

УДК 004.421.2:512.55

DOI: 10.32626/2308-5916.2025-27.26-40

В. В. Жуковський, канд. техн. наук,**Д. Л. Грабовський**

Національний університет водного господарства

та природокористування, м. Рівне

МОДЕЛЮВАННЯ ВНУТРІШНЬОЧАСТИНКОВОГО МАСОПЕРЕНОСУ ЗА ДОПОМОГОЮ ДРОБОВО- ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

В статті розглянуто процес розробки програмного забезпечення для впровадження апарату дробового аналізу в галузі математичного моделювання, зокрема на прикладі задачі внутрішньочастинкового масопереносу в неоднорідному каталітичному пористому середовищі. Висвітлено основні етапи побудови математичної моделі, яка ґрунтується на використанні дробових похідних Капуто, що дозволяє враховувати ефекти пам'яті та просторової нелокальності, властиві пористим і неоднорідним матеріалам. Для відповідної одновимірної крайової задачі було знайдено аналітичний розв'язок із застосуванням методів Фур'є та перетворення Лапласа.

Описано алгоритмічні рішення та програмну реалізацію чисельних методів на основі бібліотек Python, зокрема NumPy і NumFracPy, які забезпечують ефективні обчислення над багатовимірними масивами даних. Увагу приділено обчисленню функції Міттаг-Лефлера, яка є компонентом дробово-диференціальних рівнянь. Наведено структуру програмного комплексу. Реалізовано механізм передачі вхідних параметрів через командний рядок.

Програмний продукт було верифіковано шляхом проведення числових експериментів і аналізу поведінки математичної моделі при різних параметрах. Для цього було виконано розрахунок значень функції у тестових точках і порівняння результатів із обчисленнями в системах комп'ютерної алгебри. Підтверджено, що чисельні розв'язки збігаються з аналітичними результатами.

Запропоноване програмне рішення забезпечує підвищену точність і продуктивність обчислень, дозволяючи застосовувати його для аналізу складних багатофакторних фізичних систем.

Ключові слова: *дробово-диференціальні рівняння, дробова похідна, математичне моделювання, каталітичне пористе середовище, метод Фур'є, метод перетворення Лапласа, функція Міттаг-Лефлера.*

Вступ. Дробово-диференціальні математичні моделі процесів міграції речовин використовують апарат дробового інтегро-диференціювання для опису міграції речовин у середовищах з аномальними

властивостями. Дробові похідні, що замінюють цілочисельні похідні дозволяють враховувати нелокальність (вплив віддалених ділянок середовища), ефект пам'яті (залежність поточного стану від всієї історії динамічного процесу), субдифузію, супердифузію тощо. Зазначимо, що через велику кількість можливих підходів до визначення дробових похідних і складність процесів, що досліджуються у пористих середовищах, таких як ґрунти, мікро-, нанопористі середовища, то розвиток математичних моделей та застосування методів дробово-диференціального моделювання все ще перебуває на початкових етапах.

Також, з огляду на відсутність універсальних готових рішень для моделювання процесів із застосуванням дробово-диференціальних похідних, що враховують специфічні вимоги дослідників, постає необхідність створення адаптивного програмного інструменту. В цьому контексті пропонується розробка модульного продукту. Під модульністю розуміється архітектурний підхід, який передбачає розбиття системи на незалежні, але сумісні компоненти (модулі), кожен з яких відповідає за окрему функцію – чисельні обрахунки, обробку даних, візуалізації результатів тощо [1]. Такий підхід забезпечує гнучкість у налаштуванні, розширенні та оптимізації програмного забезпечення, дозволяючи легко адаптувати та повторно використати модулі в контексті нових дослідницьких вимог та постановок задач.

Аналіз літературних джерел. Витоки дробового аналізу беруть початок із пошуків відповіді на фундаментальне математичне питання: «Якщо похідні цілих порядків існують, чи можливо їх узагальнити для довільних дійсних порядків?». Хоча Лейбніц і Лаплас заклали основи необхідного математичного апарату, їхні ідеї тривалий час залишалися суто теоретичними. Лише в 1823 році Нільс Абель вперше здійснив практичне застосування інтеграла порядку 0.5 у своїй праці для розв'язання задачі про таутохрон [2]. Ця подія стала поворотним моментом в історії дробового аналізу і протягом всього 19 століття різні математики світу пропонували свої підходи для означення та систематизації поняття дробового інтегро-диференціювання, а закономірним наслідком їх роботи стало успішне застосування дробових диференціальних рівнянь Олівером Хевісайдом для опису поведінки електричного струму у провіднику [3], після чого спеціалісти з інших областей фізики знайшли застосування даної методики і у своїх галузях, оскільки, як виявилось, дробові рівняння чудово описують процеси, що відбуваються у неоднорідних середовищах (наприклад, в біологічних тканинах), а класичні рівняння передбачають однорідність за означенням. Такий підхід дозволяє будувати набагато точніші математичні моделі, при цьому залишаючи обрахунки якомога менш громіздкими. Саме з цієї причини в еру

комп'ютерних технологій дробово-диференціальні математичні моделі набули нового забарвлення.

