

УДК 519.615.5+510.58

М. Д. Бабич, О. М. Гецко (Ужгородський нац. ун-т)

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ І ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ

Separate aspects of a constitution and calculation of mathematical models are investigated, which ones are defined by some non-linear functional equations.

Досліджуються окремі аспекти побудови та обчислення математичних моделей, що визначаються деякими нелінійними функціональними рівняннями.

Математичне моделювання є одним із основних і найбільш ефективних методів дослідження різних природничих процесів і явищ. Нерідко математичними моделями таких процесів являються лінійні та нелінійні функціональні рівняння, зокрема, диференціальні, інтегральні рівняння та системи скалярних рівнянь. Важливе значення мають аналогічні рівняння, які містять деякі параметри. Конкретні значення таких параметрів можуть визначати стан процесу або явища, а їх зміна характеризувати поведінку процесу або явища.

При розробці математичних моделей різних процесів (фізичних, хімічних, біологічних, економічних, екологічних і т.д.) поряд із класичними методами: спостереження, аналізу, систематизації, побудови гіпотез та випробовувань, важливе місце займають інтуїція і здоровий глузд.

Інтуїція відіграє важливу роль у процесі формування основних припущень і обмежень, при встановленні головних залежностей між ключовими змінними, та формуванні початкового підходу щодо побудови моделі явища або процесу, які досліджуються.

Здоровий глузд вимагається для забезпечення узгодженості і рівноваги між точністю і повнотою опису математичної моделі з однієї сторони та складністю і оптимізацією (за заданим критерієм) процесу з іншої сторони. Збалансованість цих положень, як правило, призводить до позитивних результатів при математичному моделюванні.

Наприклад, при розробці математичних моделей природничих процесів необхідно визначити наступні параметри [1]:

- 1) границі (межі) області дії модельованого процесу;
- 2) глибину деталізації та її зв'язок з удосконаленням моделі;
- 3) характерні природничі обмеження та обмеження, які визначають умови безпеки реалізації процесу;
- 4) характер керування (стаціонарне або динамічне);
- 5) обмеження на задану точність та обчислювальну складність;
- 6) змінні величини стану та відомі змінні керування;
- 7) збурення та інші некеровані змінні.

Методами розробки математичних моделей прикладних процесів є: аналітичні, що базуються на використанні основних природничих законів тих областей, які досліджуються, та експериментальні, що базуються на відповідних математичних методах та комп'ютерній їх реалізації.

В обох випадках істотну роль відіграє обчислювальний експеримент. У першому випадку обчислювальний експеримент дає можливість перевірити теоретичну математичну модель на предмет її адекватності тому процесу який вона описує, а в другому випадку дає можливість коригувати і міняти параметри математичної моделі з метою її покращення та зменшення неусувної похибки.

В даній роботі предметом розгляду будуть деякі аспекти створення дослідження та обчислення математичних моделей, сформульованих у вигляді нелінійних функціональних рівнянь, зокрема, інтегральних, диференціальних рівнянь та систем нелінійних алгебраїчних рівнянь.

Математичним апаратом наближеного розв'язування таких рівнянь є теорія апроксимації, чисельні методи і їх комп'ютерна реалізація з допомогою різних обчислювальних схем.

Методика дослідження математичних моделей повинна включати як загальні критерії, що застосовуються до всіляких математичних моделей, так і індивідуальні критерії, які стосуються їх окремих класів. Наприклад, при дослідженні математичних моделей, які описуються функціональними рівняннями, повинні враховуватись структури, властивості і гладкість операторів, які характеризують такі математичні моделі. Вагомі, зокрема, найкращі результати таких досліджень можуть бути одержані при об'єднанні зусиль і знань представників замовників-експериментаторів і математиків-обчислювачів. Перші добре володіють природничою (фізичною) стороною модельованого процесу або явища, а другі — математичним апаратом і комп'ютерним забезпеченням для обрахунку математичної моделі, тобто наближеного розв'язування відповідних функціональних рівнянь та знаходження розв'язків за заданим критерієм.

Аналіз результатів обчислювального експерименту, як правило, повинен проводитися сумісно представниками предметної області і математиками-обчислювачами. В результаті такого аналізу здійснюється відбір тих розв'язків із знайденої їх множини, які відображають певний фізичний зміст задачі та (у разі потреби) з метою покращення якісних характеристик розв'язків.

Нерідко у процесі такого аналізу здійснюється корекція значень наявних параметрів значень і наближених методів в рамках обмежень, що на них накладаються природничим (фізичним) змістом предметної області та можливостями обчислювального експерименту.

