13 МОДЕЛІ ОКРЕМИХ КЛАСІВ СИСТЕМ

Наразі математичне моделювання є невід'ємною частиною процесів проектування та дослідження різноманітних об’єктів і систем. Для кожного типу систем найхарактернішими є певні типи моделей.

13.1 Моделі фізичних процесів в технологічних об’єктах

Найскладнішою задачею у моделюванні систем є створення моделей об’єктів управління. Передусім це зумовлено їх розмаїттям, оскільки об’єктом управління може бути будь-який об’єкт навколишнього світу – від атома до планети, від хаотичної плазми до живої істоти. Але без моделі об’єкта управління неможливо здійснити аналіз і синтез системи управління, отже, хоча задача і важка, але розв’язувати її необхідно.

Об’єкти управління в цілому можна розділити на природні, технічні, біологічні, інтелектуальні, соціальні, виробничі та організаційні. Відповідно моделі об’єктів ґрунтуються на різних законах природи, техніки і суспільства.

13.1.1 Фізичні процеси в об’єктах керування

Більшість об’єктів управління відносять до класу природних та технічних. Їх моделі ґрунтуються, передусім, на відомих фізичних законах і явищах. Загалом, відповідно до прийнятої у фізиці класифікації, фізичні процеси можна розділити на типи:

- механічні;
- теплові;
- електричні;
- електромагнітні;
- оптичні;
- квантові.

Разом з тим слід відзначити, що усі ці типи процесів тісно пов’язані і, залежно від рівня розгляду (макрорівень або макрорівень), моделі одних і тих самих процесів можуть бути віднесені до різних типів. Так наприклад, теплові макропроцеси є механічним рухом часток на мікрорівні, макроскопічні електромагнітні хвилі викликаються нерівномірним рухом електронів на мікрорівні, оптичні явища можуть розглядатися і як електромагнітні процеси, і як квантові тощо.

13.1.2 Закони збереження як фундаментальні моделі фізичних процесів

Закони збереження в природі відіграють особливу роль. Вони є відправною точкою як для отримання моделей фізичних об'єктів і процесів, так і для перевірки адекватності одержаних результатів моделювання. До законів збереження у фізиці відносять: закон збереження енергії, імпульсу, моменту імпульсу, заряду та деякі інші.

Закони збереження дозволяють скласти певну кількість рівнянь, які можуть використовуватися як фундаментальні моделі фізичних процесів у технологічних об'єктах. Загальна структура таких рівнянь має вигляд

$$\Theta_{кін} = \Theta_{поч} + \Theta_{зовн}, \qquad (13.1)$$

де $\Theta_{кін}$ – характеристика, яка зберігається (наприклад, енергія або заряд), наприкінці процесу; $\Theta_{поч}$ – характеристика, яка зберігається, на початку процесу; $\Theta_{зовн}$ – зміна характеристики, зумовлена зовнішнім впливом, та ілюструється схемою рис. 13.1.

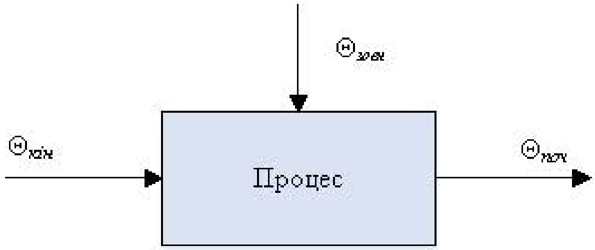


Рисунок 13.1 – Загальна схема збереження характеристик у фізичних процесах

Угорська вчена Е. Нетер довела, що за кожним із законів збереження стоїть деяка *симетрія*. У фізиці загальноприйнято виділяти дві форми симетрії: *геометричну* та *динамічну*. Симетрії, що виражають властивість простору і часу, відносять до геометричної форми симетрії, наприклад, однорідність простору і часу, ізотропність простору, просторова парність, еквівалентність інерціальних систем відліку. Простір має групу симетрії відносно довільних переносів за трьома взаємно перпендикулярними напрямами і відносно поворотів координатних систем. Симетрію щодо поворотів називають "ізотропія", переносів – "однорідність".

