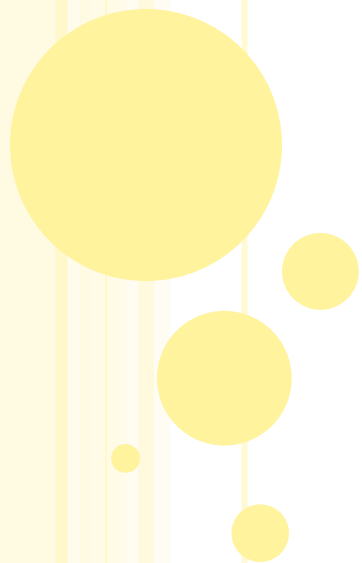




КУРС ЛЕКЦИЙ

ТЕПЛОМАССООБМЕН В БИОСФЕРЕ

**Старший преподаватель
Львов Владимир Анатольевич**



СТРУКТУРА КУРСА

1. Раздел I. Математическое моделирование как основной метод изучения процессов и решения задач оптимизации и управления в биосфере.
2. Раздел II. Математические модели нестационарных процессов тепломассообмена.
3. Раздел III. Рассеяние примесей в атмосфере (ОНД-86).
4. Раздел IV. Рассеяние примесей в атмосфере (модели АООС)
5. Раздел V. Прикладные модели основных процессов тепломассообмена в биосфере

Виды занятий	Объем занятий, час		
	Всего	9-ый семестр	10-ый семестр
Лекции	68	34	34
Семинары	17	17	-
Самостоятельная работа	51	34	17
Итого:	136	85	51
Проверка знаний:		зачет	экзамен

Виды самостоятельной работы и контрольных мероприятий	Объем, час/выполнение, неделя выдачи-сдачи		
	Всего, час	9-ый семестр	10-ый семестр
Домашнее задание №1 №2	24	12/9-14	12/9-14
Рубежный контроль №1 №2 №3	12	2/5 2/10 2/13	2/5 2/10 2/13

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ

Основная литература:

1. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газов. Учебник для вузов. – 6-е изд., испра. и доп. – М.: Наука, 1987. – 840с.
2. Теория тепломассообмена: Учебник для технических университетов и вузов. /С.И. Исаев, И.А. Кожников, В.И. Кофанов и др.; под ред. А.И. Леонтьева. – М.: Изд-во МГТУ им.Н.Э. Баумана, 1997. – 683с.
3. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий (ОНД-86). – Л.: Гидрометеиздат, 1987. – 68с.

Дополнительная литература:

1. Защита атмосферы от промышленных загрязнений: Справ, изд. В 2-х ч./ Пер. в англ. под ред. Калверта Л., Инглунда Г.М. – М.: Металлургия, 1988. – 712с.
2. ГОСТ 17.3.02.-78. Атмосфера. Правила установления допустимых выбросов вредных веществ промышленными предприятиями.
3. Самарский А.А., Вабищев П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. – М.: Либроком, 2009. – 248с.
4. Самарский А.А., Вабищев П.Н. Вычислительная теплопередача. – М.: Либроком, 2009. – 784с.
5. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991. – 400с.
6. Протодьяконов И.О., Богданов С.Р. Статистическая теория явлений переноса в процессах химической технологии. – Л.: Химия, 1983. – 400с.
7. Протодьяконов И.О., Чесноков Ю.Г. Гидромеханические основы процессов химической технологии. – Л.:Химия, 1987. – 360с.
8. Протодьяконов И.О., Люблинская И.Е., Рыжков А.Е. Гидродинамика и массообмен в дисперсных системах жидкость-твердое тело. – Л.: Химия, 1987. – 336с.
9. Протодьяконов И.О., Муратов О.В., Евлампиев И.И. Динамика процессов химической технологии. – Л.: Химия, 1984. – 304с.



ТЕПЛОМАССООБМЕН В БИОСФЕРЕ

Биосфера

- ✓ (по В.И. Вернадскому) часть Земного шара, в пределах которой существует жизнь.

Биосфера включает в себя часть атмосферы (примерно до озонового слоя), верхнюю часть литосферы (кору выветривания - 2-3 км в глубь Земли) и гидросферу.

- ✓ область распространения жизни на Земле, включающая нижний слой атмосферы и верхний слой литосферы, не испытавших техногенного воздействия.
- ✓ оболочка Земли, обусловленная прошлой или современной деятельностью живых организмов.
- ✓ **область сосредоточения сложных систем обмена веществ и энергии между входящими в эту систему компонентами, т.е. область распространения жизни на Земле, включая техносферу.**

ТЕПЛОМАССОБМЕН В БИОСФЕРЕ

- **Техносфера** – среда обитания, возникшая с помощью прямого или косвенного воздействия людей и технических средств на природную среду с целью наилучшего соответствия среды социально-экономическим потребностям человека.
- **Среда обитания** – окружающая человека среда, обусловленная совокупностью факторов (физических, химических, биологических, информационных, социальных), способных оказывать прямое или косвенное воздействие на жизнедеятельность человека, его здоровье и потомство.
- **Гомосфера** – пространство, зона, где находится человек в процессе жизнедеятельности.
- **Ноосфера** – состояние биосферы, при котором разумная деятельность человека становится решающим фактором ее развития.
- **Ноксосфера** – пространство, в котором постоянно существует или спонтанно (периодически) возникают опасности.



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ОСНОВНОЙ МЕТОД ИЗУЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ И
РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ И УПРАВЛЕНИЯ
В БИОСФЕРЕ

Лекция 1. Качественная характеристика процессов в биосфере. Стратегия системного анализа. Подходы для описания закономерностей изменения наблюдаемых величин в пространстве и времени. Основные этапы моделирования

Качественная характеристика процессов в биосфере

Процессы в биосфере – сложные физико-химические и биологические системы, имеющие двойную детерминированно-стохастическую природу, переменные в пространстве и во времени.

Процессы переноса – в ходе их протекания в каждой точке фазы и среды, а также на границах раздела происходят различные процессы переноса массы, энергии, теплоты, импульса и т.п.

Потоки вещества – гетерогенные, многофазные и многокомпонентные.

Условия протекания – либо в аппаратах с конкретными геометрическими и технологическими характеристиками, либо в определенных условиях биосферы, которые оказывают непосредственное влияние на характер этого процесса.



Качественная характеристика процессов в биосфере

Существенная особенность процессов в биосфере – совокупность их составляющих, которая исходно носит детерминированно-стохастическую природу, проявляющуюся в наложении вероятностно-статистических особенностей текущей обстановки происходящего природного явления (например, гидродинамической, концентрационной, температурной и т.п.) на процессы теплообмена и переноса, физического, химического и физико-химического превращения.

Природа процессов в биосфере – характеризуется не только случайным взаимодействием различных составляющих рассматриваемых систем (частиц, молекул, природы самих процессов и т.п.), но и случайным характером граничных условий системы (случайное расположение структурных элементов, произвольная ориентация границы раздела фаз и т.п.), включая стохастическую природу поведения дисперсных систем и биологических объектов.

Вывод: Системы подобного рода характеризуются очень сложным взаимодействием объектов, а также составляющих их фаз и компонентов. В результате их детальное изучение только с позиций классических детерминированных законов механики, переноса и сохранения, зачастую оказывается попросту невозможным.



Качественная характеристика процессов в биосфере

Дополнительные законы, которые привлекаются при изучении процессов в биосфере – законы статистической физики, химической, физической и физико-химической кинетики, а также ряда других теорий и дисциплин, например, таких как неравновесная термодинамика, нелинейная динамика и т.п.

- **Кинетика** – (приводящий в движение) – раздел теоретической механики, объединяющий статику и динамику.
- **Физическая кинетика** – раздел теоретической физики, в котором изучаются законы протекания процессов, возникающих в системе при её относительно малом отклонении от состояния термодинамического равновесия (диффузия, теплопроводность, вязкость, термоэлектрические явления), фактически все кинетические явления = явления переноса.
- **Химическая кинетика** – (кинетика химических реакций) – раздел физической химии изучающий химические процессы, скорости, механизмы и законы их протекания во времени.

