

УДК 519.6 + 544.6

ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕРВАЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ЭЛЕКТРОЛИТАХ

© А. М. Болотнов^{1*}, Г. Н. Закиева²

¹Башкирский государственный университет
Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.

²Башкирский государственный университет, Нефтекамский филиал
Россия, Республика Башкортостан, 452681 г. Нефтекамск, ул. Тракторная, 1.

Тел./факс: +7(347) 229 96 89.

*Email: bolotnovam@mail.ru

Сформулирована математическая модель электрического поля в электролите. Разработан алгоритм расчета потенциала и плотности тока в двумерной задаче с интервальными исходными данными. По формуле Рунге вычисляется погрешность дискретизации задачи, которая включается в интервальные решения. Погрешность, возникающая при вычислении интервальных границ, включается в результирующий интервал с помощью направленных округлений. Полученные интервальные решения включают все виды погрешностей: ошибки исходных данных, погрешности численного метода и погрешности компьютерных округлений. Представлены графики распределений потенциала и плотности тока с интервальными исходными данными.

Ключевые слова: интервальные вычисления, компьютерное моделирование, электрическое поле, электролит, электролизер.

Введение

Одной из актуальных проблем компьютерного моделирования является строгий учет погрешностей при численном решении естественнонаучных задач. Для корректного анализа сложных систем и получения достоверных численных результатов необходимы математические модели и алгоритмы, учитывающие: а) неопределенности в исходных данных, полученных в результате измерений; б) погрешности аппроксимации непрерывных зависимостей их дискретными аналогами; в) ошибки компьютерных округлений вещественных чисел, вызванные конечностью разрядной сетки. В конкретных задачах соотношения вкладов перечисленных видов ошибок в общую погрешность решения могут распределяться самым различным образом. На практике, как правило, определяется наиболее весомый вклад погрешности, после чего проводится оценка точности результата с учетом только данного вида ошибок.

Эффективным средством учета всех указанных типов погрешности (одновременно или выборочно) в численных результатах решения задач являются интервальные методы. Интервальный подход формировался вначале как метод автоматического контроля ошибок округления на ЭВМ, а затем и как средство учета влияния неопределенности в исходных данных на конечные результаты расчетов. Ценность интервальных вычислений заключается в том, что они дают возможность получения достоверного интервального решения, включающего не только диапазоны неопределенности входных параметров, но также и погрешности дискретизации задачи и компьютерных округлений [1].

В ходе интервальных вычислений результат гарантированно содержит множество всевозможных

решений точечных задач, исходные значения которых содержатся в интервалах. Известно, что в некоторых случаях применение интервальных вычислений дает неудовлетворительные результаты из-за чрезмерной ширины получаемых интервалов [2].

Элементы интервальной арифметики

Интервальный тип данных на современных компьютерах реализуется представлением интервала двумя вещественными числами для его концов:

$$A = [a_1, a_2] = \{x \mid a_1 \leq x \leq a_2; a_1, a_2 \in R\},$$

а множество всех интервалов обозначают $I(R)$.

Арифметические операции над интервалами определяются правилом [1, 2]:

$$A * B = \{a * b \mid a \in A, b \in B\},$$

где символу * соответствует одна из операций: +, −, ×, /.

Для $A = [a_1, a_2]$ и $B = [b_1, b_2]$ операции могут быть расписаны в виде:

$$A + B = [a_1 + b_1, a_2 + b_2], \quad A - B = [a_1 - b_2, a_2 - b_1],$$

$$A \times B = [\min(a_i \times b_j), \max(a_i \times b_j)]; \quad i, j = 1, 2,$$

$$A / B = [\min(a_i / b_j), \max(a_i / b_j)]; \quad 0 \notin [b_1, b_2];$$

$$i, j = 1, 2.$$

Возникающая при вычислении интервальных границ погрешность включается в результирующий интервал с помощью направленных округлений: левая граница округляется «вниз» (к $-\infty$), правая – «вверх» (к $+\infty$). Режим округления процессора устанавливается с помощью функций, имеющихся в стандартных библиотеках многих систем программирования. Например, в среде программирования Lazarus (компилятор Free Pascal Compiler) в модуле Math доступна функция SetRoundMode, параметр которой rmDown соответствует округлению

«вниз», gmUp – «вверх». В средах Dev-C++ и Code::Blocks (компилятор GCC Compiler) в стандартной библиотеке fenv.h имеется аналогичная функция fesetround с параметрами FE_DOWNWARD и FE_UPWARD того же назначения [3].