Слід відмітити, що із класів задач з параметрами, які виникають у більшості досліджуваних проблем, особливий інтерес представляють ті, де є функціональна залежність фізичних величин, що характеризують процес, від набору параметрів та їх зміни в деякому проміжку. У цьому випадку результатом дослідження і обчислення математичної моделі будуть множини розв'язків, які відповідатимуть множинам значень параметрів, що відобразатиме зміну або поведінку фізичного процесу. Що стосується фіксованого набору значень параметрів, то вони будуть визначати певний, конкретний стан фізичного процесу на даний момент.

Розглянемо конкретну задачу побудови, дослідження і обчислення математичних моделей для природничих процесів.

Одною із таких задач є визначення рівноважного складу суміші газів при високій температурі. Відмітимо, що задача теоретичного визначення рівноважного складу суміші хімічно реагуючих газів має велике значення в різних областях техніки. Математичними моделями таких процесів є системи нелінійних рівнянь з багатьма ізолюваними розв'язками. Наприклад, така система рівнянь одержується в результаті

хімічної реакції, яка символічно записується у вигляді стехіометричної формули [2].

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i A_i = 0, \quad (1)$$

де A_1, A_2, \dots, A_N означають хімічні символи речовини, які вступають у реакцію і які утворюються в результаті реакції, а параметри $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ означають дійсні числа, що пропорційні змінам числа молей n_1, n_2, \dots, n_N речовин A_1, A_2, \dots, A_N , причому речовинам, які утворюються в результаті реакції відповідають додатні значення α_i , а речовинам, які вступають у реакцію — від'ємні значення $\alpha_i, i = 1, 2, \dots, N$.

Якщо до системи (1) додати рівняння, що відображає закон діючих мас

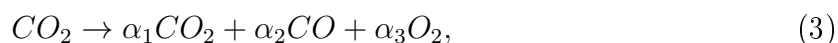
$$f(\alpha_1, \dots, \alpha_n, K, p) = 0, \quad (2)$$

де K — константа хімічної реакції, а p — повний тиск, то одержується система нелінійних алгебраїчних рівнянь, яка характеризує математичну модель даного хімічного процесу.

Практичну сторону побудови математичної моделі описаного хімічного процесу розглянемо на простому прикладі [3].

Приклад 1. *Нехай один моль CO_2 нагрівається при сталому тиску в 10 атм. Потрібно знайти рівноважні складові в інтервалі температур від 1000 до 6000 К у припущенні, що рівноважна суміш містить CO_2, CO, O_2 .*

На основі цих умов можна записати, що



де ліва частина характеризує початковий стан, а права — хімічний стан при рівновазі. $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ — шукані невідомі параметри, що визначають числа молей компонент.

Із врахуванням балансу елементів C і O , із (3) одержуються рівняння

$$\begin{cases} \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \\ 2\alpha_1 + \alpha_2 + 2\alpha_3 = 2. \end{cases} \quad (4)$$

Оскільки невідомих три $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, то для одержання нормальної системи потрібно мати ще одне рівняння. Таке рівняння одержується із хімічної реакції



Тоді на основі закону діючих мас будемо мати

$$\frac{\alpha_2 \sqrt{\alpha_3}}{\alpha_1} \cdot \frac{1}{\sqrt{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}} \sqrt{p} = K,$$

або

$$p\alpha_2^2\alpha_3 - K^2\alpha_1^2(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) = 0, \quad (6)$$

де K — константа хімічної рівноваги, а p — повний тиск. Таким чином, математична модель даної задачі виражається нелінійною алгебраїчною системою трьох рівнянь.

$$\begin{cases} \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \\ 2\alpha_1 + \alpha_2 + 2\alpha_3 = 2, \\ p\alpha_2^2\alpha_3 - K^2\alpha_1^2(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

В роботі [3] для наближеного розв'язування таких систем застосований метод диференціювання по параметру. Зокрема, система (7) була розв'язана при $p = 10$ атм., коли залежність константи хімічної рівноваги для реакції (5) від температури виражається таблицею 1.

Таблиця 1

$T(K)$	$\ln(K)$	$T(K)$	$\ln(K)$
1000	-23.535	4000	1.593
2000	-6.641	5000	3.193
3000	-1.117	6000	4.239

В цьому випадку рівновагомі складові ($\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$) за наведених значень температури характеризуються таблицею 2.

Таблиця 2

$T(K)$	α_1	α_2	α_3
1000	0.981	0.019	0.010
2000	0.981	0.019	0.010
3000	0.739	0.261	0.130
4000	0.251	0.749	0.374
5000	0.068	0.932	0.468
6000	0.025	0.975	0.487

Із таблиці видно, що кожному значенню температури $T(K)$ відповідає один розв'язок ($\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$) системи (7), причому для значень $T(K) = 1000$ і $T(K) = 2000$ ці розв'язки співпадають. Проте, система (7), як нелінійний математичний об'єкт, може мати не один розв'язок. Проведений обчислювальний експеримент щодо глобального розв'язування системи (7) з допомогою εs -алгоритму [4] це положення повністю підтвердив. При $T(K) = 1000$, $T(K) = 2000$ і $T(K) = 3000$ система (7) має по одному розв'язку. При подальших значеннях $T(K)$ система (7) вже має три дійсні розв'язки. За даними таблиці 1 всі наближені розв'язки системи (7), одержані за допомогою εs -алгоритму розміщені в таблиці 3.

