**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2014 Т. 6 № 4 С. 479−493**

Ки&М

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И ОСНОВЫ ИХ РЕАЛИЗАЦИИ

УДК: 519.622.2

Алгоритм численного интегрирования потенциально-потоковых уравнений в сосредоточенных параметрах с контролем корректности приближенного решения

И. Е. Старостин

Научно-исследовательский институт стандартизации и енификации ФГУП (НИИСУ),
Россия, 107113, г. Москва, ул. Сокольнический Вал, 37/10

E-mail: starostinigo@yandex.ru

Получено 22 июня 2014 г.

Данная работа посвящена разработке алгоритма численного интегрирования системы дифференциальных уравнений потенциально-потокового метода моделирования неравновесных процессов. Этот метод был разработан автором в опубликованных им ранее работах. В настоящей работе рассмотрение ограничивается системами с сосредоточенными параметрами. Также ранее была разработана автором методика анализа корректности приближенного решения системы потенциально-потоковых уравнений для систем в сосредоточенных параметрах. Целью настоящей статьи является объединение этой методики с современными численными методами интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений и разработка методики численного интегрирования систем уравнений потенциально-потокового метода, позволяющей гарантировать корректность приближенного решения.

Ключевые слова: потенциально-потоковый метод, уравнения потенциально-потокового метода, численное интегрирование уравнений, анализ корректности приближенного решения

Numerical integration algorithm potentially-streaming equations in lumped parameters to control the correctness of the approximate solution

I. E. Starostin

Research Institute of Standardization and Unification FSUE (BRE), 37/10 Sokolniki Val str., Moscow, 107113, Russia

Abstract. — This work is devoted to development of an algorithm for numerical integration of differential equations potentially-streaming method simulation of non-equilibrium processes. This method was developed by the author in his earlier published works. In this paper, consideration is limited to systems with lumped parameters. Also previously developed method for analyzing the correctness of the author of the approximate solution of the system potentially-streaming equations for systems in lumped parameters. The purpose of this article is to combine this technique with modern numerical methods for integrating systems of ordinary differential equations and the development of methods of numerical integration of systems of equations potentially-streaming method that allows to guarantee the correctness of the approximate solution.

Keywords: potentially-streaming method, equation potentially-streaming method, numerical integration of the equations, analysis of the correctness of approximate solutions

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2014, vol. 6, no. 4, pp. 479–493 (Russian).

Введение. Постановка задачи

Способы описания неравновесных процессов

В настоящее время для исследования неравновесных процессов существует два подхода: микроскопический и макроскопический [Старостин, Халютин, 2013; Айзеншиц, 1963; Квасников, 2002a; Квасников, 2002b; Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Пригожин, Кондепуди, 2002; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Агеев, 2001]. Микроскопический подход описания неравновесных процессов основан на неравновесной статистической механике и кинетической теории [Старостин, Халютин, 2013; Айзеншиц, 1963; Квасников, 2002c]. Эти теории основываются на уравнениях движения частиц, как, например, уравнение Больцмана [Айзеншиц, 1963; Квасников, 2002c]. Различные неравновесные процессы, как теплопроводность, электропроводность, термоэлектричество и пр., исследованы таким путем [Айзеншиц, 1963; Квасников, 2002c]. Со многих точек зрения статистическая или кинетическая теории в принципе являются наиболее удобными для физика. Они дают полное представление механизма явлений и обеспечивают возможность количественного определения коэффициентов, входящих в уравнения, описывающие эти процессы (например, уравнение диффузии, теплопроводности) [Айзеншиц, 1963]. Однако они базируются на известных моделях молекул и применяются для определенных классов необратимых процессов [Старостин, Халютин, 2013; Айзеншиц, 1963; Квасников, 2002c]. Поэтому эти теории, несмотря на то, что дают глубокое физическое описание явлений, не нашли широкого применения для моделирования неравновесных процессов в технических, технологических системах, в природе, в живых организмах [Старостин, Халютин, 2013].

Альтернативой микроскопического подхода описания неравновесных процессов является макроскопический подход [Старостин, Халютин, 2013; Квасников, 2002a; Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Пригожин, Кондепуди, 2002; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Агеев, 2001; Бахарева, 1976], основанный на современной термодинамике. Предметом современной термодинамики является изучение тех наиболее общих свойств макроскопических тел, которые не зависят от конкретного микрофизического строения этих тел и которые проявляются в процессах обмена энергией между телами [Квасников, 2002a; Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Пригожин, Кондепуди, 2002; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991]. Любые явления в природе и технике сопровождаются обменом энергией, поэтому термодинамика, разрабатывая общие методы изучения энергетических явлений, имеет всеобщее методологическое значение и ее методы используются в самых различных областях знания [Старостин, Халютин, 2013; Квасников, 2002a; Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Пригожин, Кондепуди, 2002; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Агеев, 2001; Бахарева, 1976].

Современная термодинамика подразделяется на равновесную (классическая термодинамика) и неравновесную [Старостин, Халютин, 2013; Квасников, 2002a; Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Пригожин, Кондепуди, 2002; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Агеев, 2001; Бахарева, 1976]. Классическая (равновесная) термодинамика изучает равновесные состояния и равновесный (квазистатический) переход из одного равновесного состояния в другое [Квасников, 2002a; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991]. Равновесным (квазистатическим) процессом называется процесс, состоящий из последовательности во времени состояний термодинамического равновесия [Квасников, 2002a; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991]. Неравновесный же процесс представляет собой последовательность состояний рассматриваемой системы, не являющихся равновесными; равновесный процесс является частным случаем бесконечно медленного неравновесного процесса, при котором изменение параметров системы соизмеримо со временем релаксации системы [Квасников, 2002a; Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991]. Таким образом, неравновесные процессы являются общим случаем физико-химических процессов.

В современной термодинамике неравновесных процессов к настоящему времени наибольшее распространение получили два основных направления [Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Зарубин, Кувыркин, 2008]. В основу первого направления, являющегося развитием классической (равновесной) термодинамики, и называемом *классической равновесной термодинамики*, положен принцип локального *термодинамического равновесия* [Квасников, 2002a; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Агеев, 2001; Бахарева, 1976]. Второе направление, называемое *рациональной термодинамикой неравновесных процессов*, характеризуется, в первую очередь, отказом от принципа локального термодинамического равновесия [Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Зарубин, Кувыркин, 2008]. Второе направление современной термодинамики является, таким образом, обобщением первого направления, и поэтому именно второе направление используется в общем случае при построении методов описания, математического моделирования и анализа реальных систем.

Описание неравновесных процессов методами современной неравновесной термодинамики (рациональной термодинамики). Потенциально-потоковый метод

Современная неравновесная термодинамика описывает как системы, обладающие эффектом памяти, так и не обладающие эффектом памяти [Квасников, 2002c; Зарубин, Кувыркин, 2008]. В случае систем, обладающих эффектом памяти, вводятся величины, характеризующие накопленный опыт системы, позволяя тем самым математическую модель, описывающую системы с эффектом памяти, свести к математической модели систем, не обладающих эффектом памяти [Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010].

