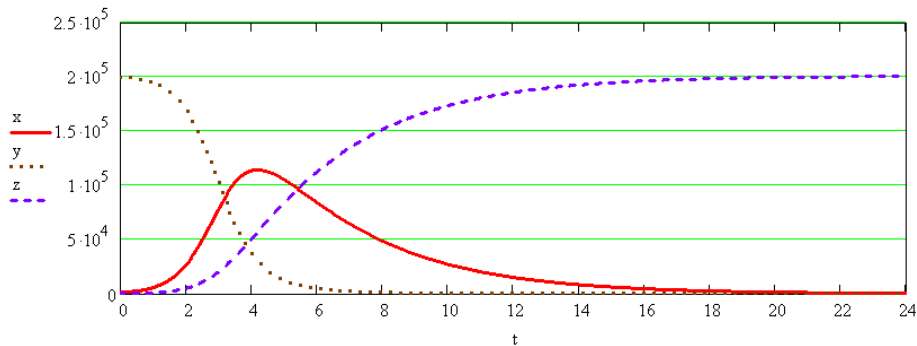


Рис.47. Графіки розв'язку системи диференціальних рівнянь в математичній моделі розвитку епідемії.

Як бачимо з графіків, на початку епідемії відбувається різке зростання чисельності інфікованих (хворих) осіб, яке досягає максимуму (пік захворюваності) приблизно на 4-й місяць від початку розвитку епідемії. В той же час зменшується кількість здорових (сприйнятливих до інфекції) осіб та зростає кількість тих, що набули імунітет. Десь на 20-й місяць епідемія вщухає, тобто кількість хворих та сприйнятливих до інфекції осіб встановлюється на рівні біля 0 в той час як кількість осіб з імунітетом добігає максимальної кількості (тобто загальної чисельності популяції = 201 тис. осіб).

На який день від початку епідемії, **❶** станеться пік захворюваності, **❷** кількість хворих співпаде з кількістю здорових осіб, сприйнятливих до інфекції, **❸** кількість осіб, сприйнятливих до інфекції, співпаде з кількістю осіб, несприйнятливих до інфекції, визначте самостійно, скориставшись, наприклад, способами, що були застосовані для відповіді на аналогічні питання при вирішенні завдання 2 цієї лабораторної роботи (задача про взаємодію популяцій в моделі Холлінга—Теннера).

Завдання 8

Побудуйте математичну модель розвитку епідемії за таких самих параметрів, як і в попередньому завданні, але з додатковою умовою:

☞ З початку епідемії починається вакцинація, тобто особи, сприйнятливі до інфекції, набувають штучного імунітету із коефіцієнтом швидкості $\gamma = 0,5$.

☞ Отримайте значення кількості хворих (інфікованих), сприйнятливих (здорових) та несприйнятливих (тих, що набули імунітет) осіб у кожен день протягом 24 місяців розвитку епідемії та побудуйте графіки.

☞ Визначте, на який день від початку епідемії станеться пік захворюваності. На скільки він буде відрізнятись від піку захворюваності при епідемії,

що протікає без вакцинації?

☞ Визначте, на скільки раніше закінчиться ця епідемія ніж епідемія, що протікає без вакцинації?

☞ Змінюючи значення коефіцієнту швидкості вакцинації γ , дослідить, як він впливає на термін закінчення епідемії. Яке повинно бути значення γ , щоб епідемія скінчилася за 6 місяців?

Якщо відбувається вакцинація, особи, що є сприйнятливими до інфекції, набувають штучного імунітету зі швидкістю γ $\chi(t)$, що вносить зміни до системи диференціальних рівнянь (5.3), і вона набуває вигляду:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \alpha \cdot x(t) \cdot y(t) - \beta \cdot x(t) \\ \frac{dy}{dt} = -\alpha \cdot x(t) \cdot y(t) - \gamma \cdot y(t) \\ \frac{dz}{dt} = \beta \cdot x(t) + \gamma \cdot y(t) \end{cases}$$

Таким чином, для відповіді на усі питання задачі необхідно розв'язати цю систему диференціальних рівнянь за заданих значень параметрів α , β і γ та початкових значень функцій $x(t)$, $y(t)$ та $z(t)$.

