



Моделирование химических и экологических процессов

УДК 51-7:502.52

DOI: 10.25514/CHS.2022.2.23001

**Универсальная программная надстройка распознавания событий
для моделирования гибридных систем**

С. О. Травин

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный
исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук,
Москва, Россия, e-mail: travinso@yandex.ru

Поступила в редакцию: 01.10.2022 г.; после доработки: 07.11.2022 г.; принята в печать: 18.11.2022 г.

Аннотация – В статье приводится описание универсальной программной надстройки в среде VBA – Excel, для обработки событий в гибридных системах дифференциальных уравнений (ДУ) со сменой режимов. Надстройка совместима с интеграторами любого типа, производящими численное решение систем ДУ. Наступление событий фиксируется значениями логических переменных, расположенных в ячейках одного из листов Excel (при переходе от значения False к значению True). Приведены примеры расчетов демонстрационных систем. Также представлен код надстройки, который может быть использован для систем произвольной сложности с самыми различными подходами к распознаванию событий.

Ключевые слова: динамическая система, задача Коши, химическая реакция, дифференциальные уравнения химической кинетики, унификация программного обеспечения.

Simulation of chemical and ecological processes

UDC51-7:502.52

DOI: 10.25514/CHS.2022.2.23001

**Universal Software Add-on for Event Recognition in Hybrid Systems
Simulation**

Sergey O. Travin

N.N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia, travinso@yandex.ru

Received: October 1, 2022; Revised: November 7, 2022; Accepted: November 18, 2022

Abstract – The article describes the universal software add-on in the VBA - Excel environment, for processing events in hybrid systems of differential equations with mode changes. The add-on is compatible with integrators of any type, producing a numerical solution of remote control systems. The occurrence of events is recorded by the values of logical variables located in the cells of one of the Excel sheets (when switching from False to True). Examples of calculations of demonstration systems are given. The add-on code is also presented, which can be used for systems of arbitrary complexity with a variety of approaches to event recognition.

Keywords: dynamic system, Cauchy problem, chemical reaction, differential equations of chemical kinetics, software unification.

ВВЕДЕНИЕ

В химической технологии, а также в научной практике моделирования химических систем постоянно приходится сталкиваться с ситуацией, когда в результате происходящих процессов в системе наступают перемены, в корне меняющие набор уравнений ее описывающих. Простейшим примером такого типа может быть фазовый переход, когда в результате пересыщения раствора выпадает осадок или в газовой фазе конденсируются твердые или жидкие микрочастицы.

Подобные системы получили название дискретно-непрерывных или гибридных систем (ГС) [1–4]. ГС представляет собой совокупность непрерывных режимов, которые сменяют друг друга при возникновении определенных событий, – именно эти события и выступают причиной смены режима. Например, в классе задач Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ), смена режима соответствует изменению одной или нескольких правых частей СОДУ. В каждый выбранный момент времени ГС может находиться только в одном режиме. С этой точки зрения классические динамические системы, записанные в форме задачи Коши, можно рассматривать как частный случай ГС с одним режимом.

Наличие событий является ключевым отличием ГС от классических динамических. В общем случае нельзя аналитически решить дифференциальное уравнение из-за невозможности выражения многих первообразных через элементарные функции. В таком случае моменты переключений режимов в ГС также не могут быть определены аналитическими методами.

Следует отметить, что в известной литературе отсутствуют данные анализа математических моделей ГС с точки зрения применения современных методов численного моделирования и инструментальных средств машинного анализа. Так в [5, 6] отмечается, что в общем случае не существует решений в аналитическом виде для описания поведения ГС, а применение классических методов для этих целей крайне ограничено. Отсюда вывод, что при моделировании ГС упор следует делать на численные и, в отдельных случаях, численно-аналитические методы с использованием инструментальных вычислительных средств [7, 8].

К настоящему времени теория гибридных систем и ее алгоритмы оказались универсальным аппаратом математического описания сложных дискретно-непрерывных процессов различной физической природы.

При решении жестких задач широкое распространение получили неявные схемы. Однако их использование для анализа ГС может приводить к неверному решению, поскольку такие схемы могут потребовать вычисления решения в точке вне области действия применяемой для расчета правой части ДУ (дифференциальных уравнений).

Во многих практически важных гибридных системах при анализе жестких режимов эффективными оказываются комбинированные явно-неявные методы или, как их еще называют, неоднородные схемы. Основой алгоритма является контроль устойчивости, а приближение к границе устойчивости является критерием переключения схем. Такие комбинированные расчетные схемы хорошо работают при моделировании ГС с жесткими и нежесткими режимами работы. Предлагаемые алгоритмы анализа наиболее удобны для пользователя, не являющимся разработчиком программного обеспечения, если они применяются в совокупности со специализированными инструментальными средствами [9, 10].