Как же изучать процессы техносферной безопасности, а тем более процессы в биосфере?



Системный анализ и его стратегия

Ключ к решению проблем – применение метода математического моделирования, базирующийся на стратегии системного анализа.

Сущность стратегии системного анализа – представление рассматриваемого процесса как сложной взаимодействующей иерархической системы с последующим качественным и количественным анализом её структуры, выбором подходов для её описания, разработкой математического описания и оценкой неизвестных параметров, включая границы применимости.

Пример: *«Рассмотрение явлений в гидросфере, возникающих в процессе движения ансамбля частиц, капель или пузырьков газа в сплошной жидкой среде»*

1. Совокупность явлений на атомарно-молекулярном уровне;
2. Эффекты в масштабе надмолекулярных или глобулярных структур;
3. Множество физических и физико-химических явлений, связанных с движением единичного включения дисперсной фазы, с учетом химических реакций и физико-химических превращений, а также явлений межфазного энерго-, тепло- и массопереноса или обмена;
4. Физические и физико-химические процессы в ансамбле дисперсной фазы, перемещающейся в сплошной среде;
5. Совокупность процессов, определяющих макрогидродинамическую обстановку в масштабе системы или аппарата.



Системный анализ и его стратегия

Вывод: Подобный иерархический подход позволяет наиболее полно установить совокупность явлений всего процесса и связей между ними.


Замечание: Следует помнить, что сложные проблемы, возникающие на каком-либо уровне, как правило, на этом же уровне не решаются, а требуют перехода на более высокий уровень рассмотрения в иерархии эффектов.

Подходы для описания закономерностей изменения наблюдаемых величин в пространстве и времени

Основные группы подходов при изучении процессов в биосфере

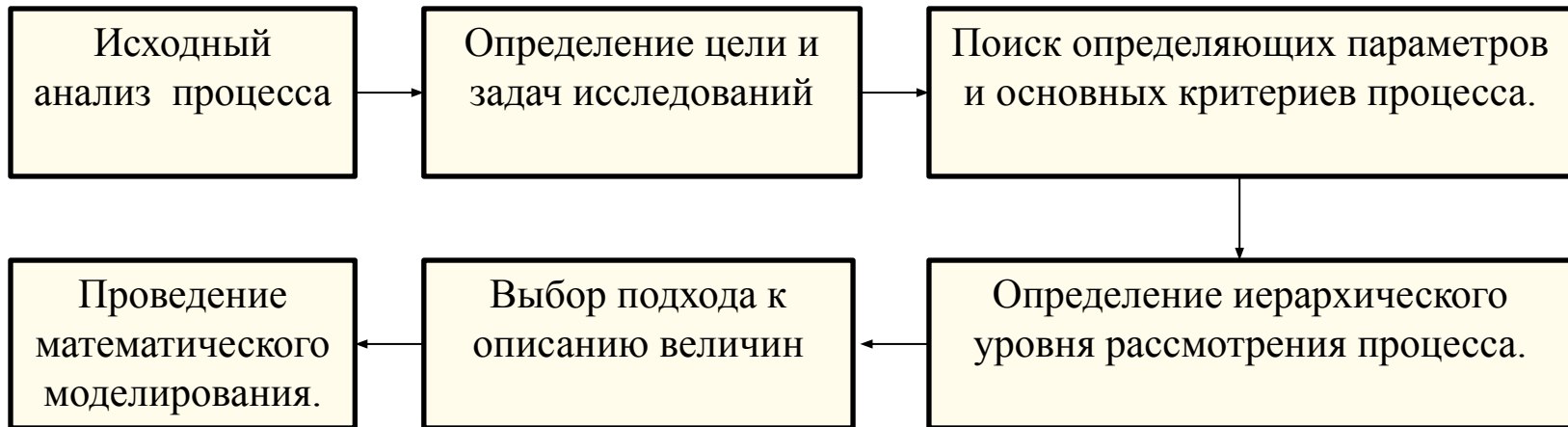
1. Подход, основанный на использовании методов классической механики, включая так называемый метод молекулярной динамики;
2. Феноменологический подход, включая чисто эмпирические методы;
3. Подход, основанный на использовании вероятностно-статистических методов, в том числе методов статистической физики.

Специфические подходы при изучении процессов в биосфере

1. Подход, основанный на использовании методов квантовой физики;
 2. Подход, основанный на использовании методов нелинейной динамики;
 3. Подход, основанный на использовании методов неравновесной термодинамики.
- 

ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Начальный этап проведения исследований процессов в биосфере – формирование основ смыслового аспекта всей работы в целом.



- ✓ Математическое моделирование – изучение свойств процесса (объекта) на математической модели. Его целью является определение оптимальных и/или предельных условий протекания процесса, разработка методов управления им на основе математической модели и перенос результатов на реальный процесс.
- ✓ Основное понятие метода математического моделирования – математическая модель.
- ✓ Математическая модель – приближенное описание какого-либо явления или процесса внешнего мира, выраженное с помощью математической символики.

ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

1. Выделение основных явлений и элементов в объекте, включая их взаимосвязи.
2. Составление математического описание изучаемого объекта;
3. Выбор метода решения системы уравнений математического описания и реализация его форме моделирующей программы и/или в аналитическом виде.
4. Установление адекватности (соответствия) модели процессу (объекту).

На первом этапе окончательно формируются основы смыслового аспекта моделирования, который представляет собой физическое, (химическое, физико-химическое, биологическое и иное другое описание природы) моделируемого объекта.

На втором этапе для каждого выделенного элемента и явления записывают уравнение (или систему уравнений), отражающее его функционирование на выбранном иерархическом уровне описания с учетом используемого подхода.

При этом, в математическое описание включают уравнения взаимосвязи между различными выделенными явлениями. В зависимости от процесса математическое описание может быть представлено в виде системы алгебраических, дифференциальных, интегральных и интегрально-дифференциальных уравнений.



ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

На третьем этапе производится выбор метода решения и разработки моделирующей зависимости или программы подразумевает выбор наиболее эффективного метода решения из имеющихся, (имеется в виду быстрота и точность получения решения) и реализацию его в форме выражения или алгоритма решения, а затем - в форме зависимости или программы пригодных для расчета на ЭВМ.

Четвертый этап – является заключительным в последовательности основных этапов, выполняемых при разработке модели. Для проверки адекватности математической модели реальному процессу нужно сравнивать результаты измерений (мониторинга) на объекте в ходе процесса с результатами предсказаний модели в идентичных условиях.

При этом от правильности учета в модели характерных черт рассматриваемого процесса зависит успех исследования и ценность полученных результатов моделирования.

Самостоятельный этап – использование математической модели с обязательным учетом ее возможностей и границ применимости.



БЛОК-СХЕМА РАЗРАБОТКИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ОСНОВНОЙ МЕТОД ИЗУЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ И
РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ И УПРАВЛЕНИЯ В БИОСФЕРЕ

Лекция 2. Характеристика основных этапов разработки математических моделей. Описание природы объекта. Блочный принцип построения моделей.

Основные аспекты математических моделей

Любая математическая модель – система уравнений математического описания, отражающей сущность протекающих в объекте явлений, для которой определены методы ее решения.

Алгоритм решения математической модели – реализация расчетов в форме моделирующей программы.

Вывод: Любая математическая модель должна всегда рассматриваться в совокупности следующих трех ее аспектов.

- ▣ **Смысловой аспект** – физическое, (химическое, физико-химическое, биологическое и иное другое описание) природы моделируемого объекта.
- ▣ **Аналитический аспект** – математическое описание процесса в виде некоторой системы уравнений, которая отражает в объекте явления и функциональные связи между ними.
- ▣ **Вычислительный аспект** – метод и алгоритм решения системы уравнений математического описания, в частности, реализуемый в виде моделирующей программы.



