

С.Н. ИВАНОВ, В.Б. ТАРАНЧУК

О ПРОГРАММНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ В СИСТЕМЕ *Mathematica* АТЛАСА АНАЛИТИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ ЗАДАЧ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА

Instruments, architecture and implementation of the package of intellectual modules **MonSol_HTM1**, which were created based on computer technical system *Mathematica*, are described. Program allows creating, analysis and monitoring analytical solutions of heat-mass transfer equations with different initial and boundary conditions. In describing package unified series of accurate and approximate analytical solutions is built.

Прямые задачи теории тепло- и массопереноса сводятся к интегрированию дифференциальных уравнений с частными производными при определенных начальных и граничных условиях. Наиболее типичным для данной теории является уравнение, которое в математической физике известно как уравнение теплопроводности. Основные определяющие коэффициенты: удельная теплоемкость, плотность материала, коэффициент теплопроводности. Решения уравнения теплопроводности при различных начальных и граничных условиях для наиболее типичных задач даны в справочнике А.В. Лыкова ([1]). Но в настоящее время нет электронного банка аналитических решений, универсального механизма их получения. Именно разработке унифицированного ряда точных и приближенных аналитических решений, единого подхода к их получению, графической и табличной визуализации с использованием программной платформы системы компьютерной алгебры посвящена настоящая работа.

Обсуждаются инструментарий, архитектура и реализация пакета интеллектуальных модулей **MonSol_HTM1**, разработанного с использованием компьютерной технической системы (КТС) *Mathematica*, которая обеспечивает построение, анализ и мониторинг аналитических решений уравнения теплопроводности при различных начальных и граничных условиях. Средствами пакета могут быть получены в символьном виде и/или иллюстрированы графиками решения типичных задач тепло- и массопереноса в почвогрунтах, в том числе задачи промерзания влажного грунта с учетом его деформации ([2]). Примером может служить следующая унифицированная постановка задачи и ее обобщенное аналитическое решение:

$$\frac{\partial T^*(x, \tau)}{\partial \tau} = a^* \frac{\partial^2 T^*(x, \tau)}{\partial x^2} \quad (\tau > 0, 0 < x < \xi), \quad (1)$$

$$\frac{\partial T(x, \tau)}{\partial \tau} = a \frac{\partial^2 T(x, \tau)}{\partial x^2} \quad (\tau > 0, \xi < x < \infty), \quad (2)$$

$$T(x, 0) = f(x), \quad (3)$$

$$\gamma \cdot H \cdot T(0, \tau) - \eta \frac{\partial T(0, \tau)}{\partial x} = H \cdot T_C, \quad (4)$$

$$T(\infty, \tau) = T_0, \quad \frac{\partial T(\infty, \tau)}{\partial x} = 0, \quad (5)$$

для $\xi=0$

$$\begin{aligned} T(x, \tau) = & (1 - \gamma) \left[T_0 + 2 \cdot H \cdot T_C \cdot \sqrt{a \cdot \tau} \cdot \operatorname{ierfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot \tau}} \right) \right] + \\ & + \gamma \cdot \eta \left[T_0 + (T_C - T_0) \times \right. \\ & \left. \times \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot \tau}} \right) - e^{H \cdot x + H^2 \cdot a \cdot \tau} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot \tau}} + H \cdot \sqrt{a \cdot \tau} \right) \right] \right] + \\ & + \gamma \cdot (1 - \eta) \left[T_C + \frac{1}{2\sqrt{\pi \cdot a \cdot \tau}} \int_0^\infty (f(\varepsilon) - T_C) \cdot \left(e^{-\frac{(x-\varepsilon)^2}{4 \cdot a \cdot \tau}} - e^{-\frac{(x+\varepsilon)^2}{4 \cdot a \cdot \tau}} \right) d\varepsilon \right]. \end{aligned}$$

При значениях $\xi=0$, $\gamma=1$, $\eta=0$ уравнение (1) будет исключено из постановки (1) – (5), и получаем задачу с граничными условиями первого рода, известное ([1]) решение которой имеет вид

$$T(x, \tau) = T_C + \frac{1}{2\sqrt{\pi \cdot a \cdot \tau}} \int_0^\infty (f(\varepsilon) - T_C) \cdot \left(e^{-\frac{(x-\varepsilon)^2}{4 \cdot a \cdot \tau}} - e^{-\frac{(x+\varepsilon)^2}{4 \cdot a \cdot \tau}} \right) d\varepsilon. \quad (6)$$