Необходимо отметить, что многократное переключение режима округления процессора влечет за собой большие затраты: их использование в каждой интервальной операции увеличивает на порядок общее время счета. Поэтому, как правило, в модуле интервальных вычислений один раз устанавливается режим округления, например, «вниз»; при этом операция сложения для интервала $C = A + B$ может быть реализована в виде: $c_1 = a_1 + b_1$; $c_2 = -(-a_2 - b_2)$. Аналогично преобразуются и другие арифметические интервальные операции.

В качестве примера учета погрешностей округления приведем результаты N -кратного ($N = 10^9$) суммирования вырожденного (ширина равна нулю) интервала $A = [10^{-9}, 10^{-9}]$ с единицей. Очевидно, что при обычном округлении «к ближайшему» итоговая сумма должна быть равна двум, а ширина полученного интервала – нулю. В таблице для N , кратных 2×10^8 , приведены результаты суммирования для расширенного типа (long double) с мантиссой 18 десятичных знаков. Здесь a_1, a_2 – итоговые значения концов интервала, w_a, w_o – абсолютная и относительная ширина полученного интервала.

Отметим, что использование действительного типа с двойной точностью (double) приводит к большей ширине результирующего интервала: для данного примера ее значение на два-три порядка больше, чем с типом long double. Вместе с тем, применение типа double несколько сокращает время счета.

Для учета погрешностей дискретизации в методе граничных элементов, который используется в данной работе, применяется «двойной пересчет» на двух граничных сетках с шагами h_1 и $h_2 = h_1/2$.

Пусть S_N и S_{2N} – квадратурные суммы на k -м граничном элементе с N и $2N$ разбиениями, I – искомое значение интеграла. Тогда главный член погрешности численного интегрирования по квадратурной формуле с порядком точности p , вычисляется по формуле Рунге [4]

$$R_N = \frac{S_{2N} - S_N}{2^{p+1} - 1}, \tag{1}$$

а для уточнения результата используется экстрапо-

ляция Ричардсона

$$I = S_{2N} + R_N.$$

Если в алгоритме решения задачи предусматривается учет погрешности численного метода, то значение (I) на каждом граничном элементе включается в интервальное решение задачи.

Математическая модель электрического поля в электролизере

Рассмотрим задачу расчета электрического поля в двумерном сечении электролизера для производства цветных металлов (рис. 1).

Известно, что потенциал $u(p)$ стационарного электрического поля в области Ω при отсутствии точечных источников или стоков удовлетворяет уравнению эллиптического типа:

$$\text{div}(\sigma(p) \text{grad } u(p)) = 0; \quad p \in \Omega, \tag{2}$$

где $\sigma(p)$ – удельная электропроводность среды, См/м.

Так как удельные электропроводности жидкого металла (катода) и анодного материала на несколько порядков выше, чем электропроводность электролита, то принято полагать значения потенциалов в аноде и катоде постоянными (u_a, u_c), а краевую задачу для потенциала электрического поля в электролите формулировать для уравнения Лапласа

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \tag{3}$$

На изолированных границах (S_i), к которым относятся внешние стенки электролизера, свободная поверхность электролита, а также границы симметрии, вводимые с целью сокращения области интегрирования, ставятся краевые условия второго рода:

$$\frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{S_i} = 0, \tag{4}$$

где n – вектор нормали к границе.