В Україні ряд науковців займаються розвитком дробово-диференціальних математичних моделей, що застосовуються до різних класів задач. Зокрема, Костробій П. П. у статті [4] розглянув узагальнені рівняння дифузії у дробових похідних в рамках статистики Реньї, що дозволило точніше описати дифузійні процеси в неоднорідних середовищах. Подальший розвиток дробово-диференціального підходу відзначається у працях [5], де було запропоновано математичну модель, що містить коефіцієнт q -дифузії та досліджується його вплив на процеси переносу. В даній роботі використано метод статистики Реньї для обґрунтування механізмів процесів дифузії.

Окрему увагу науковців приділено дослідженню гідрогеоміграційних процесів на основі дробово-диференціальних моделей. У статті [6] Богаєнко В. О. та Булавацький В. М. розглянули моделі конвективної дифузії у неоднорідних пористих середовищах, що дозволяє описати поведінку забруднювачів у ґрунтах. В подальших роботах авторами розроблено чисельні методи для розв'язання початково-крайових задач дробово-диференціальних рівнянь, що значно підвищило ефективність обчислень [7]. Ці результати використані в дослідженнях моделювання міграції розчинених речовин у водоносних шарах з урахуванням аномальної дифузії.

Левкович М. В. у статті [8] запропонував двовимірну математичну модель тепломасоперенесення у капілярно-пористих матеріалах із використанням дробових похідних, що дало змогу краще описати ефекти "пам'яті" та самоорганізації у процесі сушіння деревини. Розширення цих моделей відбулося у дослідженнях деформаційних процесів у середовищах з фрактальною структурою із застосуванням дробово-диференціальних аналогів моделей Максвелла та Фойгта. Чисельні методи реалізації цих моделей представлені у роботі [9], що включає алгоритми на основі методу предиктор-коректор для скінченно-різницевих апроксимацій дробових операторів.

Таким чином, наукові публікації розвитку дробово-диференціальних моделей в Україні охоплюють широкий спектр застосувань: від моделювання аномальної дифузії у фізичних та хімічних системах до аналізу складних екологічних процесів. Використання цих моделей у поєднанні з сучасними чисельними методами та високопродуктивними обчислювальними технологіями сприяє підвищенню точності прогнозування і розширенню сфер їх практичного застосування.

У дослідженнях, присвячених математичному моделюванню складних процесів тепло-, масо- та вологопереносу в ґрунтах, значний внесок зробили Власюк А. П., Мартинюк П. М., Бомба А. Я. [10].

Зокрема, в їхніх роботах було розроблено математичні моделі, які описують фільтрацію сольових розчинів у каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури. Деякі дослідження дали змогу уточнити класичні рівняння Дарсі, Дарсі-Герсеванова та Фіка для випадку неізотермічних умов, а також розглянути вплив каталітичних частинок на кінетику процесу фільтрації [11]. У цих моделях вперше враховано внутрішньочастинкову дифузію в нанопористих структурах, що дозволило покращити прогнозування міграції розчинених речовин у ґрунтовому середовищі [12].

Проте класичні підходи до опису цих процесів не завжди враховують ефект пам'яті та складну геометрію пористого середовища, яке може мати фрактальну структуру. У зв'язку з цим перспективним є застосування дробово-диференціальних моделей, які дозволяють описати аномальну дифузію та вплив складної геометрії середовища на процеси переносу. Врахування фрактальних характеристик ґрунту та використання дробових похідних у рівняннях фільтрації дозволило б точніше описати динаміку міграції забруднювачів та передбачити довготривалі ефекти взаємодії рідини з пористими структурами.

Постановка задачі. У якості предметної області дослідження було обрано задачу внутрішньочастинкового масопереносу у каталітичному пористому середовищі, класичний випадок якої детально описано у [13]. У даній роботі буде проведена заміна часової компоненти рівняння на дробову похідну порядку $\beta \in (0;1)$. Фізичний зміст такої заміни полягає у тому, що в неоднорідних середовищах дифузія відбувається нерівномірно та відхиляється від класичного Броунівського руху. У таких системах частинки взаємодіють зі складними структурами середовища, що може мати фрактальну геометрію або локальні неоднорідності, які впливають на характер їхнього розповсюдження. Така поведінка, як показують практичні експерименти [14], підпорядковується закону $x^2 \propto t^\beta, 0 < \beta < 1$, тобто виникає дробова залежність між просторовою та часовою компонентами. Введення дробової похідної по часу відображає наявність пам'яті в системі, оскільки тепер еволюція процесу залежить не тільки від поточного стану, а й від усієї передісторії руху частинок.