Не вдаваясь в подробности, отличающие жесткие системы от нежестких, содержащие легко обнаружимые и труднораспознаваемые события, можно сформулировать общее правило: вся система переключений с режима на режим включает чередование двух принципиально разных этапов – 1) анализатора событий, который предсказывает смену режима (замену правых частей системы ДУ или даже всей системы; как вариант – новые вводные по начальным и/или граничным условиям) и 2) собственно интегратора, который дает локальное численное решение системы ДУ для текущего режима, оно и служит численной базой для анализатора событий.

К настоящему времени разработано множество математически корректных подходов к обнаружению событий. Различают анализаторы, работающие по времени и работающие по совокупности вектор-координат переменных системы. Отдельное внимание уделяется случаю, когда за один шаг интегрирования система успевает зайти в область параметров, характерную для другого режима и вернуться из нее в предыдущий, исходный.

На рисунке 1 представлена ставшая уже классической угроза, когда анализатор событий ГС может дать сбой в обнаружении точек смены режима.

Первый вариант, когда траектория полностью пересекается так, что событийная функция имеет несколько корней на полуинтервале. Похожая ситуация возникает, когда множество значений событийной функции тонкое или имеет острые углы. Два этих варианта практически эквивалентны. В обеих ситуациях большинство стандартных методов могут дать сбой [11, 12].

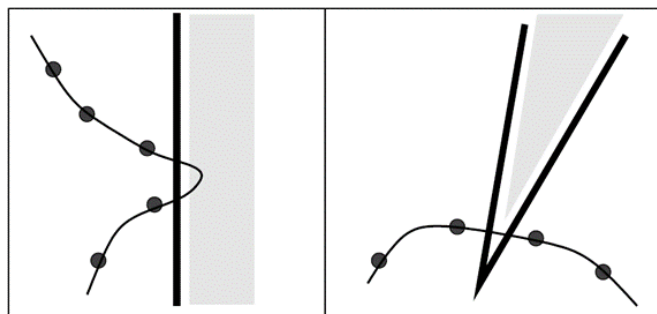


Рис.1. (заимствован из работы Esposito [11]). Два случая, в которых анализатор событий может пропустить смену режима. Это происходит либо в случае «острой» траектории системы (слева) либо в случае «острой» границы событийной функции (справа).

Fig.1. (borrowed from Esposito [11]). Two cases in which the event analyzer can miss the mode change. This occurs either in the case of a sharp system trajectory (left) or in the case of a sharp boundary of the event function (right).

На мой взгляд, все подобные схемы недопустимо сложны для их применения массовым пользователем, не имеющим навыков программирования. Да и для профессионалов возникают определенные неприятности, например, необходимость перехода к вычислительным схемам с переменным шагом, что, как минимум, требует внедрения интерполятора в вычислительный алгоритм, что и неудобно и требует неоправданно высокого расхода машинного времени.

При этом мне не удалось обнаружить в литературе ни одного конкретного примера публикации о ГС с «аномально тонким» поведением, которое требовало бы применения математических изысков для обнаружения событий. Напротив, практически все демонстрационные модели, используемые в публикациях на тему ГС содержат исключительно простые причины смены режимов и соответствующие им событийные функции.

Можно сказать, что выбирая между осторожным маневрированием с переменными шагами и выбором уместного для задачи достаточно малого шага, в большинстве случаев следует отдать предпочтение второму. Алгоритмы с переменным шагом и постоянной оглядкой, не пропущено ли что-то важное между шагами, требуют самостоятельных вычислительных затрат, зачастую могущих превосходить время, на интегрирование постоянными мелкими шагами. Помимо всего прочего, не совсем понятно, а что делать с событием, которое при имеющейся сетке шагов не попадает ни в один из узлов. Дробить шаг? Тогда это лучше сделать изначально.

Построение программной надстройки для работы с событиями

Ранее нами описан пакет программ для моделирования прямой и обратной задач химической кинетики [13]. Уже тогда мы высказали свое предпочтение в пользу VBA-Excel в качестве среды разработки. Пакет, отличающийся интуитивно ясным интерфейсом и простотой использования может быть легко интегрирован с любыми другими приложениями, включает в себя три интегратора различной сложности, которые в совокупности позволяют моделировать динамику практически любых химико-биологических систем.

Пользуясь случаем, очередной раз хочу подчеркнуть гибкость и универсальность выбранной среды. По данным Gartner от 2015 года [14], более половины IT-компаний «полностью» или «преимущественно» пользуются электронными таблицами для аналитики. Это доказывает, что Excel де-факто конкурирует с целой индустрией анализа данных, но при этом не ограничивает своих пользователей только одной сферой применения.