На границах электролита с анодом (S_a) и катодом (жидким металлом на дне электролизера) (S_c), в случае линейной зависимости плотности тока от разности потенциалов «электрод–электролит», требуется выполнение краевых условий третьего рода:

$$\left(u + \rho_e \sigma \frac{\partial u}{\partial n} \right) \Big|_{S_e} = u_e; \quad e = a, c, \tag{5}$$

где ρ_a, ρ_c – удельные сопротивления на границах электродов ($\text{Ом} \times \text{м}^2$); u_a, u_c – потенциалы электро-

Таблица

Суммы вырожденных интервалов с расширенным базовым типом

$N \times 10^{-8}$	a_1	a_2	$w_a \times 10^{11}$	$w_o \times 10^{12}$
2	1.1999999999815	1.2000000000031	2.2	18
4	1.3999999999629	1.4000000000063	4.3	31
6	1.5999999999444	1.6000000000094	6.5	41
8	1.7999999999259	1.8000000000126	8.7	48
10	1.9999999999073	2.0000000000157	11	54

дов (В), разность которых равна приложенному напряжению от внешнего источника тока; здесь и далее индекс «e» принимает значение «a» для анода и «c» – для катода.

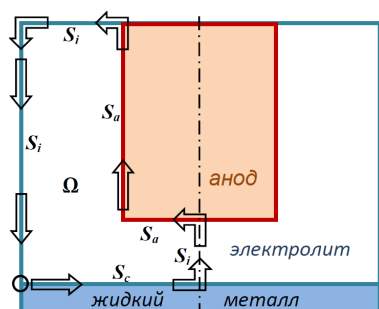


Рис. 1. Схема электролизера.

Алгоритм решения задачи

Для решения задачи (3)–(5) в двумерной постановке предлагается метод граничных элементов, который без принципиальных осложнений можно использовать в областях с границей произвольной конфигурации [5–7], а также в трехмерных постановках задач [8, 9]. Для построения граничного интегрального уравнения воспользуемся интегральной формулой Грина, которая с учетом уравнения (3), для точек p и q , лежащих на границе S , примет вид:

$$\pi u(p) = \int_{S_q} \left(\ln \frac{1}{r(p,q)} \frac{\partial u}{\partial n_q} - u(q) \frac{\partial}{\partial n_q} \left(\ln \frac{1}{r(p,q)} \right) \right) ds_q, \quad (6)$$

где $r(p, q) = \sqrt{(x_p - x_q)^2 + (y_p - y_q)^2}$ – расстояние между точками p и q .

Из формулы (6) с учетом краевых условий (4), (5), после некоторых преобразований будем иметь граничное интегральное уравнение относительно неизвестной функции $u(p)$:

$$u(p) = \frac{1}{\pi} \int_{S_q} K(p, q, u(q)) ds_q, \quad (7)$$

в котором ядро $K(p, q, u(q))$ определяется соотношениями (аргументы p и q для краткости опущены):

$$K = \frac{u_a}{\rho_e \sigma} \ln \frac{1}{r} - u \left(\frac{1}{\rho_e \sigma} \ln \frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial n} \left(\ln \frac{1}{r} \right) \right); \quad q \in S_e;$$

$e = a, c$;

$$K = -u \frac{\partial}{\partial n} \left(\ln \frac{1}{r} \right); \quad q \in S_i.$$

Алгоритм численного решения можно построить на основе метода конечных сумм, путем сведения интегрального уравнения (7) к системе линейных алгебраических уравнений. Так как во многих реальных задачах рассматриваемого типа гранич-

ные условия (5) – нелинейны, то более универсальным подходом представляется применение итерационной процедуры [10]:

$$u^{k+1}(p) = u^k(p) - \alpha \left(u^k(p) - \frac{1}{\pi} \int_{S_q} K(p, q, u^k(q)) ds_q \right), \quad (8)$$

где k – номер итерации; $\alpha > 0$ – итерационный параметр, выбираемый из условия сходимости процесса.

Метод граничных элементов в сочетании с итерационной процедурой (8) ранее применялся автором при решении аналогичных задач в областях более сложной геометрии, в том числе в трехмерных задачах с нелинейными граничными условиями [11, 12], но без учета интервальных исходных данных, погрешностей дискретизации задачи и погрешностей округления.