Зважаючи на вищезазначене, метою дослідження є підвищення точності моделювання внутрішньочастинкового масопереносу з використанням математичного апарату дробово-диференціальних рівнянь.

Для досягнення цієї мети, були поставлені наступні задачі:

- Побудувати математичну модель внутрішньочастинкового масопереносу в каталітичному пористому середовищі з використанням дробової похідної за часом.

- Отримати аналітичний розв'язок поставленої крайової задачі.
- Розробити обчислювальний алгоритм, що базується на отриманому аналітичному розв'язку та апараті дробно-диференціальних рівнянь.
- Створити програмне забезпечення, що реалізує розроблений алгоритм.
- Провести тестування та верифікацію програмного забезпечення шляхом порівняння чисельних результатів з аналітичними.
- Забезпечити можливість модульного використання розробленого ПЗ у сторонніх програмних продуктах.

Математична модель внутрішньочастинкового масопереносу в каталітичному пористому середовищі з використанням дробової похідної має наступний вигляд [13]:

$$D_t^{(\beta)}(q) = D_0 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), X \in \Omega, r \in (0, R), t > 0, 0 < \beta \leq 1, \quad (1)$$

$$q(x, r, 0) = \tilde{Q}_0(r), X \in \Omega, r \in (0, R), \quad (2)$$

$$q(x, R, t) = 0, X \in \Omega, t > 0. \quad (3)$$

Тут $q(x, r, t)$ – концентрація радіонуклідів у частинці радіуса R в області $\Omega = \{0 < x < l; 0 < r < R\}$.

Аналітичний та чисельний розв'язок. У дробовому аналізі зроблено багато способів визначення дробового оператора, але частіше використовують три основні означення:

1. Оператор Рімана-Ліувілья [15]. Найбільш розповсюджений та одне із найперших означень. Отримується із формули повторного інтегрування Коші:

$${}^{RL}_a D_x^\beta (f(x)) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \frac{d}{dx} \int_a^x (x-t)^{-\beta} f(t) dt, 0 < \beta < 1. \quad (4)$$

2. Оператор Грюнвальда-Лентікова [16]. Отримується шляхом повторного виконання операції диференціювання, припускаючи, що природи незалежної змінної прямують до нуля однаково:

$${}^{GL}_a D_x^\beta (f(x)) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{x-a}{n} \right)^{-\beta} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{\beta}{k} f \left(x - k \left(\frac{x-a}{n} \right) \right). \quad (5)$$

3. Оператор Капуто [17]. Модифікована версія оператора Рімана-Ліувілья, основною властивістю якого є рівна нулю похідна від константи та незалежність від точки відліку a :

$${}^C D_x^\beta (f(x)) = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^x \frac{f'(t)}{(x-t)^\beta} dt. \quad (6)$$

Для ефективної програмної реалізації було обрано саме варіант Капуто, оскільки значення похідної по Ріману-Ліувілью в кінцевому випадку залежатиме від точки відліку, що спричинить введення надлишкових параметрів, а оператор Грюнвальда-Летнікова застосовують, коли мова йде про чисельні та дискретні обчислення. Оператор Капуто ж у свою чергу дозволяє отримати одночасно як аналітичне, так і зручне для опису в коді представлення розв'язку.

Аналітичний розв'язок такого рівняння можна знайти за допомогою методу Фур'є. Для цього представимо розв'язок як добуток трьох функцій, що залежать лише від однієї змінної: $q(x, r, t) = X(x)\tilde{R}(r)T(t)$. Підставимо заміну в рівняння (4) з урахуванням змінних, по яким беруться похідні:

$$X(x)\tilde{R}(r)D_t^\beta(T(t)) = D_0 X(x)T(x)\left(\tilde{R}''(r) + \frac{2}{r}\tilde{R}'(r)\right). \quad (7)$$

Зважаючи на те, що $X(x) \neq 0$, спростимо вираз та розділимо змінні:

$$\frac{D_t^\beta(T(t))}{T(t)} = \frac{D_0\left(\tilde{R}''(r) + \frac{2}{r}\tilde{R}'(r)\right)}{\tilde{R}(r)}. \quad (8)$$

Така рівність може виконуватися лише тоді, коли обидві функції є константами, а отже можна розглянути кожен вираз окремо, прирівнявши його до поки що невідомої постійної $-\lambda$:

$$\begin{cases} D_t^\beta(T(t)) + D_0\lambda T(t) = 0; \\ \tilde{R}''(r) + \frac{2}{r}\tilde{R}'(r) + \lambda\tilde{R}(r) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Друге рівняння сукупності (9) та крайова умова (6) утворюють задачу Штурма-Ліувілья з якої отримуємо функцію $\tilde{R}(r)$ та коефіцієнт λ :

$$\lambda = \left(\frac{\pi n}{R}\right)^2, n \in [1; \infty). \quad (10)$$

$$\tilde{R}(r) = \frac{1}{r} \sin \sqrt{\lambda} r = \frac{1}{r} \sin \frac{\pi n}{R} r, n \in [1; \infty). \quad (11)$$