При значениях $\xi=0, \gamma=0, \eta=1$ и $f(x)=T_0$ получаем задачу с граничными условиями второго рода, известное ([1]) решение которой записывается

$$T(x, \tau) = T_0 + 2 \cdot H \cdot T_C \cdot \sqrt{a \cdot \tau} \cdot \operatorname{ierfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot \tau}}\right).$$

При значениях $\xi=0, \gamma=1, \eta=1$ получаем задачу с граничными условиями третьего рода, решение которой известно ([1]):

$$T(x, \tau) = T_0 + (T_C - T_0) \times \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot \tau}}\right) - e^{H \cdot x + H^2 \cdot a \cdot \tau} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot \tau}} + H \cdot \sqrt{a \cdot \tau}\right) \right].$$

Для $\xi \neq 0, \gamma=1, \eta=0$ и $f(x)=T_0$ с дополнительными условиями

$$\begin{aligned} T^*(\xi, \tau) &= T(\xi, \tau) = T_3 = \text{const}, \\ \lambda^* \frac{\partial T^*(\xi, \tau)}{\partial x} - \lambda \frac{\partial T(\xi, \tau)}{\partial x} &= Q \cdot W \cdot \rho \cdot \frac{\partial \xi}{\partial \tau}, \\ \xi &= \beta \cdot \sqrt{\tau} \end{aligned} \tag{7}$$

из постановки (1) – (5) получаем задачу промерзания/оттаивания влажного грунта ([2]). Пример аналитического решения:

$$T(x, \tau) = \begin{cases} T_C + (T_3 - T_C) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a^* \tau}}\right) / \operatorname{erf}\left(\frac{\beta}{2\sqrt{a^*}}\right), & x \leq \beta \cdot \sqrt{\tau}, \\ T_0 - (T_0 - T_3) \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a \tau}}\right) / \operatorname{erfc}\left(\frac{\beta}{2\sqrt{a}}\right), & x > \beta \cdot \sqrt{\tau}, \end{cases} \tag{8}$$

где β находится из решения уравнения

$$\frac{\lambda^* \cdot (T_3 - T_C)}{\sqrt{a^*} \cdot \operatorname{erf}(\beta / 2\sqrt{a^*})} e^{-\frac{\beta^2}{4a^*}} - \frac{\lambda \cdot (T_0 - T_3)}{\sqrt{a} \cdot \operatorname{erfc}(\beta / 2\sqrt{a})} e^{-\frac{\beta^2}{4a}} = \frac{Q \cdot W \cdot \rho \cdot \sqrt{\pi}}{2} \beta. \tag{9}$$

Необходимыми составляющими вычислительного эксперимента являются графическая визуализация, создание и сопровождение базы знаний получаемых результатов. Для реализации мониторинга решений выбрана именно КТС *Mathematica*, которая, как и другие компьютерные системы, поддерживает Windows-подобный интерфейс, содержит средства программирования специальных алгоритмов и инструменты создания интерактивных диалогов.

Формируемые аналитические решения сгруппированы в классы по типу граничных условий и наличию фазовых переходов. Решения включают интегралы от функций начального распределения и граничных условий. Как правило, решения в пакете представляются суммами функциональных рядов или специальными функциями ([3]). Такой формат представления позволяет получить аналитические решения рассматриваемых классов задач для любых начальных и граничных условий, лишь заменяя соответствующие функции в обобщенной форме аналитического решения. Сложные преобразования и выводы формул выполняются в пакете и реализованы функциями ядра КТС, что освобождает пользователя от громоздких вычислений, появления случайных ошибок при выводе формул.

