

Тема 2. Методы исследования математических моделей

Одно из фундаментальных свойств природных, технических, многих экономических объектов симметрия (подобие, повторяемость, воспроизводимость) находит свое отражение в их математических моделях. Наличие какого-либо вида симметрии у изучаемого явления означает большую простоту объекта в сравнении с его менее симметричным аналогом. На этом основываются широко применяемые методы упрощения математических моделей и, следовательно, методы упрощения их анализа. Они состоят в понижении порядка системы уравнений, образующих модель, в уменьшении числа переменных, от которых зависят искомые величины, или числа постоянных параметров, определяющих процесс.

Типичный подход к использованию свойств симметрии анализ размерности величин, входящих в модель [15]. Часть характеристик объектов измеряется в каких-либо единицах, имеющих непосредственный (механический, физический, технологический и т. д.) смысл. Например, масса в килограммах, температура в градусах Кельвина, мощность в ваттах. Такие величины называются размерными. Их численное значение зависит от выбора единиц измерения. Среди них выделяются величины с независимой размерностью, или размерно независимые величины. Например, если для описания механических явлений используется система единиц СИ, то размерности длины x , массы m и времени t независимы и не выражаются одна через другую. В отличие от них размерность кинетической энергии $E = mv^2/2$ определяется через размерности основных величин по формуле $[E] = [m][v]^2[t]^{-2} = \text{кг} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{с}^{-2}$, называемой формулой размерности. Такие величины называются размерно зависимыми. Кроме этого некоторые явления и процессы могут описываться также и безразмерными величинами.

Системы единиц измерения можно выбирать по-разному, причем связи между величинами, характеризующими объект (получаемые из законов природы или иных соображений), не должны изменяться при изменении единиц измерения. Например, второй закон Ньютона $F=ma$ в системе СИ записывается точно так же, как и в системе СГС.

Инвариантность моделей по отношению к системе единиц измерения частный случай более общих свойств их симметрии. Наиболее хорошо разработанный и широко применяемый подход, использующий подобие моделей, основан на так называемом инвариантно-групповом методе исследования дифференциальных уравнений. Действительно, большинство дифференциальных уравнений, представляющих собой

составную часть математических моделей многих явлений, остаются неизменными при некоторых преобразованиях входящих в них независимых переменных и искомым функций.

Совокупности промежуточных асимптотик, какими бы разнообразными они ни были, не могут дать описание объекта в общем случае хотя бы потому, что при их получении всегда приходится делать сильные упрощающие предположения. Построение достаточно полной картины невозможно без использования устойчивости математических моделей, или непрерывной зависимости решений от входных данных. Под этим подразумевается свойство решений несильно изменяться при несильном изменении краевых условий, коэффициентов уравнений и других характеристик моделей. Устойчивость, математически выражаемая по-разному для разных ситуаций является одним из необходимых условий корректности моделей, без чего нельзя говорить об их адекватности изучаемому объекту. Для устойчивых моделей наборы частных решений служат своего рода ориентирами или границами среди множества всех возможных решений. Это особенно важно, если задача нелинейна и сконструировать ее общее решение из частных нельзя.

Применительно к уравнениям параболического типа это свойство находит свое воплощение в принципе максимума. Рассмотрим задачу Коши для уравнения нелинейной теплопроводности [13, 25, 35]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad k(T) > 0, \quad T > 0, \quad -\infty < x < \infty, \quad (1.18)$$

$$t > 0, \quad T(x, 0) = T_0(x) \geq 0,$$

Принцип максимума – максимум решения $T(x, t)$ в любой момент времени не превосходит максимума начальных данных $T_0(x)$ [15]:

$$\max_{t > 0, -\infty < x < \infty} T(x, t) \leq \max_{-\infty < x < \infty} T_0(x) \quad (1.19)$$

Неравенство (1.19) имеет очевидный физический смысл. Максимум начального распределения температуры никак не может увеличиться с течением времени, ведь по закону Фурье поток тепла переносит энергию от нагретых участков среды к холодным.