Уже в первой редакции пакета была продемонстрирована возможность решения самых разнообразных прикладных задач, включая гибридные, т.е. содержащие события, изменяющие саму структуру модели. В то же время, приложения для случая гибридных задач получались несколько громоздкими, не имели специализированного интерфейса, поэтому требовали от оператора некоторых навыков программирования.

В силу указанных причин разбирались только довольно простые варианты гибридного поведения, имеющие всего одно переключение с режима на режим.

В то же время, использованная программная среда как нельзя лучше ориентирована на работу с гибридными системами. В этой работе представлена недавно разработанная универсальная программная надстройка, предоставляющая комфортный сервис для работы с гибридными системами произвольного вида и сложности, содержащие любое (в пределах разумного) количество событий, переключающих систему на другой режим.

Эта надстройка ориентирована на работу с одним из трех встроенных интеграторов, а именно с использующим квадратурную формулу Гаусса-Лежандра.

С этой целью на странице «Формулы» рабочей книги Excel с поддержкой макросов (например, «Кин_два_шара_01.xlsm») выделена область, содержащая именованные диапазоны «Событие_1», «Событие_2» и т.д. Количество событий ограничивается только фантазией оператора.

Для удобства каждое событие расположено в цельносвязном прямоугольном блоке ячеек, от левой верхней до правой нижней. Первая ячейка диапазона представляет собой логическое выражение (принимаящее одно из двух значений «истина» или «ложь»), которое и определяет наступление события. В свою очередь, вычисление событийной функции может содержать формулы произвольного вида или обращение к пользовательской функции. В любом случае вычисление событийной функции, сколь бы сложным оно ни было, может быть сведено к сравнению некоторой расчетной величины с заданным пороговым значением, превышение которого расценивается как наступление события. В разработанном варианте на каждом шаге интегрирования происходит принудительное вычисление всего диапазона командой `Range_name.calculate`. Подчеркну еще раз, что в случае так называемых «острых» событийных функций рекомендуется изначально выбирать достаточно мелкий шаг интегратора, поскольку если смена режима и возврат к предыдущему режиму произойдут между двумя соседними точками выдачи, такая информация событийной функции как минимум бесполезна.

На каждом шаге интегрирования происходит циклический обход всех именованных диапазонов, содержащих в литерале идентификатора корень «Событие». При этом если логическая переменная принимает значение «истина», событие считается состоявшимся, а режим ему соответствующий принят. В ряде случаев пересечение границы режимов может быть только однократным (по крайней мере в локальной области времен и значений переменных), тогда первым же действием значение этой событийной переменной сбрасывается в «ложь».

В случае, если событие не состоялось интегратор просто игнорирует все возможные дальнейшие действия по переключению режима, поэтому для одномодовых задач Коши с единственным режимом практически никаких дополнительных вычислительных затрат не возникает и программа-солвер работает столь же быстро, как и без событийной надстройки.

Если все же событие состоялось (целевая ячейка приняла значение «истина»), обрабатывается весь блок присоединенных ячеек Range_name.CurrentRegion. Эти ячейки, в свою очередь, могут использовать вычисления, проводимые в произвольном наборе других ячеек, в том числе, использующих пользовательские функции. Завершается вычислительный этап обработки события тем, что новые значения переменных системы, рассчитанные по правилам нового режима, загружаются по адресам компонентов, на которые указывают стрелки.

Пример такого цельносвязного блока приведен в таблице 1.

Таблица 1. Фрагмент листа «Формулы» книги Excel, в котором идет обработка события
Table 1. Fragment of the sheet “Formulas” of the Excel book, in which the event is processed

События	Условия	Вычисления		Действия	
Событие_1	ЛОЖЬ	0,00	v_t		
		0,00	v_n		
		0,00	v_t1		
		0,00	v_n1		
		0,00	rr_1	-->	R_1
		0,00	rr_2	-->	R_2
		1,00	rr_9	-->	R_9

Введем обозначения (по аналогии с общепринятыми в [5–9]) для описания гибридной системы, содержащей N_x переменных x , описываемых алгебраическими уравнениями, N_y переменных y , описываемых дифференциальными уравнениями и событийную функцию g порогового типа, настроенную так, что событие происходит, когда она меняет знак (в нашем случае с отрицательного на положительный).

$$y' = f(t, x, y), \quad x = \varphi(t, x, y) \quad (1)$$

Событийная функция: $g(y, t) < 0$ – нет события; $g(y, t) > 0$ – есть событие.