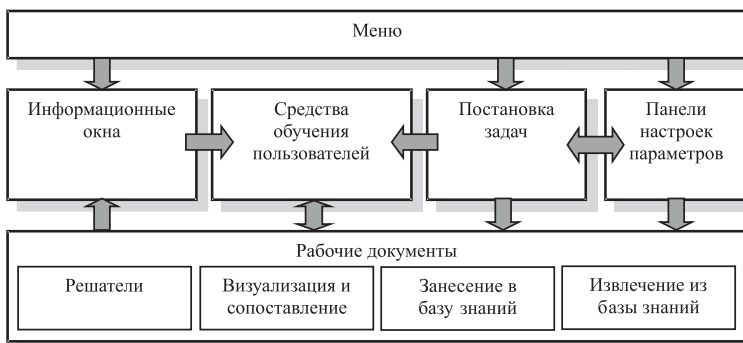


Рис. 1. Структурная схема интерфейсной оболочки пакета

Пакет *MonSol_HTM1* предоставляет собой удобный пользовательский интерфейс, который включает в себя меню, панели настроек параметров, информационные окна, средства обучения пользователя и рабочие документы ([4]). Структуру пакета можно представить в виде взаимосвязанных блоков (рис. 1).

Все модули пакета имеют интуитивно понятный интерфейс, который не требует от пользователя дополнительных навыков работы с электрон-

ными документами. Главное меню обеспечивает удобный доступ ко всем компонентам пакета. Настройка параметров производится с нескольких панелей: изменения параметров уравнения теплопроводности и граничных условий, управления дискретизацией расчетов, управления графической визуализацией. Информационные окна содержат поля с условными обозначениями и таймером.

Разработанные инструменты и база знаний обучения предоставляют пользователю для каждой задачи: краткое пояснение с описанием физического смысла возможных граничных условий, постановку задачи и обобщенное аналитическое решение в традиционной математической нотации. Иллюстрация динамики процесса распространения тепла и влаги (расчет решения и графическая визуализация) может быть получена нажатием соответствующей кнопки в рабочем документе. Начальное распределение в области определения решения может задаваться как постоянное и в виде функции от координаты. Причем в таких случаях функция записывается в виде, максимально близком к тому, как она представлена в математической литературе. Например, начальное распределение для полуограниченного тела в пакете определяется как $f[x_] := 2 + 1 / \text{Cos} \left[\left(\frac{\pi}{2} \right) \frac{x}{R} \right] e^{-\left(\frac{\pi}{2} \right)^2}$. Потоки на границах также

могут задаваться постоянными или функциями времени, например: $q[\tau_] := 1 - \frac{2}{(\pi n)^2} \text{Sin} \left[\frac{\pi n \tau}{R} \right]$.

При программировании пакета были использованы следующие встроенные функции системы *Mathematica*, которые можно разделить на группы.

Решение уравнений и систем уравнений

FindRoot [*lhs==rhs*, {*x*, *x0*}] – находит численное решение уравнения *lhs==rhs*, если для переменной *x* выбрано начальное приближение *x0*;

Solve [*eqns*, *vars*, *elims*] – пытается решать уравнения *eqns* по переменным *vars*, исключая переменные *elims*;

Nsolve [*eqns*, *vars*, *elims*] – пытается численно решить уравнения *eqns* относительно переменных *vars*, исключая переменные *elims*. С этой функцией используется единственная опция *WorkingPrecision*, задающая число верных цифр результата;

NDSolve [*eqns*, {*y1*, *y2*, ...}, {*x*, *xmin*, *xmax*}] – дает решение задачи Коши для системы дифференциальных уравнений *eqns* относительно функций *y1*, *y2*, ... независимой переменной *x* в интервале от *xmin* до *xmax*. Первый аргумент (список) включает как сами дифференциальные уравнения, так и начальные условия. Результатом вычисления является интерполирующая функция, с помощью которой можно найти значения приближенного решения в любой точке указанного интервала.

Списки и матрицы

Table [*expr*, *n*] – список из *n* значений одного и того же выражения *expr*;

Table [*expr*, {*i*, *m*, *n*, *d*}] – список значений выражения *expr*, зависящего от параметра *i*, для *i* от *m* до *n* с шагом *d*;

Table [*expr*, {*i*, *m1*, *n1*}, {*j*, *m2*, *n2*}, ...] – порождает многоуровневые списки, используется для создания числовых таблиц.

Алгебраические преобразования

Simplify [*expr*] – приводит выражение *expr* к простейшей форме;

ReplaceAll (*expr* /. *rules*) – применяет правило или набор правил *rules* для преобразования каждой части выражения *expr*.