Для знаходження розв'язку першого рівняння сукупності використаємо метод перетворення Лапласа:

$$\mathcal{L}\{D_t^\beta(T(t))\} + D_0\lambda\mathcal{L}\{T(t)\} = 0. \quad (12)$$

Перетворення Лапласа для дробово-диференціального оператора Капуто при $0 < \beta < 1$ має вигляд:

$$\mathcal{L}\left\{{}^C D_t^\beta\left(f(t)\right)\right\}=s^\beta F(s)-s^{\beta-1} f(0)=s^\beta F(s)-C s^{\beta-1} . \quad (13)$$

Після підстановки виразу (13) у рівняння (12) та виконання спрощень отримуємо:

$$\tilde{T}(s)=C \frac{s^{\beta-1}}{s^\beta+D_0 \lambda} . \quad (14)$$

Виконавши зворотнє перетворення отримуємо кінцевий результат:

$$T(t)=C E_{\beta, 1}\left(-D_0 \lambda t^\beta\right)=C E_{\beta, 1}\left(-D_0\left(\frac{\pi n}{R}\right)^2 t^\beta\right), n \in[1 ; \infty), \quad (15)$$

де

$$E_{a, b}(x)=\sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(a k+b)} \quad (16)$$

– функція Міттаг-Лефлера, дробове узагальнення експоненціальної функції.

Таким чином, об'єднуючи (11) і (15) ми отримуємо частинний розв'язок диференціального рівняння (4), а загальним розв'язком є їх лінійна комбінація:

$$q(x, r, t)=\frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} C_n E_{\beta, 1}\left(-D_0\left(\frac{\pi n}{R}\right)^2 t^\beta\right) \sin \frac{\pi n}{R} r . \quad (17)$$

Для того, щоб знайти коефіцієнт C_n скористаємось початковою умовою (5) і розкладемо функцію $\tilde{Q}_0(r)$ в ряд Фур'є:

$$\tilde{Q}_0(r) \sim \sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{2}{R} \int_0^R \tilde{Q}_0(\varepsilon) \sin \frac{\pi n}{R} \varepsilon d \varepsilon\right] \sin \frac{\pi n}{R} r . \quad (18)$$

$$q(x, r, 0)=\frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin \frac{\pi n}{R} r=\tilde{Q}_0(r) \Rightarrow C_n=\frac{2}{R} \int_0^R \varepsilon \tilde{Q}_0(\varepsilon) \sin \frac{\pi n}{R} \varepsilon d \varepsilon . \quad (19)$$

Кінцевий результат має вигляд:

$$\begin{aligned} q(x, r, t) &= \\ &= \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{2}{R} \int_0^R \varepsilon \tilde{Q}_0(\varepsilon) \sin \frac{\pi n}{R} \varepsilon d \varepsilon\right] E_{\beta, 1}\left(-D_0\left(\frac{\pi n}{R}\right)^2 t^\beta\right) \sin \frac{\pi n}{R} r . \end{aligned} \quad (20)$$

У такому вигляді розв'язок уже можна повноцінно представити у програмному кодї.

Проектування програмного продукту. Для забезпечення ключового аспекту розроблюваного продукту, а саме модульності, було вирішено винести основну обчислювальну частину програми у модуль обчислень, який читуватиме вхідні дані у вигляді аргументів командного

рядка (argv). Таким чином ініціювати обчислення можна не лише з терміналу операційної системи, а й із будь-якої користувацької програми, як з консольним, так і графічним інтерфейсом (модуль користувача). Фінальним етапом роботи програми є передача результатів обчислень у спеціалізований модуль побудови графіку, що забезпечить інтерактивну тривимірну візуалізацію даних (модуль візуалізації). Схематично структуру компонентів продукту можна зобразити наступним чином:

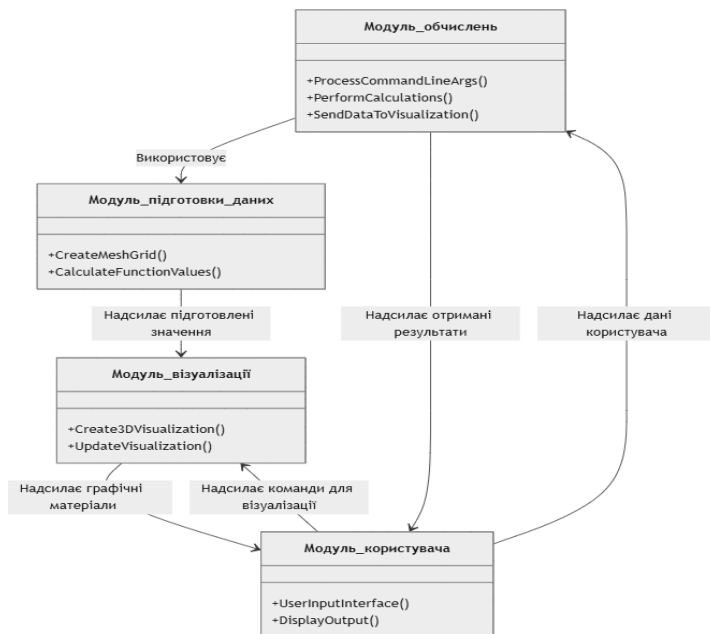


Рис. 1. Діаграма компонентів програмного продукту

Програмна реалізація чисельних методів. Для розробки модуля обчислень програмного комплексу було обрано мову програмування Python версії 3.10 та бібліотеки NumPy і NumFracPy, які забезпечують широкі можливості для виконання високопродуктивних обчислень над великими багатовимірними масивами даних, що репрезентують просторові координати у програмному середовищі.

В загальному задача побудови графіку полягає в обчисленні значень функції для кожної пари (r, t) з проміжків $R=(0; \text{Radius})$ та $T=(0; \text{Time_interval})$ з частотою дискретизації Δ , де Radius та Time_interval – введені користувачем максимальний радіус частинки та часовий діапазон вимірювань відповідно. Для цього створимо два проміжки за допомогою функції `numpy.arange()`, узявши $\Delta = 0.1$ (таблиця 1).

Таблиця 1

Лістинг створення координатних осей

```
r_data = np.arange(0.1, Radius, 0.1)
t_data = np.arange(0.1, Radius, 0.1)
```

Далі для створення координатних пар можна було б виконати операцію декартового добутку, однак NumPy має у своєму складі функцію `numpy.meshgrid()`, що перетворює два одновимірні масиви на два двовимірні, розміщення елементів у яких відображає координату r і t відповідно (таблиця 2).

Таблиця 2

Формування сітки координат функцією `numpy.meshgrid()`

```
R, T = np.meshgrid(r_data, t_data)
```

Застосування такого підходу дає змогу ефективно розділити обчислення за змінними, усуваючи необхідність багаторазового звертання до їх значень із загального списку координатних пар [18].

Отримавши множини значень, над якими будуть виконуватися подальші операції, можна описати безпосереднє обчислення функції (20). Даний процес поділяється на наступні підзадачі:

1. Обчислення коефіцієнтів ряду Фур'є (19) для всіх n від 1 до деякого введеного користувачем ступеня наближення `approx_order`.
2. Підстановка обчислених коефіцієнтів у вираз (20) та обчислення суми перших `approx_order` членів ряду.

Розрахунок коефіцієнтів ряду Фур'є виконуватимемо безпосередньо за означенням визначеного інтеграла:

$$C_n = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{n=0}^k f(a + n\Delta x) \Delta x, \Delta x = \frac{b}{k} \quad (21)$$

Програмна реалізація має вигляд згідно коду таблиці 3.

Таблиця 3

Лістинг коду обчислення коефіцієнтів ряду Фур'є

```
def Fourier(n, diffusion_function):
    dr = Radius/1000
    nn = 0
    F = 0.0
    r = 0
    while nn < 1000:
        dF = r * eval(diffusion_function) *
math.sin((r*math.pi*n)/Radius) * dr
        r += dr
        F += dF
        nn += 1
    return ((F*2)/Radius)
Precalc_Fourier = [Fourier(j, Diffusion_Function) for j
in range(1,approx_order+1)]
```

Окремо варто звернути на функцію `eval()`, що забезпечує введення довільного в межах синтаксису мови Python виразу для початкової умови (2).

Наступним кроком буде підстановка усіх введених користувачем та обрахованих наперед значень в кінцеву формулу, а оскільки NumPy дозволяє виконувати математичні операції безпосередньо над масивами, нам не потрібно буде організовувати вкладені цикли, обмежившись лише сумуванням від 1 до `approx_order`.

Особливу складність становить обчислення значень функції Міттаг-Лефлера, оскільки зробити це за означенням не вдасться через неминуче переповнення дробової частини змінних типу `float`, що призведе до спотворення результатів. Для розв'язання цієї проблеми нами було використано бібліотеку `NumFracPy`, яка реалізує обчислення функції Міттаг-Лефлера на основі контурного інтегралу:

$$E_{\beta,1}(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{t^{\beta-1} e^t}{t^\beta - z} dt. \quad (22)$$

У програмному коді це має вигляд коду, що наведений у таблиці 4.