Здесь

$$x \in R^{N_x}, y \in R^N, f: R^1 \times R^{N_x} \times R^N \rightarrow R^N, \varphi: R^1 \times R^{N_x} \times R^N \rightarrow R^{N_x}, g: R^1 \times R^N \rightarrow R^S, S \leq N$$

Начальные условия задаются так:

$$t \in [t_0, t_k], \quad x(t_0) = x_0, \quad y(t_0) = y_0 \quad (2)$$

В программном пакете «Кинетика» работа с переменными x производится внесением соответствующих формул в ячейки листа Excel «Формулы», тогда как работа с переменными y осуществляется путем интегрирования по схеме, введенной на листе «Реакции». Например, элементарному примитиву $\frac{dy}{dt} = A(t)$ соответствует элементарная стадия $A \rightarrow y + A$ с константой скорости равной 1. Присутствие A как в правой, так и в левой части уравнения реакции всего лишь подчеркивает, что в ходе интегрирования первообразной производная «не расходуется». Понятно, что используя вспомогательные псевдопеременные, вычисляемые по правилам

листа «Формулы» можно сгенерировать дифференциальное уравнение, разрешенное относительно производной с правой частью любой сложности

Важно отметить, что «событийная надстройка» создана для работы, в первую очередь, с интегратором, основанном на квадратурной формуле Гаусса-Лежандра (это один из трех «решателей», встроенных в пакет «Кинетика»). Главная причина такого выбора состоит в том, что в штатном режиме этот интегратор работает по явной схеме, аналогичной схеме типа Рунге-Кутты [15]:

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m p_i k_i, \quad k_i = hf \left(t_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j \right), \quad \alpha_1 = 0 \quad (3)$$

В этой формуле y_n и y_{n+1} – значения вектор-переменной интегрирования на левом и правом концах n -го шага интегрирования, p_i – коэффициенты точности метода, α_i и β_{ij} – коэффициенты, определяющие устойчивость метода, $1 \leq i \leq m$ (m – порядок метода), k_i – стадии метода, h – шаг разностной схемы, t_n – время.

Алгоритм взаимодействия событийной надстройки с интегратором, основанным на явной схеме можно представить в виде последовательности из пяти шагов. Напомним, что для увеличения быстродействия программы, написанной на языке VBA (для любого из трех интеграторов) в книге Excel отключается автоматический режим вычисления формул и зависимостей в книге. Полагаем, что решение y_n в точке t_n вычислено, причем интегрирование идет с «условно постоянным» шагом¹, достаточно мелким и подробным, чтобы не «перешагивать» через острые события.

Шаг 1. Выдается команда вида `Range_name.calculate` для диапазона ячеек, в которых содержатся инструкции по вычислению алгебраических компонентов x гибридной системы: $x_{n+1} = \varphi(t_{n+1}, x_n, y_n)$

Шаг 2. Вычисляются значения правых частей для дифференциальных уравнений для y , описывающих систему в текущем режиме: $f_n = \varphi(t_{n+1}, x_n, y_n)$

Шаг 3. По формуле (3) вычисляется следующее значение набора переменных y_{n+1}

Шаг 4. Производится вычисление событийной функции $g_{n+1} = g(t_{n+1}, x_{n+1}, y_{n+1})$. Если вычисленная функция имеет значение «ложь» не делается ничего. Если же она приобретает значение «истина», управление передается подпрограмме `Sbycha()`, которая в цикле обеспечивает переподстановку правых частей и стартовых значений переменных в соответствии с включенным новым режимом. Листинг этой подпрограммы приведен в Приложении №1.

Шаг 5. Выполняется следующий шаг интегрирования.

¹ На самом деле, интеграторы программного пакета «Кинетика» обучены дробить т.н. внутренний шаг для расчетов применительно к жестким системам в случае потери точности ниже допустимого задаваемого порога. При этом во внешнюю среду, т.е. для пользователя идет выдача с постоянным выбранным пользователем шагом. Многолетняя практика работы с пакетом подтвердила удобство такого решения.

Важно отметить, что программная надстройка универсально обрабатывает произвольное количество событий, с вычислением событийных функций произвольного вида. При этом от пользователя не требуется написания какого-либо программного кода – достаточно обычных типовых навыков работы со средой Excel.

Проверка работы программной надстройки для работы с событиями

Мы проверили работу надстройки на наиболее популярных примерах, использованных классиками исследования гибридных систем. Самый простой пример – реактор открытого типа, в котором в определенные моменты времени, а именно на 2-й и 5-й секунде происходят «события». На 2-й секунде двукратно увеличивается входной поток (и выходной, соответственно, иначе количество жидкости превысит объем реактора), а на 5-й секунде реактор начинает греться со скоростью 5 градусов в секунду, что естественным образом приводит к росту констант скорости реакций в соответствии с уравнением Аррениуса. Этот пример (рис. 2) максимально подробно описан в работе [9].

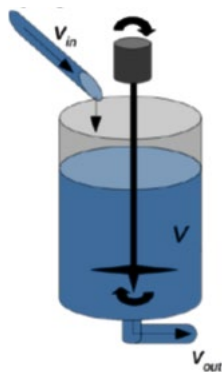


Рис. 2. Схема проточного реактора идеального перемешивания для моделирования гибридной системы, описанной в [9].