В рамках современной неравновесной термодинамики можно выделить замкнутые неравновесные системы и незамкнутые [Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010]. Замкнутые системы — системы, находящиеся при фиксированных внешних условиях (например, изолированные системы, изобарно-изотермические системы, изохорно-изотермические системы и т. д. [Квасников, 2002a]) [Квасников, 2002a; Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010]. Замкнутые системы (в силу фиксированности внешних условий) в соответствии с нулевым началом термодинамики приходят в состояние термодинамического равновесия, из которого самопроизвольный выход невозможен [Квасников, 2002a; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Агеев, 2001]. Системы, внешние условия у которых не фиксированы, уже незамкнутые, и они под внешними воздействиями могут выходить из состояния равновесия [Квасников, 2002a; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Агеев, 2001; Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010].

Из современной неравновесной термодинамики следует, что для любой неравновесной системы определена некоторая функция свободной энергии (инергии), которая для замкнутой системы уменьшается в силу протекающих в ней процессов и, как следствие, в состоянии равновесия принимает минимум [Квасников, 2002a; Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Пригожин, Кондепуди, 2002; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010; Быков, Старостин, Халютин, 2014]. Второе начало термодинамики позволяет определить эту свободную энергию из величин, снимаемых из экспериментальных данных [Квасников, 2002a; Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Пригожин, Кондепуди, 2002; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Быков, Старостин, Халютин, 2014]. Согласно второму началу термодинамики убыль свободной энергии в результате протекания неравновесных процессов равна работе, которую можно извлечь из системы при ее равновесном переходе из начального состояния в текущее [Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Быков, Старостин, Халютин, 2014].

Описывая неравновесную систему, вводят параметры состояния — величины, однозначно характеризующие состояние неравновесной системы [Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010], и ее функции состояния, выражаемые через параметры состояния. Параметры состояния неравновесной системы связаны между собой уравнениями баланса, поэтому среди них выделяем независимые параметры состояния, и зависимые параметры состояния выражаемые через независимые посредством уравнений баланса [Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010]. В современной термодинамике в качестве параметров состояния выбираются координаты состояния — параметры состояния, протекание любого конкретного неравновесного процесса может вызвать только изменение одного из них соответствующего параметра состояния [Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Быков, Старостин, Халютин, 2014]. Координаты состояния также в общем случае связаны уравнениями баланса [Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Быков, Старостин, Халютин, 2014], а потому среди них выделяем независимые параметры состояния, и зависимые параметры состояния выражаемые через независимые посредством уравнений баланса [Быков, Старостин, Халютин, 2014].

Так как свободная энергия в случае замкнутой системы монотонно уменьшается и в ее состоянии равновесия принимает локальный минимум, то ее градиент свободной энергии по независимым параметрам состояния (координатам состояния) в состоянии равновесия равен нулю [Квасников, 2002a], Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991]. Отсюда, термодинамические силы, определяемые как градиент свободной энергии по независимым параметрам состояния (координатам состояния), являются причиной и необходимым условием протекания неравновесных процессов [Квасников, 2002c; Эткин, 2008; Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Пригожин, Кондепуди, 2002; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991; Агеев, 2001; Бахарева, 1976].

В работах [Быков, Старостин, Халютин, 2013b; Старостин, Быков, Халютин, 2013] было показано, что помимо термодинамических сил характер протекания неравновесных процессов определяется еще и некоторыми свойствами системы, названными в [Быков, Старостин, Халютин, 2013b; Старостин, Быков, Халютин, 2013] кинетическими, независимо от термодинамических сил. Поэтому, для моделирования и анализа динамики протекания неравновесных процессов необходимо знать связь термодинамических сил со скоростями протекания неравновесных процессов [Эткин, 2008; Быков, Старостин, Халютин, 2013b], которая и определяется этими кинетическими свойствами [Быков, Старостин, Халютин, 2013b] и дается путем введения матрицы восприимчивостей [Эткин, 2008; Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010; Быков, Старостин, Халютин, 2013b] (кинетической матрицы [Быков, Старостин, Халютин, 2013b; Старостин, Быков, Халютин, 2013]), определяемой кинетическими свойствами неравновесной системы [Быков, Старостин, Халютин, 2013b; Старостин, Быков, Халютин, 2013]. Система уравнений связи термодинамических сил со скоростями — система уравнений потенциально-потокового метода, разработанного в рамках рациональной термодинамики, имеет вид [Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010]:

$$
\begin{aligned}
&\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = A\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t)\right)\vec{X}\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t)\right) + \frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt}, \vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) = -\vec{\nabla}_{\vec{x}} F\left(\vec{x},\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right),\vec{U}\right)\Big|_{\vec{P}=\vec{P}(\vec{x},\vec{y})}, \\
&\frac{d\vec{y}(t)}{dt} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right)}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right)}{\partial x_m} \end{pmatrix}_{\substack{\vec{x}=\vec{x}(t) \\ \vec{P}=\vec{P}\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t)\right)}} \left(\frac{d\vec{x}(t)}{dt} - \frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt}\right) + \frac{d^{(e)}\vec{y}}{dt},
\end{aligned}
\tag{1}
$$

где $\vec{x}$, $\vec{y}$ — параметры состояния (координаты состояния) системы; $\vec{P}$ — параметры баланса системы; $\frac{d^{(e)}\vec{x}(t)}{dt}$, $\frac{d^{(e)}\vec{y}(t)}{dt}$ — внешние составляющие скоростей изменения координат состояния системы $\vec{x}$ и $\vec{y}$ соответственно; $\vec{U}$ — внешние условия, в которых находится рассматриваемая система; $F\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ — свободная энергия системы; $\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ — термодинамические силы, движущие неравновесные процессы внутри системы; $A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ — положительно определенная матрица восприимчивостей (кинетическая матрица [Быков, Старостин, Халютин, 2013b]) системы к термодинамическим силам. В работах [Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010] рассматривается декомпозиция системы на простые подсистемы, и матрица восприимчивостей сложной системы строится как сумма матриц восприимчивостей простых подсистем, умноженных справа и слева на матрицу, вытекающую из уравнений баланса и ей транспонированную соответственно [Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010].

Для построения матриц восприимчивостей (кинетических матриц) простых подсистем неравновесные процессы в рассматриваемой простой подсистеме представляются в виде совокупности обратимой и необратимой составляющей неравновесных процессов [Быков, Старостин, Халютин, 2013a; Старостин, 2013]. В работах [Халютин и др., 2010; Быков, Старостин, Халютин, 2013a] показывается, что матрицу восприимичвостей можно разложить на обратимую (антисимметричную) и необратимую (симметричную) составляющие. Часть обратимой составляющей матрицы восприимчивостей обуславливается инерционными свойствами системы (например, в случае инерционной теплопроводности, инерционной электропроводности [Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006]) [Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Быков, Старостин, Халютин, 2013a; Старостин, 2013]. Эту часть мы определяем из соответствующих инерционных характеристик [Жоу, Каскас-Баскес, Лебон, 2006; Быков, Старостин, Халютин, 2013a; Старостин, 2013]. Для определения оставшейся части мы определяем матрицы увлечения термодинамических координат и матрицы увлечения термодинамических сил (обратимых свойств [Быков, Старостин, Халютин, 2013a; Старостин, 2013]), а также скорости протекания неравновесных процессов, вызванных термодинамическими силами в этой простой подсистеме [Быков, Старостин, Халютин, 2013a; Старостин, 2013]. Зная скорости и термодинамические силы, их вызвавшие, мы легко определим необратимую составляющую матрицы восприимчивостей, а зная матрицы увлечения термодинамических координат и эквивалентности термодинамических сил, а также инерционную составляющую матрицы восприимчивостей, — матрицу восприимчивостей простой подсистемы [Быков, Старостин, Халютин, 2013a; Старостин, 2013]. Алгоритм построения матрицы восприимчивостей в простой подсистеме изложен в [Быков, Старостин, Халютин, 2013a].