Завдання для самостійної роботи

Варіант 1

Побудуйте модель взаємодії популяцій біологічних систем в моделі Лоткі—Вольтерри (5.1) за початкового співвідношення жертв x_1 до хижаків x_2 2:1 та наступних параметрів:

- ☞ швидкість розмноження жертв за відсутності хижаків $a=4$,
- ☞ коефіцієнт втрат жертв від хижаків $b=3,5$,
- ☞ відносна швидкість зменшення популяції хижаків за відсутності їжі $c=2$,
- ☞ коефіцієнт компенсації зменшення популяції хижаків $d=1$.

☞ Побудуйте графіки розв'язку й фазові портрети динамічної системи.

Варіант 2

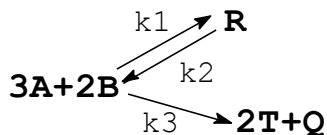
Побудуйте модель динаміки популяції хижаків в моделі Лоткі—Вольтерри (5.1) за відсутності жертв ($x_1 = 0$) й відносною швидкості зменшення популяції хижаків за відсутності їжі $c=4$. Побудуйте графік динаміки популяції хижаків.

Варіант 3

Побудуйте модель динаміки популяції жертв в моделі Лоткі—Вольтерри (5.1) за відсутності хижаків ($x_2 = 0$) й швидкості розмноження жертв за відсутності хижаків $a=2$. Побудуйте графік динаміки популяції жертв.

Варіант 4

Побудуйте модель кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку



Виконайте розрахунок залежностей концентрацій реагентів А, В, R, T і Q від часу та побудуйте графіки цих залежностей.

Вихідні дані для розрахунків такі:

☞ Початкові концентрації:

$$\begin{array}{ll} \text{A} - 0,9 \text{ кмоль/м}^3, & \text{B} - 0,8 \text{ кмоль/м}^3, \\ \text{R} - 0,5 \text{ кмоль/м}^3, & \text{T і Q} - 0 \text{ кмоль/м}^3. \end{array}$$

☞ Коефіцієнти швидкості реакції $k_1=0,016 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_2=0,018 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_3=0,02 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$.

☞ Час спостереження за реакцією 50 хвилин, крок інтегрування 1 секунда.

☞ Температуру оточуючого середовища вважати сталою.

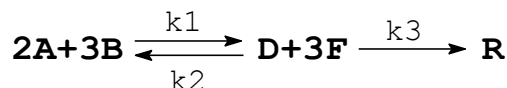
☞ Визначте моменти часу:

❶ коли концентрації реагентів R і T співпадуть;

❷ коли концентрація реагенту R досягне 85% від свого початкового значення.

Варіант 5

Побудуйте модель кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку



Виконайте розрахунок залежностей концентрацій реагентів А, В, D, F і R від часу та побудуйте графіки цих залежностей.

Вихідні дані для розрахунків такі:

☞ Початкові концентрації:

$$\begin{array}{llll} \text{A} - 0,8 \text{ кмоль/м}^3, & \text{B} - 0,6 \text{ кмоль/м}^3, & & \\ \text{D} - 0,1 \text{ кмоль/м}^3, & \text{F} - 0,2 \text{ кмоль/м}^3, & \text{R} - 0 \text{ кмоль/м}^3. & \end{array}$$

☞ Коефіцієнти швидкості реакції $k_1=0,016 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_2=0,02 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_3=0,018 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$.

☞ Час спостереження за реакцією 180 хвилин, крок інтегрування 1 секунда.

☞ Температуру оточуючого середовища вважати сталою.

☞ Визначте моменти часу:

❶ коли концентрації реагентів F та B співпадуть;

❷ коли концентрація реагенту A досягне 75% від свого початкового значення.

Варіант 6

Дослідите взаємодію популяцій «хижак—жертва» у моделі Холлінга—Теннера (5.2) протягом шости місяців співіснування за таких умов:

☞ початкова кількість хижаків (x_1) дорівнює 2,

☞ початкова кількість жертв (x_2) дорівнює 25,

☞ значення параметрів $a=5$, $b=0,3$, $c=1,1$, $d=2$, $p=5$, $q=4$.

