

Процеси добування металів з руд та їх послідууючої переробки до чавуну і сталі відрізняються великою складністю. Сюди входять: фізичні процеси переміщення різних мас – газів, рідин та сипучих тіл; процеси плавлення, випарювання; фазові перетворення речовин; хімічні та фізико-хімічні процеси – дисоціація-утворення сполук, відновлення-окислення сполук, сорбційні явища, тощо. Ці процеси протікають за високих температур, часто одночасно, та ще й різними швидкостями, з мінливими тисками компонентів і з участю кількох фаз. Складність металургійних систем виявляється також у великій кількості й різноманітності параметрів стану системи і процесу, а крім того, ще й у наявності зв'язків між цими параметрами.

Інформація про багаточисленні ознаки, що відображають розвиток процесів, також вельми різноманітна й складна. Для того щоб спростити (обмежити) цей потік інформації й вибрати головні значущі ознаки процесу вживають моделі – деякі спрощені системи, що відображають окремі, обмежені у заданому напрямку, сторони процесу, що досліджується. Математичне моделювання сьогодні стало головним методом кібернетики – науки, що вивчає системи будь-якої природи, які здатні зберігати й переробляти інформацію з метою оптимального керування.

Кібернетика включає такі поняття, як система, інформація, зберігання й переробка інформації, керування системами та їх оптимізація. Металургійні багатопараметричні процеси й системи через свою складність виявляються об'єктом кібернетики, яка аналізує й оптимізує їх за допомогою математичних моделей, використовуючи як технічні засоби обчислювальні машини. Таким чином цілі моделювання й оптимізації металургійних процесів тісно й безпосередньо пов'язані з цілями кібернетики.

1.1. Основні поняття моделювання

Моделювання це один з методів пізнання, що широко застосовується в сучасній науці. Особливу роль моделювання грає в прикладних областях знань. Воно дозволяє глибше і всебічно вивчити процес, явище, агрегат, прискорити освоєння нових виробництв. *Під моделюванням розуміється процес створення моделі, її дослідження і поширення результатів цього дослідження на оригінал.*

Моделі можуть бути *матеріальними* (фізичними) або уявними. Якщо під моделлю мається на увазі деякий об'єкт, що замінює оригінал при проведенні досліджень, то цей об'єкт є матеріальною моделлю. Його можна вимірювати, зважувати, переміщувати і т.д. Інший тип моделей – уявні моделі не є об'єктами, - це уявні схеми оригіналу. Прикладом уявної моделі може служити відома модель атома Резерфорда. Уявні моделі представляються у вигляді словесного опису (звукового, письмового), у вигляді малюнків, а також у вигляді математичних образів (рівнянь, нерівностей, таблиць, графіків). Останній тип уявних моделей прийнято називати математичними. *До уявних* моделей відносять також концептуальні *моделі*. Вони передують розробку будь-якої моделі, оскільки до початку її створення виробляється певна концепція – система поглядів на явища, процеси, що є об'єктом моделювання (оригіналом).

Модель завжди є спрощеним представленням оригіналу. Відносна простота моделі є її важливим достоїнством, в іншому випадку дослідження проводилося б на оригіналі. Структура і складність моделі визначаються конкретною метою моделювання.

Мета моделювання – це дослідження впливу умов, що визначають процес, на його кінцевий результат і, в подальшому, встановлення масштабних коефіцієнтів для перенесення результатів дослідження моделі на оригінал. Мета моделювання визначає всі найважливіші характеристики моделі: повноту опису явища а, отже, і кількість задіяних параметрів, точність і складність моделі.

Моделювання має значення тільки тоді, коли виконуються дві дуже важливі вимоги: економічність і традуктивність. Вимога економічності моделювання очевидно - витрати на створення і дослідження моделі повинні бути меншими, ніж при дослідженні безпосередньо оригіналу. Звичайно, тут потрібно розуміти економічність в широкому значенні – дослідження різних небезпечних явищ, катастроф, багатьох військових і космічних об'єктів і ін. вигідніше провести на моделях, незважаючи на витрати.

Традуктивність – це здатність перенесення результатів випробування моделі на оригінал, тобто встановлення масштабних коефіцієнтів, що дозволяють оцінювати поведінку оригіналу за результатами дослідження моделі. Це складна і важлива задача теорії моделювання, яка тісно пов'язана з оцінкою подібності об'єктів. Метод подібності вивчається у відповідних дисциплінах (див., наприклад, [4]). Тут ми розглянемо лише місце методу подібності в моделюванні. Подібність – це умова, при якій можливо перенесення кількісних результатів дослідження моделі на оригінал. Саме подібність визначає традуктивність моделювання і дає правило традукції: *безрозмірні комплекси (критерії подібності) в схожих точках подібних об'єктів (тут: моделі і оригіналу) – рівні*[1]. Таким чином, критерії (числа) подібності і є, по суті, тими масштабними коефіцієнтами, які потрібні для

забезпечення традукції. У кожному конкретному разі моделювання встановлюється мінімально можливе число визначальних критеріїв або чисел подібності. Але виявилось, що одночасне використання декількох критеріїв часто робить задачу побудови моделі нереалізуємою – її параметри повинні повністю співпадати з параметрами оригіналу. Це обмежує можливості фізичного моделювання складних об'єктів. У деяких випадках вдається обійти ці ускладнення, використовуючи принцип аналогії. Аналогія – це випадок схожості нетотожних об'єктів по деяких сторонах або відносинах. Наприклад, аналогічними можна вважати процеси, які описуються схожими математичними рівняннями (математичний ізоморфізм). Ряд відомих процесів описується рівнянням одного загального вигляду

$$q = -a \cdot \text{grad } x, \quad (1.1)$$

де q – векторна величина, що характеризує потік; x – скалярна величина; a – коефіцієнт; grad – градієнт скалярної величини.

- Закон Дарсі-Вейсбаха описує фільтрацію рідини через пористе середовище

$$w = -k \cdot \text{grad } p, \quad (1.2)$$

де w – швидкість фільтрації; k – коефіцієнт фільтрації; p – тиск.

- Закон Ньютона для в'язкої течії рідини

$$\tau = -m \cdot \text{grad } v, \quad (1.3)$$

де τ – потік імпульсу; m – коефіцієнт в'язкості; v – швидкість.

- Закон Фур'є для теплопровідності середовища

$$q_T = -I \cdot \text{grad } T, \quad (1.4)$$

де q_T – потік тепла; I – коефіцієнт теплопровідності; T – температура.

- Перший закон Фіка для дифузії

$$q_M = -D \cdot \text{grad } c, \quad (1.5)$$

де q_M – потік маси; D – коефіцієнт дифузії; c – концентрація.

- Закон Ома для електричного струму в трьохмірному просторі

$$i = -k \cdot \text{grad } u, \quad (1.6)$$

де i – щільність струму; k – коефіцієнт електропровідності; u – потенціал.

Внаслідок ізоморфності математичних рівнянь будь-який з вказаних процесів може служити моделлю іншого. У хімічній технології вживається електрогідродинамічна аналогія ЕГДА, коли гідродинамічні задачі моделюються електричними ланцюгами. Вельми широке коло процесів, математичний опис яких виконаний диференціальними рівняннями, моделюються на аналогових обчислювальних машинах АОМ, побудованих на принципах поєднання окремих електричних функціональних блоків, відповідних різним математичним операціям: підсумовуванню, множенню, диференціюванню, інтегруванню і ін. Можна сказати, що аналогія розширює можливості моделювання в порівнянні з прямою подібністю.

І все ж моделювання, що використовує аналогії, хоч і розширило можливості фізичного моделювання, відмовившись від ідентичності процесів, що протікають в моделі і в оригіналі, не уникло труднощів, пов'язаних

них з умовами подібності при моделюванні складних об'єктів. Ці труднощі вдалося подолати при *математичному моделюванні*.

При математичному моделюванні ми маємо справу не з самим явищем, а з його уявною схемою (зліпком), що виражає в математичній формі основні закономірності, яким це явище підкоряється. Якщо процес або явище можна описати математично у вигляді системи рівнянь, то результат рішення цих рівнянь, виконаний в певній послідовності (алгоритмі), можна перенести на оригінал і тоді вказана система рівнянь є математичною моделлю. Коли вказана система рівнянь вирішується із залученням ЕОМ, то можна почути зауваження, що це не моделювання, а просто розрахунок. Звичайно, рішення математичної задачі є розрахунком, але шлях, послідовність такого розрахунку, задана дослідником, його можна багато разів повторювати з варіюванням параметрів і це перетворює просто інженерний розрахунок в експеримент, що виконується за рахунок обчислювальної техніки. Такі експерименти стали широко застосовуватися в цілому ряді наук і їх стали називати обчислювальними *експериментами*. Потрібно, також, пам'ятати, що сама ЕОМ є фізичним об'єктом, і, проводячи обчислювальний експеримент на ЕОМ, ми, по суті, проводимо його за допомогою аналогій з електричними ланцюгами.

Важливо зазначити, що при математичному моделюванні дотримуються обидві вимоги до моделювання як продуктивність, так і економічність. Результат моделювання кількісно розповсюджується на оригінал вже по самому запису моделі, а моделювання на машині завжди дешевше, ніж на оригіналі.

Математичне моделювання відрізняють від фізичного моделювання, при якому модель і оригінал фізично ідентичні, а основою побудови моделі служить теорія подібності. Потрібно підкреслити, що не можна протиставляти фізичне і математичне моделювання – безглуздо вважати одне з них кращим за інше. Вони доповнюють одне одного при рішенні конкретної задачі, яка ставиться перед дослідником і йому вибирати найкращий шлях.

1.2. Етапи створення математичної моделі

Математичне моделювання складається з декількох етапів.

- Перший етап є етапом ідентифікації об'єкта моделювання, на якому розробляється *концептуальна модель* об'єкта, що вивчається, яка може бути реалізована різними математичними і технічними засобами.

Розробка концептуальної моделі включає:

1. Докладну постановку задачі і її аналіз
2. Вибір параметрів, змінних, критеріїв ефективності і ін.
3. Гіпотези і припущення
4. Вибір мети - обґрунтування доцільності побудови моделі

5. Оцінку очікуваних результатів роботи моделі

6. Опис моделі в загальних термінах і поняттях

На цьому етапі створюється “математичний образ” об’єкта, що вивчається. Він, по можливості, звільняється від випадкових рис – з усіх рис, що характеризують його зв’язки, вибираються найбільш істотні. Ці зв’язки записуються у вигляді рівнянь і нерівностей. Рівняння підбираються за принципом законів, правил, що безумовно виконуються. Прикладом служать балансові закони: збереження маси, енергії, імпульсу і ін. Тут же повинні бути чітко поставлені мета і завдання, які повинна вирішувати модель, що розробляється. Саме вони визначають глибину і кількість параметрів, що використовуються, змінних, а також об’єм і необхідну точність інформації, що в кінцевому результаті визначає складність і вартість моделі. Модель представляється одним або цілою системою рівнянь, нерівностей і ін. математичних виразів.

На другому етапі створюється алгоритм моделювання, тобто порядок рішення системи рівнянь. Він може супроводитися розробкою блок-схеми моделі. На цьому етапі використовується основний теоретичний апарат вищої математики – чисельні методи, в формі обчислювальних алгоритмів.

На третьому етапі на основі обчислювального алгоритму складається програма на одній з мов програмування. Конкретна мова програмування зараз вже практично не впливає на швидкість розрахунків, оскільки цей показник можна легко подолати, використовуючи більш швидкодіючу ЕОМ. Тому дослідник може скласти програму на доступній і найбільш знайомій йому мові програмування.

На четвертому етапі здійснюється відладка роботи програми, перевірка її адекватності процесу, що досліджується, шляхом проведення обчислювального експеримента і зіставлення, даних, що отримуються від моделі, з теоретичними або експериментальними даними, прогнозом результатів при зміні параметрів моделі і процесу. Якщо адекватність не досягнута, то проводиться необхідне коректування моделі.

1.3. Типи математичних моделей

Існує два підходи до опису об’єкта моделювання – детермінований і стохастичний (ймовірний).

Детермінований (структурний) підхід засновується на глибокому знанні механізму процесів, природі явищ і ін. сторін об’єкта моделювання. При моделюванні фізико-хімічних процесів, що мають місце в металургії, уявна модель містить відомості про механізми реакцій, характери руху потоків, процеси перенесення теплоти і маси, параметри процесів і їх залежності від умов його розвитку і ін. У отриманому математичному представленні моделі її параметри мають фізичне значення – це відомі фізико-

хімічні константи, коефіцієнти, критерії. Зв'язки між параметрами моделі являють собою відомі закони фізики, хімії і фізичної хімії.

Переваги моделей, побудованих на детермінованому підході (детермінованих моделей), полягають в універсальності, високій прогностичній потужності і інформативності. Недолік – в складності апарату моделювання, вузькій області застосування.

Стохастичний (статистичний) підхід, званий ще методом “**чорного ящика**”, застосовується при відсутності глибоких знань про механізм процесів у об'єкті, що вивчається. Об'єкт-оригінал, що моделюється, представляється у вигляді “чорного ящика” (рис 1.1).

Математичні співвідношення між вхідними і вихідними параметрами встановлюються на основі експериментів. При цьому застосовують методи математичної статистики: *дисперсійний, регресійний і кореляційний* аналізи. Експеримент, при можливості варіювання параметрами процесу (тобто активного впливу на нього), проводиться методами *планування експерименту*.

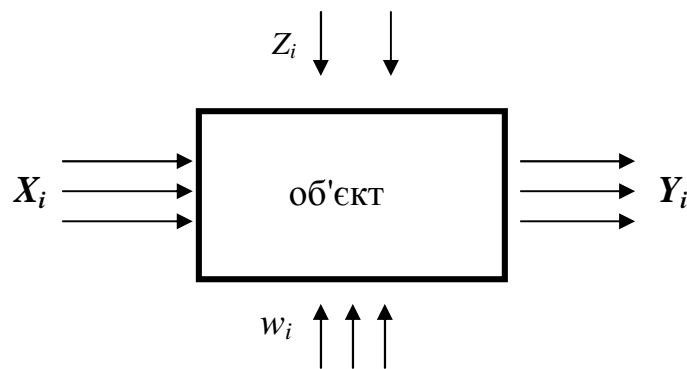


Рис. 1.1. Схема зв'язків “чорного ящика”. X_i - вхідні параметри; Y_i - вихідні параметри (характеристики продукту роботи системи); Z_i - керуючі параметри; w_i - випадкові параметри

Регресійний аналіз встановлює залежність вихідної функції (вихідної ознаки продукту) Y від параметрів процесу (управління) X_i (Z_i) у вигляді якої-небудь функції, - наприклад, полінома. Це рівняння називається рівнянням регресії. Як правило, обмежуються лінійною, в крайньому випадку, квадратичною моделлю.

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + \dots + a_{12}x_1x_2 + \dots, \quad (1.7)$$

де a_i - коефіцієнти рівняння регресії.

Коефіцієнти рівняння регресії показують міру (через величину) і характер (через знак) впливу варіюваного параметру управління (x_i). Вони не мають фізичного смислу – це чисто математичні характеристики. Регресійний аналіз застосовується лише за умови, коли параметри управління, які досліджуються, *незалежні* і не є випадковими *величинами*.

Задачу перевірки зв'язків між випадковими або пов'язаними величинами виконує кореляційний аналіз. Він визначає міру залежності або незалежності параметрів і застосовується на першому етапі дослідження з метою встановлення незалежних значущих параметрів.

Дисперсійний аналіз результатів експерименту дозволяє оцінити вплив кожного чинника в багатофакторному експерименті на вихідні параметри.

Достоїнства стохастичного підходу – простота, розробленість і визначеність математичного апарату, гарантована результативність. Недолік – низька прогностична потужність. Можливе порушення встановленої закономірності при виході за межі експериментально дослідженого інтервалу зміни параметрів. Така модель не розкриває істинні причини явищ. Завжди існує небезпека упущення якого-небудь значущого чинника (наприклад, такого, що повільно міняється).

Обидва розглянуті підходи до моделювання – протилежності, але, як і впливає із законів діалектики, вони знаходяться в єдності. Для складних систем використовуються обидва підходи одночасно в комбінованому варіанті. У цьому випадку з'єднуються переваги обох підходів, як стохастичного, так і детермінованого. При цьому виконується ряд етапів:

1. Постановка задачі моделювання. Тут формулюються цілі створення моделі, система вхідних і вихідних потоків, точність їх обчислення.

2. Структуризація системи (процесу). Якщо система або процес виявилися дуже складними, або в них є невивчені явища, то вся система розбивається на ряд підсистем (п/с), часто на різних рівнях структурної схеми задачі (див., наприклад, ієрархічну структуру акад. М.Г. Слінько). У цьому випадку математична модель включає всі п/с і модель взаємодії їх між собою. Після цього аналізується кожна п/с окремо. У залежності від складності п/с і їх структури спостерігають три варіанти дослідження п/с:

- 2.1. Якщо п/с дозволяє описати її відомими законами фізики, хімії і ін., то на цьому процес структуризації п/с і закінчується.

- 2.2. Якщо п/с залишається ще складною, то її можна додатково розбити на п/с наступного рівню (пп/с) і створити пп/с зв'язків пп/с цього рівню. Кожна пп/с аналізується окремо.

- 2.3. Якщо для п/с немає готових або відомих рішень, немає достатніх відомостей про механізм, в зв'язку з чим не вдається побудувати структуру, то цю п/с можна розглядати як "чорний ящик" і цим процес структуризації закінчується. У подальшому ця п/с досліджується окремо за методом планування експерименту і для неї отримують рівняння регресії, що зв'язують ті параметри, які входять в цю п/с, з тими, які виходять з неї.

Таким чином, поєднуючи детермінований і стохастичний підходи можна домагатися бажаних результатів при моделюванні складних об'єк-

тів. Загальних принципів по розподілу складних систем на підсистеми немає. Багато тут залежить від досвіду і вдачі дослідника. Якість проведеної структуризації істотно впливає на складність зв'язків між підсистемами. Звичайно зв'язок здійснюють через систему вхідних і вихідних параметрів: вхідний параметр даної системи є вихідним параметром попередньої і т.д. На складність зв'язків впливає наявність паралельних і оборотних процесів, які приводять до розгалуження і появи зворотних зв'язків.

3. Моделювання підсистем.

Кожна підсистема описується математично: детермінований – системою рівнянь, а стохастичні – рівняннями регресії. Для отримання необхідних для них коефіцієнтів і констант проводяться експерименти. Етап закінчується об'єднанням моделей п/с в загальну математичну модель на базі моделі зв'язків всіх п/с.

4. Перевірка адекватності моделі.

Це принципово важливий показник придатності розробленої моделі для рішення поставленої перед нею задачі. Звичайно така перевірка ведеться по практичній реалізації моделі шляхом порівняння результатів розрахунку вихідних характеристик моделі з експериментальними даними оригіналу.

Ієрархічна структура математичних моделей складних фізико-хімічних процесів

Ієрархічна структура математичних моделей складних фізико-хімічних процесів була розроблена академіком М.Г. Слінько [5] для хіміко-технологічних процесів, але вона цілком придатна для фізико-хімічних процесів, що протікають в металургійних агрегатах. Модель будується шляхом послідовного переходу від простого до складного, від нижнього рівня до вищого:

1. Молекулярний рівень. Закономірності цього рівня описуються хімічною (формальною) кінетикою.

2. Рівень малого об'єму. Тут описуються процеси в зерні, в краплі, в шматку і т.д. Закономірності першого рівня доповнюються закономірностями тепло- і масообміну. Науковий напрям цього рівня – макрокінетика.

3. Рівень робочої зони апарату. Попередній рівень доповнюється закономірностями руху потоків газу, рідкої або твердої сипучої маси. Тут важливе значення має організація процесу – зовнішній вплив на систему, характер руху потоку. Так, наприклад, можна подавати газ в зернистий шар зверху, збоку, знизу, через один або декілька джерел, доводячи шар до кипіння, фонтанування, струшуючи або перекочуючи шар матеріалу і т.д. Кожний з цих випадків описується своєю моделлю.

4. Рівень апарату. Попередній рівень доповнюється відомостями про форму, розміри, співвідношення робочих зон апарату.

5. Рівень агрегату. Накладаються зв'язки між різними апаратами даного агрегату.

1.4. Характеристики моделей

Крім підходів до побудови моделей, що приводять до певного типу моделей – детермінованих, стохастичних або комбінованих, моделі розрізняються за своєю складністю, точністю, числом параметрів і за іншими характеристиками.

Про точність моделей. Жодна модель не може відобразити оригінал повністю. Це зауваження відноситься не тільки до фізичних, але і до уявних моделей. Часто виявляється доцільним користуватися більш простою моделлю. Наприклад, для ідеальних газів користуються рівнянням стану Клапейрона-Менделєєва $PV = nRT$. Для реальних газів потрібне внесення емпіричних поправок, що помітно ускладнюють розрахунок, але не сильно змінюють результат. Якщо задана точність розрахунку задовольняється першим рівнянням, то більш складний розрахунок не зажадається.

Звичайно, якщо потрібно досить точно моделювати складний об'єкт, то належить використати складну модель.

Про складність моделей. Складність моделі може бути пов'язана зі складністю об'єкту, що моделюється, кількістю показників властивостей об'єкту-оригіналу, параметрів, зі складністю і кількістю рівнянь, що використовуються, складністю рішення системи рівнянь, високою чутливістю до помилок визначення параметрів моделі і ін.

• *Складність математичного опису*

Спочатку розглянемо це питання з боку математичного опису об'єкта моделювання. Тут враховується *число і тип рівнянь*. Модель може бути описана кінцевими або диференціальними рівняннями. Складність моделі зростає: при переході від алгебраїчних до диференціальних рівнянь; від звичайних диференціальних рівнянь (функції однієї незалежної змінної) до рівнянь в приватних похідних; від лінійних рівнянь до нелінійних рівнянь; ще складніше нелінійні рівняння в приватних похідних для нестационарних процесів.

• *Число параметрів, що використовуються*

Складний об'єкт вимагає для свого опису використання великого *числа параметрів* – величин, що характеризують процес, речовину, систему. Чим більше параметрів в моделі, тим вона точніше описує об'єкт, але в той же час модель стає складнішою. Потрібно мати також на увазі, що складну модель важче обробляти і якщо ми застосовуємо складну модель на нижньому рівні ієрархічної структури, то складність моделі верхнього рівня може перевищити можливості навіть могутніх ЕОМ.

З збільшенням числа параметрів моделі збільшується чутливість до помилок дослідів, які проводяться для оцінки цих параметрів. Вимогу до точності результатів таких дослідів можуть перевищити можливості дослідницького обладнання, і тоді виникає характерна помилка – втрата фізичного смислу параметрів моделі. Модель може давати хороший збіг з досвідом, а окремі параметри стають просто підгоночними коефіцієнтами, закономірності зміни яких відхиляються від теорії. Може трапитися, що модель з детермінованої моделі перетвориться в експериментальну.

Таким чином, для виконання заданої мети моделювання необхідно вибирати мінімально можливе число параметрів моделі, щоб максимально спростити задачу і добитися бажаного результату. Одним з способів спрощення складних процесів, наприклад, є опис їх через лімітуючу стадію. Багато які з фізико-хімічних процесів в металургії багатостадійні і багатоступінчасті. Деякі з цих стадій протікають послідовно, інші - паралельно, а інші – послідовно-паралельно. Попередніми дослідими встановлюється лімітуюча стадія процесу і модель сильно спрощується, якщо для опису процесу використовується тільки ця лімітуюча стадія. Якщо процес складається з послідовних стадій, то лімітуючою є найбільш повільна з них, а у разі паралельних стадій сумарна швидкість визначається вже найбільш швидкою з стадій. Щоб ефективно управляти процесом, досить впливати на його лімітуючу стадію.

• *Складність процесу, що описується*

Більш простими для аналізу і моделювання є *стаціонарні процеси*, – їх параметри незмінні у часі. Ці процеси описуються простими рівняннями балансу:

$$\text{прихід} = \text{витрата.}$$

Стаціонарний процес – безперервний і протікає у відкритих системах. Безперервність підтримує рівність між вхідними і вихідними потоками. Нестационарні процеси характеризуються зміною параметрів у часі. Вони описуються узагальненими рівняннями балансу:

$$\text{прихід} - \text{витрата} = \text{накопичення.}$$

Всі періодичні процеси – нестационарні. Нестационарними є також перехідні режими у стаціонарних процесів, коли виникає необхідність перейти з одного стаціонарного режиму в інший.

Є ще відмінність по складності опису процесу – це, так звані, *об'єкти з зосередженими або з розподіленими параметрами*. У випадку, якщо об'єкт має однакові параметри у всіх його точках, то виявляється достатнім описати розвиток процесу в одній точці, так як в інших він повторюється. Це випадок об'єкту із *зосередженими параметрами*. Стаціонарні процеси в таких об'єктах можна описувати кінцевими (алгебраїчними або трансцендентними) рівняннями.

Якщо ж параметри змінюються в просторі, наприклад, по висоті і по радіусу, то кажуть про об'єкт з *розподіленими параметрами*. Його опис значно складніше. Якщо для опису процесу потрібно більш однієї незалежної змінної, то використовуються диференціальні рівняння в приватних похідних.

Адитивність моделі. До числа характеристик, що визначають якість моделі, відносять і здатність моделі приймати поправки, уточнення або доповнення без її корінної переробки. Цю властивість моделі називають адитивністю. Воно є важливим для складних багатооператорних програм моделей.

Задачі Коші і крайові задачі

При чисельному рішенні звичайних диференціальних рівнянь зустрічаються 2 основних випадки, пов'язані з характером завдання *початкових умов*.

Перший випадок: всі початкові умови задані при постійному значенні незалежною змінною. Це **задача Коші**. Якщо процес складається з n стадій, то для його опису використовується n диференціальних рівнянь. У цьому випадку задається n початкових значень залежних змінних, наприклад концентрацій, при $\tau = 0$. Численне рішення задачі Коші зводиться до якої-небудь розрахункової схеми, в якій здійснюється розрахунок залежних змінних при переході від початкового стану до кінцевого значення незалежної змінної.

Другий випадок: крайові умови (включаючи і початкові) задані при різних значеннях незалежної змінної. Це, так звана, **крайова** задача. Прикладом подібних задач є задачі з потоками тепла, речовини і ін. При чисельному рішенні крайових задач спочатку задаються початковим наближенням. Далі задача вирішується як задача Коші, тобто розраховуються залежні змінні від початкового наближення до кінцевого стану, який заданий в крайовій задачі. Встановлюється нев'язка, вноситься поправка до значення наближення, і розрахунок повторюється до необхідної точності.

Ї *Про клас задач, що вирішуються моделюванням*

За класом задач, що вирішуються, моделі поділяють на **прямі** і **зворотні** задачі. При рішенні прямих задач знаходять значення функції для заданих параметрів. Прикладом можуть служити моделі кінетичних процесів, коли визначається міра перетворення речовини у часі при заданих параметрах процесу – константах швидкості реакцій, масовіддачі, коефіцієнтах дифузії і ін. У зворотних задачах знаходять значення параметрів процесу в полі відомих значень незалежних і залежних змінних. Наприклад, визначення константи швидкості реакції і коефіцієнту дифузії з експериментальної кінетичної кривої «міра перетворення – час».

Граничні умови

Якщо треба описати теплопередачу або масоперенос в суцільних середовищах для рішення диференціальних рівнянь переносу типу $q_T = -\lambda \cdot \text{grad}(T)$ чи $q_c = -D_e \cdot \text{grad}(C)$, то необхідно задатися початковими і граничними (крайовими) умовами. Початкова умова математично формулюється таким чином

$$X(x, y, z, 0) = X_0(x, y, z).$$

У теорії теплопровідності і масообміну найчастіше зустрічаються 4 роди граничних умов.

Граничні умови 1-го роду. На кордоні (s) задається постійне значення шуканого параметра (T або C)

$$T(s, \tau) = T_0 \quad \text{або} \quad C(s, \tau) = C_0.$$

Тут T_0 і C_0 – відомі значення температури і концентрації, τ - час, s - сукупна координата межі. Параметр на границі можна задати як відому функцію часу, наприклад, $T(s, \tau) = T_0(\tau)$.

Граничні умови 2-го роду. На границі задається потік (маси, теплоти). Він може бути постійним, рівним нулю або бути відомою функцією у часі.

$$-\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_s = q_{0, \tau} \quad \text{або} \quad -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_s = q(\tau),$$

тут n - нормаль до поверхні.

Граничні умови 3-го роду. На границі області задається лінійний зв'язок між градієнтом змінною і її величиною

$$-\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_s = \alpha_T T, \quad \text{або} \quad -D \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_s = K_r (C^0 - C).$$

Граничні умови 4-го роду. Це випадок масо- або теплообміну на границі двох фаз

$$-\lambda_1 \left. \frac{\partial T_1}{\partial n} \right|_s = -\lambda_2 \left. \frac{\partial T_2}{\partial n} \right|_s, \quad \text{або} \quad -D_{e,1} \left. \frac{\partial C_1}{\partial n} \right|_s = -D_{e,2} \left. \frac{\partial C_2}{\partial n} \right|_s \quad \text{за} \quad T_1 = T_2.$$