

быть не больше, чем размер ячейки, и одновременно пористость ячейки, образованная этим кубиком, не должна быть больше

$$\rho_{l,j,k}^{\max} = \rho - \frac{s}{n_{prev}} - \sum_t \rho_t^{\min},$$

где  $\rho_t^{\min}$  – минимальная пористость ячейки ( $t = n_{prev} + 2 \dots n^3 - 1 - n_{prev}$ ,  $n_{prev} \geq 1$ ) с неизвестным размером кубика.

Реализовать представленный алгоритм можно, например, в таких системах, как Excel с поддержкой VBA, Delphi, MathCAD и др. Преимущество СКМ MathCAD перед другими системами заключается в возможности создания 3D-модели для сформированной капиллярно-пористой структуры.

Для создания 3D-модели в MathCAD необходимо дополнительно использовать программные модули, позволяющие по заданным координатам строить простейшие пространственные фигуры, совокупность которых позволяет визуализировать сложные структуры.

УДК 51-74

**М.Ю. КИРИКОВИЧ, М.И. ЯСЮТЧИК, В.А. КОФАНОВ**

Брест, БрГТУ

#### **ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В MATHCAD**

Разработка новых химико-технологических процессов, изучение и их практическая реализация невозможны без предварительного термодинамического анализа, который предполагает необходимость приобретения знаний о методах расчета термодинамических характеристик и сведений о термодинамических свойствах веществ, участвующих в анализируемом процессе [1].

Термодинамические расчеты, как правило, связаны со сложными и трудоемкими вычислениями. Это ограничивает круг решаемых задач. Применение компьютерных программ, например MathCAD, снимает вычислительные затруднения. Тем не менее реализация подобных вычислений требует разработки организации хранения данных.

При выполнении несложных термодинамических расчетов требуется довольно большой объем справочной информации. В настоящее время такого рода информацию можно найти в многочисленных электронных справочниках в сети Интернет. Для того чтобы выполнять термодинамические

расчеты в MathCAD, необходимо всю справочную информацию о свойствах веществ занести в массивы. Этот процесс трудоемкий и сопровождается некоторыми особенностями. Так, например, MathCAD позволяет создавать массивы для заполнения вручную с количеством элементов не более 600. Поэтому для создания массивов с большим количеством элементов необходимо прибегнуть к встроенным функциям (stack и augment), позволяющим «склеивать» массивы. Для этого мы создаем массивы меньших размеров, а затем «склеиваем» и используем в дальнейшем как один массив. Такой подход наиболее приемлем в случае, если необходимо пополнить базу данных новой информацией. Как правило, большие массивы занимают большую часть пространства рабочего листа и не несут полезной информации для одной конкретной задачи. В этом случае необходимо создавать в MathCAD скрытые области, которые присутствуют в документе, участвуют в расчетах, но не видны на экране и распечатке. Для работы с массивами удобно использовать программные модули.

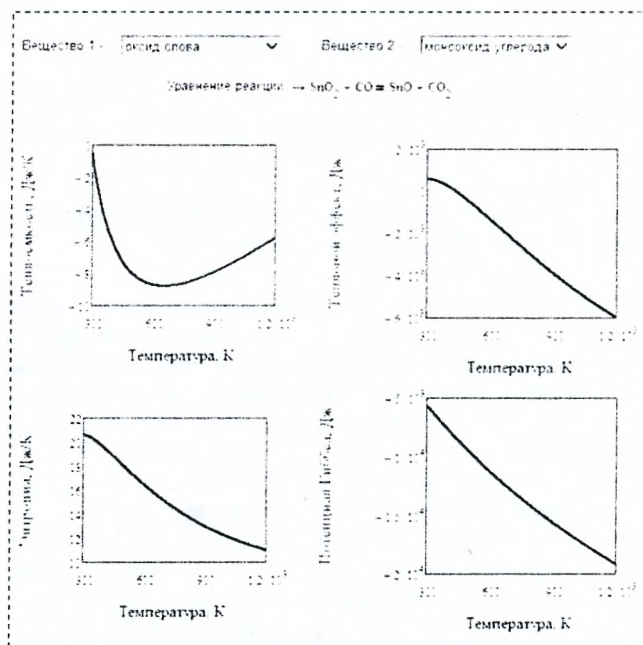


Рисунок – Фрагмент листинга MathCAD

Выбор химической реакции пользователь осуществляет с помощью элементов управления веб-интерфейса, которые доступны ему после защиты документа MathCAD от изменения. Элемент управления представляет собой выпадающий список, сформированный из названий химических веществ. В разработанном документе пользователь имеет возможность выбрать по одному химическому веществу из двух списков. Если в заданных массивах присутствует информация о химическом взаимодействии выбранных веществ, то на экране отобразится соответствующая химическая реакция, а также соответствующие ей графики функций теплоемкости системы, теплового эффекта (при отсутствии фазовых превращений), энтропии, потенциала Гиббса и др. (рисунок).

Использование разработанного документа MathCAD позволяет быстро получить информацию о параметрах протекания химических реакций в указанном температурном диапазоне.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Панфилов, А. М. Расчет термодинамических свойств при высоких температурах : учеб. электрон. текст. изд. / А. М. Панфилов, Н. С. Семенова. – Екатеринбург : УГТУ-УПИ, 2009. – 32 с.

УДК 517.923

**И.Н. КЛИМАСHEVСКАЯ, Е.М. ВОЙТОВИЧ**

Брест, БрГУ имени А.С. Пушкина

#### **УСЛОВИЯ ОДНОЗНАЧНОСТИ ПОДВИЖНЫХ ОСОБЫХ ТОЧЕК РЕШЕНИЙ СИСТЕМЫ ДВУХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ**

В работе рассматривается система двух дифференциальных уравнений вида

$$\begin{cases} \frac{dx}{dz} = A_0(z) + A_1(z)x + A_2(z)x^2, \\ \frac{dy}{dz} = B_0(z) + B_1(z)x + B_2(z)y + B_3(z)x^2 + B_4(z)xy + B_5(z)y^2, \end{cases} \quad (1)$$

где  $A_0(z), \dots, B_5(z)$  – аналитические функции в некоторой области  $D$ , причем  $A_2(z) \cdot B_3(z) \neq 0$ . Ставится задача: выделить классы систем вида (1) и найти в явном виде достаточные условия отсутствия у таких систем решений с подвижными критическими особыми точками.