☞ Отримайте чисельний розв'язок системи (2) – кількість хижаків та жертв у кожний день протягом шости місяців співіснування популяцій (вважати, що в кожному місяці рівно 30 днів).

☞ Побудуйте графіки розв'язку та фазові траєкторії системи.

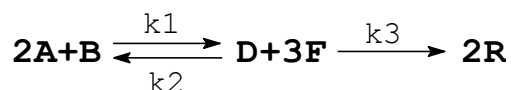
☞ Визначте моменти часу:

❶ коли чисельності популяцій хижаків та жертв співпадуть;

❷ коли популяція хижаків досягне максимальної кількості.

Варіант 7

Побудуйте модель кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку



Виконайте розрахунок залежностей концентрацій реагентів A, B, D, F і R від часу та побудуйте графіки цих залежностей.

Вихідні дані для розрахунків такі:

☞ Початкові концентрації:

A – 0,8 кмоль/м³,

B – 0,6 кмоль/м³,

D – 0,1 кмоль/м³,

F – 0,2 кмоль/м³,

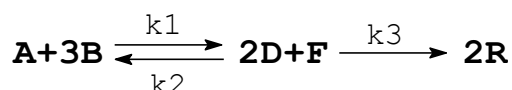
R – 0 кмоль/м³.

☞ Коефіцієнти швидкості реакції $k_1=0,016 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_2=0,02 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_3=0,018 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$.

- ☞ Час спостереження за реакцією 50 хвилин, крок інтегрування 1 секунда.
- ☞ Температуру оточуючого середовища вважати сталою.
- ☞ Визначте моменти часу:
 - ❶ коли концентрації реагентів А та В співпадуть;
 - ❷ коли концентрація реагенту В досягне 90% від свого початкового значення.

Варіант 8

Побудуйте модель кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку



Виконайте розрахунок залежностей концентрацій реагентів А, В, D, F і R від часу та побудуйте графіки цих залежностей.

Вихідні дані для розрахунків такі:

- ☞ Початкові концентрації:

$$\begin{array}{ll} \mathbf{A} - 0,6 \text{ кмоль/м}^3, & \mathbf{B} - 0,8 \text{ кмоль/м}^3, \\ \mathbf{D} - 0,1 \text{ кмоль/м}^3, & \mathbf{F} - 0,2 \text{ кмоль/м}^3, & \mathbf{R} - 0 \text{ кмоль/м}^3. \end{array}$$

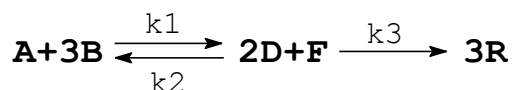
- ☞ Коефіцієнти швидкості реакції $k_1=0,021 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_2=0,016 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_3=0,018 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$.
- ☞ Час спостереження за реакцією 45 хвилин, крок інтегрування 1 секунда.
- ☞ Температуру оточуючого середовища вважати сталою.

- ☞ Визначте моменти часу:

- ❶ коли концентрації реагентів D та F співпадуть;
- ❷ коли концентрація реагенту F зросте до 120% від свого початкового значення.

Варіант 9

Побудуйте модель кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку



Виконайте розрахунок залежностей концентрацій реагентів А, В, D, F і R від часу та побудуйте графіки цих залежностей.

Вихідні дані для розрахунків такі:

- ☞ Початкові концентрації:

$$A - 0,6 \text{ кмоль/м}^3, \quad B - 0,8 \text{ кмоль/м}^3, \\ D - 0,1 \text{ кмоль/м}^3, \quad F - 0,2 \text{ кмоль/м}^3, \quad R - 0 \text{ кмоль/м}^3.$$

☞ Коефіцієнти швидкості реакції $k_1=0,021 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_2=0,016 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_3=0,018 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$.

☞ Час спостереження за реакцією 45 хвилин, крок інтегрування 1 секунда.

☞ Температуру оточуючого середовища вважати сталою.