Таблиця 4

Лістинг коду обчислення кінцевого результату

```
MLF = np.vectorize(ncp.Mittag_Leffler_one)
Q = 0.0
Tmp = 0.0
for l in range(1, approx_order+1):
    Tmp = MLF(-1*pow(math.pi*l/Radius,2) * Diffusion_Coeff*
np.float_power(T,beta),beta)
    Tmp *= np.sin((math.pi*l*R)/Radius)
    Q += Precalc_Fourier[l-1]*Tmp/R
```

Функція `numpy.vectorize()` виступає в ролі обгортки для функції `numfracpy.Mittag_Leffler_one()`, забезпечуючи можливість прийому масиву в якості вхідного аргумента, а кінцевим результатом усіх обчислень є масив `Q`, який далі передається у бібліотеку побудови графіку. У даній роботі використано бібліотеку `Matplotlib`, але за бажанням можна використати будь-яку іншу, оскільки формат масивів NumPy є універсальним та сприймається великою кількістю аналогічних бібліотек.

Тестування та верифікація. Процес тестування готового продукту було поділено на два основних етапи: тестування програмного продукту та верифікація чисельних обрахунків згідно побудованої математичної моделі. Під час першого етапу відслідковувалися та виправлялися усі критичні помилки програмного продукту. модуль обчислень перевірявся на зчитування вхідних даних при запуску з терміналу, правильність опису використаних алгоритмів, роботу фу-

нкцій та відповідність типів проміжних та вихідних даних умовам постановки задачі. Критеріями перевірки модуля користувача були швидкість відгуку елементів форми, недопущення вводу некоректних даних та їх правильну передачу до модуля обчислень.

Після того, як була забезпечена безвідмовна робота продукту, перейшли до безпосередньої верифікації результатів. Для цього побудували графік функції при значенні усіх параметрів рівним одиниці та $\beta = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$ і порівняли результати (рис. 2).

Із рисунків 2(a)-2(d) випливає, що зі зменшенням β зменшується і кут між графіком функції та площиною T , що у свою чергу збігається з поведінкою функції $CE_{\beta,1}(-\lambda t^\beta)$ при $\beta \rightarrow 0$, а з означення (20) легко бачити, що $q(x, r, t)$ при $r \rightarrow 0$ прямує до цієї ж величини, що повністю збігається із зображенням на графіках.

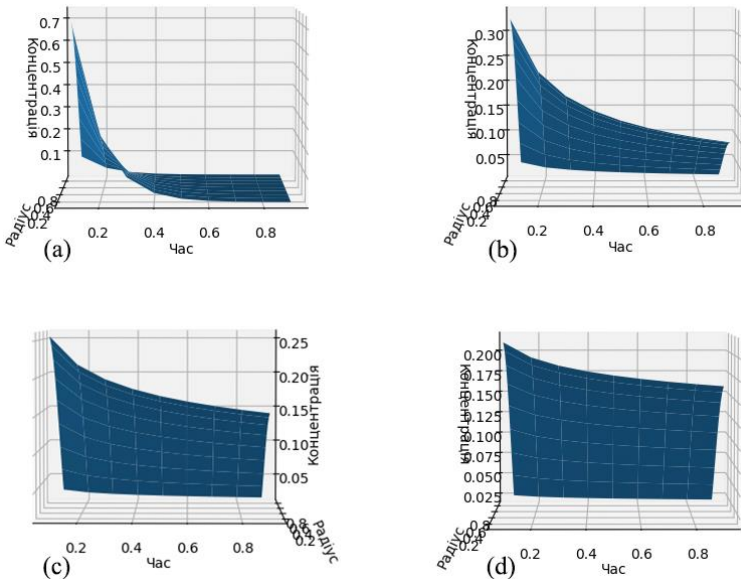


Рис. 2. Графіки функції $q(x, r, t)$ при $\beta = 1$ (a), $\frac{1}{2}$ (b), $\frac{1}{4}$ (c) та $\frac{1}{8}$ (d)

Такий результат вже дозволяє зробити попередні висновки про коректність обчислень, однак для більшої впевненості знову скористаємося властивостями функції Міттаг-Лефлера. Для цього розглянемо випадок, коли a і b в означенні (16) рівні 1:

$$E_{1,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(1k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k!}. \quad (23)$$

Сума (23) є нічим іншим, як розкладом функції e^z у ряд Маклорена, а тому при значенні $\beta = 1$ функція $q(x, r, t)$ набуває вигляду [19]:

$$q(x, r, t) = \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{2}{R} \int_0^R \varepsilon \sin \frac{\pi n}{R} \varepsilon d\varepsilon \right] e^{-D_0 \left(\frac{\pi n}{R} \right)^2 t} \sin \frac{\pi n}{R} r, \quad (24)$$