Из этого алгоритма видно, что матрица восприимчивостей в простой подсистеме определяется кинетическими свойствами этой простой подсистемы [Быков, Старостин, Халютин, 2013b], а матрица восприимчивостей всей систем — кинетическими свойствами всей системы [Быков, Старостин, Халютин, 2013b]. Определяя матрицу восприимчивостей сложной системы как сумму матриц восприимчивостей простых подсистем, умноженных справа и слева на матрицу, вытекающую из уравнений баланса, и ей транспонированную соответственно [Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010], мы суммируем кинетические свойства ее простых подсистем [Быков, Старостин, Халютин, 2013b].

Система потенциально-потоковых уравнений (1) может быть записана как для систем с сосредоточенными параметрами, так и для систем с распределенными параметрами. В последнем случае рассматриваемая система представляется в виде системы элементов среды, взаимодействующих между собой. Для этой системы элементов среды и записываются потенциально-потоковые уравнения. [Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010].

Для учета флуктуаций в систему потенциально-потоковых уравнений (1) вводятся аналогично [Бахарева, 1976] случайные силы $\vec{X}_{сл}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U},t\right)$ и случайные составляющие внешних потоков $\frac{d_{сл}^{(e)}\vec{x}}{dt}$, $\frac{d_{сл}^{(e)}\vec{y}}{dt}$ [Старостин, т. 2, 2013]:

$$
\begin{aligned}
&\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = A\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t)\right)\left(\vec{X}\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t)\right) + \vec{X}_{сл}\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t),t\right)\right) + \frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt} + \frac{d_{сл}^{(e)}\vec{x}}{dt},\\
&\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) = -\vec{\nabla}_{\vec{x}} F\left(\vec{x},\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right),\vec{U}\right)\Big|_{\vec{P}=\vec{P}(\vec{x},\vec{y})},\\
&\frac{d\vec{y}(t)}{dt} = \left(\frac{\partial\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right)}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right)}{\partial x_m}\right)_{\substack{\vec{x}=\vec{x}(t)\\ \vec{P}=\vec{P}(\vec{x}(t),\vec{y}(t))}} \left(\frac{d\vec{x}(t)}{dt} - \frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt} - \frac{d_{сл}^{(e)}\vec{x}}{dt}\right) + \frac{d^{(e)}\vec{y}}{dt} + \frac{d_{сл}^{(e)}\vec{y}}{dt}.
\end{aligned}
\qquad (2)
$$

Уравнение (2) позволяет замоделировать динамику неравновесных процессов с учетом случайных факторов, что имеет важное значение в неустойчивых областях (эти области встречаются в нелинейных системах вдали от равновесия) [Пригожин, Кондепуди, 2002]. В неустойчивых областях (согласно известному из теории устойчивости определению устойчивости и неустойчивости [Демидович, 1967]) флуктуации определяют дальнейшую эволюцию системы [Пригожин, Кондепуди, 2002].

Более того, флуктуации могут также вызвать и отклонение от второго начала термодинамики [Квасников, 2002a; Эткин, 2008; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991], но вероятным является только мизерное отклонение в околоравновесном состоянии; вероятность существенных флуктуаций от второго начала термодинамики ничтожно мала [Квасников, 2002a; Эткин, 2008; Крутов, Исаев, Кожинов, 1991]. Так, например, 1%-я вероятность нарушения равновесного статистического распределения в 1 см^3 воздуха, находящегося при нормальных условиях, имеет порядок раз в 10^{140} лет [Крутов, Исаев, Кожинов, 1991]. Поэтому, учитывая, что даже малые флуктуации определяют судьбу системы [Пригожин, Кондепуди, 2002] (в неустойчивых состояниях определяют дальнейшую динамику системы, а в устойчивых — создают шум [Квасников, 2002a; Пригожин, Кондепуди, 2002]), их необходимо учитывать.

Систему уравнений (2) аналогично системе уравнений (1) можно записать и для распределенных параметров.

Постановка задачи

Итак, мы рассмотрели общие физические особенности протекания неравновесных процессов: причиной и необходимым условием протекания неравновесных процессов являются термодинамические силы, помимо них особенности протекания неравновесных процессов определяются и кинетическими свойствами системы, а также свою коррективу в протекание неравновесных процессов вносят и флуктуации. Эти особенности, как и видно из сказанного выше, заложены в уравнения потенциальнопотокового метода (2) [Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010; Быков, Старостин, Халютин, 2013b; Старостин, Быков, Халютин, 2013; Быков, Старостин, Халютин, 2013a; Старостин, 2013; Старостин, 2013].

В настоящее время существует большое число методов численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений [Жук, Маничев, Ильницкий, 2010; Калиткин, 1978]. Но все они дают лишь приближенное решение и не вникают в суть рассматриваемой задачи. Отсюда они не дают в общем случае гарантии корректного решения. В современных системах автоматизированного проектирования, автоматизированного управления необходима гарантия корректного приближенного решения математической модели проектируемого, анализируемого, управляемого, и т. д. объекта. Поэтому, выполняя численное интегрирование системы обыкновенных дифференциальных уравнений, в том числе и потенциально-потоковых, необходимо в методы интегрирования этой системы «зашить» физические особенности моделируемой системы.

Задача настоящей работы — разработка методов численного интегрирования системы потенциально-потоковых уравнений (1) с проверкой корректности приближенного решения. В настоящей работе мы ограничиваемся системами с сосредоточенными параметрами.

Анализ корректности приближенного решения потенциально-потоковых уравнений

В настоящее время существует большое число методов численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений [Жук, Маничев, Ильницкий, 2010; Калиткин, 1978; Бахвалов, 1975; Березин, Жидков, 1959; Демидович, Марон, Шувалова, 1967; Новиков, 1997; Холл, Уат, 1979]. Современные методы численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений обладают как свойством устойчивости (A-устойчивости) в устойчивых областях, так и свойством неустойчивости в неустойчивых областях (AL -устойчивость) [Жук, Маничев, Ильницкий, 2010]. Однако ни один из современных методов численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений не позволяет проанализировать корректность приближенного решения [Старостин, Халютина, 2014]. Именно поэтому в работе [Старостин, Халютина, 2014] была разработана методика анализа корректности приближенного решения системы потенциальнопотоковых уравнений (2).

