

1. Загальні принципи комп'ютерного моделювання

План. *Зв'язок між математичним і комп'ютерним моделюванням, класифікація математичних моделей, приклади.*

Сутність математичного моделювання полягає у заміні реального процесу (фізичного, хімічного тощо) його *математичною моделлю*, тобто його описом за допомогою математичних понять (диференціальних та інтегральних рівнянь тощо), що виражають основні закономірності функціонування об'єкта чи протікання процесу (закони збереження, фізичні припущення тощо). Отже, математичним моделювання називається процес побудови і дослідження математичних моделей.

На цьому етапі дослідники аналізують фізичні та інші закономірності протікання реальних процесів, висувають гіпотези, які дозволяють спростити опис тощо.

Приклад 1.1. *Класичні моделі масопереносу.*

Розглянемо пористе середовище (грунт, біологічну тканину тощо). Опишемо рух рідини, що містить розчинну речовину (забруднення, ліки тощо) і фільтрується скрізь це середовище, тобто сформулюємо рівняння, що описують розподіл концентрації речовини у просторі і часі. Як правило, ці моделі формуються за таких припущень:

- 1) середня швидкість групи частинок розчиненої речовини є дійсною швидкістю фільтрації, яка приблизно дорівнює швидкості фільтрації, що поділена на пористість середовища;
- 2) макроскопічне пористе середовище є суцільним, тобто будь-який нескінченно малий елемент пористого середовища містить як тверду фазу, так і порожнечі;

3) концентрація є двічі диференційованою функцією в будь-якій точці простору.

Фільтрація розчиненої речовини у пористому середовищі описується сукупністю рівнянь фільтрації рідини, руху частинок речовини, розчиненої в цій рідині, а також рівняння, що описує процеси масообміну між рідиною і пористим середовищем, крізь яке вона фільтрується. Перенос маси в пористому середовищі спричиняється багатьма фізичними процесами, головними з яких є конвективний перенос, молекулярна дифузія і конвективна дифузія.

Конвективний перенос — це рух частинок розчиненої речовини, обумовлений потоком рідини. Він є найсуттєвішим фізичним процесом підземного масопереносу. Головним параметром, який характеризує конвективний перенос, є швидкість фільтрації рідини.

Молекулярна дифузія — це зміна концентрації розчиненої речовини внаслідок існування градієнта концентрації. Вона описується законом Фіка:

$$q_n = -D_M \frac{\partial c}{\partial n}, \quad (1.1)$$

де q_n — дифузійний потік в напрямку \vec{n} , $\frac{\partial c}{\partial n}$ — похідна від об'ємної концентрації мігранта в розчині за напрямком \vec{n} , D_M — коефіцієнт молекулярної дифузії в пористому середовищі.

Конвективна дифузія, або гідродинамічна дисперсія — це механічне розсіювання розчиненої речовини при фільтрації крізь пористе середовище. Конвективна дифузія також описується законом Фіка (1.1), але коефіцієнт конвективної дифузії залежить від швидкості фільтрації. Ураховуючи молекулярну дифузію, коефіцієнт

конвективної дифузії можна записати в такий спосіб:

$$D_L = D_M + \alpha_L v, D_T = D_M + \alpha_T v, \quad (1.2)$$

де D_L — коефіцієнт поздовжньої конвективної дифузії, D_T — коефіцієнт поперечної конвективної дифузії, v — модуль швидкості фільтрації, α_L, α_T — поздовжня і поперечна дисперсивність пористого середовища.

Рух розчиненої речовини внаслідок конвективного переносу, молекулярної дифузії і гідродинамічної дисперсії описується таким виразом:

$$u_i = v_i c - D_i \frac{\partial c}{\partial x_i}, \quad i=1,2, \quad (1.3)$$

де u_i — компоненти масової швидкості частинок розчиненої речовини; v_i — компоненти швидкості фільтрації рідини; x_i - декартові координати; c — об'ємна концентрація речовини в розчині.