СМЫСЛОВОЙ АСПЕКТ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Описание природы объекта


Замечание: Построение любой математической модели **всегда** начинается с описания природы объекта моделирования. При описании природы объекта **всегда** выделяются "**элементарные**" процессы, протекающие в объекте моделирования, которые подлежат отражению в модели, и формируются основные допущения, принимаемые при их описании.

Элементарный процесс – процесс, относящийся к определенному классу явлений, например, массообмен, теплопередача и т.п.

Замечание: Перечень учитываемых "элементарных" процессов определяет совокупность явлений, описывающих объект, которые включают в математическую модель.

Вывод: Название "элементарные" процессы отнюдь не означает, что данные процессы являются простейшими и описываются несложными уравнениями. Это просто составляющие элементы куда более сложного процесса.

Основные «элементарные» процессы, используемые в рамках феноменологического подхода, при математическом моделировании объектов в биосфере

1. *движение потоков фаз;*
 2. *теплообмен и теплопередача;*
 3. *массообмен между фазами;*
 4. *изменение агрегатного состояния (испарение, конденсация, растворение и т.п.);*
 5. *превращения и трансформации (физические, химические, физико-химические и т.п.);*
 6. *процессы: физической и коллоидной химии, а также эволюции частиц дисперсной фазы;*
 7. *процессы физической, химической и статистической термодинамики.*
- 

СМЫСЛОВОЙ АСПЕКТ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Замечание: Полнота математического описания "элементарных" процессов в модели зависит от их роли во всем исследуемом объекте, степени изученности, глубины взаимосвязи "элементарных" в основном процессе и желаемой точности описания.

Вывод: Взаимосвязь "элементарных" процессов может быть чрезвычайно сложной. Поэтому на практике часто делаются различные допущения относительно характера связей, что позволяет избежать введения в модель недостаточно изученных зависимостей и, следовательно, излишнего усложнения материала. Очевидно, что каждое допущение определяет границы применимости модели и должно быть обосновано, либо теоретически, либо экспериментально.

«ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ» ПРОЦЕССЫ В АТМОСФЕРЕ

Пример: *«При физическом описании процесса переноса и трансформации влаги в атмосфере можно выделить следующие “элементарные” процессы»*

1. гидродинамика потоков воздуха, водяного пара и дисперсной фазы влаги;
2. массообмен между дисперсной фазой и паром;
3. теплопередача между воздухом, дисперсной фазой и паром;
4. фазовые переходы между дисперсной фазой и паром.

Внимание!!! Иногда физическое описание объекта моделирования само устанавливается в результате математического моделирования.

Замечание: Все указанные "элементарные" процессы могут происходить в различных слоях атмосферы, либо непосредственно в приземном слое и прямо связаны между собой. Полное описание этих процессов представляет собой очень сложную систему уравнений.

Вывод: Без разумных обоснованных допущений в процессе математического моделирования не обойтись. При этом наиболее рациональным является использование блочного принципа построения математических моделей.

БЛОЧНЫЙ ПРИНЦИП ПОСТРОЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Сущность принципа – модель строится из отдельных логически законченных блоков, обычно отражающих ту или иную специфику рассматриваемого процесса. Это может быть блок кинетики массопередачи, блок гидро- аэродинамики, блок фазового равновесия и т.п.

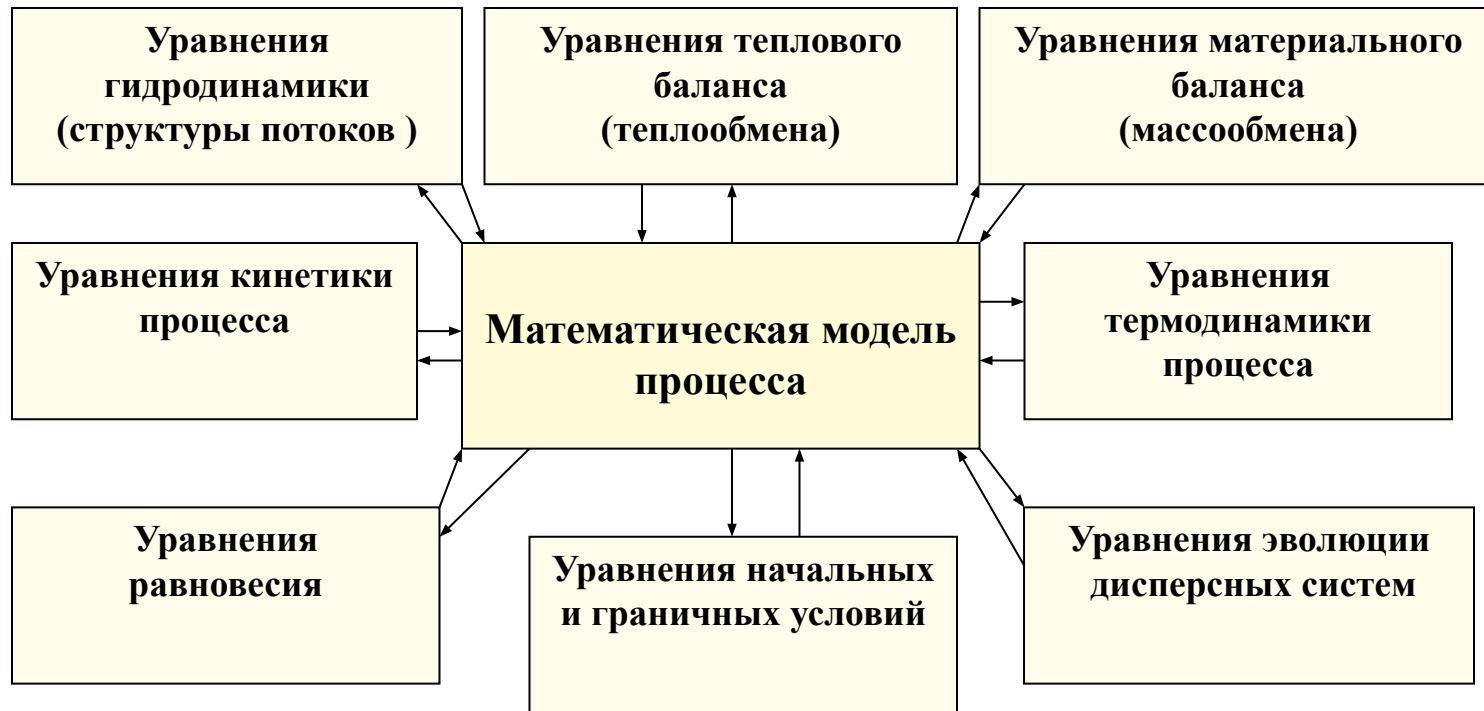
Блочный принцип, **основанный на системном подходе**, позволяет:

- ▣ *разбить общую сложную задачу на отдельные более простые подзадачи и тем самым упростить ее решение с использованием знаний "узких" специалистов.*
- ▣ *использовать ранее разработанные блоки в других моделях.*
- ▣ *модернизировать и заменять отдельные блоки на новые, не касаясь при этом остальных.*
- ▣ *представить общее комплексное описание как совокупность математических описаний и взаимодействий отдельных блоков, включая синергетические эффекты.*
- ▣ *во многих случаях решить проблему масштабирования объектов, при изменении геометрических размеров и определяющих параметров.*
- ▣ *использовать различную степень детализации математического описания (подхода), при взаимном соответствии входных и выходных переменных всех блоков.*
- ▣ *обеспечивать получение замкнутой системы уравнений процесса в целом.*
- ▣ *гарантировать достаточно большую свободу выбора внутренних переменных блоков.*
- ▣ *применять эмпирические данные и соотношения на том или ином уровне детализации каждого блока.*



БЛОЧНЫЙ ПРИНЦИП ПОСТРОЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Пример: «Упрощенная схема общей структуры математической модели в биосфере»



Вывод: Независимо от исследуемого процесса биосферы в структуре его математической модели уравнения тепломассообмена, с учетом уравнений гидродинамики всегда занимают одно из центральных мест.