Таким чином результати обчислювального експерименту щодо глобального розв'язування системи (7) показують, що при зміні параметра K (температури) в заданому інтервалі число і характер розв'язків теж міняються. Так, при $T(K) = 1000$, $T(K) = 2000$ і $T(K) = 3000$ система (7) має один дійсний розв'язок з додатними компонентами і два комплексні розв'язки. При $T(K) = 4000$, $T(K) = 5000$, $T(K) = 6000$ система (7) має три дійсні розв'язки, один з яких має всі компоненти додатні, а два інші розв'язки, як видно з таблиці 3, мають знаки компонент відповідно $-$, $+$, $+$ і $+$, $-$, $-$.

На основі проведеного експерименту можна зробити наступний висновок, що за допомогою εs -алгоритму можна відокремити всі ізольовані розв'язки даної системи рівнянь в обмеженій області і знайти їх з наперед заданою точністю.

Аналіз та визначення фізичного змісту одержаних розв'язків це є прерогатива предметників природничої області, в даному випадку хіміків.

Слід відмітити, що такого роду (або і більш складні) системи нелінійних алгебраїчних рівнянь можуть виникати як математичні моделі хімічного процесу створення нових матеріалів із скінченного набору складових компонент. Такі системи можуть

Таблиця 3

$T(K)$	α_1	α_2	α_3
1000	0,9999999103	0,0000000897	0,00000004486
2000	0,99303816231	0,00696183769	0,00348091885
3000	0,7598388320	0,2401611620	0,1200805840
4000	3.540818199	-2,540818199	-1.270409099
	0.2512501793	0,7487498207	0.3743749103
	-0.7920683783	1,7920683783	0.8960341891
5000	3.015167217	-2.015167217	-1.007583609
	0.681900241	0.9318099759	0.4659004988
	-0.083357241	1.083357241	0.5416786206
6000	3.001851691	-2.001851691	-1.000925846
	0.0254405712	0.9745594288	0.4872797144
	-0.0272922626	1.0272922626	0.5136461313

мати багато розв'язків, які задовольнятимуть фізичному змісту задачі. У цьому випадку на множині допустимих розв'язків ставиться оптимізаційна задача, а саме: із набору розв'язків вибирають той, який забезпечує заданий критерій якості, наприклад мінімальні затрати при створенні нових матеріалів або максимальний вихід створюваного продукту. Математичним апаратом для розв'язування таких задач є математичне програмування.

Другим прикладом моделі неперервного у часі фізичного процесу є змішувальний бункер або гомогенізатор. Задача полягає у підтриманні постійного об'єму матеріалу у гомогенізаторі. Це досягається шляхом забезпечення однакової швидкості вхідного і вихідного потоків матеріалу за умови встановлення функціональної залежності між складовими вхідного і вихідного потоків матеріалу. Математичною моделлю наведеного фізичного процесу, що реалізується гомогенізатором, є система лінійних диференціальних рівнянь першого порядку [1], яка може бути розв'язана аналітичними або числовими методами.

Третім прикладом, що відображає застосування функціональних рівнянь до моделювання фізичних процесів є задача детонації твердої вибухової речовини [3].

Рівняння енергії, якому задовольняє розподіл температури при детонації твердої вибухової речовини у безрозмірних змінних може бути записана у вигляді крайової задачі

$$\begin{cases} \frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{2}{t} \frac{d\theta}{dt} + \alpha \exp\left[\frac{\theta}{1+\frac{\theta}{\gamma}}\right] = 0, \\ \frac{d\theta(0)}{dt} = 0, N_{nu}\theta(1) + \frac{d\theta(1)}{dt} = 0, \end{cases}$$

яку можна розв'язати або безпосередньо, або звести до нелінійного інтегрального рівняння з наступним наближенням його розв'язуванням.

1. Ли Т. Г., Адамс Г. Э., Гейнз У. М. Моделирование и оптимизация. – М.: Советское радио, 1972. – 312 с.
2. Яворский Б. М., Детлаф А. А. Справочник по физике. – М.: Наука, 1964. – 847 с.
3. На Ц. Вычислительные методы решения прикладных граничных задач. – М.: Мир, 1982. – 294 с.
4. Бабич М. Д., Шевчук Л. Б. Об одном алгоритме приближенного решения систем нелинейных уравнений. // Кибернетика. – 1982. – №. 2. – С. 74–79.

Одержано 20.09.2005