В рамках этой методики уравнения баланса

$$\vec{y} = \vec{y}\left(\vec{x}, \vec{P}\right) \tag{3}$$

разрешаются относительно $\vec{P}$:

$$\vec{P} = \vec{P}\left(\vec{x}, \vec{y}\right). \tag{4}$$

В замкнутой системе в общем случае параметры баланса $\vec{P}$ остаются неизменными [Старостин, 2010; Халютин, Старостин, 2012; Халютин и др., 2010]; в незамкнутой системе часть параметров баланса $\vec{P}$ меняется. Поэтому, в общем случае в работе [Старостин, Халютина, 2014] выделяют неизменные параметры баланса $\vec{P}_c$ и изменяющиеся параметры баланса $\vec{P}_v$:

$$\vec{P} = \begin{pmatrix} \vec{P}_c^T & \vec{P}_v^T \end{pmatrix}^T. \tag{5}$$

Согласно (3)–(5), система потенциально-потоковых уравнений (2), при вводе случайной составляющей скорости изменения параметров баланса $\dfrac{d_{сл}\vec{P}_v}{dt}$, примет вид [Старостин, Халютина, 2014]

$$\begin{gathered}
\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = A\left(\vec{x}(t), \vec{y}(t), \vec{U}(t)\right)\left(\vec{X}\left(\vec{x}(t), \vec{y}(t), \vec{U}(t)\right) + \vec{X}^{\circ}_{сл}\left(\vec{x}(t), \vec{y}(t), \vec{U}(t), t\right)\right) + \frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt}, \\
\vec{y}(t) = \vec{y}\left(\vec{x}(t),\, \vec{P}(t)\right), \\
\vec{X}\left(\vec{x}, \vec{y}, \vec{U}\right) = -\vec{\nabla}_{\vec{x}} F\left(\vec{x}, \vec{y}\left(\vec{x}, \vec{P}\right), \vec{U}\right)\Big|_{\vec{P}=\vec{P}(\vec{x},\vec{y})}, \vec{P}(t) = \begin{pmatrix} \vec{P}_c^T & \vec{P}_v^T(t) \end{pmatrix}^T, \\
\frac{d\vec{P}_v(t)}{dt} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_m} \end{pmatrix}_{\substack{\vec{x}=\vec{x}(t) \\ \vec{y}=\vec{y}\left(\vec{x}(t), \vec{P}(t)\right)}} \frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt} + \\
+ \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_1} & \cdots & \dfrac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_{m_y}} \end{pmatrix}_{\substack{\vec{x}=\vec{x}(t) \\ \vec{y}=\vec{y}\left(\vec{x}(t), \vec{P}(t)\right)}} \frac{d^{(e)}\vec{y}}{dt} + \frac{d_{сл}\vec{P}_v}{dt},
\end{gathered} \tag{6}$$

где $\vec{X}^{\circ}_{сл}\left(\vec{x}, \vec{y}, \vec{U}, t\right)$, $\dfrac{d_{сл}\vec{P}_v}{dt}$ определяются как [Старостин, Халютина, 2014]

$$\vec{X}^{\circ}_{сл}\left(\vec{x}, \vec{y}, \vec{U}, t\right) = \vec{X}_{сл}\left(\vec{x}, \vec{y}, \vec{U}, t\right) + A^{-1}\left(\vec{x}, \vec{y}, \vec{U}\right)\frac{d^{(e)}_{сл}\vec{x}}{dt},$$

$$\frac{d_{сл}\vec{P}_v}{dt} = \left(\frac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_m} \right)_{\substack{\vec{x}=\vec{x}(t) \\ \vec{y}=\vec{y}(\vec{x}(t),\vec{P}(t))}} \frac{d_{сл}^{(e)}\vec{x}}{dt} + \left(\frac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_{m_y}} \right)_{\substack{\vec{x}=\vec{x}(t) \\ \vec{y}=\vec{y}(\vec{x}(t),\vec{P}(t))}} \frac{d_{сл}^{(e)}\vec{y}}{dt}.$$

Обозначив приближенное решение системы потенциально-потоковых уравнений (6) как $\vec{x}^\circ(t)$, $\vec{y}^\circ(t)$, определив из (4) приближенное значение $\vec{P}_v^\circ(t)$

$$\vec{P}_v^\circ(t) = \vec{P}_v\left(\vec{x}^\circ(t), \vec{y}^\circ(t)\right)$$

и введя формальные внешние силы $\vec{X}_ф^\circ\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U},t\right)$, аналогичные $\vec{X}_{сл}^\circ\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U},t\right)$, а также формальные составляющие скорости изменения параметров баланса $\frac{d_ф\vec{P}_v}{dt}$, аналогичные $\frac{d_{сл}\vec{P}}{dt}$, получим уравнение (7) для приближенного решения, аналогичное (6), [Старостин, Халютина, 2014]:

$$\begin{gathered}
\frac{d\vec{x}^\circ(t)}{dt} = A\left(\vec{x}^\circ(t),\vec{y}^\circ(t),\vec{U}(t)\right)\left(\vec{X}\left(\vec{x}^\circ(t),\vec{y}^\circ(t),\vec{U}(t)\right) + \vec{X}_ф^\circ\left(\vec{x}^\circ(t),\vec{y}^\circ(t),\vec{U}(t),t\right)\right) + \frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt}, \\
\vec{y}^\circ(t) = \vec{y}\left(\vec{x}^\circ(t), \vec{P}^\circ(t)\right), \\
\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) = -\vec{\nabla}_{\vec{x}} F\left(\vec{x},\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right),\vec{U}\right)\Big|_{\vec{P}=\vec{P}(\vec{x},\vec{y})}, \vec{P}^\circ(t) = \left(\vec{P}_c^T \quad \vec{P}_v^{\circ T}(t)\right)^T, \qquad (7) \\
\frac{d\vec{P}_v^\circ(t)}{dt} = \left(\frac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_m} \right)_{\substack{\vec{x}=\vec{x}^\circ(t) \\ \vec{y}=\vec{y}(\vec{x}^\circ(t),\vec{P}^\circ(t))}} \frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt} + \\
+ \left(\frac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial \vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_{m_y}} \right)_{\substack{\vec{x}=\vec{x}^\circ(t) \\ \vec{y}=\vec{y}(\vec{x}^\circ(t),\vec{P}^\circ(t))}} \frac{d^{(e)}\vec{y}}{dt} + \frac{d_ф\vec{P}_v}{dt}.
\end{gathered}$$

Из (7) видно, что отклонение приближенного решения системы (2) (или эквивалентной ей системы (6)) от точного решения системы (1) формально объясняется формальными внешними силами $\vec{X}_ф^\circ\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U},t\right)$ и формальными составляющими скоростей изменения параметров баланса $\frac{d_ф\vec{P}_v}{dt}$. Как отмечалось выше, формальные внешние силы $\vec{X}_ф^\circ\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U},t\right)$ и формальные составляющие скоростей изменения параметров баланса $\frac{d_ф\vec{P}_v}{dt}$ аналогичны соответствующим флуктуационным (случайным) величинам. В реальных системах точное решение системы (1) невозможно в результате действия в системе флуктуаций. Поэтому реальная динамика системы отклоняется от точного решения системы (1) благодаря флуктуациям. Отсюда, если формальные внешние силы $\vec{X}_ф^\circ\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U},t\right)$ и формальные составляющие скоростей изменения параметров баланса $\frac{d_ф\vec{P}_v}{dt}$ ведут себя во времени аналогично флуктуациям (т. е. имеют характер беспорядочных колебаний во времени, а также их величина не превышает величину соответствующих флуктуаций), то приближенное решение $\vec{x}^\circ(t)$, $\vec{y}^\circ(t)$ корректно. В противном случае это приближенное решение некорректно. Для учета флуктуаций они в системе (2) (или эквивалентной ей системе (6)) задаются в виде случайных функций времени, затем система (2) или система (6) решаются любым из современных численных методов и полученное приближенное решение вышеописанным способом анализируется на корректность [Старостин, Халютина, 2014].