Лекция 3. Составление математического описания объекта. Методы составления математического описания. Состав математического описания. Основные классы уравнений, встречающихся при описании объектов в биосфере.

Основные этапы составления математического описания объекта

- ✓ *Исследование гидродинамической модели как основы структуры математического описания.*
- ✓ *Изучение кинетики процессов: тепло- и массопередачи, различного рода реакций, фазовых переходов и т.п.*
- ✓ *Составление математического описания каждого из этих процессов, с учетом гидродинамических условий, в рамках их детерминированных и вероятностно-статистических особенностей.*
- ✓ *Объединение описаний всех исследуемых "элементарных" процессов (блоков) в единую систему уравнений математического описания объекта, с учетом различного рода закономерностей, зависимостей, ограничений и особенностей, включая возможность возникновения нелинейных и неравновесных явлений.*

Вывод: Основным достоинством данного принципа построения математического описания является то, что его можно использовать, начиная с самой начальной стадии исследования или проектирования, когда окончательный вариант результата исследований или оформление процесса еще неизвестен.

МЕТОДЫ СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

К основным методам составления относятся:

Аналитический, Экспериментальный, Экспериментально-аналитический.

Аналитический метод – способы вывода уравнений кинетики, статики и динамики на основе теоретического анализа, физических, химических, физико-химических и ряда других процессов, происходящих в исследуемом объекте, а также на основе заданных определяющих параметров и характеристик взаимодействующих компонентов системы.

Особенности:

- При выводе уравнений используются фундаментальные законы сохранения (вещества, энергии, заряда, импульса и т.п.), а также кинетические закономерности процессов переноса (массы, теплоты и т.д.); химических, физико-химических и ряда других превращений.
- Параметры (коэффициенты) составленных уравнений функционально зависят от определяющих размеров объекта, свойств взаимодействующих веществ и величин, характеризующих интенсивность протекание определяющих процессов (констант скорости реакций, коэффициентов диффузии и т.п.).

Преимущества:

- ✓ Не требуется проведения каких-либо экспериментов на натурном объекте,
- ✓ Некоторые параметры уравнений могут быть определены расчетным путем, другие указаны в соответствующей справочной литературе, третьи находят с помощью методов теории подобия и размерности по результатам ранее выполненных или специально организованных модельных исследований.

Недостатки:

- Относительная сложность решения получающейся системы при достаточно полном описании объекта.
- Методы пригодны для нахождения статических и динамических характеристик, вновь исследуемых или проектируемых объектов, определяющие процессы в которых, хорошо изучены.

МЕТОДЫ СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

Экспериментальный метод – используется для исследования, проектирования и управления объектов в достаточно узком "рабочем" диапазоне изменения входных параметров и переменных.

Особенности:

- Основываются на предположении о линейности и сосредоточенности параметров объекта,
- Всегда требуется постановка опытов непосредственно на изучаемом объекте

Преимущества:

- ✓ Простота получаемого математического описания при достаточно точном описании свойств объекта в узком диапазоне изменения параметров.

Недостатки:

- Невозможность установления функциональной связи между входящими в уравнения числовыми параметрами и характерными размерами объекта, режимными параметрами процесса, свойствами веществ и т.п.
- Полученные экспериментальным методом математические описания **нельзя** однозначно распространять на другие, даже однотипные объекты.

МЕТОДЫ СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

Экспериментально-аналитический метод — аналитическое составление уравнений описания с последующим проведением экспериментальных исследований и нахождением по их результатам параметров уравнений.

Особенности:

Необходимость использования комбинированного подхода при проведении исследований.

Преимущества:

Сохранение многих «положительных» свойств, как аналитических, так и экспериментальных методов.

Недостатки:

Реализация требует от специалистов достаточно большого практического опыта.

Замечание: Несмотря на наличие аналогий, не следует путать методы составления математического описания модели с подходами к описанию наблюдаемых величин в пространстве и во времени.

СОСТАВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

Математическое описание – совокупность зависимостей, связывающих различные переменные процесса в единую систему уравнений.

Основной состав системы уравнений:

- ❑ Уравнения, отражающие общие физические законы (например, законы сохранения массы, энергии, заряда и т.п.),
- ❑ Уравнения, описывающие "элементарные" процессы (например, теплообмен, превращения различного рода), ограничения на переменные процесса и т.д.

Дополнительный состав системы уравнений:

- ✓ Различные эмпирические и полуэмпирические зависимости между различными параметрами процесса, теоретическая форма которых неизвестна или слишком сложна.

Замечание: При отсутствии или весьма ограниченном объеме теоретических сведений о моделируемом объекте, когда неизвестен даже ориентировочный вид соотношений, описывающих его свойства, уравнения математического описания могут представлять собой систему связывающих выходные и входные переменные эмпирических зависимостей, полученных в результате статистического обследования действующего объекта (вероятностно-статистический подход и экспериментальный метод описания). Эти модели обычно имеют вид регрессионных соотношений между входными и выходными переменными объекта, и, разумеется, не отражают смысловую сущность объекта моделирования, что затрудняет обобщение результатов, получаемых при их применении.

Вывод: Математические модели, построенные на основе аналитического метода, отражают основные закономерности процесса и качественно более правильно характеризуют его даже при наличии недостаточно точных параметров модели. Поэтому с их помощью можно изучать общие свойства объектов моделирования, относящихся к определенному виду.

СОСТАВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

В составе математического описания, разработанного на основе реальной природы моделируемого объекта, можно выделить следующие группы уравнений:

- I. Уравнения сохранения массы и энергии, записанные с учетом гидродинамической структуры движения потоков.*
- II. Уравнения "элементарных" процессов для локальных элементов потоков.*
- III. Теоретические, полуэмпирические или эмпирические соотношения между различными параметрами процесса.*
- IV. Уравнения и выражения, накладывающие ограничения на параметры процессов.*



I. УРАВНЕНИЯ СОХРАНЕНИЯ МАССЫ И ЭНЕРГИИ, ЗАПИСАННЫЕ С УЧЕТОМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ДВИЖЕНИЯ ПОТОКОВ

Данная группа уравнений характеризует распределение в потоках температуры, концентрации и связанных с ними свойств.

Пример: *«Модель гидротермодинамики в климатической системе, в сочетании с моделью переноса и трансформации влаги при наличии оптически и химически активных примесей в газовом и аэрозольном состояниях»*

Операторная форма общей структуры моделей для данного класса задач:

$$L_0(\varphi) \equiv \mathbf{B} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{G}(\varphi, \mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \varepsilon = 0$$

где \mathbf{B} - диагональная матрица, $\mathbf{G}(\varphi, \mathbf{Y})$ - нелинейный матричный дифференциальный оператор, основанный на адвективно-диффузионном операторе, действующий на различные компоненты функции состояния; \mathbf{f} - функции источников; ε - ошибки моделей.

Справочно: Адвекция \mathbf{f} — доставка, горизонтальный перенос воздуха и (вместе с ним) тех или иных свойств, например теплоты, влаги, запыленности.

I. УРАВНЕНИЯ СОХРАНЕНИЯ МАССЫ И ЭНЕРГИИ, ЗАПИСАННЫЕ С УЧЕТОМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ДВИЖЕНИЯ ПОТОКОВ

В этом уравнении функции источников параметрически учитывают действия естественных и антропогенных факторов. При этом операторы переноса в таких моделях приводятся к симметричному виду с помощью уравнения неразрывности.