Fig. 2. Diagram of flow reactor of ideal mixing for modeling the hybrid system described in [9].

Для демонстрационных целей авторами [9] была выбрана простейшая двухстадийная схема



с константами скорости

$$k_1 = 5.073 \cdot 10^8 \cdot \exp\left(-\frac{1.0 \cdot 10^5}{RT}\right)$$

$$k_2 = 1.340 \cdot 10^8 \cdot \exp\left(-\frac{9.8 \cdot 10^4}{RT}\right)$$

и начальными скоростями $v_{in} = 0.20$ ед./сек и $v_{out} = 0.21$ ед./сек. Объем реактора для простоты был принят за безразмерную единицу, а начальная температура составляла $t_0 = 580$ °K.

В отличие от описанного в [9] языка LISMA_PDE, пакет «Кинетика» не требует выписывать дифференциальные уравнения вручную, достаточно ввести кинетическую схему, как это представлено в таблице 2. Подчеркнем, что восьмая стадия схемы является виртуальной и представлена исключительно для того, чтобы пользователь мог следить за температурой. Для сравнения, запись

дифференциальных уравнений в [9] занимает 17 строк, а вся программа, с обработкой событий – 38.

Таблица 2. Кинетическая схема для реактора идеального перемешивания.

Table 2. Kinetic scheme for an ideal mixing reactor.

Реагент # 1	Реагент # 2	Реагент # 3	Продукт # 1	Продукт # 2	Продукт # 3	Константа
1 V_in			---> A	+ V_in		1,50E+01
2 V_out	+ A		---> V_out			1,00E+00
3 A			---> B			4,95E-01
4 B			---> C			1,82E-01
5 V_in			---> V_in	+ B		1,00E+01
6 V_out	+ B		---> V_out			1,00E+00
7 V_out	+ C		---> V_out			1,00E+00
8 T			---> T			1,00E+00

Совпадение результатов стопроцентное (рис. 3).

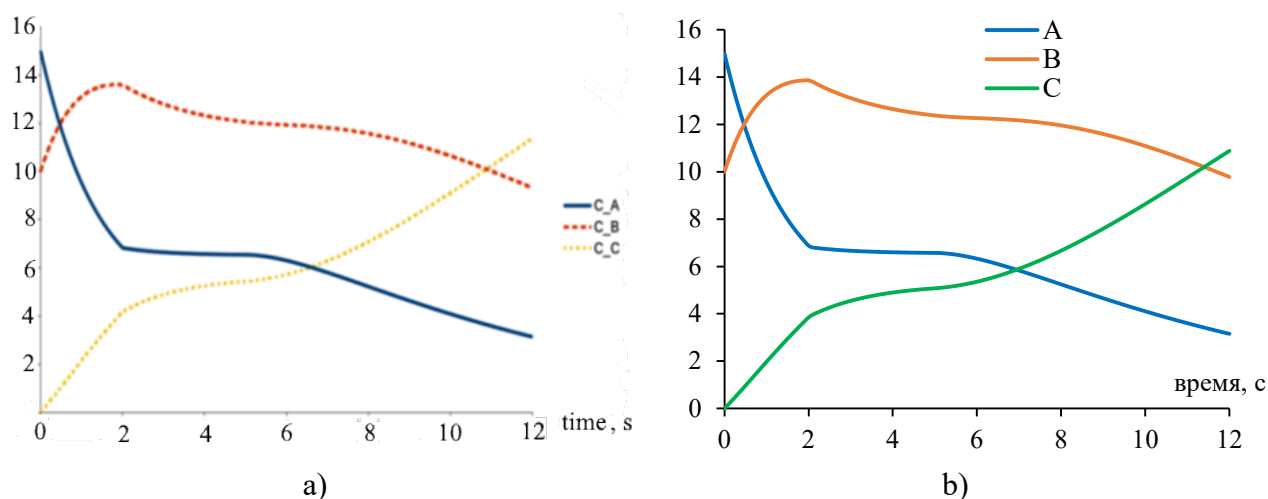


Рис. 3. Сравнение графиков изменения концентраций в модельной системе. Слева а) – расчет из [9], справа б) – расчет с использованием пакета «Кинетика».

Fig. 3. Comparison of plots of changes in concentrations in the model system. On the left a) – calculation from [9], on the right b) – calculation using the «Kinetics» software package.

Еще один пример для сравнения был взят из работы [16]. На рисунке 4 изображены два шара на пружинах, помещенных в едином пространстве, где они могут сталкиваться. Для простоты рассматривается одномерная задача, что, тем не менее, оставляет большой простор для вариативности. Шары могут иметь различные массы, а пружины – различные жесткости. Кроме того, пользователь по своему усмотрению может задавать различные равновесные положения шаров и различные их отклонения от равновесия в начальный момент.