На підземний масоперенос також впливають фізико-хімічні процеси взаємодії розчину із пористим середовищем, крізь яке фільтрується рідина. Ці процеси в цілому можуть бути описані через адсорбцію, тобто зв'язування частинок розчиненої речовини пористим середовищем, і десорбцію, тобто вивільнення частинок речовини із пористого середовища в розчин.

Позначимо через N кількість сорбованої речовини на одиницю об'єму пористого середовища. Рівняння балансу маси розчиненої речовини для елементарного об'єму пористого середовища приводить до рівняння масопереносу

$$\sum_{i=1}^2 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial (mc)}{\partial t} = 0, \quad (1.4)$$

де t — час, m — пористість. Додаючи в (1.4) рівняння хімічної кінетики, що описує адсорбцію-десорбцію, в загальному вигляді

$$\frac{\partial N}{\partial t} = f(c, N),$$

отримаємо класичне рівняння конвективної дифузії, яке описує перенос розчиненої речовини у пористому середовищі

$$\frac{\partial(mc)}{\partial t} = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - v_i c \right) - f(c, N). \quad (1.5)$$

Класичне рівняння масопереносу розглядається разом з відповідними крайовими та початковою умовами:

- 1) крайові умови першого роду (умови Діріхле) описують значення, що набуває концентрація на межі області $\partial\Omega$:

$$c|_{\partial\Omega} = g(x, t), x \in \partial\Omega; \quad (1.6)$$

- 2) крайові умови другого роду (умови Неймана) задають значення потоку маси вздовж зовнішньої нормалі до межі області:

$$\left. \frac{\partial c}{\partial n} \right|_{\partial\Omega} = q(x, t), x \in \partial\Omega; \quad (1.7)$$

- 3) масообмін через межу області описується крайовими умовами третього роду (умова Ньютона)¹:

$$\left(D_i \frac{\partial c}{\partial n} - v_i c \right) \Big|_{\partial\Omega} = Q(x, t), x \in \partial\Omega; \quad (1.8)$$

Початкова умова задає розподіл концентрації в області на момент часу t_0 :

$$c(x, t_0) = c_0(x), x \in \partial\Omega. \quad (1.9)$$

Математична модель як початкова-крайова або інша задача може бути самостійним об'єктом дослідження.

¹ У закордонній літературі іноді вживається термін "умова Робіна" [див. Флетчер].

Основними питаннями, які досліджуються за допомогою математичної моделі, є існування на єдиність її розв'язку, властивості її розв'язків тощо. Ці проблеми належать до галузі якісної теорії диференціальних рівнянь у часткових похідних, інтегральних рівнянь тощо.

Класифікація математичних моделей є неоднозначною і залежить від обраного критерію. Зокрема, вирізняють лінійні і нелінійні, зосереджені і розподілені, детерміновані і стохастичні, статичні і динамічні, дискретні і неперервні, прямі і обернені тощо. Ця термінологія більшою частиною є очевидною і пояснення може бути лише тавтологічним. Біль-менш неочевидним є різниця між прямими і оберненими, а також між зосередженими і розподіленими моделями.

Приклад 1.2. Обернена задача масопереносу.

Математична модель, що була описана у прикладі 1.2, є *прямою*, тому що вона дозволяє обчислити розподіл концентрації речовини у заданій області у заданий момент часу при заданих початковій і крайовій умові. Тепер уявімо собі що в деякий момент часу ми спостерігаємо певний розподіл концентрації і ставимо питання: як він міг утворитися. Для того щоб відповісти на нього, питання слід конкретизувати, тобто уточнити вид джерел, з яких може зв'язуватися речовина. Припустимо, що це точкові джерела. Отже, задача зводиться до визначення потужності (і можливо координат) точкових джерел, з яких фільтрується речовина. Така задача, виникає, наприклад, при ідентифікації джерел забруднення підземних вод, а також при побудові оптимальної схеми хіміотерапії злоякісних пухлин.