Час задається однією величиною, а не трьома. Симетрія часу полягає в його однорідності, тобто всі його моменти рівносильні, принаймні щодо суто механічних явищ. Закони механіки повністю симетричні щодо минулого і майбутнього.

Симетрії, що безпосередньо не пов'язані з властивостями простору і часу, а виражають властивості певних фізичних взаємодій, відносять до динамічної форми симетрії. Взагалі до динамічної симетрії відносять симетрії внутрішніх властивостей об'єктів і процесів. Прикладами динамічних симетрій є симетрія електричного заряду.

У спрощеному формулюванні теорема Е. Нетер свідчить, що якщо властивості системи не змінюються від будь-якого перетворення змінних, то цьому відповідає деякий закон збереження. Так, наприклад, інваріантність щодо зсувів часу (що відповідає однорідності часу) тягне за собою, за теоремою Е. Нетер, закон збереження енергії. З однорідності простору (інваріантності відносно просторових зсувів) випливає закон збереження імпульсу. Подібним же чином з ізотропності простору (тобто рівноцінності всіх просторових напрямів і пов'язаної з цим інваріантності дії щодо обертання системи координат в просторі) випливає закон збереження моменту.

Таким чином, з фізичного уявлення про однорідність та ізотропність простору-часу випливає, що для будь-якої замкненої системи повинні існувати сім фундаментальних величин, що зберігаються: енергія, компоненти імпульсу (три величини) і моментів (три величини).

При наявності в системі симетрій іншого роду (не пов'язаних з простором-часом) теорема Е. Нетер дозволяє побудувати й інші закони збереження.

13.1.3 Рівняння Максвелла

Рівняння Максвелла – це основні рівняння класичної електродинаміки, що описують розповсюдження електромагнітного поля і його взаємодію з зарядами і струмами. Серед технологічних об'єктів, які використовують електромагнітні поля і відповідні процеси, виділимо термічну обробку матеріалів у НВЧ-печах, медичні установки для магнітно-резонансної томографії, системи радіолокації, процеси плазмової обробки матеріалів тощо.

Базові рівняння Максвелла наведені у таблиці 13.1.

Таблиця 13.1 – Рівняння у загальному вигляді

Назва	**Диференціальна форма**	**Інтегральна форма**	**Приблизне формулювання**
Закон індукції Фарадея	$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -k_F \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$	$\oint\limits_{\mathbf{L}} \mathbf{E} d\mathbf{l} = -k_F \int\limits_{\mathbf{S}} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} d\mathbf{S}$	Зміна магнітної індукції породжує вихрове електричне поле
Закон Ампера (з доданком Максвелла)	$\operatorname{rot}\mathbf{H} = 4\pi k_B \mathbf{j} + \dfrac{k_B}{k_\varepsilon}\dfrac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$	$\oint\limits_{\mathbf{L}} \mathbf{H} d\mathbf{l} = 4\pi k_B \mathbf{I}_{encl} + \dfrac{k_B}{k_\varepsilon}\int\limits_{\mathbf{S}} \dfrac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} d\mathbf{S}$	Електричний струм і зміна електричної індукції породжують вихрове магнітне поле
Теорема Гауса	$\operatorname{div}\mathbf{D} = 4\pi k_\varepsilon \rho$	$\oint\limits_{\mathbf{S}} \mathbf{D} d\mathbf{S} = 4\pi k_\varepsilon Q_{encl} \phi$	Електричний заряд є джерелом електричної індукції
Теорема Гауса	$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0$	$\oint\limits_{\mathbf{S}} \mathbf{B} d\mathbf{S} = 0$	Магнітна індукція не розходиться (немає джерел).