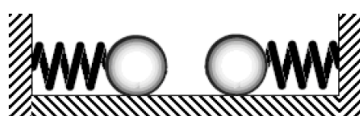


Рис. 4. Модель двух шаров для моделирования гибридной системы, описанной в [16].

Fig. 4. Model of two balls for simulation of hybrid system described in [16].

Главной особенностью неупругого соударения шаров, которая, к сожалению, не очень четко описана в [16], является их слипание. Его подробности можно восстановить из текста программы, приведенной в [16]. Сконструирована несколько искусственная ситуация, в которой в момент соударения шары склеиваются. Причем клей этот довольно нестойкий, с течением времени он начинает терять прочность по реакции первого порядка. Пока шары склеены, они двигаются одинаково и этот режим называется «Вместе». В какой-то момент времени разность сил натяжения пружин, к которым привязаны шары, становится сильнее прочности клея. В этот момент шары разлипаются и происходит переход в режим «Раздельно».

Диапазон ячеек листа «Формулы», ответственный за вычисление событийных функций представлен в таблице 3.

Таблица 3. Диапазон ячеек листа «Формулы», ответственный за вычисление событийных функций

Table 3. The range of cells in the Formula sheet responsible for calculating event

	Формула	Значение	Формула	Значение		
Событие_1	=И((R_5>=R_6);НЕ(Столкновение))	ЛОЖЬ	=ИСТИНА	ИСТИНА	было	--> Столкновение
момент столкновения			$=\frac{(m_1 \cdot R_3 + m_2 \cdot R_4)}{(m_1 + m_2)}$	0,00	v_1_new	--> R_3
			$=\frac{(m_1 \cdot R_3 + m_2 \cdot R_4)}{(m_1 + m_2)}$	0,00	v_2	--> R_4
			=10	10,00	sl	--> R_8
			=ИСТИНА	ИСТИНА	стало	--> Вместе
			=ЛОЖЬ	ЛОЖЬ	стало_2	--> Раздельно
	Формула	Значение	Формула	Значение		
Событие_2	=Вместе	ЛОЖЬ	$=\frac{(k_j \cdot 1 \cdot n_1 + k_j \cdot 2 \cdot n_2 \cdot R_5 \cdot (k_j \cdot 1 + k_j \cdot 2))}{(m_1 + m_2)}$	4,00	a_1t	--> R_1
Движение вместе			$=\frac{(k_j \cdot 1 \cdot n_1 + k_j \cdot 2 \cdot n_2 \cdot R_6 \cdot (k_j \cdot 1 + k_j \cdot 2))}{(m_1 + m_2)}$	-3,50	a_2t	--> R_2
	Формула	Значение	Формула	Значение		
Событие_3	=R_8<ABS(kj_1*n_1-kj_2*n_2-R_5*(ИСТИНА	=ИСТИНА	ИСТИНА	Выч_1	--> Раздельно
Движение раздельно			=ЛОЖЬ	ЛОЖЬ	Выч_2	--> Вместе
			=ЛОЖЬ	ЛОЖЬ	Выч_3	--> Столкновение

При столкновении шаров (Событие 1) вычисляется результирующая скорость слипшейся пары по закону сохранения импульса (первые две строчки), взводится таймер старения клея (строка 3) и задается режим «вместе» одновременно со сбросом события «столкновение» и режима «раздельно».

Событие 2 или продолжение режима «вместе» длится до тех пор, пока не наступит Событие 3 – разлипание шаров в результате неспособности состарившегося клея удерживать их вместе.

Вот и вся схема, которая выглядит несколько проще настройки программного модуля LISMA.

На рисунке 5 представлена временная развертка движения шаров.

Как видно из рисунка, совпадение близко к идеальному.

Применение надстройки работы с событиями к более сложной системе

Рассмотрим систему одного шара, упруго отражающегося от наклонной плоскости. На первый взгляд, система, состоящая всего из одного движущегося тела, выглядит проще, чем рассмотренные ранее, но по мере того, как будут добавляться отражающие поверхности, система становится все сложнее и сложнее. Постепенно траектория движения шара становится хаотической, а

анализ происходящих событий, хотя и сохраняет первоначальные принципы простоты, перестает быть тривиальным и демонстрирует весьма сложное поведение.