Розглянемо задачу ідентифікації точкових джерел забруднюючих речовин у підземних водах.

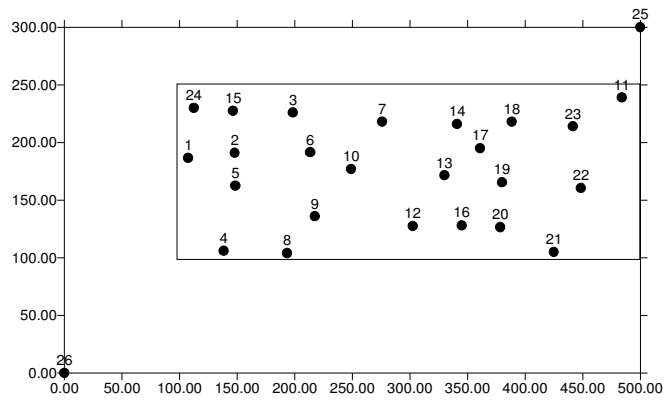


Рис.1. Майданчик і контрольні свердловини

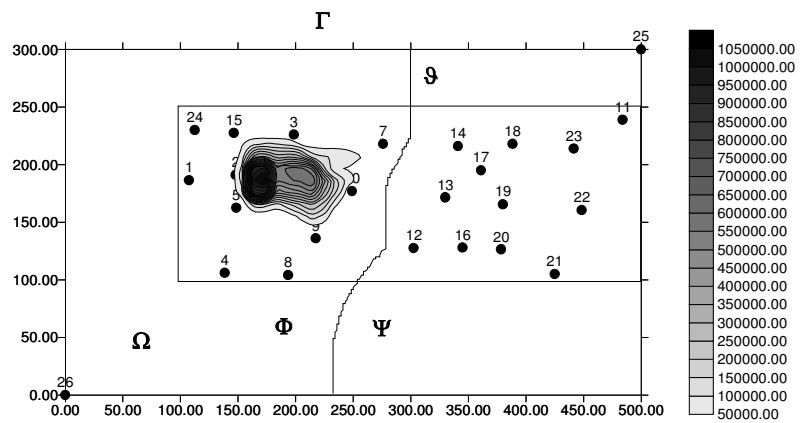


Рис.2. Прогнозний розподіл концентрації тритію.

Пряма задача полягає у обчисленні розподілу концентрації речовини $u(x,t)$ у підземних водах (рис. 1.1 і 1.2) в двовимірній області

$$\Omega = \{(x_1, x_2) : 0 \leq x_1 \leq l_1, 0 \leq x_2 \leq l_2\}$$

за нестационарним параболічним рівнянням другого порядку

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(D_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} \right) - \sum_{\alpha=1}^2 v_\alpha \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} + \sum_{\beta=1}^p \delta(x - r_\beta) q_\beta(t), \quad (1.10)$$

$$x \in \Omega, 0 < t \leq T,$$

граничних умов

$$u(x,t) = 0, \quad x \in \Gamma, \quad 0 < t \leq T. \quad (1.11)$$

і початкової умови

$$u(x,0) = 0, \quad x \in \Omega. \quad (1.12)$$

Припустимо, що додаткова інформація полягає в значеннях функції $u(x,t)$ в окремих точках $z_m \in \Omega, m=1, \dots, M$. В ідеалі ця інформація повинна бути відомою у кожній точці і в кожний момент часу, але на практиці концентрація речовини вимірюється в контрольних свердловинах з координатами $z_m \in \Omega, m=1, \dots, M$ через певні проміжки часу. На основі цих вимірювань методами регресійного аналізу будують залежності $\varphi_m(t), m=1, \dots, M$, які описують зміну концентрації трітій в контрольних свердловинах в часі. Отже, можна покласти із урахуванням похибки вимірювань та екстраполяції

$$u(z_m, t) \approx \varphi_m(t), \quad m=1, \dots, M, \quad 0 < t \leq T. \quad (1.13)$$