Разработка алгоритма приближенного интегрирования потенциально-потоковых уравнений

Среди существующих методов численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений (систем ОДУ) можно выделить как методы, подразумевающие вычисления значений в точках (например, методы Рунге–Кутты, явные или неявные, многошаговые, например, методы Розенброка, Бурлиша-Штерра, и т. д. [Жук, Маничев, Ильницкий, 2010; Новиков, 1997; Холл, Уат, 1979]) и основанные на вычислении аналитических или кусочно-аналитических функций [Калиткин, 1978; Бахвалов, 1975; Березин, Жидков, 1959; Демидович, Марон, Шувалова, 1967]. Однако, методы, основанные на аналитических или кусочно-аналитических зависимостях, проигрывают по сравнению с методами, основанными на вычислении значений в точках (в плане точности) [Калиткин, 1978]. В то время как последние могут иметь высокие порядки точности, свойства AL-устойчивости (т. е. устойчивые в устойчивых областях и неустойчивые в неустойчивых областях).

Отсюда, используя интерполяцию сплайнами, получим кусочно-аналитическое решение. Его-то корректность мы и будем исследовать вышеописанными методами.

Интерполяция сплайнами приближенного решения

Пусть, имея значения $\vec{x}_n$ и $\vec{P}_{v,n}$ в момент времени t_n и в предыдущие моменты времени, мы определили значения $\vec{x}_{n+1}$ и $\vec{P}_{v,n+1}$ в момент времени t_{n+1} из (6) (путем известных методов из [Жук, Маничев, Ильницкий, 2010; Калиткин, 1978; Бахвалов, 1975; Березин, Жидков, 1959; Демидович, Марон, Шувалова, 1967; Новиков, 1997; Холл, Уат, 1979]). Далее, используя (6), определим скорости изменения этих величин $\vec{v}_{x,n}$, $\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}$ и $\vec{v}_{x,n+1}$, $\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1}$ в моменты времени t_n и t_{n+1} соответственно в соответствии с

$$\begin{gathered}
\vec{v}_{x,n}=A\left(\vec{x}_n,\vec{y}(t_n),\vec{U}(t_n)\right)\left(\vec{X}\left(\vec{x}_n,\vec{y}(t_n),\vec{U}(t_n)\right)+\vec{X}^\circ_{сл}\left(\vec{x}_n,\vec{y}(t_n),\vec{U}(t_n),t_n\right)\right)+\frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt},\\
\vec{y}(t_n)=\vec{y}\left(\vec{x}_n,\,\vec{P}(t_n)\right),\ \vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=-\vec{\nabla}_{\vec{x}}F\left(\vec{x},\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right),\vec{U}\right)\Big|_{\vec{P}=\vec{P}(\vec{x},\vec{y})},\vec{P}(t_n)=\begin{pmatrix}\vec{P}_c^T & \vec{P}_{v,n}^T\end{pmatrix}^T,\\
\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial\vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial\vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_m}\end{pmatrix}_{\substack{\vec{x}=\vec{x}_n\\ \vec{y}=\vec{y}(t_n)}}\frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt}+\begin{pmatrix}\dfrac{\partial\vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_1} & \cdots & \dfrac{\partial\vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_{m_y}}\end{pmatrix}_{\substack{\vec{x}=\vec{x}_n\\ \vec{y}=\vec{y}(t_n)}}\frac{d^{(e)}\vec{y}}{dt}+\frac{d_{сл,n}\vec{P}_v}{dt}.
\end{gathered}\tag{8}$$

Случайные величины в (8) задаем случайным образом. Определив согласно (8) скорости $\vec{v}_{x,n}$, $\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}$ и $\vec{v}_{x,n+1}$, $\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1}$, получим приближенное кусочно-аналитическое решение, используя интерполяцию кубическими сплайнами.

Представим кусочно-аналитическое решение в виде

$$\vec{x}^\circ_n(t)=\vec{a}^{(0)}_{x,n}+\vec{a}^{(1)}_{x,n}\left(t-t_{n+\frac{1}{2}}\right)+\frac{1}{2}\vec{a}^{(2)}_{x,n}\left(t-t_{n+\frac{1}{2}}\right)^2+\frac{1}{6}\vec{a}^{(3)}_{x,n}\left(t-t_{n+\frac{1}{2}}\right)^3,\tag{9}$$

$$\vec{P}^\circ_{v,n}(t)=\vec{a}^{(0)}_{\vec{P}_v^\circ,n}+\vec{a}^{(1)}_{\vec{P}_v^\circ,n}\left(t-t_{n+\frac{1}{2}}\right)+\frac{1}{2}\vec{a}^{(2)}_{\vec{P}_v^\circ,n}\left(t-t_{n+\frac{1}{2}}\right)^2+\frac{1}{6}\vec{a}^{(3)}_{\vec{P}_v^\circ,n}\left(t-t_{n+\frac{1}{2}}\right)^3,\tag{10}$$

где

$$t_{n+\frac{1}{2}} = \frac{t_{n+1} + t_n}{2}. \tag{11}$$

Приближенные скорости изменения этих величин имеют вид

$$\frac{d\vec{x}_n^\circ(t)}{dt} = \vec{a}_{x,n}^{(1)} + \vec{a}_{x,n}^{(2)}\left(t - t_{n+\frac{1}{2}}\right) + \frac{1}{2}\vec{a}_{x,n}^{(3)}\left(t - t_{n+\frac{1}{2}}\right)^2, \tag{12}$$

$$\frac{d\vec{P}_{v,n}^\circ(t)}{dt} = \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(1)} + \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(2)}\left(t - t_{n+\frac{1}{2}}\right) + \frac{1}{2}\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(3)}\left(t - t_{n+\frac{1}{2}}\right)^2. \tag{13}$$

Коэффициенты в (9), (10), (12), (13) найдем из условий

$$\vec{x}_n^\circ(t_n) = \vec{x}_n,\ \vec{x}_n^\circ(t_{n+1}) = \vec{x}_{n+1},\ \vec{P}_{v,n}^\circ(t) = \vec{P}_{v,n},\ \vec{P}_{v,n}^\circ(t_n) = \vec{P}_{v,n}, \tag{14}$$

$$\left.\frac{d\vec{x}_n^\circ(t)}{dt}\right|_{t=t_n} = \vec{v}_{x,n},\ \left.\frac{d\vec{x}_n^\circ(t)}{dt}\right|_{t=t_{n+1}} = \vec{v}_{x,n+1},\ \left.\frac{d\vec{P}_{v,n}^\circ(t)}{dt}\right|_{t=t_n} = \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n},\ \left.\frac{d\vec{P}_{v,n}^\circ(t)}{dt}\right|_{t=t_{n+1}} = \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1}. \tag{15}$$