що є вже дослідженим випадком рівняння масопереносу [13]. Більшість систем комп'ютерної алгебри здатні виконувати обчислення з даною функцією, що дозволяє безпосередньо підставляти у рівняння (24) довільний діапазон значень параметрів r та t для подальшого аналізу. Верифікація коректності обчислень була здійснена шляхом порівняння отриманих результатів із тими, що повертає програмний комплекс, причому для перевірки достатньо розглянути лише перший член суми. Виконання тесту проводитимемо за допомогою онлай-системи WolframAlpha, а в якості тестових значень візьмемо пари $(r, t) = (0.2, 0.2), (0.2, 0.6), (0.6, 0.2), (0.6, 0.6)$. У таблиці 5 наведені значення функції $q(x, r, t)$, обчислені системою WolframAlpha.

Таблиця 5

Значення $q(x, r, t)$, знайдені WolframAlpha

(r, t)	$q(x, r, t)$
(0.2, 0.2)	0.25989
(0.2, 0.6)	0.00501
(0.6, 0.2)	0.14017
(0.6, 0.2)	0.00270

Далі знаходимо значення функції у цих самих точках за допомогою графіка, побудованого програмою (табл. 6).

Таблиця 6

Значення $q(x, r, t)$, знайдені програмою

(r, t)	$q(x, r, t)$
(0.2, 0.2)	$2.59899539e-01$
(0.2, 0.6)	$5.01510023e-03$
(0.6, 0.2)	$1.40175429e-01$
(0.6, 0.6)	$2.70486755e-03$

Спостерігаємо повне співпадіння значень у таблицях 5 і 6, з чого можна зробити висновок про успішну верифікацію програмного продукту.

Висновки. У ході реалізації завдань проекту було опрацьовано значний обсяг теоретичного матеріалу та освоєно математичний апарат дробового інтегро-диференціювання. Основним результатом роботи є розробка обчислювального алгоритму, що базується на апараті дробово-диференціальних рівнянь, для підвищення точності моделювання внутрішньочастинкового масопереносу. Отримано оптимальний для програмної реалізації аналітичний розв'язок поставленої крайової задачі внутрішньочастинкового масопереносу. При написанні модуля обчислень було використано сучасні бібліотеки візуалізації даних та чисельних обрахунків для значної оптимізації складних обчислень. Реалізовано механізм модульності та надано стандартний програмний інтерфейс для взаємодії з іншими програмними модулями за допомогою обробки параметрів як аргументів командного рядка. Проведено верифікацію результатів та доведено їх точність та коректність, а отже усі поставлені завдання вважаються виконаними. Робота над проектом показала, що методи дробового аналізу мають значний потенціал для прикладного застосування та потребують значно ширшого впровадження у сучасних системах математичного моделювання.

Список використаних джерел:

1. Жуковський В. В. Про деякі підходи до створення програмних комплексів комп'ютерного моделювання підземних процесів. *Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського*. 2017. Т. 2. № 103. С. 64-73.
2. Abel N. H. Solution de Quelques Problems al'Aide d'Integrales Definies, Werke 1. *Mag. Naturvidenkaberne*. 1823. С. 10-12.
3. Heaviside O. Electrical Papers. New York; London: Macmillan & Co, 1894.
4. Костробій П. П., Маркович Б. М., Візнович О. В. та ін. Узагальнене рівняння дифузії в статистиці Реньї. *Фіз.-матем. модел. інформ. техн.* 2015. Т. 2. № 2. С. 154-159.
5. Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., Tokarchuk M. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics. *Journal of Mathematical Physics*. 2016. Т. 57. № 9. Art. 93301.
6. Bohayenko V. O., Bulavatskyi V. M. Mathematical modeling of the fractional differential dynamics of the relaxation process of convective diffusion under conditions of planned filtration. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2015. № 51. С. 886-895.
7. Bohayenko V. O., Bulavatskyi V. M., Khimich O. M. Mathematical and computer modeling in the study of hydrogeochemical migration dynamics. *Scientific Thought*. 2022.
8. Левкович М. В. Алгоритм ідентифікації дробово-експоненціальних ядер повзучості за експериментальними даними. *Scientific Bulletin of UNFU*. 2016. Т. 26. № 1. С. 382-386.
9. Sokolovskyy Y., Levkovych M. Two-dimensional mathematical models of viscoelastic deformation using a fractional differentiation apparatus. *International Journal of Modern Education and Computer Science*. 2018. № 10. Num. 4. С. 1-9.