Количество итераций в процедуре (8) зависит от протяженности границ области интегрирования, размерности задачи, а также от требуемой точности результатов, и может оказаться достаточно большим. В этом случае, вследствие накопления погрешностей округления в задачах с интервальными исходными данными, ширина результирующего интервала может превзойти допустимые пределы. В данной работе используется методика, изложенная авторами [13, 14], которая предполагает на первом этапе решения задачи применение традиционных численных методов на множестве действительных чисел, после чего на заключительном этапе – применение интервальных вычислений.

Вычислительный эксперимент

Приведем пример применения изложенного подхода при компьютерном моделировании электрического поля в электролизере при следующих значениях основных параметров: высота / ширина сечения электролита, $m = 1 / 2$; высота / ширина анода, $m = 0.8 / 1.0$; удельные сопротивления анода / катода, $\text{Ом} \times \text{м}^2 = 0.06 / 0.03$; потенциалы анода / катода, $\text{В} = 5 / 3$. Граница интегрирования дискретизирована с равным шагом на 800 граничных элементов; направление обхода границы в интегральном уравнении обозначено на рис. 1 стрелками.

На рис. 2 представлены графики распределения потенциала по границе области при различных значениях удельной электропроводности электролита с точными входными данными без учета погрешностей.

На рис. 3, 4 представлены кривые распределения потенциала и плотности тока с учетом погрешностей и с интервальными исходными данными, значения которых указаны в подрисуночных подписях.

Программное обеспечение разработано на языке C/C++ в среде Code::Blocks с компилятором GCC Compiler, распространяемых по лицензии GPL.

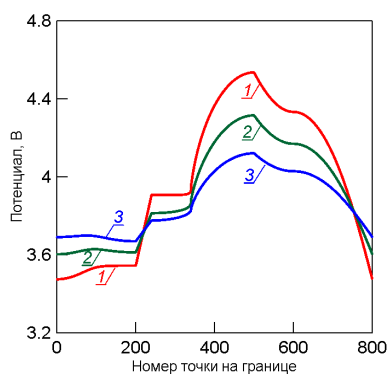


Рис. 2. Распределение потенциала по границе электролита без учета интервальных данных при σ , равных, См/м: 1 – 10, 2 – 20, 3 – 40.

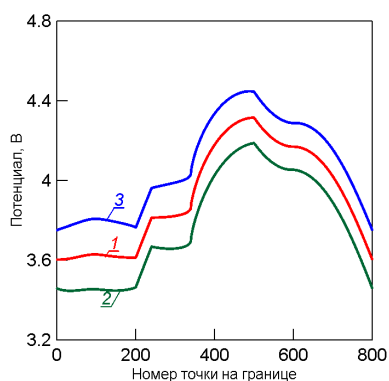


Рис. 3. Распределение потенциала в электролите по границе области: 1 – при точных исходных данных; 2, 3 – нижняя и верхняя границы решения при $u_a = [4.975, 5.025]$, $u_c = [2.985, 3.015]$; $\rho_a = [0.0597, 0.0603]$; $\rho_c = [0.02985, 0.03015]$; $\sigma = [19.9, 20.1]$.

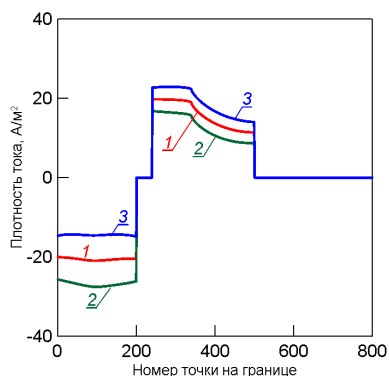


Рис. 4. Распределение плотности тока в электролите по границе области: 1 – при точных исходных данных; 2, 3 – нижняя и верхняя границы интервального решения. Значения исходных данных указаны в подписи к рис. 3.