Для процессов распространения тепла, излучения и переноса оптически и химически активных субстанций в атмосфере имеем:

1. Модель термодинамики атмосферы в виде:

2. Модели переноса и трансформации влаги, а также оптически и химически активных примесей в газовом и аэрозольном состояниях:

$L_2(\varphi) \equiv V \frac{\partial \pi \varphi_i}{\partial t} + \text{div}(\pi(\varphi_i \vec{u} - \mu \text{grad} \varphi_i)) - \pi(R_i(\varphi)) - \pi Q_{\varphi_i} - \mu \varepsilon_{\varphi_i} = 0$ коэффициент турбулентного обмена, π - функция зависящая от давления, φ_i - отношения смеси для характеристик атмосферной влаги и концентраций примесей (загрязнений) в атмосфере, na - общее число субстанций, Q_{θ} , Q_{φ_i} - источники теплоты, влаги и примесей. $(R_i(\varphi))_i$ - операторы, описывающие процессы трансформации, ε_{θ} , ε_{φ_i} - функции, учитывающие ошибки и меру неопределенности моделей процессов.



I. УРАВНЕНИЯ СОХРАНЕНИЯ МАССЫ И ЭНЕРГИИ, ЗАПИСАННЫЕ С УЧЕТОМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ДВИЖЕНИЯ ПОТОКОВ

В последнем уравнении функции θ и φ_i , $i=1, \dots, na$ включаются в число компонентов функции состояния φ , а μ_θ , $\mu_{\varphi i}$, Q_θ , $Q_{\varphi i}$ и входные данные начальных и краевых (граничных) условий – в компоненты вектора параметров \mathbf{Y} .

Замечание: Если в модели учитывается образование аэрозолей, то добавляется еще одна независимая переменная – размер частиц, и по этой переменной оператор трансформации становится интегрально-дифференциальным. Причем содержательное и конструктивное описание операторов трансформации примесей осуществляется с помощью моделей атмосферной химии.

Вывод: Решение только этих уравнений в системе вызовет огромные трудности, поэтому процесс понимания всегда надо начинать с самых простых случаев, зачастую тривиальных случаев.

І. УРАВНЕНИЯ СОХРАНЕНИЯ МАССЫ И ЭНЕРГИИ, ЗАПИСАННЫЕ С УЧЕТОМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ДВИЖЕНИЯ ПОТОКОВ

В наиболее простом случае обобщенное уравнение материального баланса при отсутствии источников и стоков, а также без процессов трансформации может быть записано в виде:

$$\text{Приход вещества} - \text{Расход вещества} = \text{Накопление вещества}$$

Вывод: Разность между приходом и расходом вещества равна изменению его количества в рассматриваемом объекте, а в стационарном режиме не может происходить ни убыль, ни накопление.

В этом случае имеем:

$$\text{Приход вещества} = \text{Расход вещества}$$

Замечание: Эти тривиальные уравнения можно применять, как каждому веществу, так и ко всей совокупности веществ, которые учитываются в процессе.

Аналогично, в этих условиях обобщенное уравнение теплового баланса имеет вид:

$$\text{Приход теплоты} - \text{Расход теплоты} = \text{Накопление теплоты}$$

В стационарных условиях:

$$\text{Приход теплоты} = \text{Расход теплоты}$$

Замечание: Для перехода к уравнению энергии следует учесть работу, но поскольку во многих процессах энергетические эффекты являются тепловыми, при составлении уравнений сохранения энергии можно зачастую пользоваться последними условиями.

ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ОСТАЛЬНЫХ ГРУПП УРАВНЕНИЙ

II. Уравнения "элементарных" процессов для локальных элементов потоков.

К этой группе относятся описания практически всех процессов теплообмена, различного рода химических реакций, фазовых переходов и т.п. Эти уравнения во многом определяются в качестве предмета изучения самостоятельных прикладных дисциплин и изучаются в рамках специальных курсов. К ним, например, можно отнести закон Фика, уравнение Клайперона-Менделеева, уравнения процессов переноса и т.д.

III. Теоретические, полуэмпирические или эмпирические соотношения между различными параметрами процесса.

Фактически, это группа основных зависимостей используемых в инженерных и технологических расчетах. Например, критериальные уравнения, зависимости коэффициента диффузии от температуры, коэффициента массопередачи от скоростей потоков фаз, формула Стокса, зависимость теплоемкости от состава и т.д.

IV. Уравнения и выражения, накладывающие ограничения на параметры процессов.

В состав этой группы обычно включают граничные и начальные условия уравнений предыдущих групп, критические значения коэффициентов подобия, условия нормировки и т.п.

Вывод: Общим для всех математических моделей прикладного технологического и инженерного назначения является то, что число уравнений, включаемых в математическое описание, всегда должно быть равно числу переменных, которые находятся в результате моделирования.

Лекция 4. ОСНОВНЫЕ КЛАССЫ УРАВНЕНИЙ, ВСТРЕЧАЮЩИХСЯ ПРИ ОПИСАНИИ ОБЪЕКТОВ В БИОСФЕРЕ

Для характеристики свойств различных объектов моделирования обычно применяют:

- ▣ Алгебраические и трансцендентные уравнения.***
- ▣ Обыкновенные дифференциальные уравнения, включая системы этих уравнений.***
- ▣ Дифференциальные уравнения в частных производных***

Более редки случаи использования:

- ▣ Интегральные уравнения***
- ▣ Интегрально-дифференциальные уравнения***
- ▣ Стохастических уравнения***

Замечание: Применение в практике инженерных расчетов интегральных, интегрально-дифференциальных, стохастических и других типов уравнений нельзя назвать каким-либо исключением.

АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ И ТРАНСЦЕНДЕНТНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Примеры уравнений:

$$Nu=0.13Re^{0.33}Gr^{0.1}\epsilon_1; \quad \Delta p=\xi\rho v^2/2; \quad v=(\rho-\rho')gd^2/(18\mu)$$

Особенности применения:

- Описание стационарных режимов работы единичных объектов с сосредоточенными параметрами;
- Описание более сложных объектов для выражения стационарных или равновесных (квазиравновесных) связей между различными параметрами;
- Описание различного рода критериальных зависимостей;
- Описание корреляционных, регрессионных и эмпирических зависимостей.

Преимущества:

- Простота применения;
- Широкое распространение в практике инженерных и технологических расчетов.

Недостатки:

- Сложность описания существенно зависит от числа уравнений и вида входящих в них функций.

ОБЫКНОВЕННЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Примеры уравнений:

$$dC/dt+kC=0; \quad y''+py'+qy=f(x); \quad d^2c/dY^2+(Pr/2)*f(Y)*dc/dY=0$$

Особенности:

- Используются для описания нестационарных режимов работы объектов с сосредоточенными параметрами;
- Используются для описания стационарных режимов объектов с распределенными параметрами по одной пространственной координате.

Преимущества:

- Тождественность, математических описаний, которая иногда свойственна математическим моделям на первый взгляд различных объектов;
- Относительная простота получения численных решений;
- Для решения дифференциальных уравнений разработан целый арсенал специальных методов.

Недостатки:

- Сложность решения уравнений;
- Невозможность получения аналитического решения во многих практических случаях.

ОБЫКНОВЕННЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Пример тождественности описания: «Нестационарных моделей периодически действующих объектах полного смешения и стационарных моделях объектов идеального вытеснения, где уравнения совпадают с точностью до коэффициентов»

Для реакции $A+B \rightarrow^k P$

В первом случае имеем:

$$\frac{dC_A}{dt} + kC_A C_B = 0 \quad \frac{dC_B}{dt} + kC_A C_B = 0 \quad C_A = C_A^0 \quad C_B = C_B^0 \quad t = 0$$

Во втором случае имеем:

$$G \frac{dC_A}{dx} + skC_A C_B = 0 \quad G \frac{dC_B}{dx} + skC_A C_B = 0 \quad C_A = C_A^{BX} \quad C_B = C_B^{BX} \quad x = 0$$

где s - поперечное сечение рабочей зоны объекта, G - объемный расход, $C_A = C_A^0$, $C_B = C_B^0$; $C_A = C_A^{BX}$, $C_B = C_B^{BX}$ - начальные и входные концентрации веществ.