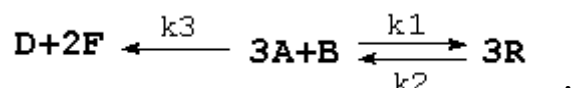
☞ Визначте моменти часу:

❶ коли концентрації реагентів D та F співпадуть;

❷ коли концентрація реагенту F зросте до 120% від свого початкового значення.

Варіант 10

Побудуйте модель кінетики оборотної хімічної реакції другого порядку



Виконайте розрахунок залежностей концентрацій реагентів A, B, D, F і R від часу та побудуйте графіки цих залежностей.

Вихідні дані для розрахунків такі:

☞ Початкові концентрації:

$$A - 1 \text{ кмоль/м}^3, \quad B - 0,8 \text{ кмоль/м}^3, \\ D - 0 \text{ кмоль/м}^3, \quad F - 0 \text{ кмоль/м}^3, \quad R - 0,7 \text{ кмоль/м}^3.$$

☞ Коефіцієнти швидкості реакції $k_1=0,02 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_2=0,015 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$, $k_3=0,018 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{сек})$.

☞ Час спостереження за реакцією 120 хвилин, крок інтегрування 1 секунда.

☞ Температуру оточуючого середовища вважати сталою.

☞ Визначте моменти часу:

❶ коли концентрації реагентів R та B співпадуть;

❷ коли концентрація реагенту F збільшиться до 0,5 кмоль/м³.

Рекомендована література:

1. Кирьянов Д. Mathcad 13. В подлиннике.
2. Семенов М.Г. Математическое моделирование в MathCad.
3. Дьяконов В. П. Компьютерное моделирование физических процессов с помощью MathCad.
4. Каганов В.И. Компьютерные вычисления в средах EXCEL и MathCad.
5. Н.И.Лазарев, С.В.Вельма. Практикум по информационным технологиям в фармации (на основе интенсивных методик обучения): Учеб. пособие для студентов фармацев. вузов. – Х.:Изд-во НФАУ: Золотые страницы, 2002.
6. Панкратов В.П., Зайцев А.И. Информационные технологии в фармации: Постановка и решение простейших задач управления и проектирования с помощью пакетов MS Excel и MathCad. (Методические указания к практическим занятиям студентов Украинской фармацевтической академии).– Х.: УкрФА, 2000.– 40 с.
7. Туляков В.О., Зупанець І.А., Тихонов О.І. Експериментальне вивчення стабільності та прогнозування строків зберігання ін'єкційної лікарської форми з глюкозаміном та кислотою ацетилсаліциловою // Вісн. фармації. – 1998. – № 2 – с.39–43.
8. Царева З.М., Орлова Е.И. Теоретические основы химической технологии. – К.: Вища школа, 1986.
9. Царева З.М., ТОВАЖНЯНСКИЙ Л.Л., Орлова Е.И. Основы теории химических реакторов (компьютерный курс). – Х.:ХГПУ, 1997.
10. John Maynard Smith: Mathematical Ideas in Biology. Cambridge University Press. 1968.
11. Wallace S. Brey: Physical Chemistry and Its Biological Applications. Acad. Press. New York, San Francisco, London 1978.
12. Malcolm Dixon, Edwin C. Webb, Enzymes. 3rd Ed. Longman Group Ltd. 1979.
13. Jaszczycza P., Kawka-Serwecicka E., Witas I., Dolejych B., Migula P. : Iron Ascorbate-Stimulated Lipid Peroxidation. Why is the method controversial? Gen. Physiol. Biophys. 1995. 14: 3-18.

14. Deborah M. Gordon. The Development of Organization in an Ant Colony. American Scientist, Jan-Feb 1995
15. Dale Clifford. Drug Interactions.
16. Eberhard Voit. Credit Computational Analysis of Biochemical Systems.
17. <http://exponenta.krasu.ru/soft/Mathcad/Mathcad.asp.htm>.
18. <http://exponenta.krasu.ru/educat/class/courses/ode/theme17/theory.asp.htm>.
19. http://www.ict.nsc.ru/ru/textbooks/akhmerov/ode_unicode/s-37/s-37.html
20. Амелькин В.В. Дифференциальные уравнения в приложениях. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1987. – 160 с.