Выводы

На основе метода граничных элементов построен алгоритм численного решения двумерной краевой задачи для потенциала электрического поля в электролизере. Установлено, что применение

интервальных операций позволяет учесть в решении задачи неопределенности в исходных данных, погрешности дискретизации численного метода и ошибки компьютерных округлений. Представлены численные результаты, подтверждающие эффективность разработанного алгоритма. Направление дальнейших исследований предполагает переход к более общим трехмерным математическим моделям с интервальными исходными параметрами, с учетом неодносвязности области, криволинейности границ и нелинейности краевых условий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Алефельд Г., Херцбергер Ю. Введение в интервальные вычисления. М.: Мир, 1987. 360 с.
2. Калмыков С. А., Шокин Ю. И., Юлдашев З. Х. Методы интервального анализа. Новосибирск: Наука. Сиб. отд., 1986. 224 с.
3. Болотнов А. М. Компьютерное моделирование потенциальных электрических полей в электролитах на основе интервальных вычислений // Современные проблемы науки и образования. 2014. № 2. С. 670. URL: <http://www.science-education.ru/116-12937>.
4. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. М.: Мир, 2001. 575 с.
5. Иванов В. Т., Болотнов А. М. Автоматизированная система научных исследований электрических полей в сложных электрохимических системах на основе вычислительного эксперимента // Электрохимия. 1991. Т. 27. Вып. 3. С. 324–331.
6. Болотнов А. М., Иванов В. Т. Численное моделирование электрических полей анодной защиты некоторых электрохимических систем // Электрохимия. 1996. Т. 32. №6. С. 694–697.
7. Болотнов А. М., Лобастов С. А., Сулюндук А. Р. Расчет электрического поля в электролите на основе уравнений электрохимической и диффузионной кинетики // Системы управления и информационные технологии. 2012. Т. 49. №3(49). С. 77–81.
8. Бесхлебнова Г. А., Болотнов А. М., Горбатков С. А., Башаев М. А. Алгоритм построения нейросетевой математической модели процессов коррозии нефтяных трубопроводов // Вестник компьютерных и информационных технологий. 2006. №2. С. 22–32.
9. Болотнов А. М., Глазов Н. Н., Глазов Н. П., Шамшетдинов К. Л., Киселев В. Д. Математическая модель и алгоритм расчета электрического поля катодной защиты трубопровода протяженными анодами // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2008. Т. 44. №4. С. 438–441.
10. Bolotnov A. M., Ivanov V. T. Numerical Simulation of the Anodic Protection Starting Conditions // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2001. Т. 37. №2. С. 197–200.
11. Болотнов А. М., Зайков Ю. П., Закеева Г. Н., Ковров В. А., Храмов А. П., Щербинин С. А. Математическое моделирование и оптимизация токораспределения в цилиндрическом электролизере с многоэлементным анодом // Вестник Башкирского университета. 2003. Т. 8. № 3–4. С. 3–7.
12. Болотнов А. М., Глазов Н. П., Киселев В. Д., Хисаметдинов Ф. З. Математическое моделирование и численное исследование электрических полей в системах с протяженными электродами // Вестник Башкирского университета. 2006. Т. 11. №2. С. 17–21.
13. Добронец Б. С., Шайдулов В. В. Двусторонние численные методы. Новосибирск: Наука. Сиб. отд., 1990. 208 с.
14. Морозкин Н. Д., Морозкин Н. Н. Управление нагревом хрупких тел при наличии ограничений на термонапряжения и максимальную температуру // Вестник Башкирского университета. 2013. Т. 18. №1. С. 4–6.

Поступила в редакцию 22.05.2014 г.

APPLICATION OF INTERVAL COMPUTATION IN THE COMPUTER SIMULATION OF ELECTRIC FIELDS IN ELECTROLYTES

© A. M. Bolotnov^{1*}, G. N. Zakieva²

¹*Bashkir State University
32 Zaki Validi St., 450076 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

²*Neftekamsk Branch of Bashkir State University
1 Traktovaya St., 452681 Neftekamsk, Republic of Bashkortostan, Russia.*

Phone: +7 (347) 229 96 89.