Введені позначення:

- ρ – густина стороннього електричного заряду (в одиницях СІ – Кл/м³);
- **j** – густина електричного струму (густина струму провідності) (в одиницях СІ – А/м ²);
- **E** – напруженість електричного поля (в одиницях СІ – В/м);
- **H** – напруженість магнітного поля (в одиницях СІ – А/м);
- **D** – електрична індукція (в одиницях СІ – Кл/м²);
- **B** – магнітна індукція (в одиницях СІ – Тл = Вб/м² = кг • с$^{-2}$ • А$^{-1}$);
- Q_{encl} – електричний заряд всередині поверхні (в одиницях СІ – Кл);
- I_{encl} – електричний струм, що проходить через поверхню, викликаний рухом вільних зарядів (в одиницях СІ – А);
- k_ε, k_B, k_F – коефіцієнти, які залежать від системи одиниць;
- rot – диференціальний оператор ротора. Результатом є вектор

$$\operatorname{rot}\mathbf{F} = \nabla\times\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \times \mathbf{F} = \begin{vmatrix} e_x & e_y & e_z \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z} \\ F_x & F_y & F_z \end{vmatrix};$$

- div – диференціальний оператор дивергенції. Результатом є скаляр

$$\operatorname{div}\mathbf{F} = \nabla\bullet\mathbf{F} = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z};$$

- ***S*** – замкнена двовимірна поверхня;
- ***L*** – замкнений контур.

В системі СІ в рівняннях Максвелла коефіцієнти пропорційності перетворюються на одиниці:

$$\begin{cases} \operatorname{rot}\mathbf{H} = \dfrac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j} \\ \operatorname{rot}\mathbf{E} = -\dfrac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} \\ \operatorname{div}\mathbf{D} = \rho \\ \operatorname{div}\mathbf{B} = 0 \end{cases}. \tag{13.2}$$

Співвідношення, що зв'язують величини **j**, **H**, **D**, **E**, **B**, в яких враховуються індивідуальні властивості середовища, називаються матеріальними рівняннями.

На практиці найчастіше використовують спрощені рівняння, які враховують особливості конкретного об’єкта.

У разі слабких електромагнітних полів, які порівняно повільно змінюються в просторі і часі, а також для ізотропних, неферомагнітних і несегнетоелектричних середовищ матеріальні рівняння записуються у вигляді:

$$\begin{aligned} &\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \\ &\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \\ &\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \end{aligned} \qquad (13.3)$$

де ε – діелектрична проникність (в одиницях СІ – Ф/м), μ – магнітна проникність (в одиницях СІ – Гн/м) і σ – електропровідність середовища (в одиницях СІ – 1/(Ом • м)).

У вакуумі електрична і магнітна постійні позначаються через ε_0 і μ_0:

$$\begin{aligned} &\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} \\ &\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \end{aligned}. \qquad (13.4)$$

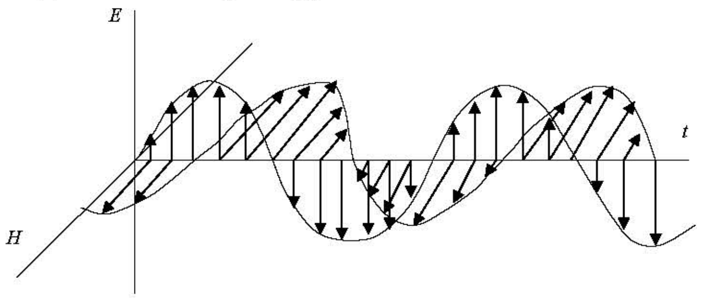
Рівняння Максвелла для вакууму без електричних зарядів і струмів:

$$\begin{aligned} &\operatorname{div} \mathbf{E} = 0 \\ &\operatorname{div} \mathbf{H} = 0 \\ &\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ &\operatorname{rot} \mathbf{H} = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned}. \qquad (13.5)$$

Ця система диференціальних рівнянь має простий розв'язок у вигляді гармонічної, плоскої хвилі (рис. 13.2.). Вектори електричного і магнітного полів перпендикулярні до напрямку розповсюдження хвилі й один до одного та знаходяться у одній фазі. Хвиля поширюється зі швидкістю:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}}. \qquad (13.6)$$

Це швидкість світла у вакуумі.



13.1.4 Рівняння Шредінгера

Рівняння Шредінгера відіграє у квантовій механіці таку ж важливу роль, як рівняння другого закону Ньютона в класичній механіці. Його можна назвати рівнянням руху квантової частинки.

Серед технологічних об’єктів, які потребують використання рівняння Шредінгера для моделювання процесів і управління ними, виділимо технологічні процеси утворення напівпровідникових структур та інші нанотехнологічні об’єкти.