Вывод: В обоих случаях имеет место тождественность оптимальных решений, хотя практическая реализация оптимальных условий в обоих случаях может существенно различаться.

ОБЫКНОВЕННЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Основные причины сложности решения обыкновенных дифференциальных уравнений:

- Сложность решения начинает резко возрастать с ростом порядка уравнения или с ростом числа дифференциальных уравнений в системе, поскольку уравнение m -го порядка всегда можно преобразовать в систему, состоящую из m уравнений первого порядка.
- На сложность решения еще существеннее влияет линейность или нелинейность уравнений. Обыкновенные линейные дифференциальные уравнения решаются гораздо проще.
- Нелинейность, на столько резко усложняет решение, что, как правило, в этом случае нельзя обойтись без использования численных методов.
- В нелинейных уравнениях использование численных методов не гарантирует получения положительных результатов, допускающих однозначные выводы.
- При решении систем дифференциальных уравнений часто приходится сталкиваться с так называемым свойством "жесткости" системы, которое заключается в значительном разбросе собственных значений матрицы системы, что не позволяет использовать обыкновенные методы решения. В таких случаях необходимо использовать специальные приемы и алгоритмы.
- Важной особенностью описания, содержащего обыкновенные дифференциальные уравнения, является необходимость задания корректных, обоснованных и однозначных начальных условий, что во многих случаях, по тем или иным причинам, не является простой задачей.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Примеры уравнений:

$$u_{xt} + (\beta/v)u_t + \beta\gamma u_x = 0; \quad \partial(D\partial u/\partial x)/\partial x = c\partial u/\partial t; \quad \text{cp}(\partial T/\partial t + \mathbf{v}\text{grad}T) = \text{div}(k\text{grad}T) + f$$

Особенности:

- Дифференциальные уравнения в частных производных используют для математического описания динамики объектов с распределенными параметрами или стационарных режимов объектов с параметрами, распределенными по нескольким координатам;
- При описании динамики объекта наряду с начальными условиями нужно также задавать граничные условия, в общем случае являющиеся функциями времени.

Преимущества:

- Высокая информативность.

Недостатки:

- Большая сложность решения;
- Зачастую решение выражаются в виде специальных функций и бесконечных рядов, применение которых в инженерной практике не является тривиальным и может вызвать большие затруднения.

Внимание! Для стационарных режимов работы объектов, которые описываются уравнениями в частных производных, при наличии устойчивых решений, задают **только граничные условия.**

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Пример объекта, который описывается этим классом уравнений:

«Одномерный объект вытеснения, работающий в нестационарных условиях»

Для реакции $A+B \rightarrow^k P$

В этом случае имеем:

$$S \frac{\partial C_A}{\partial t} + G \frac{\partial C_A}{\partial x} + skC_A C_B = 0$$

$$S \frac{\partial C_B}{\partial t} + G \frac{\partial C_B}{\partial x} + skC_A C_B = 0$$

Начальные условия: $t=0$; $C_A = C_{AH}(x)$; $C_B = C_{BH}(x)$

Граничные условия: $x=0$; $C_A = C_{AGP}(t)$; $C_B = C_{BGP}(t)$

где s - поперечное сечение рабочей зоны объекта, G - объемный расход.

Вывод: Метод математического моделирования эффективно применяют при изучении процессов в биосфере, для которых имеется достаточно точное математическое описание.

ОСНОВНЫЕ КЛАССЫ УРАВНЕНИЙ, ВСТРЕЧАЮЩИЕСЯ

ПРИ ОПИСАНИИ ОБЪЕКТОВ В БИОСФЕРЕ

Пределные случаи полноты математического описания объектов:

- ▣ *известна полная система уравнений, описывающая все стороны моделируемого процесса, и все числовые значения этих уравнений;*

Характерен для тиражирования известных разработок, он очевиден и не требует дополнительных пояснений.

- ▣ *полное математическое описание процесса отсутствует.* Типичен для решения кибернетических задач, в которых приходится иметь дело с управлением процессами при наличии неполной информации об объекте и действующих на него возмущениях.

Например, при применении известных разработок в принципиально новых условиях или инновационных разработок в чистом виде.

Замечание: При полном или частичном отсутствии информации об исследуемых явлениях их изучение **всегда** начинается с построения простейших моделей, но без нарушения основной (качественной) специфики исследуемого процесса. Указанное обстоятельство, на начальном этапе рассмотрения задачи требует использования предельной классификации процессов.

ОСНОВНЫЕ КЛАССЫ УРАВНЕНИЙ, ВСТРЕЧАЮЩИЕСЯ

ПРИ ОПИСАНИИ ОБЪЕКТОВ В БИОСФЕРЕ

В зависимости от конкретной реализации процесса и его оформления, исходя из их пространственных и временных признаков, все многообразие процессов в биосфере также исходно можно разделить на **четыре предельных класса**:

1. Процессы, не меняющиеся во времени – **стационарные**.
2. Процессы переменные во времени – **нестационарные**.
3. Процессы без пространственного изменения параметров.
4. Процессы, в ходе которых их параметры меняются в пространстве.

В соответствие с предельной классификацией процессов математические модели по пространственно-временным признакам могут быть разделены на **четыре предельных класса**:

1. Модели, не неизменные во времени – **статические, равновесные или стационарные**.
2. Модели переменные во времени – **динамические, нестационарные или неравновесные**.
3. Модели, не неизменные в пространстве – **модели с сосредоточенными параметрами**.
4. Модели, изменяющиеся в пространстве – **модели с распределенными параметрами**.

Лекция 5. РАЗДЕЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО ПРОСТРАНСТВЕННЫМ И ВРЕМЕННЫМ ПРИЗНАКАМ. ВЫБОР МЕТОДА РЕШЕНИЯ ПРЕДЛАГАЕМОЙ МОДЕЛИ. РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ. ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ.

МОДЕЛИ С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Основные особенности:

- Для данного класса моделей характерно постоянство переменных в пространстве;
- Математическое описание моделей обычно включает в себя, либо **обыкновенные дифференциальные уравнения** (в полных производных) первого порядка для нестационарных процессов, либо **алгебраические уравнения**.

Основные преимущества:

- Это один из наиболее простых классов моделей, как правило, допускающих аналитическое решение;
- Эти модели широко применяются в технологических процессах для описания работы реакторов полного смешения на нестационарных режимах.

Основные недостатки:

- Невозможность детализации происходящих процессов;
- Низкая информативность.

Пример этого класса моделей

Модель "черного ящика", когда параметры в "черном ящике" принимаются одинаковыми во всех его точках.

РАЗДЕЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО ПРОСТРАНСТВЕННЫМ И ВРЕМЕННЫМ ПРИЗНАКАМ

МОДЕЛИ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Основные особенности:

- ✓ Для данного класса моделей характерно изменение основных переменных процесса как во времени, так и в пространстве, или если указанные изменения происходят только в пространстве,
- ✓ Математическое описание включает обычно **дифференциальные уравнения в частных производных**, либо в случае стационарных процессов с одной пространственной переменной – обыкновенные дифференциальные уравнения.

Основные преимущества:

- ✓ Полнота описания;
- ✓ Высокая информативность.

Основные недостатки:

- ✓ Большая сложность решения;
- ✓ Зачастую решение выражаются в виде специальных функций и бесконечных рядов, применение которых в инженерной практике не является тривиальным и может вызвать большие затруднения.

Пример этого класса моделей

Модели "длинных" объектов и аппаратов с большим отношением длины к диаметру и значительной скоростью движения компонентов системы.

РАЗДЕЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО ПРОСТРАНСТВЕННЫМ И ВРЕМЕННЫМ ПРИЗНАКАМ

СТАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Основная особенность:

- ✓ Эти модели отражают поведение объекта в равновесных или стационарных условиях, т. е. когда параметры процесса не меняются во времени.