Графика

Plot [{*f1*, *f2*, ...}, {*x*, *xmin*, *xmax*}, *optns*] – предназначена для построения графиков функций $y = f_1(x)$, $y = f_2(x)$, ... при изменении независимой переменной *x* в пределах от *xmin* до *xmax*. При этом используется прямоугольная (декартова) система координат. Необязательные аргументы *optns* (опции), общие и для других графических функций, служат для настройки вида графиков. Если опции не указаны, то их стандартные значения устанавливаются автоматически;

ListPlot [*lst*, *optns*] – предназначена для построения графика по точкам. В общем случае аргумент *lst* представлен списком {{*x1*, *y1*}, {*x2*, *y2*}, ...}, где (*x1*, *y1*), (*x2*, *y2*), ... – координаты отмечаемых точек.

Если требуется соединять точки на графике отрезками прямых, то нужно установить дополнительную опцию *PlotJoined* → *True*. Для управления размером точек используется директива *PointSize*, а не *Thickness*, как для линий;

GraphicsArray [*lst*] – позволяет разместить в одном графическом окне на экране сразу несколько графиков, которые можно расположить в одну строку или в виде таблицы. Здесь *lst* – линейный или двухуровневый список, который группирует графические объекты;

Show [$\{plot_1, plot_2, \dots\}, opns$] – совмещает в одном графическом окне несколько графиков. Функция полезна в тех случаях, когда желательно, не вычисляя заново исходные графики $plot_1, plot_2, \dots$, просмотреть их при иных настройках опций $opns$ или сопоставить.

Программирование

For [$start, test, incr, body$] – цикл с параметром. Выражения $start$ и $body$ записываются в виде последовательности операторов, разделенных знаком «;» (точка с запятой). Сначала один раз вычисляется выражение $start$ (начальные действия). Если справедливо условие $test$, зависящее от параметра цикла, то вычисляются выражения $body$ (тело цикла) и $incr$ (приращение параметра), и все повторяется. В цикле **For** нельзя задать локальные переменные;

If [$test, expr_1, expr_2$] – определяет выбор и вычисление выражения. Сначала вычисляется логическое выражение $test$. Если получено значение *True*, то вычисляется выражение $expr_1$, в противном случае вычисляется выражение $expr_2$;

While [$test, body$] – цикл с условием. Выражение $body$ (тело цикла) записывается в виде последовательности операторов, разделенных знаком «;» (точка с запятой). Цикл может оказаться бесконечным, если условие $test$ никогда не выполняется;

Evaluate [$expr$] – выполняет вычисление выражения $expr$, подставляя все входящие в него аргументы, функции.

Управление рабочими тетрадями

NotebookCreate [] – создает и отображает на экране новую рабочую тетрадь;

NotebookWrite [$notebook, data$] – записывает данные $data$ в заданную рабочую тетрадь $notebook$.

Работа с файлами

InputString [] – предлагает пользователю диалог для ввода;

Put [$expr_1, expr_1, \dots, "filename"$] – записывает последовательность выражений $expr_i$ в файл.

Примером построения в пакете **MonSol_HTM1** решения для названной ранее задачи промерзания/оттаивания влажного грунта (1) – (5), (7) – (9) служит следующая конструкция: строим обобщенную функцию для решения

$$T[x, \tau, a_1, a_2, \beta, T_s, T_0, T_c] :=$$

$$\text{If}[x \leq \beta\sqrt{\tau}, T_c + (T_s - T_c) \text{Erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{a_1\tau}}\right] / \text{Erf}\left[\frac{\beta}{2\sqrt{a_1}}\right],$$

$$T_0 - (T_0 - T_s) \text{Erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{a_2\tau}}\right] / \text{Erf}\left[\frac{\beta}{2\sqrt{a_2}}\right]]$$

находим значение для β при помощи встроенной функции **FindRoot**

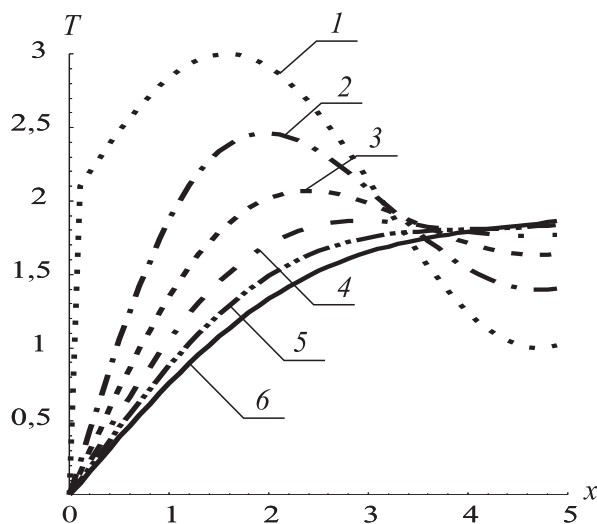


Рис. 2. Графики зависимости температуры от координаты в разные моменты времени τ , построенные для решения, описываемого формулой (7) при значениях констант $a=0,0001, T_c=0$ и начальном распределении $f(x)=2+\sin(x)$.
 τ : 1 – 0, 2 – 5000, 3 – 10 000, 4 – 15 000, 5 – 20 000, 6 – 25 000