Рівняння Шредінгера визначає хвильову функцію – ймовірність знаходження частинки у певному місці.

Нехай хвильова функція задана в N-вимірному просторі, тоді в кожній точці з координатами $\vec{r}(x_1, x_2, ... x_n)$ в певний момент часу t вона буде мати вигляд $\Psi(\vec{r}, t)$. Відповідно рівняння Шредінгера має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t)+E_p(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t), \qquad (13.7)$$

де $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – стала Планка; m – маса частинки; $E_p(\vec{r})$ – зовнішня, відносно частинки, потенційна енергія в точці $\vec{r}(x_1, x_2, ... x_n)$; Δ – оператор Лапласа (або лапсасіан)

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + ... + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}$$

У тривимірному випадку невідомі хвильові функції залежать від трьох координат, тоді рівняння Шредінгера прийме вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+E_p(x,y,z)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \qquad (13.8)$$

де $E_p(x, y, z)$ – потенційна енергія в точці (x, y, z).

Форма рівняння Шредінгера показує, що щодо часу його розв’язок має бути простим, оскільки час входить в це рівняння лише через першу похідну в правій частині. Дійсно, окремий розв’язок для спеціального випадку, коли E_p не є функцією часу, можна записати у вигляді:

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-\frac{2\pi i}{h}Et}, \qquad (13.9)$$

де функція $\psi(\vec{r})$ повинна задовольняти рівняння:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r})+E_p(\vec{r})\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}), \qquad (13.10)$$

яке випливає з рівняння Шредінгера (13.7) при підстановці в нього виразу (13.9). Це рівняння взагалі не містить часу – у зв'язку з цим воно називається стаціонарним рівнянням Шредінгера.

Загальне рішення є лінійною комбінацією всіх окремих розв’язків вигляду (13.9). Залежність функції $\Psi(\vec{r},t)$ від часу проста, але залежність її від координати не завжди має елементарний вигляд, вона знайдена аналітично лише для невеликої кількості окремих типів функції $E_p(\vec{r})$. Приклад розв'язання рівняння Шредінгера показаний на рис. 13.3.

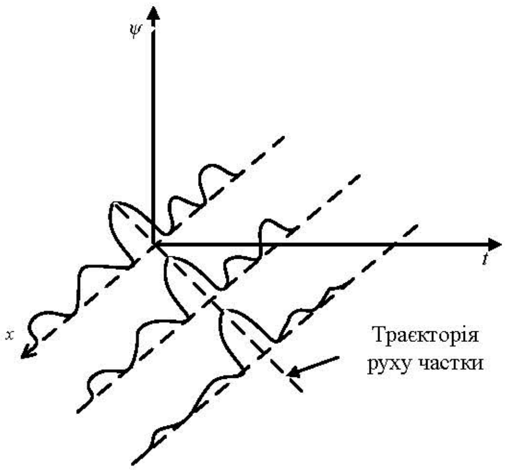


Рисунок 13.3 – Рух квантової частинки – приклад розв'язання рівняння Шредінгера

13.1.5 Рівняння дифузії і теплопровідності

Процеси дифузії і теплопровідності є основою дуже великої кількості технологічних об’єктів і процесів. Зокрема, усі процеси, що пов’язані з нагріванням (процеси зварювання, виробництво цегли, виплавлення металу тощо), описуються моделями теплопровідності. Усі хімічні процеси, а також процеси фільтрації, потребують розрахунків параметрів дифузії.

Математично рівняння дифузії і рівняння теплопровідності не розрізняються, і застосування тої чи іншої назви обмежене тільки метою.

Рівняння дифузії або рівняння теплопровідності є окремим видом диференціального рівняння в частинних похідних. Буває нестаціонарним і стаціонарним.

Найближчим аналогом рівняння дифузії є рівняння Шредінгера (13.8), яке відрізняється від рівняння дифузії відсутністю множника $i=\sqrt{-1}$ перед похідною за часом. В результаті розв’язок цього рівняння не має хвильового характеру.