В случае первой краевой задачи для уравнения (1.18) в полупространстве принцип максимума имеет столь же ясный смысл и означает, что

$$\max_{t > 0, -\infty < x < \infty} T(x, t) \leq \max \left\{ \max_{-\infty < x < \infty} T_0(x), \max_{t > 0} T(0, t) \right\} \quad (1.20)$$

где $T_0(x)$ – начальная температура вещества, $T(0, t)$ – задаваемая на его границе температура.

Как бы глубоки и разнообразны ни были методы качественного анализа математических моделей, область их применимости весьма ограничена. Это – либо простые, например линейные модели, либо отдельные фрагменты сложных, в том числе нелинейных моделей. Единственным универсальным способом исследования моделей является применение численных методов для нахождения приближенного решения поставленной задачи с помощью средств современной вычислительной техники и информатики.

Доступный «пониманию» компьютера вычислительный алгоритм, т. е. последовательность операций, в результате выполнения которых находится решение, должен удовлетворять некоторым требованиям. К ним относится, прежде всего, необходимость получить решение с заданной точностью за разумное и по возможности минимальное число действий, поскольку время одного расчета должно измеряться минутами и лишь в уникальных случаях – часами. Объемы обрабатываемой информации не могут превышать возможностей емкости машинной памяти, в процессе вычислений нельзя допускать возникновения не воспринимаемых компьютером слишком больших или малых чисел, структура алгоритма должна быть достаточно простой и учитывать архитектуру вычислительной системы [9, 27].

Только отвечающие этим требованиям вычислительные алгоритмы позволяют проводить всестороннее численное исследование исходной модели, подвергать ее вычислительному эксперименту, проводя ее анализ в самых разных ситуациях и получая исчерпывающую информацию об изучаемом объекте. Такое понимание математического моделирования означает не просто уточнение количественных характеристик явлений, но также изучение основных их качественных свойств. Последнее важно прежде всего для нелинейных объектов, поведение которых может быть весьма разнообразным и неожиданным.

Подчеркнем, что проблемы численного моделирования не снимаются сами собой по мере появления все более мощных и дешевых компьютеров. Это связано, по меньшей мере, с двумя причинами: усложнением выдвигаемых как практикой, так и теорией задач и необходимостью проведения большого числа серий вычислительных экспериментов для достаточно полного изучения объекта.

Поэтому разработка эффективных вычислительных алгоритмов всегда остается одной из ключевых задач математического моделирования. Для их конструирования широко используются методы, идеи и подходы, применяемые при построении исходных математических моделей. Эта связь хорошо прослеживается на примере очень широкого класса моделей – тех, которые сводятся к дифференциальным уравнениям. Для них процесс создания вычислительных алгоритмов состоит

из двух главных этапов: на первом строятся дискретные аналоги исходных моделей и изучаются их свойства, на втором решаются численно системы линейных арифметических уравнений.

Рассмотрев сначала простейшую краевую задачу для уравнения второго порядка на отрезке [13, 15, 35]

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{du}{dx}\right) = -f(x), \quad 0 < x < l, \quad u(0) = u_1, \quad u(l) = u_2, \quad (1.21)$$

предполагая, что ее решение существует и единственно.

Переход от (1.21) к дискретной модели разбивается на две стадии. Заменим непрерывную область $0 < x < l$ на дискретную – совокупность конечного числа точек N . Самый простой способ – равномерное деление отрезка $[0, l]$ по правилу $x_i = ih$, $h = l/N$, $0 \leq i \leq N$. Множество $\omega_h = \{x_i\}$, $i \neq 0, N$ этих точек представляет собой разностную сетку с шагом h , точки x_i – ее узлы. Все фигурирующие в (1.21) функции рассматриваются теперь как функции не непрерывного аргумента x , а дискретного аргумента x_i (сеточные функции), например, аналогом решения $u(x)$, $0 \leq x \leq l$, служит аппроксимирующее его приближенное решение $y(x_i)$, $0 \leq i \leq N$.