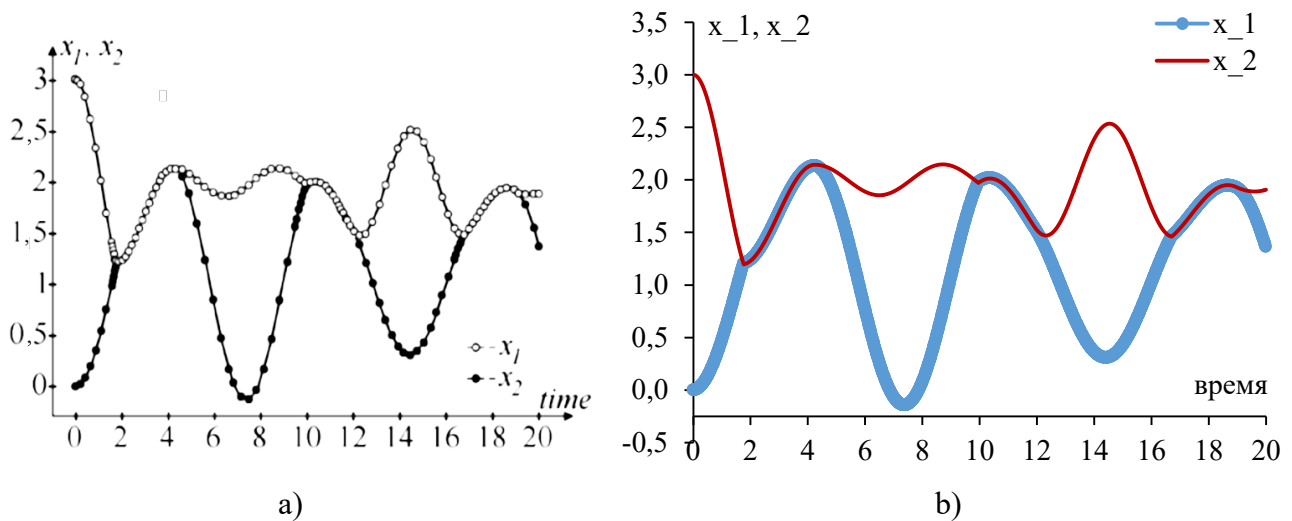


Рис. 5. Диаграмма динамики двух шаров с возможностью слипания. Сравнение с работой [16]. Слева а) – расчет в среде LISMA, справа б) расчет в пакете «Кинетика».

Fig. 5. Diagram of the dynamics of two balls with the possibility of sticking together. Comparison with work [16]. On the left a) – calculation in LISMA environment, on the right b) – calculation in “Kinetics” package.

Также, пользователь имеет возможность варьировать степень упругости шара при отражении. Кроме того, можно дополнительно добавить вязкость среды, что выводит вычислительную задачу за рамки возможностей сопоставления с траекториями, получаемыми алгебраическим расчетом. Дабы не загромождать демонстрационные картинки ограничимся простейшим случаем без диссипации энергии.

Траектория первых пяти отскоков представлена на рисунке 6. В принципе, она может быть продолжена до бесконечности – все ограничивается заданной длиной плоскости для отскока.

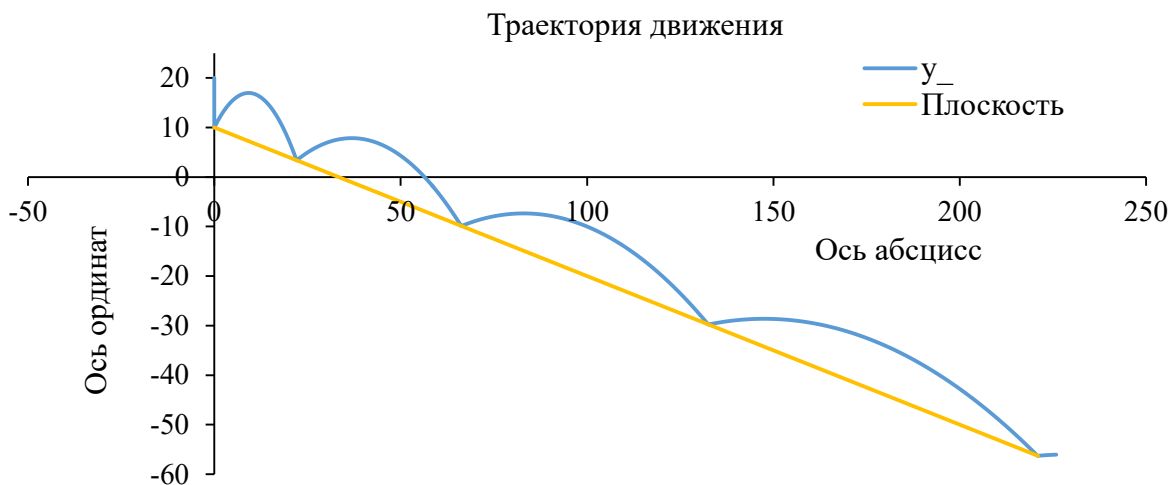


Рис. 6. Диаграмма упругих отскоков шара от наклонной плоскости.