Введем шаг интегрирования по времени

$$\tau_{n+\frac{1}{2}} = t_{n+1} - t_n. \tag{16}$$

Отсюда, согласно (9)–(16), имеем

$$\vec{x}_n = \vec{a}_{x,n}^{(0)} - \vec{a}_{x,n}^{(1)}\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{1}{2}\vec{a}_{x,n}^{(2)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2 - \frac{1}{6}\vec{a}_{x,n}^{(3)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^3,$$

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{a}_{x,n}^{(0)} + \vec{a}_{x,n}^{(1)}\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{1}{2}\vec{a}_{x,n}^{(2)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2 + \frac{1}{6}\vec{a}_{x,n}^{(3)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^3,$$

$$\vec{v}_{x,n} = \vec{a}_{x,n}^{(1)} - \vec{a}_{x,n}^{(2)}\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{1}{2}\vec{a}_{x,n}^{(3)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2,\ \vec{v}_{x,n+1} = \vec{a}_{x,n}^{(1)} + \vec{a}_{x,n}^{(2)}\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{1}{2}\vec{a}_{x,n}^{(3)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2,$$

$$\vec{P}_{v,n} = \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(0)} - \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(1)}\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{1}{2}\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(2)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2 - \frac{1}{6}\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(3)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^3,$$

$$\vec{P}_{v,n+1} = \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(0)} + \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(1)}\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{1}{2}\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(2)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2 + \frac{1}{6}\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(3)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^3,$$

$$\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n} = \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(1)} - \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(2)}\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{1}{2}\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(3)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2,\ \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} = \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(1)} + \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(2)}\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2} + \frac{1}{2}\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(3)}\left(\frac{\tau_{n+\frac{1}{2}}}{2}\right)^2;$$

отсюда имеем окончательно

$$\vec{a}_{x,n}^{(0)} = \frac{\vec{x}_n + \vec{x}_{n+1}}{2} - \frac{1}{8}\left(\vec{v}_{x,n+1} - \vec{v}_{x,n}\right)\tau_{n+\frac{1}{2}}, \quad \vec{a}_{x,n}^{(1)} = \frac{3}{2}\frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n}{\tau_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2}\frac{\vec{v}_{x,n+1} + \vec{v}_{x,n}}{2}, \tag{17}$$

$$\vec{a}_{x,n}^{(2)} = \frac{\vec{v}_{x,n+1} - \vec{v}_{x,n}}{\tau_{n+\frac{1}{2}}}, \quad \vec{a}_{x,n}^{(3)} = \frac{12}{\tau^2_{n+\frac{1}{2}}}\left(\frac{\vec{v}_{x,n+1} + \vec{v}_{x,n}}{2} - \frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n}{\tau_{n+\frac{1}{2}}}\right), \tag{18}$$

$$\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(0)} = \frac{\vec{P}_{v,n+1} + \vec{P}_{v,n}}{2} - \frac{1}{8}\left(\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} - \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}\right)\tau_{n+\frac{1}{2}}, \quad \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(1)} = \frac{3}{2}\frac{\vec{P}_{v,n+1} - \vec{P}_{v,n}}{\tau_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2}\frac{\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} + \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}}{2}, \tag{19}$$

$$\vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(2)} = \frac{\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} - \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}}{\tau_{n+\frac{1}{2}}}, \quad \vec{a}_{\vec{P}_v^\circ,n}^{(3)} = \frac{12}{\tau^2_{n+\frac{1}{2}}}\left(\frac{\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} + \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}}{2} - \frac{\vec{P}_{v,n+1} - \vec{P}_{v,n}}{\tau_{n+\frac{1}{2}}}\right). \tag{20}$$

Уравнения (17)–(20) позволяют получить коэффициенты. Для оценки корректности целесообразно ввести безразмерное время в соответствии с

$$\tau = \frac{2\left(t - t_{n+\frac{1}{2}}\right)}{\tau_{n+\frac{1}{2}}}. \tag{21}$$

Из (11), (16), (21) в силу $t \in \left[t_n, t_{n+1}\right]$ вытекает $-1 \le \tau \le 1$.

Согласно (9), (10), (12), (13), (17)–(21), имеем в безразмерном времени:

$$\vec{x}_n^\circ(\tau) = \frac{\vec{x}_n + \vec{x}_{n+1}}{2} - \frac{1}{8}\left(\left(\vec{v}_{x,n+1} - \vec{v}_{x,n}\right) - \left(\vec{v}_{x,n+1} + \vec{v}_{x,n}\right)\tau\right)\tau_{n+\frac{1}{2}}\left(1 - \tau^2\right) + \frac{1}{4}\left(\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n\right)\tau\left(3 - \tau^2\right), \tag{22}$$

$$\vec{P}_{v,n}^\circ(\tau) = \frac{\vec{P}_{v,n+1} + \vec{P}_{v,n}}{2} - \frac{1}{8}\left(\left(\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} - \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}\right) - \left(\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} + \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}\right)\tau\right)\tau_{n+\frac{1}{2}}\left(1 - \tau^2\right) + \frac{1}{4}\left(\vec{P}_{v,n+1} - \vec{P}_{v,n}\right)\tau\left(3 - \tau^2\right), \tag{23}$$

$$\left.\frac{d\vec{x}_n^\circ(t)}{dt}\right|_{t = t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\tau_{n+\frac{1}{2}}\tau} = \frac{3}{2}\frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n}{\tau_{n+\frac{1}{2}}}\left(1 - \tau^2\right) - \frac{\vec{v}_{x,n+1} + \vec{v}_{x,n}}{4}\left(1 - 3\tau^2\right) + \frac{\vec{v}_{x,n+1} - \vec{v}_{x,n}}{2}\tau, \tag{24}$$

$$\left.\frac{d\vec{P}_{v,n}^\circ(t)}{dt}\right|_{t = t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\tau_{n+\frac{1}{2}}\tau} = \frac{3}{2}\frac{\vec{P}_{v,n+1} - \vec{P}_{v,n}}{\tau_{n+\frac{1}{2}}}\left(1 - \tau^2\right) - \frac{\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} + \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}}{4}\left(1 - 3\tau^2\right) + \frac{\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n+1} - \vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}}{2}\tau. \tag{25}$$

Выражения (22)–(25) будут использованы для анализа корректности приближенного решения.

Следует также отметить, что метод сплайнов является сходящимся [Калиткин, 1978]. Отсюда следует, что если после проверки корректности приближенного решения на $\left[t_n, t_{n+1}\right]$ последнее оказалось некорректным, то необходимо уменьшать шаг интегрирования $\tau_{n+\frac{1}{2}}$, снова получить решение в $(n+1)$-й дискретный момент времени и затем, выполнив интерполяцию сплайном на $\left[t_n, t_{n+1}\right]$, проверить корректность приближенного решения.