Основные преимущества:

- ✓ Математическое описание в статических моделях **не включает время как переменную** и состоит либо из дифференциальных уравнений (обычных или в частных производных) в случае объектов с распределенными параметрами, либо из алгебраических уравнений.
- ✓ Модели этого класса нередко допускают аналитические решения, поэтому на них базируется большинство методик инженерных расчетов различных процессов и аппаратов.

Основной недостаток:

- ✓ Невозможность описания пусковых и переходных процессов.

Пример этого класса моделей

Модели большинства процессов и аппаратов, непрерывно функционирующих в **установившихся режимах** работы.

$$G_A + G_B = G; \quad G(C_{A0} - C_A) = V k C_A C_B; \quad G(C_{B0} - C_B) = V k C_A C_B;$$

где V – объем аппарата.

РАЗДЕЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО ПРОСТРАНСТВЕННЫМ И ВРЕМЕННЫМ ПРИЗНАКАМ

ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Основные особенности:

- ✓ Отражают изменение объекта во времени.
- ✓ Математическое описание таких моделей **обязательно включает производную по времени** (полную или частную).
- ✓ Могут служить для описания систем открытого типа, а также большинства процессов и аппаратов при наличии неустановившихся режимов их работы.

Основные преимущества:

- ✓ Наиболее информативны, поскольку в рамках этих моделей обычно ведется учет и стохастических составляющих процессов.
- ✓ Разработан целый арсенал математических методов их практического применения. В его состав входят методы математической физики, теория операторов, теории поля, вероятностно-статистические методы, тензорные и операционные исчисления, функциональный анализ и ряд других.
- ✓ Динамическая модель объекта строят в виде передаточных функций, связывающих входные и выходные переменные, это особенно удобно для целей управления объектом

Основные недостатки:

- ✓ Вызывают наибольшие затруднения при своей практической реализации.
- ✓ Не допускают аналитического решения, и обычно решаются численными методами.

Пример этого класса моделей

$$dC_A/dt = G(C_{A0} - C_A)/V - kC_A C_B; \quad dC_B/dt = G(C_{B0} - C_B)/V - kC_A C_B; \quad t=0; \quad C_A = C_{A0}; \quad C_B = C_{B0}$$

ряда обоснованных упрощений

Модели с ячеистой структурой

Ячеистые модели являются не только удобной формой аппроксимации объектов, описываемых дифференциальными уравнениями, но и имеют вполне определенное самостоятельное значение. Существует ряд объектов, которые по своей природе обладают ячеистой структурой - секционные аппараты, водные слои, слои атмосферы и т.д.

Основные особенности моделей:

- ✓ В них вместо математического описания объекта дифференциальными уравнениями используется его описание системой конечно-разностных уравнений, для чего непрерывный объект с распределенными параметрами рассматривают как дискретный с сосредоточенными параметрами, но имеющий ячеистую структуру.
- ✓ Формально математически замена непрерывного объекта дискретным, эквивалентна замене дифференциальных уравнений разностными соотношениями.
- ✓ Для объектов, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями, математическое описание представляется в виде системы конечно-разностных уравнений.
- ✓ Для объектов, описываемых дифференциальными уравнениями в частных производных, результатом является система дифференциально-разностных уравнений, каждое из которых, в свою очередь, может быть представлено системой конечно-разностных уравнений.

Вывод: При подобных преобразованиях системы уравнений возникает дополнительная погрешность, которую необходимо учитывать, не только в составе балансовых уравнений, но и при оценке результатов моделирования.

КВАЗИНЕСТАЦИОНАРНЫЕ МОДЕЛИ

(КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЕ, КВАЗИРАВНОВЕСНЫЕ, КВАЗИСТАТИЧЕСКИЕ И ДР.)

Квазинестационарные модели — математические модели, в которых нестационарные дифференциальные уравнения, описывающие изменение во времени переменных с малым временем релаксации, заменены стационарными уравнениями.

В подавляющем большинстве случаев, нестационарные модели, используемые на практике, фактически обычно являются, **квазинестационарными**, хотя, строго говоря, обоснование квазинестационарности ряда переменных **требует своего подтверждения!!!**

Основные особенности моделей:

- ✓ Общее математическое описание нестационарных объектов представляют в виде совокупности дифференциальных уравнений (обыкновенных или в частных производных), отражающих изменение переменных объекта во времени.
- ✓ Каждую переменную характеризуют временем релаксации t_i , в течение которого переменная изменяется на определенную долю от полного диапазона ее изменения при постоянных значениях остальных переменных..
- ✓ Выделяют кинетическую и гидродинамическую стадии эволюции исследуемой системы.

РАЗДЕЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО ПРОСТРАНСТВЕННЫМ И ВРЕМЕННЫМ ПРИЗНАКАМ

Две группы переменных квазинестационарных моделей

1. Первая группа – безынерционных переменных, для которых справедливо соотношение $t_i \leq t^I$.
2. Вторая группа – инерционных переменных, для которых справедливо соотношение $t_i \geq t^{II}$.

При $t^I \ll t^{II}$, производят замену в нестационарных дифференциальных уравнениях, описывающих во времени переменные с малым временем релаксации, стационарными уравнениями, называемыми **квазинестационарными**.

Вывод: Подобный подход существенно упрощает модель, поскольку позволяет считать производные от указанных переменных по времени равными нулю.

Расширенная предельная классификация моделей:

- по пространственным признакам – модели с сосредоточенными параметрами, ячеистые модели, модели с распределенными параметрами;
- по временным признакам – модели стационарные модели, квазинестационарные модели, нестационарные модели.



ВЫБОР МЕТОДА РЕШЕНИЯ ПРЕДЛАГАЕМОЙ МОДЕЛИ

Выбор метода решения системы уравнений, описывающей объект, неразрывно связан с выбором вычислительных методов и зависит от целей и особенностей методов прямого или обратного моделирования конкретных практических задач.

Выбор вычислительных методов всегда направлен на обеспечение максимальной скорости получения решения, устойчивости и надежной сходимости алгоритма решения к истинным значениям и обеспечении заданной точности решения.

В "простейших" случаях, когда возможно аналитическое решение отдельных уравнений системы или системы уравнений математического описания в целом, необходимость специальной разработки моделирующего алгоритма и программы не возникает, т.к. вся информация содержится в соответствующих аналитических решениях. Здесь могут возникнуть лишь локальные проблемы, связанные с вычислением и последующим использованием, полученных данных, которые обычно решаются с помощью "стандартного" математического и программного обеспечения.

Когда же математическое описание представляет собой систему конечных и дифференциальных уравнений, от возможности построения эффективного алгоритма решения может существенно зависеть практическая применимость математической модели.

Вывод: Не зависимо от выбора метода решения предлагаемой модели, особое внимание необходимо уделить обоснованному выбору условий однозначности, т.е. соответствующих начальных и граничных условий.

ВЫБОР МЕТОДА РЕШЕНИЯ ПРЕДЛАГАЕМОЙ МОДЕЛИ

Пример выбора метода решения предлагаемой модели:

1. Математические модели, связанные с описанием явления диффузионного переноса загрязнений в пределах пограничного слоя атмосферы и разработкой численных методов прогноза их распределения, основаны на нестационарных трехмерных уравнениях в частных производных параболического типа.
2. Учитывая, пространственную сущность процессов в биосфере, здесь следует особо выделить **методы расщепления**, которые нашли очень широкое применение в моделях биосферы, как в качестве вспомогательных, так и в качестве самостоятельных алгоритмов. В частности, в аэродинамических моделях атмосферы, в нестационарных моделях переноса газовых и аэрозольных примесей и ряда других моделей.
3. В этом случае, метод покоординатного расщепления **трехмерной** задачи на систему трех связанных **одномерных** подзадач дает строгое обоснование структуры соответствующего решающего алгоритма применительно к теории турбулентной диффузии субстанций в пограничном слое атмосферы.
4. В свою очередь метод расщепления исходных математических моделей по физическим факторам, позволяет выделить из общего уравнения подзадачу, описывающую явление турбулентной коагуляции частиц. При этом можно дать математическое обоснование этой операции и сходимости соответствующего алгоритма, численно реализующего вышеуказанный подход.