**Email: bolotnovam@mail.ru*

For a correct analysis of complex systems and for obtaining reliable numerical results a mathematical model and algorithm, it is suggested to take into account the uncertainties of input data, errors of approximation between of continuous dependencies and their discrete analogues, errors of computers rounding of real numbers, caused by its bit of the grid. The interval methods that are an effective means for accounting of all these types of errors in numerical results of solving problems are used. An algorithm based on boundary element method for simulation of electric fields in the two-dimensional cross-sections of electrochemical systems with interval input parameters. In the first phase, the computation is performed with “precise” numerical data on the two boundary meshes with different resolutions, then the Runge formula is used to calculate discretization error, which is included in the final interval solution. The second phase of the algorithm is to apply interval operations with directional rounding of the interval boundaries. As a result, computer-rounding errors are also included in the final interval solution. Uncertainty intervals of input parameters include measurement errors and are included in the solution through the interval computations in the second phase. Thus, the application of interval operations when solving problem allows taking into account the uncertainties in input data, sampling errors of numerical method and errors of computer rounding. Results of numerical simulations and figures of interval distribution of current potential and current density on the boundaries of the electrochemical systems are presented with the inclusion of discussed types of errors.

Keywords: *interval calculations, computer modeling, electric field, electrolyte, electrolysis cell.*

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at bulletin_bsu@mail.ru if you need translation of the article.

REFERENCES

1. Alefel'd G., Khertsberger Yu. Vvedenie v interval'nye vychisleniya [Introduction to Interval Computations]. Moscow: Mir, 1987.
2. Kalmykov S. A., Shokin Yu. I., Yuldashev Z. Kh. Metody interval'nogo analiza [Methods of Interval Analysis]. Novosibirsk: Nauka. Sib. otd., 1986.
3. Bolotnov A. M. Komp'yuternoe modelirovanie potentsial'nykh elektricheskikh polei v elektrolitakh na osnove interval'nykh vychislenii Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya. 2014. No. 2. Pp. 670. URL: <http://www.science-education.ru/116-12937>
4. Kakhner D., Mouler K., Nesh S. Chislennyye metody i programmnoe obespechenie [Numerical Methods and Software]. Moscow: Mir, 2001.
5. Ivanov V. T., Bolotnov A. M. Elektrokhimiya. 1991. Vol. 27. No. 3. Pp. 324–331.
6. Bolotnov A. M., Ivanov V. T. Elektrokhimiya. 1996. Vol. 32. No. 6. Pp. 694–697.
7. Bolotnov A. M., Lobastov S. A., Suyundukov A. R. Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii. 2012. Vol. 49. No. 3(49). Pp. 77–81.
8. Beskhlebnova G. A., Bolotnov A. M., Gorbatkov S. A., Bashaev M. A. Vestnik komp'yuternykh i informatsionnykh tekhnologii. 2006. No. 2. Pp. 22–32.
9. Bolotnov A. M., Glazov N. N., Glazov N. P., Shamshetdinov K. L., Kiselev V. D. Fizikokhimiya poverkhnosti i zashchita materialov. 2008. Vol. 44. No. 4. Pp. 438–441.
10. Bolotnov A. M., Ivanov V. T. Fizikokhimiya poverkhnosti i zashchita materialov. 2001. Vol. 37. No. 2. Pp. 197–200.
11. Bolotnov A. M., Zaikov Yu. P., Zakieva G. N., Kovrov V. A., Khramov A. P., Shcherbinin S. A. Vestnik Bashkirskogo universiteta. 2003. Vol. 8. No. 3–4. Pp. 3–7.
12. Bolotnov A. M., Glazov N. P., Kiselev V. D., Khisametdinov F. Z. Vestnik Bashkirskogo universiteta. 2006. Vol. 11. No. 2. Pp. 17–21.
13. Dobronets B. S., Shaidurov V. V. Dvustoronnie chislennyye metody [Bilateral Numerical Methods]. Novosibirsk: Nauka. Sib. otd., 1990.
14. Morozkin N. D., Morozkin N. N. Vestnik Bashkirskogo universiteta. 2013. Vol. 18. No. 1. Pp. 4–6.

Received 22.05.2014.