На второй стадии строятся дискретные аналоги дифференциального уравнения (1.21) и входных данных. Наиболее естественная дискретизация дифференциального оператора замена производных соответствующими конечными разностями. Введем обозначения

$$u_x = \frac{u(x+h) - u(x)}{h}. \quad (1.22)$$

Первые два выражения из (1.22) дискретная аппроксимация производной du/dx , для получения которой достаточно использовать значения функции $u(x)$ лишь в двух точках (двухточечный шаблон). Разлагая $u(x)$ в ряд Тейлора, нетрудно убедиться в том, что

$$\frac{du}{dx}(x) = u_x + o(h). \quad (1.23)$$

Другими словами, du/dx в целых узлах сетки $x=x_i$ аппроксимируется выражениями (1.22) с первым порядком аппроксимации. Для замены второй производной функции u требуется, очевидно, трехточечный шаблон, причем

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{du}{dx}\right) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} + o(h^2). \quad (1.24)$$

т.е. аппроксимация имеет второй порядок.

Из приведенных примеров ясно, что переход к дискретным моделям нельзя осуществлять чисто формально. Он должен оставлять в

силе по возможности наибольшее число основных свойств, которыми обладают модели исходных объектов.

Применительно к уравнению (1.21) это означает, что для отвечающей ему разностной схемы необходимо выполнение дискретного аналога закона сохранения энергии. Широко используемый подход к построению таких схем основан на записи этого закона в интегральной форме для ячеек $x_{i-1} \leq x \leq x_i$, $x_i = ih$, $i = 1, \dots, N$ разностной сетки с последующей заменой получающихся интегралов и производных приближенными разностными выражениями (интегро-интерполяционный метод) [15].

Для стационарного процесса теплопроводности без поглощения и выделения энергии уравнение баланса тепла на отрезке $x_{i-1/2} < x < x_{i+1/2}$ означает равенство потоков на его границах [15, 25]:

$$W_{i-1/2} - W_{i+1/2} = 0, \quad i = 1, \dots, N-1. \quad (1.25)$$

Проинтегрируем равенство $W(x) = -k(x)du/dx$ на отрезке $x_{i-1} < x < x_i$:

$$u_{i-1} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{W(x)}{k(x)} dx,$$

и, предполагая $W(x) = \text{const}$ при $x_{i-1} < x < x_i$ (простейшая интерполяция), получим

$$u_{i-1} - u_i \approx W_{i-1/2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)}$$

откуда приближенное значение для $W_{i-1/2}$ дается формулой

$$W_{i-1/2} = a_i \frac{u_i - u_{i-1}}{h}, \quad a_i = \left(\frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} \right)^{-1}.$$

Подставив ее в (1.25), приходим к консервативной разностной схеме

$$\frac{1}{h} \left(a_{i+1} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - a_i \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \right) = 0, \quad 1 \leq i \leq N-1,$$

$$a_i = \left(\frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} \right)^{-1} = \left(\int_{-1}^0 \frac{dx}{k(x_i + sh)} \right)^{-1} \quad (1.26)$$

для которой закон сохранения энергии выполнен как для каждой ячейки, так и для всего отрезка $[0,1]$. Таким же образом строятся консервативные дискретные модели для более сложных, в том числе нелинейных и нестационарных процессов теплопередачи.

Применимость интегро-интерполяционного и подобных ему методов распространяется на широкие классы моделей. Принцип полной

консервативности, нашедший применение при решении многих сложных задач один из надежных подходов к построению дискретных моделей с необходимыми качествами.

Вариационные принципы, служащие одним из основных способов получения математических моделей различных объектов, широко используются также и для построения соответствующих дискретных аналогов. Этому способствуют их универсальность, относительная простота применения, связь с законами сохранения и свойствами симметрии. Самый естественный путь при таком подходе – дискретизация исходного объекта, формулировка для полученного объекта вариационного принципа и вывод на его основе связей для дискретных величин, т. е. завершение конструирования искомой дискретной модели.

Построим разностные схемы для уравнений одномерной газовой динамики в лагранжевых координатах [15, 35]

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial m}, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial m}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\varepsilon + \frac{v^2}{2} \right) = -\frac{\partial}{\partial m} (pv), \quad (1.27)$$

$$0 < t < T, \quad 0 < m < M_0.$$

Здесь t – время, m – массовая координата: $\eta = 1/\rho$ – удельный объем (ρ – плотность), v – скорость, p – давление и $\varepsilon = \varepsilon(\eta, p)$ – внутренняя энергия газа.