Проверка корректности приближенного решения

Определив эти приближенные решения, необходимо проверить их корректность. Для этого записав, согласно (7),

$$
\begin{gathered}
\frac{d\vec{x}_n^\circ(t)}{dt}=A\left(\vec{x}_n^\circ(t),\vec{y}^\circ(t),\vec{U}(t)\right)\left(\vec{X}\left(\vec{x}_n^\circ(t),\vec{y}^\circ(t),\vec{U}(t)\right)+\vec{X}_{\phi,n}^\circ(t)\right)+\frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt},\\
\vec{y}^\circ(t)=\vec{y}\left(\vec{x}_n^\circ(t),\,\vec{P}^\circ(t)\right),\\
\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=-\vec{\nabla}_{\vec{x}}F\left(\vec{x},\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right),\vec{U}\right)\Big|_{\vec{P}=\vec{P}(\vec{x},\vec{y})},\vec{P}^\circ(t)=\left(\vec{P}_c^T\quad\vec{P}_{v,n}^{\circ T}(t)\right)^T,\\
\frac{d\vec{P}_{v,n}^\circ(t)}{dt}=\begin{pmatrix}\frac{\partial\vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_1}&\cdots&\frac{\partial\vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial x_m}\end{pmatrix}_{\substack{\vec{x}=\vec{x}^\circ(t)\\ \vec{y}=\vec{y}\left(\vec{x}_n^\circ(t),\vec{P}^\circ(t)\right)}}\frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt}+\\
+\begin{pmatrix}\frac{\partial\vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_1}&\cdots&\frac{\partial\vec{P}_v(\vec{x},\vec{y})}{\partial y_{m_y}}\end{pmatrix}_{\substack{\vec{x}=\vec{x}^\circ(t)\\ \vec{y}=\vec{y}\left(\vec{x}_n^\circ(t),\vec{P}^\circ(t)\right)}}\frac{d^{(e)}\vec{y}}{dt}+\frac{d_{\phi,n}\vec{P}_v}{dt},
\end{gathered}
\tag{26}
$$

и определив на отрезке $\left[t_n,t_{n+1}\right]$ из (26), используя (11), (21)–(25), формальную внешнюю силу $\vec{X}_{\phi,n}^\circ(t)$ на этом отрезке, формальную составляющую скорости изменения параметров баланса $\frac{d_{\phi,n}\vec{P}_v}{dt}$, проверим, не превышают ли эти величины $\vec{X}_{\phi,n}^\circ(t)$, $\frac{d_{\phi,n}\vec{P}_v}{dt}$ по модулю соответствующие максимальные флуктуационные значения. Если не превышают, то приближенное решение корректно, в противном случае приближенное решение некорректно.

Для того чтобы определить минимальное и максимальное значение каждой формальной внешней силы и формальной внешней составляющей скорости изменения параметров баланса, необходимо воспользоваться методами поиска экстремума на отрезке. В рассматриваемой задаче нам необходим глобальный экстремум (глобальный максимум или глобальный минимум). На практике проектировщик в подобных задачах (поиска максимума или минимума) строит график функции и по графику и определяет глобальный максимум или глобальный минимум. Если бы на всем отрезке, где мы ищем экстремумы, функция линейна, то максимум и минимум находятся на концах отрезка, а внутри экстремумов нет. В противном случае необходимо отрезки разбить на части, где функция линеаризовывается (производная знак не меняет), и определить значения функции на концах этих отрезков. Затем эти значения проверяем по модулю — не превышают ли максимального значения.

Разбивать интервал на отрезки линеаризации можно из соображений линеаризации термодинамических сил, кинетической матрицы, матрицы баланса.

Выбор шага интегрирования по времени

Для выбора шага интегрирования по времени, который затем будет корректироваться, воспользуемся соотношениями:

$$\vec{x}'_{n+1}=\vec{x}_n+\vec{v}_{x,n}\tau_{n+\frac{1}{2}},\ \vec{P}'_{v,n+1}=\vec{P}_{v,n}+\vec{v}_{\vec{P}_v^\circ,n}\tau_{n+\frac{1}{2}}. \tag{27}$$

Шаг интегрирования по времени $\tau_{n+\frac{1}{2}}$ должен быть таковым, чтобы $\vec{x}'_{n+1}$ и $\vec{P}'_{v,n+1}$, вычисляемые, согласно (27), были в области линеаризации (кинетической матрицы, термодинамических сил). Далее шаг интегрирования по мере необходимости будет уменьшаться (например, если решение на текущем шаге интегрирования оказалось некорректным). Необходимость уменьшения шага интегрирования может быть также вызвана неявностью численной схемы в случае несхождения итерационного процесса вычисления $\vec{x}_{n+1}$ и $\vec{P}_{v,n+1}$. Все численные схемы, обладающие A-устойчивостью или AL-устойчивостью, являются неявными [Жук, Маничев, Ильницкий, 2010; Новиков, 1997; Холл, Уат, 1979].

Выбирая шаг интегрирования во времени, необходимо помимо области линейности отталкиваться от предыдущего шага интегрирования. Исключение составляет первый шаг интегрирования, который мы выбираем исключительно из условия нахождения решения в области линейности и затем корректируем (исходя из условия сходимости итерационного процесса определения $\vec{x}_{n+1}$ и $\vec{P}_{v,n+1}$ и условия корректности приближенного решения). На последующих шагах интегрирования помимо линейности анализируем еще и предысторию выбора предыдущего шага интегрирования. Если предыдущий шаг интегрирования корректировался, то текущий шаг интегрирования берется равным предыдущему, если не нарушается условие линейности (27), а в противном случае шаг интегрирования выбирается из условия линейности (27). Если предыдущий шаг интегрирования не корректировался, то в этом случае шаг интегрирования берется из условия линейности (27).

Алгоритм численного интегрирования системы потенциально-потоковых уравнений

В основе предлагаемого алгоритма лежат современные численные методы интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений, дополненные анализом корректности приближенного решения. Шаг интегрирования на каждом шаге выбирается из соображений не выхода (27) из области линейности. А затем шаг корректируется вышеописанным образом.

Итак, алгоритм численного интегрирования имеет следующий вид:

1) Определяем шаг интегрирования $\tau_{n+\frac{1}{2}}$, исходя из условия линейности (27) и в случае наличия предыдущих шагов предыдущего шага интегрирования. Если предыдущий шаг интегрирования корректировался, то текущий шаг интегрирования берется равным предыдущему, если не нарушается условие линейности (27), а в противном случае шаг интегрирования выбирается из условия линейности (27). Если предыдущий шаг интегрирования не корректировался, то в этом случае шаг интегрирования берется из условия линейности (27).
2) Вычисляем момент времени t_{n+1} в соответствии с
$$t_{n+1} = t_n + \tau_{n+\frac{1}{2}}.$$
3) Вычисляем в соответствии с выбранной схемой численного интегрирования значения $\vec{x}_{n+1}$ и $\vec{P}_{v,n+1}$ в момент времени t_{n+1}, зная значения $\vec{x}_n$ и $\vec{P}_{v,n}$ в момент времени t_n, и в случае многошаговых схем значения в предыдущие моменты времени, используя (6). При необходимости уменьшаем шаг интегрирования $\tau_{n+\frac{1}{2}}$ и возвращаемся к пункту 2. Случайные величины в соответствующие дискретные моменты времени задаем случайным образом.
4) Вычисляем, согласно (22)–(25), приближенные кусочно-аналитические решения $\vec{x}_n^{\circ}(\tau)$, $\vec{P}_{v,n}^{\circ}(\tau)$, $\left.\dfrac{d\vec{x}_n^{\circ}(t)}{dt}\right|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}\tau_{n+\frac{1}{2}}\tau}$, $\left.\dfrac{d\vec{P}_{v,n}^{\circ}(t)}{dt}\right|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}\tau_{n+\frac{1}{2}}\tau}$ для безразмерного времени, а затем, используя (21), вычисляем через безразмерный промежуток времени размерный момент времени и затем, используя (11) и (26), определяем внешние формальные силы и внешние формальные составляющие скорости изменения параметров баланса (получаем сеточную функцию этих параметров от безразмерного времени).