Точки $r_\beta, \beta=1, \dots, p$ — координати джерел, потужності яких $q_\beta(t)$ є невідомими. Область Ω розділяється лінією ϑ на дві підобласті Φ і Ψ , які мають різні фільтраційні

властивості, скажімо, глина і пісок (при моделюванні переносу ліків у злоякісних пухлинах ці області можуть відповідати некротичному ядру і раковим клітинам). Отже, функції $D_\alpha \geq -_0 > 0$, $\alpha = 1, 2$ можуть мати розрив на лінії ϑ .
Обернена задача полягає у визначенні $q_\beta(t)$, $\beta = 1, \dots, p$ із крайової задачі (1.10)-(1.12) і додаткових вимірювань (1.13).

Оскільки в задачу (1.10)–(1.12) входять лише лінійні рівняння і умови, модель в прикладі 1.2 є *лінійною*; оскільки стан системи описується неперервною функцією (розподілом концентрації), модель є *розподіленою* і *неперервною*; оскільки в моделі немає випадкових величин, вона є *детермінованою*; оскільки стан змінюється в часі, модель є *динамічною*; оскільки параметри моделі (потужність точкових джерел) визначаються за вхідними даними про стан моделі, вона є *оберненою*.

Розв'язати таку модель аналітично (тобто знайти формули, які б дозволяли записати розв'язок задачі у явному вигляді через елементарні або спеціальні функції) можна лише в окремих, сильно спрощених випадках. З цієї причини головним чином для розв'язання поставлених задач на основі математичних будуються комп'ютерні моделі.

Комп'ютерна модель — це комп'ютерна програма, що працює на окремому комп'ютері або на сукупності комп'ютерів і здійснює алгоритмічний опис стану системи на підставі її математичної моделі.

Основними етапами комп'ютерного моделювання є:

- 1) виявлення основних елементів системи та процесів, що лежать в її основі (в прикладах 1.1 і 1.2 цими складовими були: пористе середовище та його фізико-механічні властивості, розчинна речовина та її фізико-

- хімічні властивості; область розв'язання та її фізичні (пористість, коефіцієнт фільтрації тощо) і геометричні (розмір) властивості, джерела (їх геометричний характер), а також процеси конвективного переносу, молекулярної та гідродинамічної дифузії);
- 2) побудова математичної моделі (формулювання прямої і оберненої задачі);
 - 3) побудова алгоритма (вибір методу дискретизації, вибір методу розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь тощо);
 - 4) розробка програми;
 - 5) планування і проведення комп'ютерних експериментів (найімовірніший сценарій, найкращий і найгірший сценарії, особливі ситуації);
 - 6) аналіз та інтерпретація результатів (прогноз, практичні рекомендації).

З огляду на цифрову природу сучасних комп'ютерів, комп'ютерне моделювання носить, головним чином, дискретний характер, а системи, що виникають в результаті цього процесу, як правило, є розрідженими (слабко заповненими).

Висновок. Основною складовою комп'ютерного моделювання є дискретизація моделі, тобто побудова і розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь, розв'язки яких дозволяють визначити стан системи отже слід зосередити увагу на вивченні методів дискретизації (метод скінчених різниць, метод зважених нев'язок, метод скінчених об'ємів, спектральний метод), а також технологічних питаннях, пов'язаних із розв'язанням розріджених систем лінійних алгебраїчних рівнянь великої розмірності.

Література

1. Мышкис А. Д. Элементы теории математических моделей. — 3-е изд., испр. — М.: КомКнига, 2007. — 192 с.
2. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры. — 2-е изд., испр. — М.: Физматлит, 2001.
3. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. В 2-х т. . — М.: Мир, 1991.