10. Bomba A. Y., Boichura M. V. Identifying the Structure of Soil Massifs by Numerical Quasiconformal Mapping Methods. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2021. T. 57. № 6. C. 927-937.
11. Vlasyuk A., Zhukovskyy V., Zhukovska N., Pinchuk O., Rajab H. Mathematical Modeling of Heat, Mass and Moisture Transfer in Catalytic Porous Media. *WSEAS Transactions on Applied and Theoretical Mechanic*. 2020. T. 15. C. 52-59.
12. Vlasyuk A. P., Zhukovskii V. V. Mathematical Simulation of the Migration of Radionuclides in a Soil Medium Under Nonisothermal Conditions with Account for Catalytic Microparticles and Nonlinear Processes. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2017. T. 90. № 6. C. 1386-1398.
13. Vlasyuk A. P., Zhukovskyy V. V. Mathematical and computer modeling of intraparticle radionuclides mass transfer in catalytic porous media under isothermal conditions. *Mathematical Modeling and Computing*. 2017. T. 4. № 2. C. 117-125.
14. Jaishankar A., McKinley G. H. Power-law rheology in the bulk and at the interface: quasi-properties and fractional constitutive equations. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2013. T. 469. № 2149. Art. 20120284.
15. Liouville J. Mémoire sur quelques questions de géométrie et de mécanique, et sur un nouveau genre de calcul pour résoudre ces questions. 1832.
16. Ortigueira M. D., Coito F. From differences to derivatives. *Fractional Calculus and Applied Analysis*. 2004. T. 7. № 4. C. 459.
17. Caputo M. Linear models of dissipation whose Q is almost frequency independent-II. *Geophysical journal international*. 1967. T. 13. № 5. C. 529-539.
18. Sharp Sight. Numpy Meshgrid, Explained.
19. Kilbas A. A., Srivastava H. M., Trujillo J. J. Theory and applications of fractional differential equations. Elsevier, 2006.

SOFTWARE DEVELOPMENT FOR INTRAPARTICLE MASS TRANSFER MODELING USING FRACTIONAL DIFFERENTIAL EQUATIONS

The article deals with the process of developing software for the implementation of the fractional analysis apparatus in the field of mathematical modeling, in particular, on the example of the problem of intraparticle mass transfer in a heterogeneous catalytic porous medium. The main stages of constructing a mathematical model based on the use of fractional Caputo derivatives, which allows taking into account the effects of memory and spatial nonlocality inherent in porous and inhomogeneous materials, are highlighted. For the corresponding one-dimensional boundary-value problem, an analytical solution was found using the Fourier and Laplace transform methods.

The algorithmic solutions and software implementation of numerical methods based on Python libraries, in particular NumPy and NumFracPy, which provide efficient computations on multidimensional data sets, are described. Attention is paid to the calculation of the Mittag-Leffler function, which is a component of fractional differential equations. The structure of the program complex is presented. A mechanism for passing input parameters through the command line is implemented.

The software product has been verified by conducting numerical experiments and analyzing the behavior of the mathematical model under different parameters. For this purpose, we calculated the values of the function at the test points and compared the results with the calculations in computer algebra systems. It is confirmed that the numerical solutions coincide with the analytical results.

The proposed software solution provides increased accuracy and performance of computations, allowing it to be used to analyze complex multifactorial physical systems.

Key words: *fractional differential equations, fractional derivative, mathematical modeling, catalytic porous medium, Fourier method, Laplace transform method, Mittag-Leffler function.*

Отримано: 2.02.2025

УДК 004.415.2+004.6

DOI: 10.32626/2308-5916.2025-27.40-57

Р. А. Крук,

Н. А. Жуковська, канд. техн. наук

Національний університет водного господарства
та природокористування, м. Рівне

ЗАСТОСУНОК-ПОСЕРЕДНИК ДЛЯ ТРАНСФОРМАЦІЇ ВИМОГ ДО ПЗ ATlassian JIRA П'ЯТИКРОКОВИМ СЕМАНТИЧНИМ АНАЛІЗОМ ГЕНЕРАТИВНОЇ ВЕЛИКОЇ МОВНОЇ МОДЕЛІ

У статті представлено фреймворк для трансформації артефактів вимог у середовищі Agile-розробки в структуровану базу знань із використанням великих мовних моделей (LLM) та графових методів. Дослідження зосереджене на усуненні критичних обмежень сучасної інженерії вимог, зокрема фрагментованості інструментів, слабкої трасованості та недостатньої адаптивності до напівструктурованих даних. Запропонована система функціонує як проміжна ланка між Atlassian Jira та графовою базою знань, реалізуючи п'ятиетапну методику: кластеризацію вимог, прив'язку тестів, визначення залежностей, дедуплікацію та історичну реконструкцію. Основним компонентом виступає LLM, з якою система взаємодіє через JSON-орієнтований протокол, що включає інструкції з інтерпретації даних, очікувану структуру відповіді та дозволені дії (створення, оновлення, трасування тощо). Модульна система архітектури включає рівень користувацької взаємодії, агент-оркестратор, семантичне ядро, графову базу даних (Neo4j) та підсистему контролю доступу. Теоретична та експериментальна частини дослідження проведе-