5) Проверяем, не превышают ли по модулю формальные внешние величины соответствующие максимальные флуктуационные значения. Если превышают, то уменьшаем вдвое шаг интегрирования и возвращаемся к пункту 2.
6) Ищем точки экстремума кусочно-аналитического приближенного решения. Если они существуют на интервале (t_n, t_{n+1}), то их тоже записываем в результат. Также записываем значения приближенного решения в моменты времени t_n и t_{n+1}. Переходим на следующий шаг интегрирования.

В соответствии с приведенным алгоритмом получаем приближенное решение, причем, этот алгоритм, основанный на общих физических особенностях моделируемой системы, гарантирует корректность этого приближенного решения. Благодаря этому рассматриваемый алгоритм может быть использован в компьютерных системах имитационного моделирования неравновесных процессов. Причем пользователю (моделеру) не надо заботиться о корректности численного интегрирования. Это, в свою очередь, позволяет моделировать в том числе и системы с большим числом степеней свободы.

Список литературы

Агеев Е. П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. — М.: Эдиториал УРСС, 2001. — 136 с.

Айзеншиц Р. Статистическая теория необратимых процессов. — М.: Издательство «Иностранная литература», 1963. — 127 с.

Бахарева И. Ф. Нелинейная неравновесная термодинамика. — Саратов: Издательство саратовского университета, 1976. — 150 с.

Бахвалов Н. С. Численные методы (алгебра, анализ, дифференциальные уравнения). — М.: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1975. — 631 с.

Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 2. — М.: Гос. изд. физ.-мат. лит., 1959. — 620 с.

Быков В. И., Старостин И. Е., Халютин С. П. Построение матрицы восприимчивостей потенциально-потоковых уравнений для простых подсистем сложной системы // Сложные системы, 2013a. — № 3(8). — С. 66–86.

Быков В. И., Старостин И. Е., Халютин С. П. Кинетические свойства неравновесных систем. Четвертое начало термодинамики // Сложные системы, 2013b. — № 4(9). — с. 68–86.

Быков В.И., Старостин И. Е., Халютин С. П. Потенциально-потоковый метод и современная неравновесная термодинамика // Сложные системы, 2014. — № 1(10). — с. 4–30.

Демидович Б. П., Марон И. А., Шувалова Э. З. Численные методы анализа: приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения. — М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит., 1967. — 368 с.

Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1967. — 470 с.

Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика. — Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2006. — 528 с.

Жук Д. М., Маничев В. Б., Ильницкий А. О. Методы и алгоритмы решения дифференциально-алгебраических уравнений для моделирования систем и объектов во временной области // Информационные технологии, 2010. — №7. — С. 16–24; № 8. — С. 23–26.

Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Математическое моделирование механики и электродинамики сплошной среды. — М.: Издательство МГТУ им. Баумана, 2008. — 511 с.

Калиткин Н. Н. Численные методы. — М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит., 1978. — 512 с.

Квасников И. А. Термодинамика и статистическая физика. Т.1: Теория равновесных систем: Термодинамика. Изд. 2-е, сущ. перераб. и доп. — М.: Едиториал УРСС, 2002a. — 240 с. В 3-х т.

Квасников И. А. Термодинамика и статистическая физика. Т.2: Теория равновесных систем: Статистическая физика. Изд. 2-е, сущ. перераб. и доп. — М.: Едиториал УРСС, 2002b. — 432 с. В 3-х т.

Квасников И. А. Термодинамика и статистическая физика. Т.3. Теория неравновесных систем. Изд. 2-е, сущ. перераб. и доп. — М.: Едиториал УРСС, 2002c. — 448 с. В 3-х т.

Крутов В. И., Исаев С. И., Кожинов И. А. Техническая термодинамика. / Под ред. Крутова. — М.: Высшая школа, 1991. — 384 с.

Новиков Е. А. Явные методы для жестких систем. — Новосибирск: Наука, сибирское предприятие РАН, 1997. — 198 с.

Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика: от тепловых двигателей до диссипативных структур. — М.: Мир, 2002. — 461 с.

Старостин И. Е. Квазиградиентные имитационные математические модели неравновесных процессов // Моделирование неравновесных систем: материалы XIII Всероссийского семинара «МНС-2010» (Красноярск, 15–18 октября 2010 г.). — Красноярск: Сибирский федеральный государственный университет, 2010. — с. 187–192.

Старостин И. Е. Построение для простых подсистем неравновесных систем матриц восприимчивостей потенциально-потоковых уравнений // Моделирование неравновесных систем: Материалы XVI всероссийского семинара / Под. ред. М. Г. Садовского; отв. за вып. М. Ю. Сенашов. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2013a. — с. 151–156.

Старостин И. Е. Учет случайных факторов при моделировании неравновесных процессов потенциально-потоковым методом // Инновационные информационные технологии: Материалы международной научно-практической конференции. Т. 2. — М.: МИЭМ НИУ ВШЭ, 2013b. — С. 378–384.

Старостин И. Е., Быков В. И., Халютин С. П. Связь матрицы восприимчивостей потенциально-потоковых уравнений с физическими свойствами неравновесной системы // Инновации на основе информационных и коммуникационных технологий: Материалы X международной научно-практической конференции. / Научн. ред. А.Н. Тихонов; Общ. ред. С.У. Увайсов; Отв. ред. И.А. Иванов. — М.: МИЭМ НИУ ВШЭ, 2013. — с. 260–262.

Старостин И. Е., Халютин С. П. Потенциально-потоковый метод — инструмент качественного анализа и моделирования динамики неравновесных процессов // X Всероссийская научно-техническая конференция «Научные чтения по авиации, посвященные памяти Н. Е. Жуковского»: материалы X Всероссийская научно-техническая конференция «Научные чтения по авиации, посвященные памяти Н. Е. Жуковского». — М.: Издательский дом Академии им. Н. Е. Жуковского, 2013. — с. 40–45.

Старостин И. Е., Халютина О. С. Анализ корректности численного решения потенциально-потоковых уравнений в сосредоточенных параметрах // Труды международного симпозиума «Надежность и качество»: в 2 т. — Пенза: ПГУ, 2014. — 1 т. — С. 126–130.

Халютин С. П., Старостин И. Е. Потенциально-потоковый квазиградиентный метод моделирования неравновесных процессов // Известия высших учебных заведений: Поволжский регион: Физико-математические науки, 2012. — № 2. — с. 25–35.

Халютин С. П., Тюляев М. Л., Жмуров Б. В., Старостин И. Е. Моделирование сложных электроэнергетических систем летательных аппаратов. — М.: Издательство ВУНЦ ВВС «ВВА им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», 2010. — 188 с.

Холл Дж., *Уатт Дж.* Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: Мир, 1979. — 313 с.

Эткин В. А. Энергодинамика (синтез теорий переноса и преобразования энергии). — СПб.: Наука, 2008. — 409 с.