Будем рассматривать газ как совокупность соседствующих друг с другом материальных точек, разбив его массу M_0 для простоты равномерно на N частей с массой $m_{i+1/2} = M_0/N$, $i = 0, 1, \dots, N$ (масса $m_{i+1/2}$ – аналог шага h в (1.26)). Введем разностную сетку с узлами в точках $i = 0, 1, \dots, N$ и равномерными по массе ячейками. Координаты и скорости частицы охарактеризуем через декартовы координаты x_i, x_{i+1} и скорости v_i, v_{i+1} соответствующих узлов. Остальные параметры материальных точек – плотность $\rho_{i+1/2}$, удельный объем $\eta_{i+1/2}$, давление $p_{i+1/2}$, внутреннюю энергию $\varepsilon_{i+1/2}$ – отнесем к середине ячейки.

Применим для построенной таким образом дискретной среды принцип Гамильтона, выбрав $x_i(t), x_{i+1}(t)$ в качестве обобщенных координат ячеек (величина $v_i(t) = dx_i/dt$ играют роль обобщенных скорости). Кинетическую энергию системы определим достаточно очевидным выражением

$$T = \sum_{i=0}^{N-1} T_{i+1/2} = \sum_{i=0}^{N-1} m_{i+1/2} \frac{v_i^2 + v_{i+1}^2}{4} \quad (1.28)$$

как сумму энергий каждой частицы

$$T_{i+1/2} = \frac{m_{i+1/2}}{2} \frac{v_i^2 + v_{i+1}^2}{2}. \quad (1.29)$$

Потенциальную энергию частиц будем соотносить с их внутренней энергией $\varepsilon_{i+1/2} = \varepsilon_{i+1/2}(x_i, x_{i+1})$ поскольку ее высвобождение дает возможность совершить работу, подобно тому как замыкание обкладок заряженного конденсатора высвобождает запасенную в нем энергию, преобразуясь в движение зарядов. Такое определение потенциальной энергии для рассматриваемой системы, как и обоснование потенциальности ее движения, требует подробного и громоздкого анализа.

Суммарная потенциальная энергия совокупности ячеек есть

$$V = \sum_{i=0}^{N-1} V_{i+1/2} = \sum_{i=0}^{N-1} m_{i+1/2} \varepsilon_{i+1/2}, \quad (1.30)$$

где $V_{i+1/2}$ – энергия отдельной частицы.

Лагранжиан дискретной газовой среды даётся выражением

$$L = T - V = \sum_{i=0}^{N-1} m_{i+1/2} \left(\frac{v_i^2 + v_{i+1}^2}{4} - \varepsilon_{i+1/2} \right). \quad (1.31)$$

Используя вариационные принципы получим полудискретную модель динамики газа (1.32), отвечающую всем необходимым законам сохранения – импульса, массы, энергии (заметим, что закон сохранения полной энергии $E = T + V$ сразу следует из инвариантности лагранжиана (31) по отношению к сдвигу времени).

$$\begin{aligned} \frac{dv_i}{dt} &= - \frac{p_{i+1/2} - p_{i-1/2}}{(m_{i+1/2} - m_{i-1/2})/2}, \quad i = 0, 1, \dots, N-1, \\ \frac{d\eta_{i+1/2}}{dt} &= - \frac{v_{i+1} - v_i}{m_{i+1/2}}, \\ \frac{d\varepsilon_{i+1/2}}{dt} &= -p_{i+1/2} \frac{d\eta_{i+1/2}}{dt} = -p_{i+1/2} \frac{v_{i+1} - v_i}{m_{i+1/2}}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Применимость продемонстрированного подхода не ограничивается рассмотренным выше простейшим случаем. Вариационные принципы эффективно используются для получения дискретных моделей в весьма трудных ситуациях (многомерные процессы, сетки сложной структуры и т. д.).