Вывод: Исследование и математическое моделирование процессов в биосфере **всегда** надо начинать с рассмотрения наиболее "простых" – **одномерных задач**.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

После выбора метода решения составляют последовательность вычислительных и логических операций, которые обеспечивают нужное решение, т.е. составляют **алгоритм** решения задачи.

- ❑ **Алгоритм** – система формальных правил, арифметических и логических, строго придерживаясь которых можно, имея начальные и граничные данные, получить конечный результат.

Основные требования к форме и содержанию алгоритма - его наглядность, компактность и выразительность.

На практике наибольшее распространение получили:

- ✓ графический способ записи алгоритма – **блок-схема**;
- ✓ запись алгоритма в виде **последовательности шагов**.

Замечание: Для квалифицированных разработчиков, блок-схема обычно предпочтительнее. Поскольку позволяет компактно оперировать набором стандартных библиотечных подпрограмм, без их детализации, а лишь с указанием входных параметров.

Вывод: При разработке алгоритмов решения задач особое внимание необходимо уделять выбору метода решения и преобразований исходной системы уравнений, включая условия однозначности.

Пример: «Разработка алгоритма решения задачи описания объекта идеального вытеснения, с реакцией $A+B \rightarrow^k P$ »

Для реакции $A+B \rightarrow^k P$, переписав уравнения в виде:

$$\frac{G}{s} \frac{dC_A}{dx} = -kC_A C_B \quad \frac{G}{s} \frac{dC_B}{dx} = -kC_A C_B \quad C_A = C_A^{BX} \quad C_B = C_B^{BX} \quad x = 0$$

Считая, что реакция протекает в изотермических условиях решим систему с помощью **метода Эйлера**. Для этого приведем ее к виду:

$$\frac{dC_A}{dx} = -k \frac{s}{G} C_A C_B \equiv f_1(C_A, C_B) \quad \frac{dC_B}{dx} = -k \frac{s}{G} C_A C_B \equiv f_2(C_A, C_B)$$

и определим искомые концентрации и по формулам:

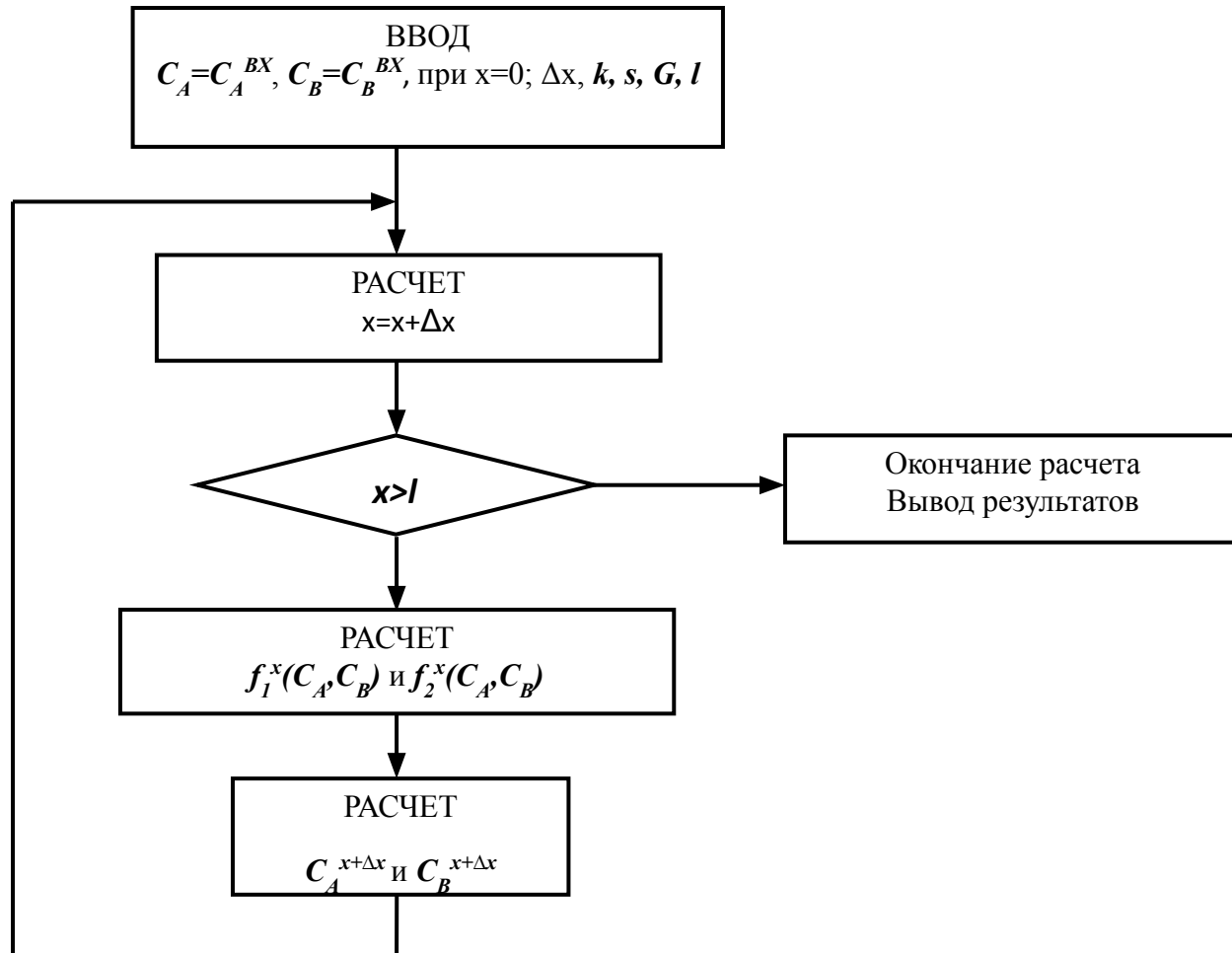
$$C_A^{x+\Delta x} = C_A^x + \Delta x f_1^x(C_A, C_B) \quad C_B^{x+\Delta x} = C_B^x + \Delta x f_2^x(C_A, C_B)$$

Пошаговая форма алгоритма

1. Задать: $C_A = C_A^{BX}$, $C_B = C_B^{BX}$, при $x=0$; Δx , k , s , l , G ;
2. Найти $x=x+\Delta x$;
3. Проверить условие по окончанию суммирования (интегрирования) – $x>l$.
Если оно выполнено, то вывести результат и закончить расчет,
если нет – продолжить расчет;
4. Рассчитать правые части $f_1^x(C_A, C_B)$ и $f_2^x(C_A, C_B)$;
5. Определить новые концентрации $C_A^{x+\Delta x}$ и $C_B^{x+\Delta x}$;
6. Перейти к п.2. алгоритма.



БЛОК-СХЕМА АЛГОРИТМА



Вывод: Этап разработки методов решения предлагаемой модели должен завершаться составлением описания программы, в котором указываются все переменные, порядок ввода и вывода информации, а также все особенности использования программы, включая границы применимости.

ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ

Процесс идентификации параметров и установление адекватности моделей обычно включает в себя следующие основные этапы:

1. статистическое оценивание числовых характеристик случайных процессов;
2. параметрическую идентификацию моделей;
3. интервальные оценки параметров;
4. выбор критериев адекватности;
5. проверку гипотез;
6. анализ значимости отдельных составляющих модели;
7. многофакторный анализ многооткликowych моделей.

Вывод: Этап идентификации параметров и установление адекватности моделей базируется на основе статистических методов и является самостоятельным предметом исследований.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Использование математической модели базируется на известной триаде

«Модель – Алгоритм – Программа»

и составляет основу вычислительного эксперимента.

Основные этапы вычислительного эксперимента представлены на схеме:



Вывод: При использовании математической модели особое внимание следует уделять соотношениям между детерминированными и случайными составляющими моделируемых процессов.