$$\beta = \beta . \text{FindRoot}\left[\frac{\lambda_1 (T_s - T_c)}{\sqrt{a_1} \text{Erf}\left[\frac{\beta}{2\sqrt{a_1}}\right]} \text{Exp}\left[\frac{\beta^2}{4a_1}\right] - \frac{\lambda_2 (T_0 - T_s)}{\sqrt{a_2} \text{Erfc}\left[\frac{\beta}{2\sqrt{a_2}}\right]} \text{Exp}\left[\frac{\beta^2}{4a_2}\right] = \frac{QW\rho\sqrt{\pi}}{2} \beta, \{\beta, 0.02\}\right]$$

для одного из полученных значений $\beta=0.01989$ решение будет записано

$$\text{If}[x \leq 0.01989\sqrt{\tau}, -3 + 8.735 \text{Erf}\left[\frac{15.877x}{\sqrt{\tau}}\right],$$

$$5 - 9.444 \text{Erfc}\left[\frac{22.361x}{\sqrt{\tau}}\right]]$$

Трудная, математически емкая часть работы – формирование аналитических точных или приближенных решений, но не менее важной частью является визуализация этих решений и представление их в виде, иллюстрирующем качественные особенности и одновременно дающем количественные характеристики. Так, по полученным пакетом **MonSol_HTM1** решениям на экран выводятся графики распределения температуры в любой заданный момент времени (рис. 2) или в гра-

фическом окне показывается эволюция решений с отображением профилей температуры через заданные пользователем дискреты времени (на выбранном временном промежутке с указанным шагом). После отображения графика аналитического решения выводится само решение, преобразованное с учетом формы начального распределения, потока на границе и параметров задачи.

Подсистема пакета по настройке параметров расчета и отображения результатов обеспечивает пользователя удобными инструментами задания определяющих функций уравнений и точек, в которых предполагается осуществить вывод решения (по координате, по времени). Причем при первоначальной загрузке пакета параметры уже проинициализированы некоторыми значениями по умолчанию. Также система выполняет проверку корректности вводимых значений параметров на физическую непротиворечивость (условия хранятся в базе знаний в виде соответствующих регламентных диапазонов). Способ преобразования и упрощения обобщенного аналитического решения зависит от конкретного типа задачи и определяется параметрами уравнений – в пакете запрограммированы основные варианты.

В пакете реализован механизм сопоставления получаемых аналитических решений одной и той же задачи для различных параметров.

Все получаемые результаты могут быть сохранены как таблицы в виде текстового файла, так и в виде блокнотов КТС *Mathematica* и использованы в будущем для отображения или сравнения с другими решениями.

Описанный пакет используется в учебном процессе, так как содержит необходимые описания физических и математических постановок задач, методов их решения, пояснения применяемых функций, опций, директив.

1. Лыков А. В. Теория теплопроводности. М., 1967.

2. Бровка Г. П. Тепло- и массоперенос в природных дисперсных системах при промерзании. Мн., 1991.

3. Морозов А. А., Таранчук В. Б. Программирование задач численного анализа в системе Mathematica: Учеб. пособие. Мн., 2005.

4. Иванов С. Н., Таранчук В. Б. // Дифференциальные уравнения и системы компьютерной алгебры. (DE&CAS'2005)=Differential equations and computer algebra systems (DE&CAS'2005): Материалы Междунар. конф., г. Брест, 5–8 окт. 2005 г.: в 2 ч. Мн., 2005. Ч. 1. С. 297.

Поступила в редакцию 22.02.07.

Сергей Николаевич Иванов – ведущий инженер-программист СП ЗАО «Международный деловой альянс».

Валерий Борисович Таранчук – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой информационного и программно-математического обеспечения автоматизированных производств.