Нестаціонарне рівняння дифузії (теплопровідності) класифікується як параболічне диференціальне рівняння. Воно описує поширення речовини внаслідок дифузії або перерозподіл температури тіла в результаті теплопровідності

$$q_x = \lambda\left(T_2^\circ - T_1^\circ\right).$$

У розділі 8 достатньо докладно викладено особливості отримання і розв’язання рівняння теплопровідності.

Рівняння дифузії є моделлю процесу, в якому потік речовини (або теплової енергії) пропорційний різниці концентрацій (температур) областей, розділених тонким шаром, як показано на рис. 13.4.

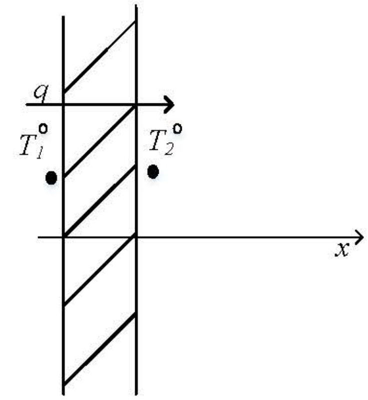


Рисунок 13.4 – Одновимірний випадок теплопровідності

У разі одновимірного дифузійного процесу з коефіцієнтом дифузії (теплопровідності) D рівняння має вигляд:

$$\frac{\partial}{\partial t}c(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left[D\frac{\partial}{\partial x}c(x,t)\right] + f(x,t). \tag{13.11}$$

При постійному D рівняння набуває вигляду:

$$\frac{\partial}{\partial t}c(x,t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}c(x,t) + f(x,t), \tag{13.12}$$

де $c(x,t)$ – концентрація речовин, які дифундують; $f(x,t)$ – функція, що описує джерела речовини (тепла).

У тривимірному випадку при постійному D рівняння набуває вигляду:

$$\frac{\partial}{\partial t}c(\vec{r},t) = D\Delta c(\vec{r},t) + f(\vec{r},t), \tag{13.13}$$

де Δ – оператор Лапласа.

У одновимірному випадку загальним розв'язком однорідного рівняння з постійним D (що не залежить від x і t) є

$$c_f(x,t)=\sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}}e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \tag{13.14}$$

при початковій умові, що виражається дельта-функцією $c_f(x,0)=\delta[x]$, і граничній умові $c_f(\infty,t)=0$.

13.1.6 Рівняння Кірхгофа

Закони Кірхгофа (чи правила Кірхгофа як окремий випадок рівнянь Максвелла) – співвідношення, які виконуються між струмами і напругами на ділянках електричного кола. Вони також при певних обмеженнях можуть застосовуватися для моделювання гідравлічних систем.

Поширеність електричних засобів у технологічних об'єктах зумовлює масове застосування законів Кірхгофа. Гідравлічні системи не так поширені, але й вони вимагають відповідних моделей, зокрема, для проектування систем тепловодопостачання.

Для формулювання законів Кірхгофа в електричному колі виділяються вузли – точки з'єднання трьох і більше провідників – і контури – замкнені шляхи з провідників. При цьому кожен провідник може входити в кілька контурів.

У цьому випадку закони такі:

1. Закон струмів Кірхгофа – алгебраїчна сума струмів у будь-якому вузлі будь-якого кола дорівнює нулю (значення струмів, які витікають, беруться із протилежним знаком).

$$\sum_{j=1}^{n} I_j = 0. \tag{13.15}$$

Якщо коло містить p вузлів, то воно описується $(p-1)$ рівнянням струмів;

2. Закон напруг Кірхгофа: алгебраїчна сума падінь напруг по будь-якому замкненому контуру кола дорівнює алгебраїчній сумі ЕРС, що діють уздовж цього ж контура.

$$\sum_{j=1}^{m} \Delta U_j = \sum_{k=0}^{l} E_k. \tag{13.16}$$

Якщо в контурі немає ЕРС, то сумарне падіння напруг дорівнює нулю.

Закони Кірхгофа справедливі для лінійних та нелінійних кіл при будь-якому характері зміни в часі струмів і напруг.

Наприклад, для наведеного на рис. 13.5 кола, відповідно до першого закону, виконуються співвідношення: