

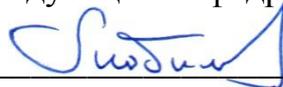
МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тульский государственный университет»

Институт *Политехнический*
Кафедра «*Электро- и нанотехнологии*»

Утверждено на заседании кафедры
«Электро- и нанотехнологий»
«19» января 2021 г., протокол №5

Заведующий кафедрой



В.В. Любимов

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ
по проведению практических занятий
по дисциплине
«Математическое моделирование в машиностроении»

основной профессиональной образовательной программы
высшего образования – программы бакалавриата

по направлению подготовки
15.03.01 Машиностроение

с направленностью (профилем)
Машины и технологии высокоэффективных процессов
обработки материалов

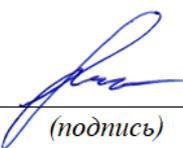
Форма обучения: *очная*

Идентификационный номер образовательной программы: 150301-01-21

Тула 2021 год

Разработчик методических указаний

Волгин В.М., профессор, докт.техн.наук, профессор
(ФИО, должность, ученая степень, ученое звание)



(подпись)

РАЗДЕЛ 1. ОРГАНИЗАЦИЯ И МЕТОДИКА ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

1.1. Цель и задачи практических занятий

Целью практических занятий является закрепление и углубление знаний студентов, полученных на лабораторных занятиях при изучении курса «Математические методы в машиностроении», а также приобретение практических навыков проведения исследований на основе компьютерного моделирования процессов обработки материалов.

1.2. Объекты проектирования и программное обеспечение

В качестве объектов исследования в ходе занятий используются методы построения математических моделей физико-химических процессов, методов численного решения и методов математической обработки результатов вычислительных экспериментов.

1.3. Порядок выполнения:

- ознакомиться с теоретическими сведениями к очередному занятию (см. раздел 2);
- ознакомиться с руководством по использованию программного обеспечения для моделирования изучаемого процесса обработки;
- произвести моделирование конкретного процесса обработки с исходными данными соответствующего варианта заданий;
- представить в графическом виде результаты моделирования;
- проанализировать полученные результаты и разработать рекомендации по проведению конкретного процесса обработки

1.4. Отчет о выполнении задания.

Отчет по каждому практическому занятию составляется в произвольной форме и должен содержать:

- указание цели занятия;
- описание математической модели процесса обработки;
- результаты моделирования в виде графиков, схем или диаграмм;
- анализ результатов моделирования;
- выводы и рекомендации.

1.5. Литература, рекомендуемая для практических занятий

1. Смирнов С.А. Компьютерные технологии в науке и образовании. Иваново: ИГХТУ. 2006. 165 с.
2. Высокие технологии в машиностроении: учеб. пособие: в 2 ч. / В.В. Любимов [и др.]. Тула: Изд-во ТулГУ, 2011. Ч.1. – 2011. – 147 с.
3. Высокие технологии в машиностроении: учеб. пособие: в 2 ч. / В.В. Любимов [и др.]. Тула: Изд-во ТулГУ, 2011. Ч.2 . – 2011 . – 140 с.
4. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье-Стокса / В.И. Полежаев, А.В. Бунэ, Н.А. Везеуб и др. М.: Наука. 1987.
5. Ши Д. Численные методы в задачах теплообмена. М.: Мир. 1988.

РАЗДЕЛ 2

УКАЗАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

2.1. К практическому занятию №1 «Построение математических моделей с применением анализа размерностей»

В случаях, когда изучение реальных процессов и явлений по тем или иным причинам затруднительно, невозможно или нецелесообразно в реальном масштабе определяющих эти процессы параметров и характеристик, их исследование осуществляют на физических моделях, а полученные при этом данные затем обобщают. Такое обобщение становится возможным при соблюдении определенных условий – условий подобия.

Теоретической базой построения и исследования физических моделей являются анализ размерностей и теория подобия. При этом теория подобия определяет условия возможного обобщения полученных на моделях данных, а анализ размерностей используется для формирования этих условий.

Первоначально анализ размерностей использовался как технический прием, позволяющий в ряде случаев сократить число исследуемых параметров процессов путем формирования их безразмерных комбинаций. Вместе с тем он может использоваться и для построения математических моделей изучаемых явлений, если выявлены определяющие их параметры и характеристики.

Различные физические величины связаны между собой определенными соотношениями. Если некоторые величины принять за основные и ввести для них определенные единицы измерения – размерности, то размерности остальных величин, называемых производными от основных, можно определенным образом выразить через основные.

На практике можно использовать одну, две, три основные размерности, пользоваться только безразмерными величинами. История человечества богата примерами оригинальных единиц измерения, таких как локоть, ладонь, дюйм (длина верхней фаланги большого пальца), ярд (длина отрезка ткани, зажатой с одного конца зубами, а с другого – отведенной в сторону рукой) и т.д. В ряде случаев одна величина имеет различную меру. Так, «румб» в геодезии – угол между меридианом и направлением на выбранную точку, отсчитываемый от меридиана в обе стороны от 0 до 90°; в морской навигации – мера угла окружности горизонта, разделенная на 32 румба, а в метеорологии – на 16 румбов. Можно привести и другие примеры.

Наибольшее распространение получила система трех измерений: масса $[M]$, линейный размер (длина) $[L]$, время $[T]$ (знак $[]$ является символом размерности). Их выбор удобен тем, что они, по нашему мнению, легко поддаются измерению и достаточно фундаментально описывают окружающую действительность. Размерности остальных физических величин выводятся через принятые в качестве основных. Эта система просто привычна для наших ощущений, хотя практика инженерного эксперимента предполагает выбор наиболее удобного для исследования комплекса основных размерностей. Например, в механике наряду с указанной широко используются системы, в которых основными являются $[F]$ (сила), $[L]$, $[T]$; $[M]$, $[L]$, $[T]$, $[V]$ (объем) и т.д.; нередко размерность времени опускается. Каких-либо объективных аргументов в пользу такого положения привести невозможно. В каждом конкретном случае исследователь вправе самостоятельно определять число и номенклатуру системы основных размерностей.

Если в систему входят величины, связанные с понятием «тепло», то к указанным размерностям следует добавить еще одну: $[\tau]$ – температуру (для построения формул динамики) или $[H]$ – тепловую энергию (для построения «тепловой» формулы). Для электрических и магнитных составляющих добавляются: $[K]$ – диэлектрическая постоянная (используется, как правило, в качестве основной при моделировании электростатических свойств явлений); $[\mu]$ – постоянная магнитного поля (используется, как правило, в каче-

стве основной при моделировании электромагнитных свойств явлений) либо скорость распространения электромагнитных волн в среде [с].

Методы анализа размерностей во многом основаны на работах Фурье, который сформулировал принцип однородности по размерности. Он гласит, что любое уравнение корректно только в том случае, если все его члены имеют одинаковую размерность: показатели степеней при основных размерностях одинаковы у всех членов уравнения, а его форма не зависит от единиц измерения величин одной природы.

Использование аппарата анализа размерностей как для установления взаимосвязи параметров процесса, так и для сокращения числа исследуемых переменных предполагает выполнение трех условий:

- понимание исследуемого процесса;
- наличие формул размерностей исследуемых величин в принятой основной системе размерностей;
- знание методов обработки размерностей.

Варианты формул размерностей в наиболее часто используемых основных системах приведены в табл. 1 – 3.

В качестве методов обработки размерностей используются методы Букингема, Релея, поэтапный метод Ипсена, метод линейных пропорциональностей Барра и др.

Таблица 4.1.

Размерности механических величин

| Величина | Размерности |
|---|-----------------|
| Длина L | L |
| Объем W | L^3 |
| Скорость V | LT^{-1} |
| Кривизна | L^{-1} |
| Ускорение A или g | LT^{-2} |
| Плотность ρ | ML^{-3} |
| Количество движения | MLT^{-1} |
| Момент количества движения | ML^2T^{-1} |
| Сила F | MLT^{-2} |
| Работа и энергия | ML^2T^{-2} |
| Мощность | ML^2T^{-3} |
| Вязкость η | $ML^{-1}T^{-1}$ |
| Кинематическая вязкость ν | L^2T^{-1} |
| Давление, касательное напряжение P , τ | $ML^{-1}T^{-2}$ |
| Угловая скорость, частота ω, f | T^{-1} |
| Расход Q | L^3T^{-1} |

| | |
|-------------------------------|-----------------|
| Объемный модуль упругости E | $ML^{-1}T^{-2}$ |
|-------------------------------|-----------------|

Таблица 2

Размерности тепловых величин

| Величина | Тепловая формула | Динамическая формула |
|--|-----------------------|----------------------|
| Количество тепла H | H | ML^2T^{-2} |
| Удельная теплоемкость C_p | $HM^{-1}t^{-1}$ | $L^2T^{-2}t^{-1}$ |
| Теплопроводность k | $HL^{-1}T^{-1}t^{-1}$ | $LMT^{-3}t^{-1}$ |
| Коэффициент теплопередачи h | $HL^{-2}T^{-1}t^{-1}$ | $MT^{-3}t^{-1}$ |
| Энтропия s | Ht^{-1} | $ML^2T^{-2}t^{-1}$ |
| Коэффициент теплового расширения β | t^{-1} | t^{-1} |

Таблица 3

Размерности электрических и магнитных величин

| Величина | Электромагнитная формула | Электростатическая формула |
|-------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------|
| Напряженность магнитного поля | $M^{1/2}L^{-1/2}T^{-1}\mu^{-1/2}$ | $M^{1/2}L^{1/2}T^{-2}K^{1/2}$ |
| Магнитный заряд полюса | $M^{1/2}L^{3/2}T^{-1}\mu^{1/2}$ | $M^{1/2}L^{1/2}K^{-1/2}$ |
| Электрический ток | $M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}\mu^{-1/2}$ | $M^{1/2}L^{3/2}T^{-2}K^{1/2}$ |
| Электрический заряд | $M^{1/2}L^{1/2}\mu^{-1/2}$ | $M^{1/2}L^{3/2}T^{-1}K^{1/2}$ |
| Разность потенциалов | $M^{1/2}L^{3/2}T^{-2}\mu^{1/2}$ | $M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}K^{-1/2}$ |
| Сопротивление | $LT^{-1}\mu$ | $L^{-1}TK^{-1}$ |
| Емкость | $L^{-1}T^{-2}\mu^{-1}$ | LK |
| Индуктивность | $L\mu$ | $L^{-1}T^2K^{-1}$ |
| Магнитная проницаемость | μ | $L^{-2}T^2K^{-1}$ |
| Диэлектрическая постоянная | $L^{-1}T^2\mu^{-1}$ | K |

Метод Букингема

Пример. Исследуется силовое гидравлическое устройство автомобиля (рис. 1), основными параметрами и характеристиками которого приняты:

F – силовое воздействие;

L – линейные размеры конструкции;

V – скорость движения элементов конструкции;

ρ – плотность рабочей жидкости;

m – вязкость рабочей жидкости;

g – ускорение свободного падения;
 P – давление.

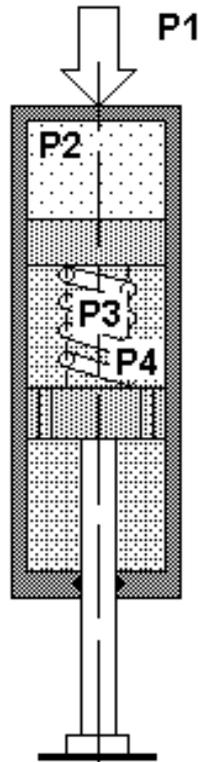


Рис. 1 Силовое устройство

Размерности физических величин:

$$F: MLT^{-2}; L: L; V: LT^{-1}; P: ML^{-3}; m: ML^{-1}T^{-1}; g: LT^{-2}; P: ML^{-1}T^{-2}.$$

По методу Букингема выбираются три основные величины (выберем для примера в качестве основных V, p, L), а остальные выражаются через них в виде

$$H = kV^x p^y L^z,$$

где H – искомая величина (все исследуемые параметры, кроме выделенных в правой части последнего равенства); k – безразмерный коэффициент пропорциональности.

Уравнивая левые и правые части этого соотношения по размерности и учитывая, что в системе основных размерностей $[M], [L], [T]$ получим

$$V = LT^{-1}, p = ML^{-3}, L = L,$$

$$L^s M^k T^h = L^{x-3y+z} M^y T^{-x}.$$

Первая часть данного соотношения – размерность искомой величины, вторая – размерность правой части исходного соотношения.

Далее следует подставить в левую часть этого уравнения последовательно размерности для величин F, P, m, g и в каждой подстановке решить свою систему уравнений:

$$s = x - 3y + z; k = y;$$

$$h = -x.$$

Для выражения сил $s = k = 1, h = -2$. Тогда $F = kV^2 p L^2$.

Для остальных величин получим

$$m = k_1 V p L; P = k_2 V^2 p; g = k_3 V^2 L^{-1}.$$

Входящие в полученные зависимости коэффициенты k_i подлежат экспериментальному определению. В рассмотренном примере все они равны единице, т.е. полученные зависимости выражают объективные закономерности исследуемого процесса.

Для однородных относительно размерностей уравнений справедлива теорема Букингема, первая часть которой констатирует:

«Если какое-либо уравнение однородно относительно размерностей, то его можно преобразовать к соотношению, содержащему набор безразмерных комбинаций величин».

Определенные методом Букингема соотношения приводятся к безразмерному виду делением их левых частей на соответствующие правые части:

$$F/(p V^2 L^2) = \Pi_1, P/(V^2 p) = \Pi_2, m/(VpL) = \Pi_3, V/(gL)^{0,5} = \Pi_4 .$$

Полученное сокращение параметров процесса (первоначально с семи размерных F, L, V, p, m, g, P до четырех безразмерных $\Pi_1, \Pi_2, \Pi_3, \Pi_4$) дает два существенных для экспериментатора преимущества:

1. Сокращение необходимого числа экспериментальных исследований.
2. Обеспечение возможности переноса результатов эксперимента на весь класс явлений, подобных исследуемому. Одним из условий такого переноса является равенство безразмерных Π -комплексов, называемых критериями подобия.

Уравнение, устанавливающее связь между критериями подобия, называется критериальным. Для рассмотренного выше примера одна из возможных записей критериального уравнения имеет вид:

$$F/(pV^2L^2) = f[P/(V^2p), m/(VpL), V/(gL)^{0,5}],$$

или

$$\Pi_1 = f(\Pi_2, \Pi_3, \Pi_4).$$

Справедливость подобных соотношений определяется второй частью теоремы Букингема (Π -теоремы), используемой для контроля результатов анализа размерностей:

«Если существует однозначное соотношение $f(A_1, A_2, \dots, A_m) = 0$ между m физическими величинами, для описания которых используется h основных единиц, то существует также соотношение $f(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{m-h}) = 0$ между $(m-h)$ безразмерными комбинациями, составленными из этих физических величин».

Примечание 1. Если не удастся получить систему безразмерных комбинаций, то это является верным признаком того, что было что-то пропущено.

Примечание 2. Теорема Букингема устанавливает лишь минимальное число безразмерных комбинаций. При проведении анализа их может быть получено больше $(m-h)$. При выборе разных комплектов основных определяющих процесс величин можно получить разные комплекты безразмерных комбинаций, хотя их число будет не меньше $(m-h)$.

Примечание 3. Как и при обеспечении однородности по размерности, получение правильного числа Π -членов еще не является гарантией корректного решения. Тем не менее неправильное число таких комплексов определенно указывает на допущенные ошибки.

Правильное число безразмерных комплексов определяется модифицированной Π -теоремой, сформулированной Ван Дристом:

«Число безразмерных комбинаций полной системы равно общему числу переменных m минус максимальное число этих переменных n , не образующих безразмерной комбинации». Во многих случаях определение числа n достаточно затруднительно.

Метод Релея

Если в методе Букингема безразмерные комплексы определялись последовательно, то метод Релея позволяет установить все их одновременно. Порядок его применения проиллюстрируем для рассмотренной ранее задачи о силовом гидравлическом устройстве.

Исходная зависимость параметров имеет следующий вид:

$$F = f(L, V, p, m, g, P).$$

Для обеспечения однородности уравнения по размерности (в данном случае размерности силы) следует ввести соответствующие степени для элементов его правой части:

$$F = f(L^b, V^c, p^d, m^e, g^f, P^h).$$

Далее, используя размерности физических величин, следует уравнивать их с целью определения значений введенных показателей степеней:

$$F: MLT^{-2}; L: L; V: LT^{-1}; p: ML^{-3}; m: ML^{-1}T^{-1}; g: LT^{-2}; P: ML^{-1}T^{-2}$$

$$MLT^{-2} = f[(L)^b, (LT^{-1})^c, (ML^{-3})^d, (ML^{-1}T^{-1})^e, (LT^{-2})^f, (ML^{-1}T^{-2})^h];$$

$$M: 1 = d + e + h;$$

$$L: 1 = b + c - 3d - e + f - h; T: -2 = -c - e - 2f - 2h.$$

Три уравнения содержат шесть переменных. Так как основными выбраны три размерности, то из имеющихся шести переменных любые три следует выразить через остальные, например:

$$1 = d + e + h \rightarrow d = 1 - e - h;$$

$$1 = b + c - 3d - e + f - h \rightarrow b = 1 - c + 3d + e - f + h;$$

$$-2 = -c - e - 2f - 2h \rightarrow c = 2 - e - 2h - 2f \rightarrow 2 - e + f.$$

Этого достаточно, чтобы преобразовать исходное однородное уравнение к виду:

$$F = f(L^{2-e+f}, V^{2-e-2h-2f}, p^{1-e-h}, m^e, g^f, P^h).$$

Теперь следует сформировать безразмерные комплексы объединением переменных с одинаковыми показателями степеней (степени устанавливались для трех основных размерностей):

$$F = f[L^2, V^2, p, (m/(LVp))^e, (Lg/(V^2))^f, (P/(V^2p))^h],$$

или

$$F/(L^2V^2p) = f[(m/(LVp))^e, (Lg/(V^2))^f, (P/(V^2p))^h],$$

что равнозначно ранее полученной совокупности безразмерных комплексов (точное соответствие выполняется при $e = 1, f = -2, h = 1$).

Относительная сложность метода Релея заключается в преобразовании показателей степеней при определяющих процесс параметрах. Если это удастся сделать без серьезных вычислений, то метод Релея позволяет сразу установить всю совокупность безразмерных комплексов.

Метод Ипсена

Суть метода заключается в поэтапном формировании безразмерных комплексов путем исключения основных размерностей в исходном уравнении связи между переменными исследуемого процесса. По сравнению с рассмотренными выше методами он обеспечивает контроль над процессом построения безразмерных комплексов как путем выбора порядка исключения размерностей, так и путем выбора переменной, которая используется для исключения конкретной размерности.

Порядок использования метода Ипсена можно показать на ранее рассмотренном примере с силовым гидравлическим цилиндром.

Исходная зависимость параметров имеет вид:

$$F = f(L, V, p, m, g, P).$$

Уравнение размерностей:

$$MLT^{-2} = f[(L), (LT^{-1}), (ML^{-3}), (ML^{-1}T^{-1}), (LT^{-2}), (ML^{-1}T^{-2})].$$

Размерность физических величин:

$$F: MLT^{-2}; L: L; V: LT^{-1}; p: ML^{-3}; m: ML^{-1}T^{-1}; g: LT^{-2}; P: ML^{-1}T^{-2}.$$

Для приведения исходной зависимости к безразмерному виду последовательно исключаем основные размерности с использованием параметров, входящих в правую часть уравнения.

Первой исключим размерность массы, используя параметр p (плотность жидкости). Преобразования подлежат только те переменные, которые содержат исключаемую размерность:

$$\begin{aligned} F/p &= f(L, V, p/p, m/p, g, P/p); \\ L^4 T^{-2} &= f[(L), (LT^{-1}), (1), (L^2 T^{-1}), (LT^{-2}), (L^2 T^{-2})]. \end{aligned}$$

Параметр p/p теперь можно исключить из правой части:

$$\begin{aligned} F/p &= f(L, V, m/p, g, P/p); \\ L^4 T^{-2} &= f[(L), (LT^{-1}), (L^2 T^{-1}), (LT^{-2}), (L^2 T^{-2})]. \end{aligned}$$

Подобные преобразования допустимы лишь в рассматриваемой ситуации, когда форма функциональной связи между параметрами не определена.

Следующей исключим размерность времени, используя для этого скорость V :

$$\begin{aligned} F/p/V^2 &= f(L, V/V, m/p/V, g/V^2, P/p/V^2); \\ L^2 &= f[(L), (1), (L), (1/L), (1)], \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} F/p/V^2 &= f(L, m/p/V, g/V^2, P/p/V^2); \\ L^2 &= f[(L), (L), (1/L)]. \end{aligned}$$

Последней исключаем линейную размерность, используя переменную L :

$$F/p/V^2/L^2 = f(L/L, m/p/V/L, Lg/V^2, P/p/V^2); 1 = f[(1), (1), (1)],$$

или

$$F/p/V^2/L^2 = f[(m/p/V/L), (Lg/V^2), (P/p/V^2)].$$

Последняя зависимость аналогична ранее полученному критериальному уравнению.

Затруднения в применении метода Ипсена появляются в задачах с увеличением числа переменных и числа используемых для анализа основных размерностей (четыре – пять). В этих случаях для исключения размерностей следует использовать комбинации нескольких определяющих процесс параметров. Каких-либо рекомендаций о последовательности исключения размерностей и о выборе используемых для этого целесообразных комбинаций параметров дать не представляется возможным.

Метод Барра (линейных пропорциональностей)

Рассмотренные выше методы предоставляют небольшую возможность получать не только корректный, но и удобный для исследователя набор безразмерных комплексов. Такие решения можно найти комбинированием переменных, однако эта процедура достаточно утомительна, а полный набор удобных решений далеко не очевиден.

С целью устранения этого недостатка в конце 60-х гг. Барр разработал метод линейных пропорциональностей. Его суть заключается во включении в процедуру анализа размерностей промежуточного шага, обеспечивающего преобразование первоначально неоднородного по размерности уравнения в однородное с одной размерностью, в частности линейной. Полученные таким образом комплексы названы линейными пропорциональностями. Используемый при этом принцип переопределенности позволяет исследователю осуществить выбор удобных комбинаций из возможного их множества. Такое однородное по размерности уравнение приводится к безразмерному аналогично методу Ипсена.

Применительно к рассмотренному примеру определенные заранее линейные пропорциональности приведены в табл. 4.

Таблица 4

Линейные пропорциональности

| Переменные | m | P | V | F |
|---------------------------------------|-----------------------|----------------|----------|--------------------|
| Ускорение «g» | $(m/p)^{2/3}/g^{1/3}$ | $P/(pg)$ | V^2/g | $F/(pg)^{1/3}$ |
| Динамический коэффициент вязкости m | | $m/(pP)^{1/2}$ | $m/(pV)$ | – |
| Давление P | | | – | $(F/P)^{1/2}$ |
| Скорость V | | | | $(F/(pV^2))^{1/2}$ |

Теперь для построения критериального уравнения можно использовать различные наборы безразмерных комбинаций исходя из удобства управления переменными при реализации эксперимента и контроля их изменения. При этом необходимо, чтобы каждая из основных переменных процесса встречалась в безразмерных комплексах не менее одного раза, а число членов однородного по размерности уравнения было на единицу больше числа членов однородного безразмерного уравнения. «Лишним» членом в однородном по размерности уравнении является линейный размер, который исключается при анализе уже известным образом.

В общем случае при комбинировании N переменных (без плотности и линейного размера) можно составить $(N - 1) + (N - 2) + \dots + 1$ линейных пропорциональностей, из которых необходимыми являются только $(N - 1)$. Применительно к примеру реально формируется восемь линейных пропорциональностей и возможными являются приведенные ниже некоторые варианты однородного по размерности уравнения:

$$(F/(pV^2))^{1/2} = f[m/(pV), m/(pP)^{1/2}, (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L];$$

$$(F/(pV^2))^{1/2} = f[m/(pV), P/(pg), (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L];$$

$$(F/(pV^2))^{1/2} = f[V^2/g, m/(pP)^{1/2}, (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L];$$

$$(F/(pV^2))^{1/2} = f[V^2/g, P/(pg), (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L];$$

$$(F/P)^{1/2} = f[m/(pV), m/(pP)^{1/2}, (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L];$$

$$(F/P)^{1/2} = f[m/(pV), P/(pg), (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L];$$

$$(F/P)^{1/2} = f[V^2/g, m/(pP)^{1/2}, (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L];$$

$$(F/P)^{1/2} = f[V^2/g, P/(pg), (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L];$$

$$\begin{aligned}
F/(pg)^{1/3} &= f[m/(pV), m/(pP)^{1/2}, (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L]; \\
F/(pg)^{1/3} &= f[m/(pV), P/(pg), (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L]; \\
F/(pg)^{1/3} &= f[V^2/g, m/(pP)^{1/2}, (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L]; \\
F/(pg)^{1/3} &= f[V^2/g, P/(pg), (m/p)^{2/3}/g^{1/3}, L] \text{ и др.}
\end{aligned}$$

Полученный ранее набор безразмерных комплексов является комбинацией следующих составляющих в приведенных уравнениях: $(F/(pV^2))^{1/2}$, $m/(pV)$, $P/(pg)$, V^2/g .

Таким образом, метод Барра предоставляет широкие возможности по формированию условий построения критериальных уравнений исходя из возможностей по организации и проведению эксперимента.

Получаемые тем или иным методом безразмерные комплексы в дальнейшем используются для построения масштабных физических моделей, контроля правильности экспериментальных исследований и переноса результатов физического эксперимента с моделей на натурные процессы.

2.2. К практическому занятию №2 «Построение математических моделей с использованием законов сохранения»

Численное решение задач, связанных с теплообменом, течением жидкости и другими сопутствующими процессами, можно начинать, когда законы, управляющие этими процессами, выражены в математической форме, обычно в виде дифференциальных уравнений. Подробный и полный вывод этих уравнений можно найти в стандартных учебниках. Наша цель заключается в ознакомлении с видом и смыслом этих уравнений. Будет показано, что все рассматриваемые здесь уравнения имеют одинаковую форму, определение которой является первым шагом в создании общего метода решения. Будут также рассмотрены некоторые свойства независимых переменных, использованных в этих уравнениях.

Смысл дифференциального уравнения. Каждое из рассматриваемых здесь дифференциальных уравнений выражает определенный закон сохранения. В каждом уравнении в качестве зависимой переменной используется некоторая физическая величина и отражен баланс между различными факторами, влияющими на эту переменную. Обычно зависимыми переменными в этих дифференциальных уравнениях являются удельные свойства, т. е., свойства, отнесенные к единице массы. Примерами являются массовая концентрация, скорость (т. е. количество движения единицы массы), удельная энтальпия. Члены дифференциального уравнения такого типа выражают воздействия на единицу объема. Поясним сказанное на примере. Пусть \mathbf{J} - поток некоторой зависимой переменной Φ . Рассмотрим показанный на рис. 1 контрольный объем, стороны которого равны dx , dy и dz . Поток, втекающий через одну поверхность площадью $dydz$, обозначим J_x (J_x - составляющая вектора \mathbf{J}), а поток, вытекающий через противоположную поверхность, обозначим $J_x + (\partial J_x / \partial x)dx$. Таким образом, чистое истечение через площадку поверхности равно $(\partial J_x / \partial x) dx dy dz$. Рассматривая аналогичным образом потоки в направлениях y и z , а также замечая, что $dx dy dz$ - величина рассматриваемого объема, получаем чистое истечение на единицу объема

$$\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = \text{div } \mathbf{J}. \quad (1)$$

Такая интерпретация $\text{div } \mathbf{J}$ особенно полезна ввиду того, что как будет видно ниже, построение численного метода будет выполняться на основе принципа баланса для контрольного объема.

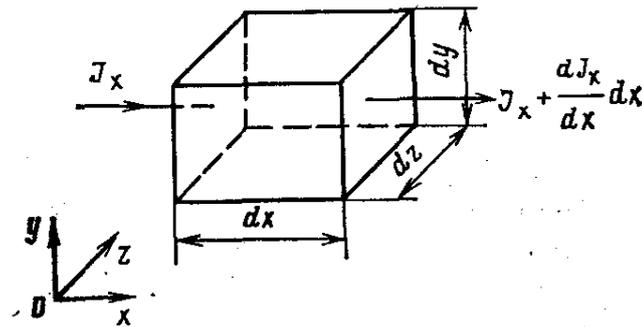


Рис. 1. Баланс потоков через контрольный объем.

К единице объема отнесите также член $\partial(\rho\Phi)/\partial t$, который описывает скорость изменения. Если Φ - удельное свойство, ρ - плотность, то $\rho\Phi$ - количество соответствующего экстенсивного свойства в единице объема. Таким образом, $\partial(\rho\Phi)/\partial t$ - скорость изменения соответствующего свойства в единице объема.

Дифференциальное уравнение состоит из членов, каждый в которых выражает воздействие на единицу объема, а сумма - баланс этих воздействий. Рассмотрим для примера несколько стандартных дифференциальных уравнений и получим их обобщенную форму.

Сохранение химической компоненты. Пусть m_i - массовая концентрация химической компоненты. При наличии поля скорости уравнение сохранения m_i записывается в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_i) + \text{div}(\rho \mathbf{u} m_i + \mathbf{J}_i) = R_i. \quad (2)$$

Здесь $\partial(\rho m_i)/\partial t$ - скорость изменения массы компоненты в единице объема; $\rho \mathbf{u} m_i$ - конвективный поток компоненты, т. е. поток переносимый общим полем течения $\rho \mathbf{u}$; \mathbf{J}_i - диффузионный поток, обусловленный чаще всего градиентом массовой концентрации m_i . Дивергенция этих двух потоков (конвективного и диффузионного) составляет второй член дифференциального уравнения. Величина R_i в правой части обозначает скорость образования компоненты в единице объема, обусловленного химической реакцией. Заметим, что в зависимости от того, что происходит в действительности - образование компоненты или ее уничтожение, R_i может быть положительной или отрицательной. Для нереагирующей компоненты $R_i = 0$.

Если для \mathbf{J}_i справедлив закон Фика, то можно записать

$$\mathbf{J}_i = -\Gamma_i \text{grad } m_i, \quad (3)$$

где Γ - коэффициент диффузии.

При подстановке (3) в (2) получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_i) + \text{div}(\rho \mathbf{u} m_i) = \text{div}(\Gamma_i \text{grad } m_i) + R_i. \quad (4)$$

Уравнение энергии. В наиболее общем виде это уравнение включает воздействия большого количества факторов. Так как нас интересует, скорее, форма, а не подробная запись членов уравнения, достаточно рассмотреть несколько частных случаев.

В случае стационарного течения с небольшой скоростью и пренебрежимо малой вязкой диссипацией уравнение энергии можно представить в виде

$$\text{div}(\rho \mathbf{u} h) = \text{div}(k \text{grad } T) + S_h. \quad (5)$$

где h - удельная энтальпия; k - коэффициент теплопроводности; T - температура; S_h - объемная скорость выделения теплоты.

Член $\text{div}(k \text{grad } T)$ описывает влияние переноса теплоты теплопроводностью внутри жидкости согласно закона Фурье.

Для идеальных газов, твердых тел и жидкостей можно записать

$$c \text{grad } T = \text{grad } h. \quad (6)$$

Здесь c - удельная теплоемкость при постоянном давлении. Подставив это выражение

в уравнение энергии, получим

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{u} h) = \operatorname{div}\left(\frac{k}{c} \operatorname{grad} h\right) + S_h. \quad (7)$$

Если c постоянна, то зависимость h от T упрощается до

$$h = cT \quad (8)$$

и уравнение энергии принимает следующий вид:

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{u} T) = \operatorname{div}\left(\frac{k}{c} \operatorname{grad} T\right) + \frac{S_h}{c}. \quad (9)$$

Подобным образом можно выбирать в качестве зависимой переменной энтальпию или температуру.

Если считать скорость $\mathbf{u} = 0$, то получим уравнение стационарной теплопроводности

$$\operatorname{div}\left(\frac{k}{c} \operatorname{grad} T\right) + \frac{S_h}{c} = 0. \quad (10)$$

Уравнение количества движения. Для ньютоновской жидкости дифференциальное уравнение, выражающее сохранение количества движения в данном направлении, можно записать аналогичным образом. Однако это сделать несколько сложнее, так как надо рассматривать касательное и нормальное напряжения, а также из-за большей сложности закона вязкого трения Стокса по сравнению с законом Фика или законом Фурье. Пусть x -составляющая скорости равна u , тогда соответствующее уравнение количества движения примет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} u) = \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} u) - \frac{\partial p}{\partial x} + B_x + V_x. \quad (11)$$

где μ - коэффициент вязкости; p - давление; B_x - x -составляющая объемной силы (приложенной к единице объема); V_x - дополнительные к $\operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} u)$ вязкие члены.

Усредненные по времени уравнения для турбулентного течения. В практических приложениях течения обычно имеют турбулентный характер и интерес представляют, как правило, средние по времени характеристики таких течений. Поэтому с помощью операции усреднения уравнения для нестационарного ламинарного течения преобразуются в усредненные по времени уравнения для турбулентного течения. При этом предполагается, что имеют место быстрые случайные пульсации усредняемой величины около среднего значения. В результате операции усреднения возникают дополнительные члены - так называемые напряжения Рейнольдса, турбулентный тепловой поток, турбулентный диффузионный поток и т. д. Задачей модели турбулентности является выражение этих потоков через средние характеристики течения.

Во многих моделях турбулентности для выражения турбулентных напряжений и потоков используется концепция коэффициентов турбулентной вязкости и диффузии. В результате усреднения по времени уравнения для турбулентного течения имеют тот же вид, что и уравнения для ламинарного течения, с той лишь разницей, что коэффициенты молекулярного обмена, такие, как коэффициенты вязкости, диффузии и теплопроводности, заменяются на эффективные (т. е. молекулярные плюс турбулентные) коэффициенты обмена. С вычислительной точки зрения турбулентное течение эквивалентно, в рамках такого подхода, ламинарному течению с довольно сложной зависимостью для коэффициента вязкости (это же справедливо и для течения неньютоновской жидкости которое можно рассматривать как течение среды с зависящим градиента скорости коэффициентом вязкости).

Уравнение для кинетической энергии турбулентности. В широко распространенной в настоящее время модели турбулентности включающей два уравнения, в качестве одного из уравнений входит уравнение для кинетической энергии k пульсационного движения, имеющее вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} k) = \operatorname{div}(\Gamma_k \operatorname{grad} k) + G - \rho \varepsilon. \quad (12)$$

где Γ_k - коэффициент диффузии k ; G - скорость генерации энергии турбулентности; ε - скорость диссипации. В целом величина $G - \rho\varepsilon$ - источниковый член уравнения. Аналогичное дифференциальное уравнение записывается для переменной ε .

Обобщенное дифференциальное уравнение. Краткое рассмотрение некоторых дифференциальных уравнений, описывающих теплообмен и гидродинамику, показывает, что интересующие нас зависимые переменные подчиняются обобщенному закону сохранения. Если обозначить зависимую переменную Φ , то обобщенное дифференциальное уравнение примет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \text{div}(\rho\mathbf{u}\Phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad } \Phi) + S. \quad (13)$$

где Γ - коэффициент диффузии, S - источниковый член. Конкретный вид Γ и S зависит от смысла переменной Φ (в действительности следовало бы использовать обозначения Γ_Φ и S_Φ , но это привело бы к слишком большому количеству нижних индексов дальнейших выкладках).

В обобщенное дифференциальное уравнение входят четыре члена: нестационарный, конвективный, диффузионный и источниковый. Зависимая переменная Φ обозначает различные величины, такие, как массовая концентрация химической компоненты, энтальпия или температура, составляющая скорости, кинетическая энергия турбулентности или масштаб турбулентности. При этом коэффициенту диффузии Γ и источниковому члену S следует придать соответствующий каждой из этих переменных смысл.

Не все диффузионные потоки определяются градиентом соответствующей переменной. Однако запись диффузионного члена уравнения в виде $\text{div}(\Gamma \text{grad}\Phi)$ не ограничивает применение обобщенного уравнения для Φ случаями, когда диффузионные процессы обусловлены соответствующими градиентами. Ту часть диффузионного члена уравнения, которую нельзя выразить в указанном виде, всегда можно записать как часть источникового члена; фактически коэффициент диффузии Γ можно даже считать равным нулю.

Явная запись диффузионного члена в обобщенном уравнении для Φ через ее градиент использовалась потому, что для большинства зависимых переменных диффузионный член имеет именно такой вид.

Входящая в (13) плотность может быть связана с такими переменными, как массовая концентрация и температура, через уравнение состояния. Эти переменные и составляющие скорости также подчиняются обобщенному дифференциальному уравнению. Кроме того, поле скорости должно удовлетворять дополнительному ограничению, а именно закону сохранения массы или уравнению неразрывности, имеющему вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho\mathbf{u}) = 0. \quad (14)$$

Уравнения (13) и (14) записаны в векторном виде. Эти уравнения можно представить также в тензорной форме в декартовой системе координат:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \Phi) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) + S, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) &= 0 \end{aligned} \quad (15)$$

где нижний индекс j в соответствии с тремя пространственными координатами принимает значения 1, 2, 3. Повторение этого индекса дважды обозначает суммирование трех аналогичных членов, например

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = \frac{\partial}{\partial x_1}(\rho u_1) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\rho u_2) + \frac{\partial}{\partial x_3}(\rho u_3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_3} \right), \quad (16)$$

Одно из достоинств тензорной записи в декартовой системе координат заключается в том, что одномерный вид уравнения можно получить, если просто опустить индекс j . Процедура записи дифференциального уравнения в обобщенном виде (13) заключается в его преобразовании до тех пор, пока нестационарный, диффузионный и источниковый члены уравнения для данной зависимой переменной не примут стандартный вид. Тогда в качестве выражения для Γ берут коэффициент перед $\text{grad}\Phi$ в диффузионном члене, а все оставшиеся члены в правой части обозначают S (источниковый член).

До сих пор мы рассматривали размерные переменные, однако, иногда удобнее иметь дело с безразмерными величинами. При этом также можно считать, что каждое из дифференциальных уравнений, записанное через безразмерные переменные, можно представить в обобщенном виде (13), где Φ - безразмерная зависимая переменная, а Γ и S - безразмерные коэффициент диффузии и источниковый член. Во многих случаях безразмерный коэффициент $\Gamma = 1$, а S принимает значения 0 либо 1.

Тот факт, что все интересующие нас дифференциальные уравнения, описывающие тепло- и массообмен, гидродинамику и турбулентность, можно рассматривать как частные случаи обобщенного уравнения для Φ , позволяет ограничиться численным решением (13). Следовательно, при создании программы расчета достаточно записать общую последовательность операций для решения уравнения (13), которую можно применять для нахождения различных Φ при использовании соответствующих выражений для Φ и S и, конечно, соответствующих начальных и граничных условий. Таким образом, концепция обобщенного уравнения позволяет сформулировать обобщенный численный метод и подготовить многоцелевые программы расчета.

2.3. К практическому занятию №3 «Приведение математических моделей к безразмерному виду и определение критериев подобия» - 6 ч.

Теория подобия и анализ размерностей являются методами частичного анализа. Каждый из них позволяет получить неполный ответ, и конечный результат применения того и другого представляет собой безразмерное функциональное уравнение, пригодное для разработки моделей. Однако если анализ размерностей служит в первую очередь средством интерпретации экспериментальных данных на основе законов моделирования, полученных из уравнения связи безразмерных параметров, то теория подобия и анализ подобия предназначены главным образом для вывода законов моделирования, на основании которых можно получить безразмерное функциональное уравнение.

Инструменты анализа размерностей являются основой для построения физических масштабных моделей, подобных натурным техническим системам. Подобными являются такие технические системы, у которых подобны все характеризующие параметры, т.е. все векторные величины геометрически подобны, а все скалярные величины пропорциональны в соответствующих точках пространства и в соответствующие моменты времени.

При решении технических задач физическое подобие рассматривается как совокупность подобия частных характеристик явления.

Условиями подобия являются:

- принадлежность явлений природы и модели к одному классу дифференциальных уравнений;
- подобие условий однозначности;

— равенство критериев подобия для природы и модели в сходственных точках исследуемого пространства.

Первое условие при использовании в модели и натуре тех же физических эффектов выполняется автоматически.

Под **подобием условий однозначности** понимается подобие начальных и граничных условий, геометрическое, кинематическое и динамическое подобие. Если для исследуемой системы характерны температурные и химические процессы, то в условия однозначности входят также температурное и химическое подобие.

Геометрическое подобие выражается равенством всех соответственных углов и пропорциональностью всех линейных размеров:

Кинематическое подобие системы определяется тождественностью направления и пропорциональностью величин времени, действующих скоростей и ускорений:

Динамическое подобие системы определяется тождественностью направления действия и пропорциональностью вектора сил G или напряжений σ :

Температурное подобие и подобие тепловых потоков определяется соответственно геометрическим подобием температурных полей и пропорциональностью всех температур.

Химическое подобие предполагает пропорциональность концентраций веществ в сходственных точках пространства.

При моделировании физических явлений масштабы k_l , k_v , k_G , k_σ и другие называют **масштабами модели** (*масштабами моделирования, коэффициентами подобия*).

В соответствии со свойствами пропорции из соотношения следует правило замещения:

$$(\Delta l_n / \Delta l_m)_{\Delta l \rightarrow 0} = dl_n / dl_m = k_l = \text{const},$$

из которого ясно, что при установлении физического подобия явлений вместо производных (и подынтегральных выражений) от характерных величин можно рассматривать соответствующие соотношения их конечных значений, которые называются *интегральными аналогами*. Последнее следует из положения, что предел постоянной величины равняется самой величине.

Третье условие подобия проверяется контролем равенства значений критериев подобия для природы и модели в сходственных точках исследуемого пространства переменных. Критерии подобия отражают в безразмерном виде основные закономерности и явления, характерные для исследуемого объекта. Их число и состав зависят от физической природы явлений.

Методы установления подобия явлений и процессов базируются на трех основных теоремах подобия и дополнительных положениях.

Первая теорема постулирует третье условие подобия: *подобные объекты (явления, процессы, системы, знаковые образования и др.) имеют индикаторы подобия, равные единице, и численно одинаковые критерии подобия*.

Под индикаторами подобия понимаются отношения масштабов сходственных величин (сил, масс и т.п.). Равенство индикаторов подобия означает моделирование сходственных параметров процесса в одном масштабе.

Критерии подобия можно преобразовать в критерии другой формы и получать новые критерии путем операций деления и перемножения как между собой, так и на постоянную безразмерную величину. При этом общее число критериев должно оставаться неизменным.

Вторая теорема (П-теорема, теорема Букингема) была уже рассмотрена. Один из ее вариантов: *всякое уравнение физического процесса $x_1 = f(x_2, x_3, \dots, x_n)$, объединяющее между собой n величин, среди которых t величин обладают независимыми размерностями, можно преобразовать к критериальному уравнению, которое связывает $(n - t)$ кри-*

териями подобия. Теорема постулирует возможность построения безразмерных уравнений связи и минимальное число критериев подобия. Практические задачи иногда приводят к получению большего числа критериев подобия. В этих случаях верхняя граница устанавливается правилом Ван Дрифта: *возможное число безразмерных комплексов равно числу определяющих процесс величин, исключая число тех величин, которые не дают безразмерных комплексов.*

Третья теорема постулирует необходимые и достаточные условия подобия: *необходимым и достаточным условием подобия двух объектов является пропорциональность сходственных параметров, входящих в условия однозначности, и равенство определяющих критериев подобия.* Так как физическая природа явлений в объекте существенно неравномерна, то построение модели проводится по основным критериям подобия, отражающим наиболее существенные явления исследуемого процесса. Такие критерии называются *определяющими критериями* подобия.

Дополнительные положения

1. Сложные объекты, явления, процессы, системы, составленные из нескольких подсистем, соответственно подобных в отдельности, подобны и в целом, если подобны условия однозначности на границах между подсистемами или равны критерии подобия, составленные из параметров, общих для подобных систем.

2. Условия подобия, справедливые для линейных систем, могут быть распространены и на нелинейные системы при соблюдении дополнительного условия – совпадения относительных характеристик переменных параметров, т.е. их зависимостей от переменных величин, заданных с учетом динамики происходящих явлений.

Условия подобия, справедливые для изотропных и однородных систем, могут быть распространены и на анизотропные и неоднородные системы, если только соответственные относительные анизотропии и неоднородности в сравниваемых системах одинаковы. В ряде случаев для определяющих компонентов процесса справедливо условие суперпозиции. Тогда подобие явлений целесообразно устанавливать на основе положений аддитивности. Аддитивно подобными называют также тела, которые можно расположить так, что границы тел будут совпадать всеми своими точками в результате равномерной деформации.

Для классической мультипликативной теории подобия связь между параметрами системы определяют выражения типа $x_{Ni} = k_{xi}x_{Mi}$. Если физические системы аддитивно подобны, то характеризующие их величины преобразуют по формуле

$$x_{Ni} = x_{Mi} + c_i,$$

где c_i – аддитивная константа подобия.

Между значениями x и c существует соотношение $c_i = x_{Mi}(k_{xi} - 1)$.

В некоторых случаях (например, при моделировании рек) модели с пропорциональными линейными масштабами не могут точно воспроизводить физические характеристики природы. Тогда необходимо и возможно отходить от строгого геометрического подобия без значительных потерь в точности. Для этого вводят несколько линейных масштабов, например вертикальный и горизонтальный. В этих условиях характерный (определяющий) размер (например, вертикальный, горизонтальный или их комбинацию) выбирают на основе рассмотрения физической сущности исследуемого процесса.

В природе нет полностью сходных явлений. При решении конкретных технических задач имеет место приближенное подобие, которое обусловлено наличием упрощающих допущений, оцениваемых в дальнейшем на основании экспериментальных и аналитических исследований. Приближенное моделирование характеризуется различной степенью приближения к полному моделированию.

Способы определения критериев подобия

При построении физических моделей критерии подобия определяют на основе двух подходов, каждый из которых представлен набором способов. Первый подход основан на применении анализа размерностей, определяющих исследуемый процесс. Второй подход базируется на анализе систем дифференциальных уравнений, описывающих процесс, и условий однозначности.

Подход на основе анализа размерностей может быть представлен рассмотренными ранее методами Релея, Букингема, Ипсена и методом Барра.

Второй подход представлен тремя наиболее распространенными методами: методом подобных преобразований, интегральных аналогов, методом приведения уравнения к безразмерному виду.

Метод подобных преобразований предписывает запись уравнений для природы через величины модели, умноженные на соответствующие масштабные коэффициенты. Например, простейшая модель поступательного движения в форме второго закона Ньютона после такого преобразования будет иметь вид:

$$k_M M_M \frac{dk_V V_M}{dk_t t_M} = k_R R_M; \quad \frac{k_L dL_M}{k_t dt_M} = k_V V_M.$$

Далее делением одной части уравнения на другую (например, левую на правую) приводят его к безразмерному виду:

$$\frac{k_M k_V}{k_t k_R} \frac{M_M}{R_M} \frac{dV_M}{dt_M} = 1;$$

$$\frac{k_L}{k_V k_t} \frac{dL_M}{dt_M} \frac{1}{V_M} = 1.$$

Полученные таким образом индикаторы подобия являются критериями подобия, выраженными через масштабные коэффициенты. Первый из них представляет критерий Ньютона, второй – критерий Стурхала.

Метод интегральных аналогов заключается в приведении исходного уравнения к безразмерному виду, как и в методе подобных преобразований:

$$\frac{M}{R} \frac{dV}{dt} = 1, \quad \frac{dL}{dt} \frac{1}{V} = 1;$$

в замене величин их размерностями (следует предварительно опустить знаки дифференцирования и интегрирования, заменив их знаками соответствия):

$$\frac{MV}{Rt} \sim 1; \quad \frac{L}{tV} \sim 1.$$

Полученные таким образом безразмерные сочетания размерных величин и являются критериями подобия.

Рассмотренные первые два метода используют процедуру приведения уравнений к безразмерному виду, которая в ряде случаев может быть использована самостоятельно для получения критериев подобия.

Типовые критерии подобия

Практикой моделирования технических систем различной физической природы установлены характерные для них типовые критерии подобия.

Действие активных сил определяется **критерием Ньютона**, являющимся модифицированной записью второго закона Ньютона:

$$Ne = \frac{F}{(pV^2L^2)}.$$

Действительно,

$$F = Ma = pva = pL^2vTaT^{-1} = pV^2L^2,$$

где M , p , a , T – масса, плотность, ускорение и время движения рассматриваемого объекта.

Так как сила есть произведение давления на площадь, то из критерия Ньютона элементарно получается следующий безразмерный комплекс – **критерий Эйлера**:

$$Eu = \frac{P}{V^2 p}.$$

Если в системе действуют только силы давления, то при наличии геометрического и кинематического подобия, подобия начальных и граничных условий равенство критерия Эйлера в модели и натуре выполняется автоматически.

Критерий Рейнольдса (Re) определяет характер течения вязкой жидкости под действием сил давления при наличии сил внутреннего трения:

$$Re = \frac{m}{VpL},$$

где m – коэффициент динамической вязкости.

Критерий Фруда определяет пропорциональность сил давления и сил тяжести:

$$Fr = V(gL)^{-0.5} = V^2(gL)^{-1}.$$

Зависимость между кинематическими характеристиками процесса устанавливается **критерием Стурхаля**, называемым также критерием **гомохронности (Ho)**:

$$Sh = VT/L = Ho.$$

При исследовании конструкций с учетом упругих свойств материалов важным является **критерий Коши**:

$$Ca = \frac{pV^2}{E},$$

где E – модуль упругости материала.

Типовые наборы критериев подобия формируют для групп процессов, изучаемых конкретными предметными областями знания. При этом один и тот же критерий, выраженный через величины, характерные для разных предметных областей, может быть выражен различным образом.

Так как сложные системы характеризуются взаимодействием процессов и явлений различной физической природы, то отражающие их критерии подобия находятся в противоречивой связи. Поэтому моделирование таких систем проводится только приближенно по основным, определяющим критериям. Образующиеся при этом погрешности моделирования определяются и учитываются при переводе результатов моделирования на натурную систему. В ряде случаев возможно согласование противоречивых критериев специальными мерами (подогрев жидкости с целью получения необходимой вязкости; использование сосредоточенных упругостей в модели, эквивалентных распределенным в натуре и т.д.).

2.4. К практическому занятию №4 «Построение дискретных аналогов математических моделей и решение систем разностных уравнений»

Выше было показано, что теоретическое исследование физических явлений имеет значительные преимущества перед экспериментальным. Многие процессы описываются дифференциальными уравнениями, которые можно представить в виде обобщенного уравнения для переменной Φ . Теперь наша основная задача заключается в разработке способов решения этого уравнения. Для простоты предположим, что переменная Φ является функцией только одной независимой переменной. Однако разработанные здесь идеи будут применимы также в случае зависимости более чем от одной независимой переменной.

Задача. Численное решение дифференциального уравнения стоит из набора чисел, по которому можно построить распределение зависимой переменной Φ . В этом смысле численный метод подобен лабораторному эксперименту, где мы имеем возможность определить распределение измеряемой величины в рассматриваемой области по набору показаний приборов. И исследователи, применяющие численный анализ, и экспериментаторы должны довольствоваться результатом, состоящим из конечного числа значений, хотя их количество можно, по крайней мере, в принципе сделать достаточным для практических целей.

Предположим, что мы хотим описать изменение Φ с помощью полинома

$$\Phi = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m. \quad (1)$$

и используем для определения значений конечного числа коэффициентов $a_0, a_1, a_2, \dots, a_m$ численный метод. Это, позволит рассчитать значения Φ в любой точке x путем подстановки значения x и значений a_i в (1). Однако если конечная цель заключается в определении значений Φ в различных точках, эта процедура несколько неудобна. Сами по себе значения коэффициентов a_i не представляют особого интереса, а для получения требуемых значений Φ необходимо выполнить операцию подстановки. Данное рассуждение наводит на следующую мысль: почему бы не разработать метод, в котором в качестве первичных неизвестных использовались значения Φ в некоторых заданных точках? Действительно, большинство методов численного решения дифференциальных уравнений принадлежит как раз к этой категории, поэтому ограничимся только такими методами.

Итак, в качестве основных неизвестных в численном методе рассматриваются значения зависимой переменной в конечном числе точек (называемых сеточными узлами или узловыми точками) расчетной области. Метод включает в себя получение системы алгебраических уравнений для этих неизвестных и алгоритм решения этих уравнений.

Концепция дискретизации. Рассматривая значения в узловых точках, мы заменили непрерывную информацию, содержащуюся в точном решении дифференциального уравнения, дискретными значениями. Таким образом, мы дискретизировали распределение Φ , и этот класс численных методов назовем *методами дискретизации*.

Алгебраические уравнения, которые назовем *дискретным аналогом* исходного уравнения, включающие неизвестные значения Φ в выбранных узловых точках, получаются из дифференциального уравнения, описывающего изменение величины Φ . При получении этих уравнений надо использовать некоторое предположение о характере изменения Φ в интервале между узловыми точками. Хотя можно выбрать этот профиль Φ так, что достаточно одного алгебраического выражения для всей расчетной области, часто бывает более удобным использовать кусочные профили, такие, что данный участок профиля описывает изменение Φ только в небольшой части этой области через значения Φ в узловых точках, находящихся внутри и вокруг этой части. Итак, расчетная область разбивается на некоторое число подобластей, с каждой из которых можно связать свой предполагаемый профиль. Это другой аспект концепции дискретизации связан с дискретизацией непрерывной расчетной области. Именно эта систематическая дискретизация пространства и зависимых переменных делает возможным замену дифференциальных уравнений, описывающих процесс, простыми алгебраическими уравнениями, которые могут быть решены относительно просто.

Структура дискретного аналога исходного уравнения. Дискретный аналог представляет собой алгебраическое уравнение связывающее значение Φ в некоторой группе узловых точек. Это уравнение получается из дифференциального уравнения, описывающего изменение Φ , и, следовательно, оно несет ту же физическую информацию, что и дифференциальное уравнение. То, что в дискретный аналог входят значения только в нескольких узловых точках, является следствием кусочного характера выбранных профилей. При этом значение Φ в некоторой узловой точке оказывает влияние только на распределение Φ в ее ближайшей окрестности. Предполагается, что при очень большом числе узловых точек решение дискретных уравнений сближается с точным решением соответствующего дифференциального уравнения. Это следует из следующего соображения: при сближении узловых точек изменение Φ между соседними точками становится малым и тогда конкретный характер предполагаемого профиля становится не существенным.

Возможные дискретные аналоги данного дифференциального уравнения неединственны, хотя предполагается, что в пределе очень большого числа узловых точек все типы дискретных аналогов дают одно и то же решение. Отличие дискретных аналогов является следствием различных предположений о характере профиля зависимой переменной и способов получения аналога.

До сих пор мы преднамеренно избегали упоминания конечно-разностного или конечно-элементного методов. Сейчас можно сказать, что данные методы можно рассматривать как две альтернативные версии метода дискретизации, описанного здесь в общем виде. Различие между ними вызвано способами выбора профиля и вывода дискретных аналогов уравнения. Находящийся, главным образом, в центре внимания данной, книги метод имеет характер конечно-разностного метода, однако он содержит множество идей, характерных для конечно-элементного метода. Назвав настоящий метод конечно-разностным, можно было бы склонить читателя к широко распространенной практике использования конечно-разностных методов. Поэтому назовем его просто методом дискретизации. В гл. 7 покажем, как из общих принципов, изложенных в этой книге, можно сконструировать метод, имеющий вид метода конечных элементов.

Методы получения дискретных аналогов

Дискретизацию данного дифференциального уравнения можно осуществить множеством способов. Опишем в общих чертах несколько распространенных методов и покажем, что один из них предпочтительней всех остальных.

Использование рядов Тэйлора. Обычная процедура получения конечно-разностных уравнений заключается в аппроксимации производных в дифференциальном уравнении обрешеченными рядами Тэйлора. Рассмотрим узловые точки, показанные на рис. 1. Разложение в ряд Тэйлора около узловой точки 2, расположенной посередине между точками 1 и 3 (так что $\Delta x = x_2 - x_1 = x_3 - x_2$ - дает

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= \Phi_2 - \Delta x \left(\frac{d\Phi}{dx} \right)_2 + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \left(\frac{d^2\Phi}{dx^2} \right)_2 - \dots; \\ \Phi_3 &= \Phi_2 + \Delta x \left(\frac{d\Phi}{dx} \right)_2 + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \left(\frac{d^2\Phi}{dx^2} \right)_2 + \dots;\end{aligned}\tag{2}$$

Отбрасывая члены обоих рядов, начиная с четвертого, вычитая и складывая уравнения, получаем

$$\begin{aligned}\left(\frac{d\Phi}{dx} \right)_2 &= \frac{\Phi_3 - \Phi_1}{2\Delta x}; \\ \left(\frac{d^2\Phi}{dx^2} \right)_2 &= \frac{\Phi_1 - 2\Phi_2 + \Phi_3}{(\Delta x)^2}.\end{aligned}\tag{3}$$

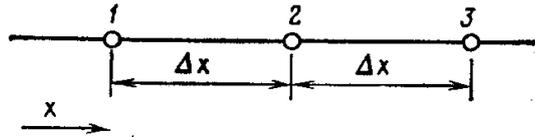


Рис. 1. Три последовательные узловые точки, используемые при разложении в ряд Тэйлора

Подставляя эти выражения в дифференциальное уравнение, можно получить конечно-разностное уравнение.

В данном методе предполагается, что изменение Φ в зависимости от x близко к полиномиальному, так что высшими производными можно пренебречь. Однако это предположение приводит к желательным последствиям, например, для случая экспонентного изменения Φ . Вывод с помощью рядов Тэйлора сравнительно прост, но менее гибок и не способствует пониманию физического смысла членов уравнения.

Вариационный метод. Другой метод получения дискретных аналогов основывается на вариационном исчислении. Для полного понимания метода необходимо знать основы вариационного исчисления. Однако для наших целей достаточно иметь общее представление об основных моментах метода.

В вариационном исчислении показано, что решение данных дифференциальных уравнений эквивалентно минимизации соответствующей величины - функционала. Эта эквивалентность называется *вариационным принципом*. Искомый дискретный аналог подается из условий минимума функционала относительно значений зависимой переменной в узловых точках. Вариационный метод очень часто используется в конечно-элементных методах исследования напряжений, где его можно связать с принципом виртуальных перемещений. Кроме математической сложности и трудности понимания основным недостатком метода является его ограниченная применимость, связанная с тем, что вариационный принцип существует не для всех представляющих интерес дифференциальных уравнений.

Метод взвешенных невязок. Эффективным методом решения дифференциальных уравнений является метод взвешенных невязок. Основной подход прост и интересен. Представим дифференциальное уравнение в виде

$$L(\Phi) = 0. \quad (6)$$

Предположим, что приближенное решение Φ имеет, например, вид,

$$\Phi = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m, \quad (7)$$

где a_i - неизвестные параметры.

Подставим Φ в дифференциальное уравнение (6) и выделим невязку R , которая равна:

$$R = L(\Phi). \quad (8)$$

Мы хотим сделать этот остаток в известном смысле малым. Предположим, что

$$\int WRdx = 0, \quad (9)$$

где W - весовая функция, а интеграл берется по рассматриваемой области. Выбирая последовательность весовых функций, можно получить количество уравнений, достаточное для нахождения параметров. Решив полученную систему алгебраических уравнений для неизвестных параметров, найдем приближенное решение дифференциального уравнения. Выбирая различные классы весовых функций, можно получить различные версии метода (имеющие свои названия).

Данный метод широко использовался для решения уравнений пограничного слоя, пока его почти не вытеснил метод конечных разностей. Однако можно установить его связь с конечно-разностным методом, или, точнее, с методом дискретизации, если рассматривать приближенное решение Φ не в виде единственной во всей области алгебраической функции, а как кусочный профиль с неизвестными параметрами, представляющими собой значения Φ

в узловых точках. Действительно, большая часть недавних разработок метода конечных элементов также основана на применении кусочных профилей в сочетании с разновидностью метода взвешенных невязок, известной как метод Галеркина.

Простейшей весовой функцией является $W=1$. С помощью такой функции можно в рамках данного метода построить систему уравнений, разбивая расчетную область на подобласти или контрольные объемы и выбирая в качестве весовой функции, одновременно равные единице в одной из подобластей и нулю во всех остальных. Этот вариант метода взвешенных невязок называют методом *подобласти* или методом *контрольного объема*. В нем полагается, что интеграл от невязки по каждому контрольному объему должен быть равен нулю. Так как в этой книге используется метод контрольного объема, то необходимо рассмотреть его более подробно.

Метод контрольного объема. Часто в элементарных учебниках по теплообмену приводят вывод конечно-разностного уравнений помощью метода рядов Тэйлора, а затем показывают, что результирующее уравнение соответствует условию теплового баланс небольшой области, содержащей узловую точку. Мы также видели, что метод контрольного объема можно рассматривать как частный случай метода взвешенных невязок. Основная идея метода контрольного объема легко понятна и поддается прямой физической интерпретации. Расчетную область разбивают на некоторое число непересекающихся контрольных объемов таким образом, что каждая узловая точка содержится в одном контрольном объеме. Дифференциальное уравнение интегрируют по каждому контрольному объему. Для вычисления интегралов используют кусочные профили, которые описывают изменение Φ между узловыми точками. В результате находят дискретный аналог дифференциального уравнения, в который входят значения Φ в нескольких узловых точках.

Полученный подобным образом дискретный аналог выражает закон сохранения Φ для конечного контрольного объема точно так же, как дифференциальное уравнение выражает закон сохранения для бесконечно малого контрольного объема. Одним из важных свойств метода контрольного объема является то, что в нем заложено точное интегральное сохранение таких величин, как масса, количество движения и энергия на любой группе контрольных объемов и, следовательно, на всей расчетной области. Это свойство проявляется при любом числе узловых точек, а не только в предельном случае очень большого их числа. Таким образом, даже решение на грубой сетке удовлетворяет точным интегральным балансам.

Результат решения дискретных уравнений относительно значений в узловых точках можно рассматривать двояко. В методе конечных элементов и большинстве методов взвешенных невязок в качестве приближенного решения берется предполагаемое изменение Φ , состоящее из значений в узловых точках и интерполяционных функций (или профилей) между узловыми точками. напротив, в конечно-разностном методе в качестве решения рассматриваются только значения ϕ в узловых точках и не делается никаких явных указаний о характере изменения Φ между этими точками. Эта ситуация напоминает лабораторный эксперимент, в котором распределение величины дается в виде измеренных значений в некоторых дискретных точках и не определяется ее изменение в промежутках между этими точками. Мы также используем этот подход в методе контрольного объема и будем искать решение в виде значений только в узловых точках. Интерполяционные формулы или профили будем рассматривать как вспомогательные, необходимые для расчета интегралов. После получения дискретных аналогов предположения о характере профилей можно не учитывать. Такая точка зрения дает полную свободу использования различных профилей для интегрирования различных членов дифференциального уравнения.

Для большей ясности применим метод контрольного объема к простой задаче.

Рассмотрим стационарную одномерную задачу теплопроводности, описываемую уравнением

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + S = 0, \quad (10)$$

где k - коэффициент теплопроводности; T - температура; S - скорость выделения теплоты в единице объема.

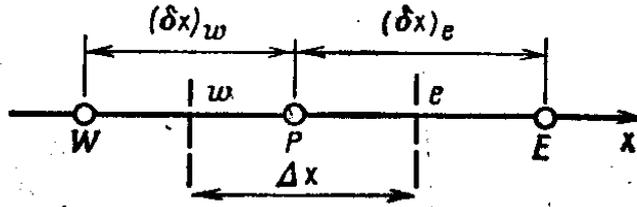


Рис. 2. Шаблон узловых точек в одномерной задаче

Подготовка. Для получения дискретного аналога будет использовано показанное на рис. 2 расположение узловых точек. В центре нашего внимания оказывается точка P , окруженная точками E и W (E - восточная сторона, т. е. направление вдоль оси x ; W - западная сторона, т. е. направление, обратное направлению оси x). Штрихом показаны границы контрольного объема; сейчас нас не интересует их точное расположение. Эти границы обозначены буквами e и w . Для рассматриваемой одномерной задачи предположим, что размеры контрольного объема в направлениях y и z равны единице. Таким образом, объем показанного контрольного объема равен $\Delta x \times 1 \times 1$. Интегрируя (10) по контрольному объему, получаем

$$\left(k \frac{dT}{dx} \right)_e - \left(k \frac{dT}{dx} \right)_w + \int_w^e S dx = 0. \quad (11)$$

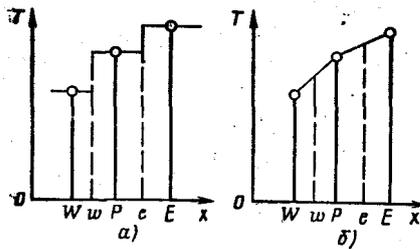


Рис. 3. Простые аппроксимации профилей: a — ступенчатый профиль; b — кусочно-линейный профиль

Предположение о виде профиля. Сделаем теперь предположение о виде профиля или интерполяционной формулы. На рис. 3 показаны два простых профиля. В простейшем случае предполагается, что значение T в узловой точке сохраняется для всего окружающего ее контрольного объема. Это предположение приводит к показанному на рис. 3, а ступенчатому профилю. Для такого профиля производная dT/dx на границах контрольного объема (т. е. в точке w или e) не определена. Эта трудность не возникает для кусочно-линейного профиля (рис. 3, б), у которого изменение T между узловыми точками описывается линейными интерполяционными функциями.

Дискретный аналог. Используя для определения dT/dx в уравнении (11) кусочно-линейный профиль, получим

$$\frac{k_e(T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w(T_P - T_W)}{(\delta x)_w} + S\Delta x = 0. \quad (12)$$

где S - среднее по контрольному объему значение S . Полезно записать уравнение (12) в следующем виде:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b. \quad (13)$$

где

$$a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e}; \quad a_W = \frac{k_w}{(\delta x)_w};$$

$$a_P = a_E + a_W; \quad b = \bar{S} \Delta x$$
(14)

Необходимо сделать следующие примечания:

1. Уравнение (13) записано в стандартном виде, в котором мы будем представлять дискретные аналоги. В левой части этого уравнения находится температура T_P в центральной узловой точке, а в правой - температуры в соседних точках и постоянная b . Как будет показано ниже, в двух- и трехмерном случаях число соседних точек возрастет. В общем случае удобно представить уравнение (13) в виде

$$a_P T_P = \sum a_{nb} T_{nb} + b. \quad (15)$$

где индекс nb обозначает соседние точки и суммирование производится по всем соседним точкам.

2. При выводе уравнения (13) использовалось простейшее приближение для профиля, позволившее рассчитать dT/dx . Конечно, возможно применение множества других интерполяционных функций.

3. Важно также понимать, что для различных величин можно использовать разные профили. Например, для вычисления \bar{S} необязательно предполагать линейный характер изменения S между узловыми точками, так же как необязательно рассчитывать k_e по его линейному изменению от k_P до k_E .

4. Нет необходимости использовать одинаковые профили для всех членов одного уравнения. Например, если бы в уравнение (10) входил дополнительный член, включающий T , можно было бы применить для его аппроксимации ступенчатый профиль вместо кусочно-линейного профиля, использованного для определения dT/dx .

Основные принципы выбора интерполяционных функций и профилей. Указанная выше свобода выбора интерполяционных функций и профилей ведет к существованию множества способов получения дискретных аналогов уравнения. Предполагается, что при увеличении числа узловых точек решения всех дискретных аналогов исходного уравнения совпадают. Однако наложим дополнительное требование, которое приведет к сокращению числа подходящих формул. Потребуем, бы решение, полученное даже на грубой сетке во-первых, всегда имело физически правдоподобный характер и, во-вторых, сохраняло полный баланс.

Понять, насколько физично полученное решение, легко, по крайней мере, в простых случаях (рис. 4). Правдоподобное решение должно иметь такой же естественный характер, что и точное решение. В задаче теплопроводности без источников никакой профиль температуры не может выходить за пределы температур границ тела. При охлаждении нагретого твердого тела окружающей жидкостью температура тела не может стать ниже температуры жидкости.

Мы будем всегда применять такие тесты к полученным дискретным аналогам уравнений.

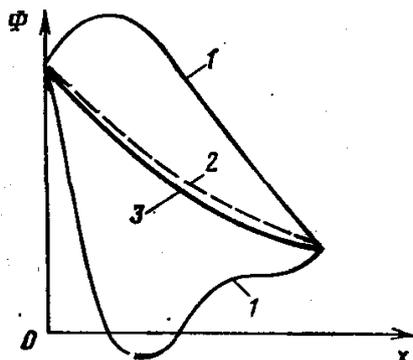


Рис. 4. Физически неправдоподобные (1), правдоподобное (2) и точное (3) решения

Условие полного баланса предполагает интегральное сохранение рассматриваемой величины во всей расчетной области. Мы будем утверждать, что тепловые потоки, массовые расходы и потоки количества движения должны правильно отражать баланс с соответствующими источниками и стоками, причем для любого числа узловых точек, а не только в пределе при очень большом числе точек.

Такую возможность сохранения полного баланса дает метод контрольного объема, но при этом необходимо обеспечить, как вскоре увидим, правильный учет потоков на границах контрольного объема. Принятые требования физического правдоподобия и сохранения полного баланса будут использоваться для выбора аппроксимаций профиля и соответствующего анализа. На основании этих ограничений будут получены некоторые, основные правила, которые позволят сравнить имеющиеся формулировки и разработать новые. С их помощью некоторые решения, определяемые обычно схематически, могут быть получены из физических соображений.

Аппроксимация источникового члена. Прежде чем перейти к определению основных правил, рассмотрим источниковый член S уравнения (10). Часто источниковый член является функцией самой зависимой переменной T и тогда желательно учесть эту зависимость при построении дискретного аналога. Однако формально можем учитывать только линейную зависимость, так как решение дискретных уравнений будет осуществляться, как увидим позже, с помощью методов решения систем линейных алгебраических уравнений. Способ линеаризации зависимости S от T обсуждается в следующей главе. Здесь нам достаточно записать среднее значение \bar{S} в виде

$$S = S_C + S_P T_P, \quad (15)$$

где S_C представляет собой постоянную составляющую S , а S_P - коэффициент (очевидно, что S_P не есть значение S в точке P).

Наличие T_P в (16) отражает тот факт, что при записи среднего значения \bar{S} мы предполагали, что значение T_P распространяется на весь контрольный объем, другими словами, использовался показанный на рис. 3, а ступенчатый профиль (следует заметить, что можно использовать ступенчатый профиль для S и кусочно-линейный для члена dT/dx).

Дискретный аналог уравнения теплопроводности с линеаризованным источниковым членом будет иметь такой же вид, как и (13), но с другими выражениями для коэффициентов:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b, \quad (16)$$

где

$$a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e}; \quad a_W = \frac{k_w}{(\delta x)_w}; \quad (17)$$

$$a_P = a_E + a_W - S_P \Delta x; \quad b = S_C \Delta x$$

Теперь можно сформулировать основные правила, которым должны подчиняться дискретные аналоги уравнений для обеспечения физичности решения и сохранения полного баланса. Эти кажущиеся простыми правила имеют глубокий смысл, и мы на протяжении всей книги будем руководствоваться ими при разработке методов.

Основные правила построения дискретных аналогов

Правило 1. Соответствие потоков на границах контрольного объема. Выражение потока через границу, общую для двух прилегающих контрольных объемов, при записи дискретных аналогов уравнения для этих объемов должно быть одним и тем же.

Обсуждение. Очевидно, что тепловой поток, покидающий один контрольный объем через его границу, должен быть равен потоку входящему через эту границу в соседний контрольный объем. В противном случае не будет сохраняться полный баланс теплоты. Хотя это требование и легко понять, надо следить, чтобы не было даже небольших его нарушений. Для изображенного на рис. 2 контрольного объема можно было рассчитать тепловые потоки

kdT/dx на границе по квадратичному профилю, проходящему через T_W , T_P и T_E . При использовании аппроксимации такого же типа для следующего контрольного объема градиент dT/dx на общей границе окажется рассчитанным по различным профилям в зависимости от того, какой из контрольных объемов рассматривается. Получающееся несоответствие dT/dx (и, следовательно, теплового потока) показано на рис. 5.

К несоответствию потоков может привести также предположение о том, что все потоки на границах данного контрольного объема описываются с помощью значения коэффициента теплопроводности в центральной точке k_P . Тогда тепловой поток на границе e (показанной на рис. 2) будет выражен через $k_P(T_P - T_E)/(\delta x)_e$ для окружающей точку P контрольного объема и через $k_E(T_P - T_E)/(\delta x)_e$ при записи разностного аналога для контрольного объема с точкой E в центре.

Чтобы избежать таких несоответствий, полезно помнить, что поток на границе рассматривается сам по себе, а не как принадлежащий определенному контрольному объему.

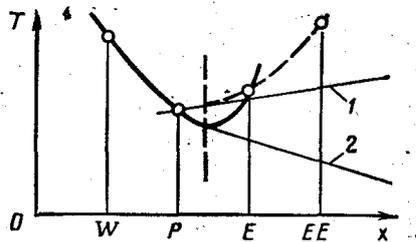


Рис. 5 Несоответствие потоков, вызванное использованием квадратичного профиля:
1—касательная к правому профилю, 2 - касательная к левому профилю

Правило 2. Положительность коэффициентов. В большинстве из интересующих нас задач влияние значений зависимой переменной в точках, соседних с некоторой узловой, на значение в этой узловой точке обусловлено процессами конвекции и диффузии. Следовательно, увеличение значения в одной узловой точке должно, при прочих равных условиях, привести к увеличению (а не уменьшению) значения в соседней узловой точке. Тогда, как видно из уравнения (13), из увеличения T_P при увеличении T_E следует, что коэффициенты a_P и a_E должны иметь одинаковый знак. Другими словами, в общем случае, описываемом уравнением (15), знаки коэффициентов перед значениями зависимой переменной в соседних точках a_{nb} и коэффициента перед ее значением в центральной точке a_P должны быть одинаковыми. Можно, конечно, выбрать их так, чтобы они все были положительными или отрицательными. Договоримся записывать разностный аналог с положительными коэффициентами. Тогда правило 2 можно сформулировать следующим образом: все коэффициенты (a_P и a_{nb}) всегда должны быть положительными.

Комментарии. Из определения коэффициентов (14) видно, что иллюстрация дискретизации уравнения теплопроводности [см. (13)] действительно удовлетворяет правилу положительности коэффициентов. Однако, как будет показано позднее, имеются многочисленные аппроксимации, в которых данное правило часто нарушается. Обычно следствием этого является физически неправдоподобное решение. Наличие отрицательного "соседнего" коэффициента может привести к ситуации, в которой увеличение температуры на границе вызывает уменьшение температуры в ближайшей узловой точке. Нас будут устраивать только те аппроксимации, которые при всех обстоятельствах гарантируют положительность коэффициентов.

Правило 3. Отрицательность коэффициента при линеаризации источникового члена. Из определений коэффициентов (18) видно, что коэффициент a_P может стать отрицательным за счет $S_P \Delta x$. Этого можно полностью избежать, потребовав, чтобы S_P не было положительным. Сформулируем теперь правило 3 в следующем виде: при линеаризации источникового члена в виде $S = S_C + S_P T_P$ коэффициент S_P всегда должен быть отрицателен

или равен нулю.

Замечания. Правило 3 не настолько произвольно, как оно звучит. На самом деле для большинства физических процессов угол наклона касательной к кривой, описывающей источник член как функцию зависимой переменной, отрицателен. Действительно, если бы S_P был положительным, физический процесс мог стать неустойчивым. Положительность S_P свидетельствует о росте источникового члена при увеличении T_P , а это, в свою очередь может привести, если нет эффективного механизма отвода теплоты, к возрастанию T_P и т. д. С вычислительной точки зрения во избежание неустойчивостей и физически нереальных решений целесообразно сохранять S_P отрицательным. Дальнейшее обсуждение линеаризации источникового члена проведено в следующей главе. Следует отметить, что принцип отрицательности S_P существен для счёта.

Правило 4. Сумма соседних коэффициентов. Часто в рассматриваемое уравнение входят только производные зависимой переменной. При этом функции T и $T+c$ (T - зависимая переменная данного уравнения, c - произвольная постоянная) удовлетворяют дифференциальному уравнению. Это свойство дифференциального уравнения также должно отразиться в его дискретном аналоге. Следовательно, уравнение (15) должно быть удовлетворено в случае, если T_P и все T_{nb} увеличить на постоянную. Из этого требования следует равенство a_P сумме соседних коэффициентов. Таким образом, правило 4 можно сформулировать в виде: для случаев, когда дифференциальное уравнение удовлетворяется так же при добавлении к зависимой переменной постоянной величины необходимо, чтобы

$$a_P = \sum a_{nb} . \quad (19)$$

Легко видеть, что уравнение (13) действительно удовлетворяет этому правилу. Оно означает, что значение в средней точке T_P является средневзвешенным значений в соседних точках T_{nb} . В отличие, от коэффициентов в (13) коэффициенты уравнения (17) не подчиняются данному правилу. Однако для одного случая правило неприменимо. Если источник член зависит от T , то сумма $T+c$ не удовлетворяет дифференциальному уравнению. Однако даже в этих случаях правило 4 не следует забывать, так как его можно применять при рассмотрении частного случая уравнения. Если, например, положить в (17) $S_P = 0$, правило можно применить и оно действительно выполняется.

Если дифференциальному уравнению удовлетворяют как T , так и $T+c$, искомое температурное поле не становится неоднозначным или неопределенным. Значения T можно сделать определенными с помощью соответствующих граничных условий. Выполнение правила 4 гарантирует, что, например, при увеличении температуры границы на постоянное значение все температуры увеличатся на это же значение.

Можно взглянуть на правило 4 с другой стороны: при отсутствии источника и равенстве температур в соседних точках температура в центре T_P должна иметь такое же значение. В этих условиях только плохая аппроксимация не дает $T_P = T_{nb}$.

2.5. К практическому занятию №5 «Оценка точности и устойчивости численного решения»

Разностный аналог, используемый при численном решении должен обладать рядом свойств, таких как точность и устойчивость. Рассмотрим вопрос оценки точности и устойчивости численного метода на примере численного решения одномерного уравнения теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1)$$

Начальные и граничные условия

$$T(x,0) = T_0(x), \quad T(0,t) = T^0(t), \quad T(L,t) = T^L(t)$$

Требуется произвести анализ конечно-разностной схемы для приведенной краевой задачи при использовании для аппроксимации производной по пространству центральных разностей, а для аппроксимации производной по времени правой разности (явная схема).

Этап 1. Дискретизация исходной краевой задачи.

Для численного решения краевой задачи будем использовать метод конечных разностей. Введем равномерную сетку по пространству и по времени с шагами Δx и Δt , соответственно. Значения переменных x и t в узлах сетки будут равны

$$x_i = i \cdot \Delta x, \quad t_n = n \cdot \Delta t \quad (2)$$

Обозначим значения зависимой переменной в узлах сетки следующим образом

$$T_i^n = T(x_i, t_n)$$

Центрально-разностная аппроксимация производной по пространству на равномерной сетке в узле (x_i, t_n) имеет вид

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_i^n = \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (3)$$

а аппроксимация производной по времени правой разностью (явная схема) в узле (x_i, t_n)

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_i^n = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \quad (4)$$

Подставляя разностные аппроксимации производных (3) и (4) в исходное дифференциальное уравнение (1) получим следующее разностное уравнение, записанное для узла (x_i, t_n)

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = a \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (5)$$

или

$$T_i^{n+1} = sT_{i+1}^n + (1 - 2s)T_i^n + sT_{i-1}^n \quad (6)$$

где $s = \frac{a \cdot \Delta t}{\Delta x^2}$ - параметр.

Полученная система разностных уравнений (6) (разностное уравнение должно быть записано для каждого внутреннего узла сетки) является явной, т.к. содержит лишь одно неиз-

вестное значение T_i^{n+1} . Значения остальных величин $(T_{i+1}^n, T_i^n, T_{i-1}^n)$ известны либо из начального условия, либо выполнения расчетов для предыдущего шага по времени.

Для рассматриваемой задачи граничные условия не содержат производных, поэтому аппроксимация граничных условий не требуется.

Этап 2. Оценка согласованности разностных уравнений.

Для оценки согласованности будем использовать разложения зависимой переменной в ряды Тейлора в окрестности точки (x_i, t_n) . В результате будем иметь

$$\begin{aligned} T_i^{n+1} &= T_i^n + \Delta t \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) \\ T_{i+1}^n &= T_i^n + \Delta x \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{\Delta x^4}{24} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + O(\Delta x^5) \\ T_{i-1}^n &= T_i^n - \Delta x \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{\Delta x^4}{24} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} - O(\Delta x^5) \end{aligned} \quad (7)$$

Подставляя разложения (7) в разностное уравнение (5) получим

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + a \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} \quad (8)$$

или

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + E(\Delta x, \Delta t) \quad (9)$$

где $E(\Delta x, \Delta t) = a \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}$ - главный член погрешности аппроксимации.

При $\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0$ главный член погрешности аппроксимации также стремится к нулю и, следовательно, в пределе получим дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (10)$$

совпадающее с исходным дифференциальным уравнением, что свидетельствует о согласованности принятой разностной схемы.

Этап 3. Определения условия устойчивости.

Оценку устойчивости будем производить методом гармоник. При этом частные решения разностного уравнения (6) будем искать в виде

$$T_i^n(\varphi) = q^n e^{ji\Delta x \varphi} \quad (11)$$

где j - мнимая единица; φ - любое действительное число; q - параметр, подлежащий определению.

Подставим соотношение (11) в уравнение (6), в результате получим

$$q^{n+1} e^{j(i+1)\Delta x \varphi} = sq^n e^{j(i+1)\Delta x \varphi} + (1-2s)q^n e^{ji\Delta x \varphi} + sq^n e^{j(i-1)\Delta x \varphi} \quad (12)$$

Сокращая полученное выражение на $q^n e^{ji\Delta x \varphi}$ будем иметь

$$q = se^{j\Delta x\varphi} + 1 - 2s + se^{-j\Delta x\varphi} = 1 + s(e^{j\Delta x\varphi} - 2 + se^{-j\Delta x\varphi}) \quad (13)$$

Используя определение функции комплексного переменного $e^{j\Delta x\varphi} = \cos(\Delta x\varphi) + j \sin(\Delta x\varphi)$ получим

$$q = 1 + 2s(\cos(\Delta x\varphi) - 1) \quad (14)$$

Применяя известное тождество $\cos(\Delta x\varphi) = \cos^2\left(\frac{\Delta x\varphi}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\Delta x\varphi}{2}\right)$, окончательно получим

$$q = 1 - 4s \sin^2\left(\frac{\Delta x\varphi}{2}\right) \quad (15)$$

Для обеспечения устойчивости разностной схемы необходимо, чтобы выполнялось условие

$$|q| \leq 1 \quad (16)$$

при любых значениях φ .

Условие $q \leq 1$ выполняется всегда, а условие $q \geq -1$ выполняется лишь при $s \leq 0.5$. Таким образом, рассматриваемая конечно-разностная схема будет устойчивой, если значение параметра s меньше или равно 0.5. Возвращаясь к исходным переменным (используя определение s) условие устойчивости можно записать в виде

$$\frac{a \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (17)$$

или

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2a} \quad (18)$$

Этап 4. Оценка порядка точности разностной схемы.

При оценке согласованности разностной схемы (см. п. 3 ККР) было получено выражение для главного члена погрешности аппроксимации в виде

$$E(\Delta x, \Delta t) = a \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \quad (19)$$

Так как в правую часть выражения (19) шаг сетки по пространству входит во второй степени, а шаг по времени – в первой степени, то (по определению порядка точности разностной схемы) рассматриваемая конечно-разностная схема имеет второй порядок точности по пространству и первый порядок точности по времени.

2.6. К практическому занятию №6 «Математическая обработка результатов вычислительных экспериментов»

Аппроксимация (от латинского "approximate" - "приближаться")- приближенное выражение каких-либо математических объектов (например, чисел или функций) через другие более простые, более удобные в пользовании или просто более известные. В научных исследованиях аппроксимация применяется для описания, анализа, обобщения и дальнейшего использования эмпирических результатов.

Как известно, между величинами может существовать точная (функциональная) связь, когда одному значению аргумента соответствует одно определенное значение, и менее точная (корреляционная) связь, когда одному конкретному значению аргумента соответствует приближенное значение или некоторое множество значений функции, в той или иной степени близких друг к другу. При ведении научных исследований, обработке результатов наблюдения или эксперимента обычно приходится сталкиваться со вторым вариантом. При изучении количественных зависимостей различных показателей, значения которых определяются эмпирически, как правило, имеется некоторая их вариабельность. Частично она задается неоднородностью самих изучаемых объектов неживой и, особенно, живой природы, частично обуславливается погрешностью наблюдения и количественной обработке материалов. Последнюю составляющую не всегда удастся исключить полностью, можно лишь минимизировать ее тщательным выбором адекватного метода исследования и аккуратностью работы. Поэтому при выполнении любой научно-исследовательской работы возникает проблема выявления подлинного характера зависимости изучаемых показателей, этой или иной степени замаскированных неучтенностью вариабельности значений. Для этого и применяется аппроксимация - приближенное описание корреляционной зависимости переменных подходящим уравнением функциональной зависимости, передающим основную тенденцию зависимости (или ее "тренд").

При выборе аппроксимации следует исходить из конкретной задачи исследования. Обычно, чем более простое уравнение используется для аппроксимации, тем более приближительно получаемое описание зависимости. Поэтому важно считывать, насколько существенны и чем обусловлены отклонения конкретных значений от получаемого тренда. При описании зависимости эмпирически определенных значений можно добиться и гораздо большей точности, используя какое-либо более сложное, много параметрическое уравнение. Однако нет никакого смысла стремиться с максимальной точностью передать случайные отклонения величин в конкретных рядах эмпирических данных. Гораздо важнее уловить общую закономерность, которая в данном случае наиболее логично и с приемлемой точностью выражается именно двухпараметрическим уравнением степенной функции. Таким образом, выбирая метод аппроксимации, исследователь всегда идет на компромисс: решает, в какой степени в данном случае целесообразно и уместно «пожертвовать» деталями и, соответственно, насколько обобщенно следует выразить зависимость сопоставляемых переменных. Наряду с выявлением закономерностей, замаскированных случайными отклонениями эмпирических данных от общей закономерности, аппроксимация позволяет также решать много других важных задач: формализовать найденную зависимость; найти неизвестные значения зависимой переменной путем интерполяции или, если это допустимо, экстраполяции.

Очень часто, особенно при анализе данных возникает необходимость найти в явном виде функциональную зависимость между величинами x и y , которые получены в результате измерений.

При аналитическом исследовании взаимосвязи между двумя величинами x и y производят ряд наблюдений и в результате получается таблица значений:

| | | | | | | |
|-----|-------|-------|-----|-------|-----|-------|
| x | x_1 | x_2 | ... | x_i | ... | x_n |
| y | y_1 | y_2 | ... | y_i | ... | y_n |

Эта таблица обычно получается как итог каких-либо экспериментов, в которых x_i (независимая величина) задается экспериментатором, а y_i получается в результате опыта. Поэтому эти значения y_i будем называть эмпирическими или опытными значениями.

Между величинами x и y существует функциональная зависимость, но ее аналитический вид обычно неизвестен, поэтому возникает практически важная задача - найти эмпирическую формулу

$$y = f(x; a_1, a_2, \dots, a_m), \quad (1)$$

значения которой при $x = x_i$ возможно мало отличались бы от опытных значений y_i ($i = 1, 2, \dots, n$), где a_1, a_2, \dots, a_m - параметры.

Обычно указывают класс функций (например, множество линейных, степенных, показательных и т.п.) из которого выбирается функция $f(x)$, и далее определяются наилучшие значения параметров.

Если в эмпирическую формулу (1) подставить исходные x_i , то получим теоретические значения $y_i^T = f(x_i; a_1, a_2, \dots, a_m)$, где $i = 1, 2, \dots, n$.

Разности $y_i^T - y_i$ называются отклонениями и представляют собой расстояния по вертикали от точек M_i до графика эмпирической функции.

Согласно методу наименьших квадратов наилучшими коэффициентами a_1, a_2, \dots, a_m считаются те, для которых сумма квадратов отклонений найденной эмпирической функции от заданных значений функции

$$S(a_1, a_2, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n [f(x_i; a_1, a_2, \dots, a_m) - y_i]^2 \quad (2)$$

будет минимальной.

Поясним геометрический смысл метода наименьших квадратов. Каждая пара чисел (x_i, y_i) из исходной таблицы определяет точку M_i на плоскости XOY . Используя формулу (1) при различных значениях коэффициентов a_1, a_2, \dots, a_m можно построить ряд кривых, которые являются графиками функции (1). Задача состоит в определении коэффициентов a_1, a_2, \dots, a_m таким образом, чтобы сумма квадратов расстояний по вертикали от точек $M_i(x_i, y_i)$ до графика функции (1) была наименьшей.

Построение эмпирической формулы состоит из двух этапов:

- выяснение общего вида этой формулы
- определение ее наилучших параметров.

Если неизвестен характер зависимости между данными величинами x и y , то вид эмпирической зависимости является произвольным. Предпочтение отдается простым формулам, обладающим хорошей точностью. Удачный выбор эмпирической формулы в значительной мере зависит от знаний исследователя в предметной области, используя которые он может указать класс функций из теоретических соображений. Большое значение имеет изображение полученных данных в декартовых или в специальных системах координат (полулогарифмической, логарифмической и т.д.). По положению точек можно примерно угадать общий вид зависимости путем установления сходства между построенным графиком и образцами известных кривых.

Определение наилучших коэффициентов a_1, a_2, \dots, a_m входящих в эмпирическую формулу производят хорошо известными аналитическими методами.

Для того, чтобы найти набор коэффициентов a_1, a_2, \dots, a_m , которые доставляют минимум функции S , определяемой формулой (2), используем необходимое условие экстремума функции нескольких переменных - равенство нулю частных производных. В результате получим нормальную систему для определения коэффициентов a_i ($i = 1, 2, \dots, m$):

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 0; \quad \frac{\partial S}{\partial a_2} = 0; \quad \dots; \quad \frac{\partial S}{\partial a_m} = 0. \quad (3)$$

Таким образом, нахождение коэффициентов a_i сводится к решению системы (3). Эта система упрощается, если эмпирическая формула (1) линейна относительно параметров a_i , тогда система (3) - будет линейной.

Конкретный вид системы (3) зависит от того, из какого класса эмпирических формул мы ищем зависимость (1). В случае линейной зависимости $y = a_1 + a_2x$ система (3) примет вид:

$$\begin{cases} a_1n + a_2 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \quad , \\ a_1 \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \quad . \end{cases} \quad (4)$$

Эта линейная система может быть решена любым известным методом (методом Гаусса, простых итераций, формулами Крамера).

В случае квадратичной зависимости $y = a_1 + a_2x + a_3x^2$ система (3) примет вид:

$$\begin{cases} a_1n + a_2 \sum_{i=1}^n x_i + a_3 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i \quad , \\ a_1 \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_3 \sum_{i=1}^n x_i^3 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \quad , \\ a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_3 \sum_{i=1}^n x_i^4 = \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i \quad . \end{cases} \quad (5)$$

В ряде случаев в качестве эмпирической формулы берут функцию в которую неопределенные коэффициенты входят нелинейно. При этом иногда задачу удается линеаризовать, т.е. свести к линейной. К числу таких зависимостей относится экспоненциальная зависимость

$$y = a_1 \cdot e^{a_2x}, \quad (6)$$

где a_1 и a_2 неопределенные коэффициенты.

Линеаризация достигается путем логарифмирования равенства (6), после чего получаем соотношение

$$\ln y = \ln a_1 + a_2x \quad (7)$$

Обозначим $\ln y$ и $\ln a_1$ соответственно через t и c , тогда зависимость (7) может быть записана в виде $t = a_1 + a_2x$, что позволяет применить формулы (4) с заменой a_1 на c и y_i на t_i .

График восстановленной функциональной зависимости $y(x)$ по результатам измерений (x_i, y_i) , $i=1,2,\dots,n$ называется кривой регрессии. Для проверки согласия построенной кривой регрессии с результатами эксперимента обычно вводят следующие числовые характеристики: коэффициент корреляции (линейная зависимость), корреляционное отношение и коэффициент детерминированности. При этом результаты обычно группируют и представляют в форме корреляционной таблицы. В каждой клетке этой таблицы приводятся численности n_{ij} тех пар (x, y) , компоненты которых попадают в соответствующие интервалы группировки по каждой переменной. Предполагая длины интервалов группировки (по каждой переменной) равными между собой, выбирают центры x_i (соответственно y_i) этих интервалов и числа n_{ij} в качестве основы для расчетов.

Коэффициент корреляции является мерой линейной связи между зависимыми случайными величинами: он показывает, насколько хорошо в среднем может быть представлена одна из величин в виде линейной функции от другой.

Коэффициент корреляции вычисляется по формуле:

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (8)$$

где $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$, $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$, \bar{x} и \bar{y} — среднее арифметическое значение соответственно по x и y .

Коэффициент корреляции между случайными величинами по абсолютной величине не превосходит 1. Чем ближе $|\rho|$ к 1, тем теснее линейная связь между x и y .

В случае нелинейной корреляционной связи условные средние значения располагаются около кривой линии. В этом случае в качестве характеристики силы связи рекомендуется использовать корреляционное отношение, интерпретация которого не зависит от вида исследуемой зависимости.

Корреляционное отношение вычисляется по формуле:

$$\eta_{y|x}^2 = \frac{\frac{1}{n} \sum_i n_i \cdot (\bar{y}_i - \bar{y})^2}{\frac{1}{n} \sum_j n_j \cdot (y_j - \bar{y})^2}, \quad (9)$$

где $n_i = \sum_j n_{ij}$, $n_j = \sum_i n_{ij}$, а числитель характеризует рассеяние условных средних \bar{y}_i около безусловного среднего \bar{y} .

Всегда $0 \leq \eta_{y|x}^2 \leq 1$. Равенство $\eta_{y|x}^2 = 0$ соответствует некоррелированным случайным величинам; $\eta_{y|x}^2 = 1$ тогда и только тогда, когда имеется точная функциональная связь между y и x . В случае линейной зависимости y от x корреляционное отношение совпадает с квадратом коэффициента корреляции. Величина $\eta_{y|x}^2 - \rho^2$ используется в качестве индикатора отклонения регрессии от линейной.

Корреляционное отношение является мерой корреляционной связи y с x в какой угодно форме, но не может дать представления о степени приближенности эмпирических данных к специальной форме. Чтобы выяснить насколько точно построенная кривая отражает эмпирические данные вводится еще одна характеристика — коэффициент детерминированности.

Для его описания рассмотрим следующие величины. $S_{\text{полн}} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$ - полная сумма квадратов, где \bar{y} среднее значение y_i .

Можно доказать следующее равенство

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - y_i^{\text{т}})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i^{\text{т}} - \bar{y})^2.$$

Первое слагаемое равно $S_{\text{ост}} = \sum_{i=1}^n (y_i - y_i^{\text{т}})^2$ и называется остаточной суммой квадратов. Оно характеризует отклонение экспериментальных данных от теоретических.

Второе слагаемое равно $S_{\text{регр}} = \sum_{i=1}^n (y_i^{\text{т}} - \bar{y})^2$ и называется регрессионной суммой квадратов и оно характеризует разброс данных.

Очевидно, что справедливо следующее равенство $S_{\text{полн}} = S_{\text{ост}} + S_{\text{регр}}$.

Коэффициент детерминированности определяется по формуле:

$$r^2 = 1 - \frac{S_{\text{ост}}}{S_{\text{полн}}}. \quad (10)$$

Чем меньше остаточная сумма квадратов по сравнению с общей суммой квадратов, тем больше значение коэффициента детерминированности r^2 , который показывает, насколько хорошо уравнение, полученное с помощью регрессионного анализа, объясняет взаимосвязи между переменными. Если он равен 1, то имеет место полная корреляция с моделью, т.е. нет различия между фактическим и оценочным значениями y . В противоположном случае,

если коэффициент детерминированности равен 0, то уравнение регрессии неудачно для предсказания значений y .

Коэффициент детерминированности всегда не превосходит корреляционное отношение. В случае когда выполняется равенство $r^2 = \eta_{y|x}^2$ то можно считать, что построенная эмпирическая формула наиболее точно отражает эмпирические данные.