MODELOVÁNÍ A SIMULACE

- základní pojmy a postupy
- vytváření matematických modelů na základě bilancí
- princip numerického řešení diferenciálních rovnic
- základy práce se simulačním jazykem PSI

Základní pojmy

matematický model procesu

je způsob vyjádření chování procesu (systému) formou matematických vztahů

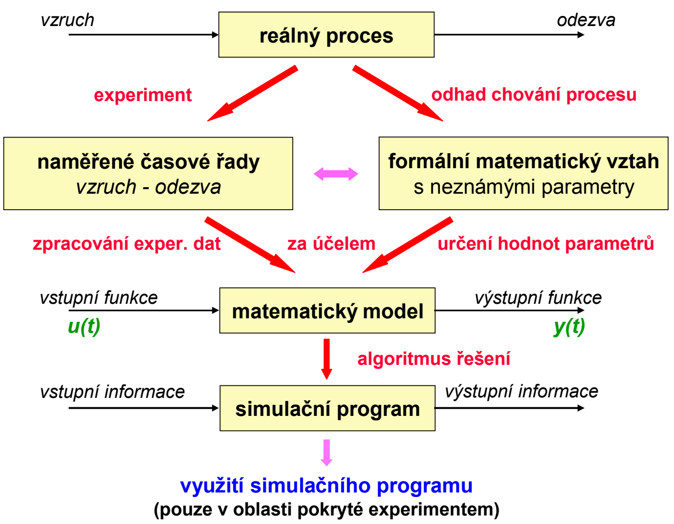
dynamické chování je chování procesu (systému) v čase

matematické modely:

- **získané zpracováním experimentů (induktivní, stochastické)**
  matematický popis je formální, systém je považován za „černou skříňku“
- **získané fyzikální analýzou procesu (deduktivní, deterministické)**
  matematický popis vyjadřuje podstatu procesu, vychází z fyzikálních, fyzikálně-chemických a chemických zákonů

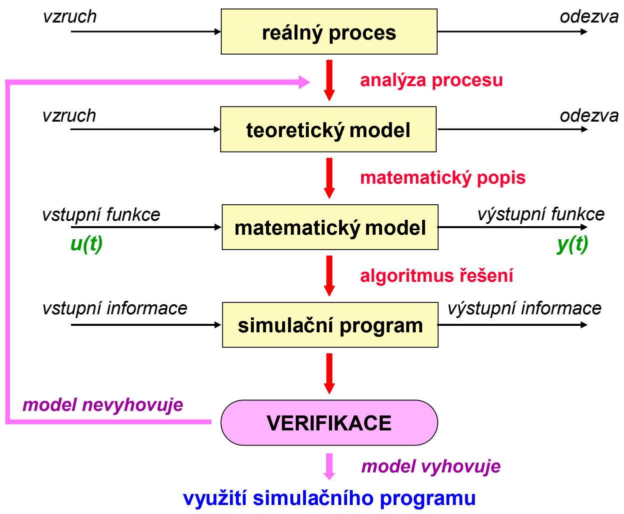
>

Obecný postup vytváření induktivních modelů



>

Obecný postup vytváření deduktivních modelů



Obecný postup vytváření deduktivních modelů

Analýza procesu

- specifikace dějů probíhajících v procesu a určení jejich podstaty
- vymezení vlivů působících na proces
- určení veličin (fyzikálních,...) popisujících proces
- výběr dílčích dějů a vlivů podstatných pro popis procesu
- výběr možných zjednodušení a jejich realizace

rozhodující pro kvalitu modelu

Zásady: -- **v úvahách vycházet z účelu vytvářeného modelu**
-- **začínat od co nejjednoduššího modelu**

↳ **teoretický model**

Obecný postup vytváření deduktivních modelů

Obvyklé zjednodušující předpoklady

- rozdělení systému na subsystémy
- zavádění idealizovaných (neexistujících) forem hmoty
- nezávislost látkových vlastností na stavových veličinách
- homogenita a isotropnost materiálu
- při současném průběhu pomalého a rychlého děje rychlý děj dosahuje okamžitě rovnovážného stavu
- zanedbávání ztrát
- linearizace nelineárních závislostí
- používání empirických vztahů a závislostí
- zavádění korekčních koeficientů
- zjednodušování geometrických proporcí, volba vhodné souřadnicové soustavy
- užití představy systému se soustředěnými parametry

Obecný postup vytváření deduktivních modelů

Matematický popis

- výběr matematického vyjádření vztahů použitých v teoretickém modelu
  a) definiční rovnice:
    — definice veličin fyziky, chemie, fyzikální chemie,...
  b) matematické vyjádření zákonů:
    — pohybové rovnice
    — rychlostní rovnice
    — rovnovážné rovnice
    — věty (zákony) o zachování
- vytvoření modelových rovnic a jejich základní kontrola
- určení podmínek řešení (počátečních, okrajových)
- rozměrová kontrola všech rovnic

↳ **matematický model**

>

Obecný postup vytváření deduktivních modelů

Řešení modelových rovnic

- volba metody řešení rovnic matematického modelu
- analýza přesnosti řešení
- vytvoření algoritmu řešení
- sestavení a odladění programu pro počítač (ve vhodném simulačním jazyce)
- definice souboru vstupních dat a parametrů (veličiny, jednotky)

↳ **simulační program**

>

Obecný postup vytváření deduktivních modelů

Verifikace modelu

- kontrola zachovávání ustálených stavů
- kontrola adekvátnosti odezvy na definovaný vzruch (logickou úvahou na základě fyzikálních představ)
- kontrola ustálených stavů po odeznění přechodových jevů
- kontrola reálnosti výsledků simulace pro mezní stavy
- kontrola porovnáním simulovaných časových průběhů se známými daty (získanými experimentálně nebo z literatury)

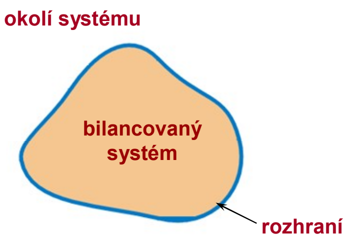
další možné kontroly (podle povahy modelovaného procesu)

↳ **použitelný matematický model** (ve formě simulačního programu)

>

Vytváření matematických modelů na základě bilancí

Základní pojmy



bilancovaná veličina

bilanční časový interval

základní bilanční rovnice:

AKUMULACE = VSTUP - VÝSTUP + ZDROJ

>

Vytváření matematických modelů na základě bilancí

AKUMULACE = VSTUP - VÝSTUP + ZDROJ

- **AKUMULACE**
  změna množství (zádrže) bilancované veličiny uvnitř bilancovaného systému za bilanční časový interval
- **VSTUP** (přítok)
  množství bilancované veličiny, které za bilanční časový interval vstoupí z okolí přes rozhraní do bilancovaného systému
- **VÝSTUP** (odtok)
  množství bilancované veličiny, které za bilanční časový interval vystoupí z bilancovaného systému přes rozhraní do okolí
- **ZDROJ**
  množství bilancované veličiny, které za bilanční časový interval přeměnou uvnitř bilancovaného systému vznikne (znaménko +) nebo zanikne (znaménko -)

>

Vytváření matematických modelů na základě bilancí

Hranice a velikost bilancovaného systému

- **systémy se soustředěnými parametry**
  - bilancovaný systém obvykle totožný s modelovaným systémem
  - hranice a geometrické rozměry se volí podle tvaru a uspořádání modelovaného systému
  - souřadnicová soustava se nemusí zavádět
- **systémy s rozloženými parametry**
  - pro bilancovaný systém se volí jednoduché geometrické tvary
  - rozměr bilancovaného systému ve směru souřadnice, která v popisu vystupuje jako nezávisle proměnná (***x***) je infinitesimálně malý (**d*x***)
  - souřadnicová soustava se zavádí tak, aby popis byl co nejjednodušší

>

Vytváření matematických modelů na základě bilancí

Bilanční časový interval

- **bilance ustáleného stavu systému** (pro statické modely)
  bilanční časový interval libovolný (obvykle jednotkový)
- **bilance neustáleného stavu systému** (pro dynamické modely)
  bilanční časový interval infinitesimálně malý (dt)

>

Vytváření matematických modelů na základě bilancí

Znaménka členů bilanční rovnice

- **systémy se soustředěnými parametry**
  - členy VSTUP a VÝSTUP formulovat jako kladné
  - znaménko členu ZDROJ určit úvahou podle charakteru procesu
  - znaménko členu AKUMULACE pak vychází automaticky
- **systémy s rozloženými parametry**
  - ve vybrané souřadnicové soustavě zvolit pro každou nezávisle proměnnou kladný směr a důsledně jej dodržovat
  - znaménka členů VSTUP a VÝSTUP, které jsou funkcemi souřadnic, pak vycházejí automaticky
  - členy VSTUP a VÝSTUP, které nejsou funkcemi souřadnic, formulovat jako kladné
  - znaménko členu ZDROJ určit úvahou podle charakteru procesu
  - znaménko členu AKUMULACE pak vychází automaticky

>

Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic

krokové metody pro řešení
lineárních diferenciálních rovnic 1.řádu
s počátečními podmínkami

Eulerova metoda

řešení lineární diferenciální rovnice 1. řádu s počáteční podmínkou

předpokládá diferenciální rovnici zapsanou ve tvaru:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = g(t,y) \quad , \quad y(t_0) = y_0$$

(t ... nezávisle proměnná (čas), y ... závisle proměnná)

>

Eulerova metoda

princip

- spojitý interval nezávisle proměnné ***t*** se rozdělí na ***n*** dílů (ekvidistatntně)

$$t_{i+1} = t_i + h \quad , \quad i = 1, 2, \dots n$$

- hodnoty závisle proměnné ***Y*** v bodech $\boldsymbol{t_i}$ se vypočtou podle vztahu

$$Y_{i+1} = Y_i + h.g(t_i, Y_i) \quad , \quad i - 1, 2, \dots n$$

kde

$$Y_i \approx y(t_i) \qquad \lim_{h \to 0} Y(t,h) = y(t)$$

konvergence numerického řešení

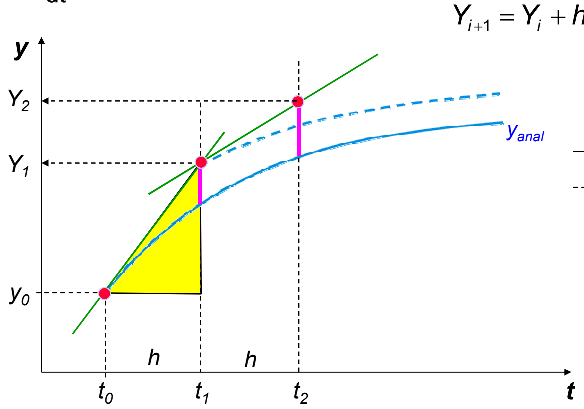
>

Eulerova metoda

princip graficky

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = g(t,y) \ , \ \ y(t_0) = y_0 \qquad t_{i+1} = t_i + h$$

$$Y_{i+1} = Y_i + h.g(t_i, Y_i)$$

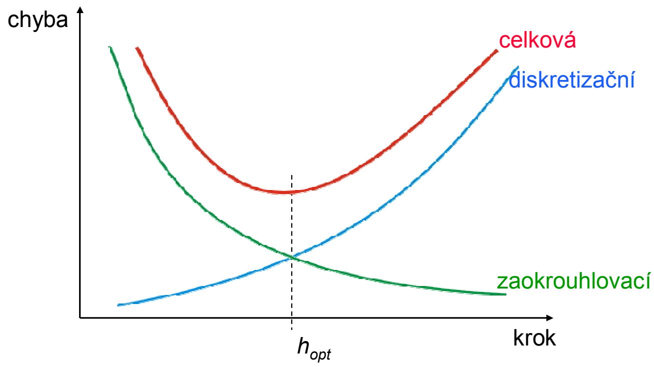


i	*t*	*Y*
0	t_0	$Y_0 \equiv y_0$
1	t_1	Y_1
2	t_2	Y_2
⋮	⋮	⋮

>

Přesnost krokových metod

chyby



řád metody n $\Rightarrow$ řádová přesnost výsledku h^n

>

Přesnost krokových metod

praktický postup pro dosažení požadované přesnosti

1. Nalezneme řešení s krokem h_1, jehož velikost jsme odhadli podle řádu použité metody a požadované přesnosti výsledků
2. Nalezneme řešení s krokem $h_2 = h_1 / 2$
3. Porovnáme výsledky obou řešení ve stejných bodech nezávisle proměnné: dekadická místa (od nejvyšších), která jsou v obou výsledcích stejná, jsou správně

POZOR, porovnání je třeba provést v několika bodech intervalu řešení, protože chyba principiálně není všude stejná !

>

Eulerova metoda

řešení lineární diferenciální rovnice 1. řádu s počáteční podmínkou

předpokládá diferenciální rovnici zapsanou ve tvaru:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = g(t,y) \quad , \quad y(t_0) = y_0$$

(t ... nezávisle proměnná (čas), y ... závisle proměnná)

>

řešení s krokem h=0,2

t	y	y anal	chyba
0,0	1,0000	1,0000	0,0000
0,2	1,0000	0,9608	0,0392
0,4	0,9200	0,8521	0,0679
0,6	0,7728	0,6977	0,0751
0,8	0,5873	0,5273	0,0600
1,0	0,3994	0,3679	0,0315
1,2	0,2396	0,2369	0,0027
1,4	0,1246	0,1409	-0,0163
1,6	0,0548	0,0773	-0,0225
1,8	0,0197	0,0392	-0,0194
2,0	0,0055	0,0183	-0,0128
2,2	0,0011	0,0079	-0,0068
2,4	0,0001	0,0032	-0,0030
2,6	0,0000	0,0012	-0,0012
2,8	0,0000	0,0004	-0,0004
3,0	0,0000	0,0001	-0,0001

řešení s krokem h=0,8

t	y	y anal	chyba
0,0	1,0000	1,0000	0,0000
0,8	1,0000	0,5273	0,4727
1,6	-0,2800	0,0773	-0,3573
2,4	0,4368	0,0032	0,4336
3,2	-1,2405	0,0000	-1,2405
4,0	5,1109	0,0000	5,1109
4,8	-27,5989	0,0000	-27,5989
5,6	184,3607	0,0000	184,3607
6,4	-1467,5114	0,0000	-1467,5114
7,2	13559,8051	0,0000	13559,8051

MODELOVÁNÍ BIOPROCESŮ

VYUČUJÍCÍ:

Ústav kvasné technologie a bioinženýrství

Ing. Martin Halecký, Ph.D. Martin.Halecky@vscht.cz

doc. Ing. Tomáš Brányik, Ph.D. Tomas.Branyik@vscht.cz

Ústav počítačové a řídicí techniky

Ing. Jana Finkeová, CSc. Jana.Finkeova@vscht.cz

RNDr. Marta Palatová, CSc. Marta.Palatova@vscht.cz

doc. Ing. Miloš Kmínek, CSc. Milos.Kminek@vscht.cz

UČEBNÍ TEXTY:

http://uprt.vscht.cz/ucebnice/MB