Fig. 6. Diagram of elastic bounces of the ball from the inclined plane.

Единственным событием в простейшем варианте системы является попытка шара пересечь границу плоскости. Надстройка перехватывает эти моменты и производит расчет нормальной и тангенциальной компонент скорости в момент соударения. При полностью упругом отскоке тангенциальная компонента скорости сохраняет и величину, и знак, тогда как нормальная компонента величину сохраняет, а знак меняет на противоположный. Пока все просто.

Усложним систему – поставим в конце плоскости вертикальную стенку. Теперь помимо пары наклонных взаимно перпендикулярных компонент необходимо рассматривать и вертикальные, x и y компоненты. Диаграмма движения в этом случае показана на рисунке 7.

Также показательно рассмотрение динамических характеристик системы (компонент скорости и координат), как функций от времени, представленное на рисунке 8. Видно, что ее поведение несопоставимо более сложно, чем в двух рассмотренных ранее литературных примерах.

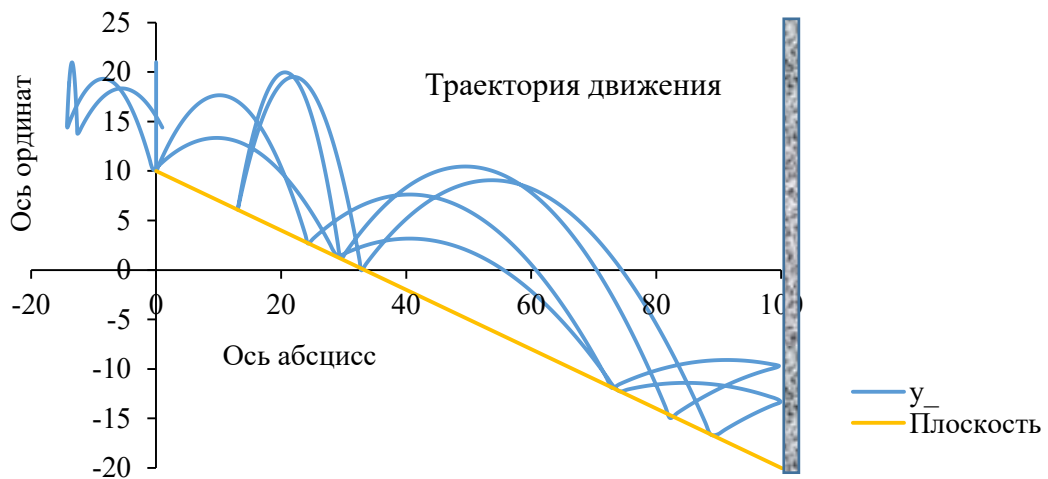


Рис. 7. Диаграмма упругих отскоков шара от наклонной плоскости и одной ограничивающей вертикальной стенки.

Fig. 7. Diagram of elastic bounces of the ball from the inclined plane and the limiting vertical wall.

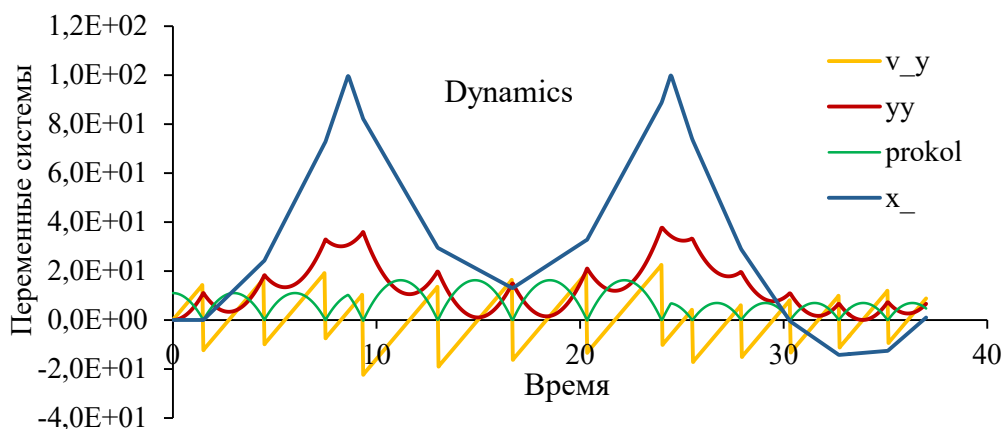


Рис. 8. Динамика изменения компонентов системы «шар на наклонной плоскости» как функция времени.

Fig. 8. Dynamics of change of system components as a function of time in the bouncing ball-on-inclined plane model.

Продолжим усложнять систему добавлением отражающих плоскостей (рис. 9 – 11).

На рисунке 9 шар совершает отскоки в области пространства, ограниченной отражающими поверхностями справа и слева.

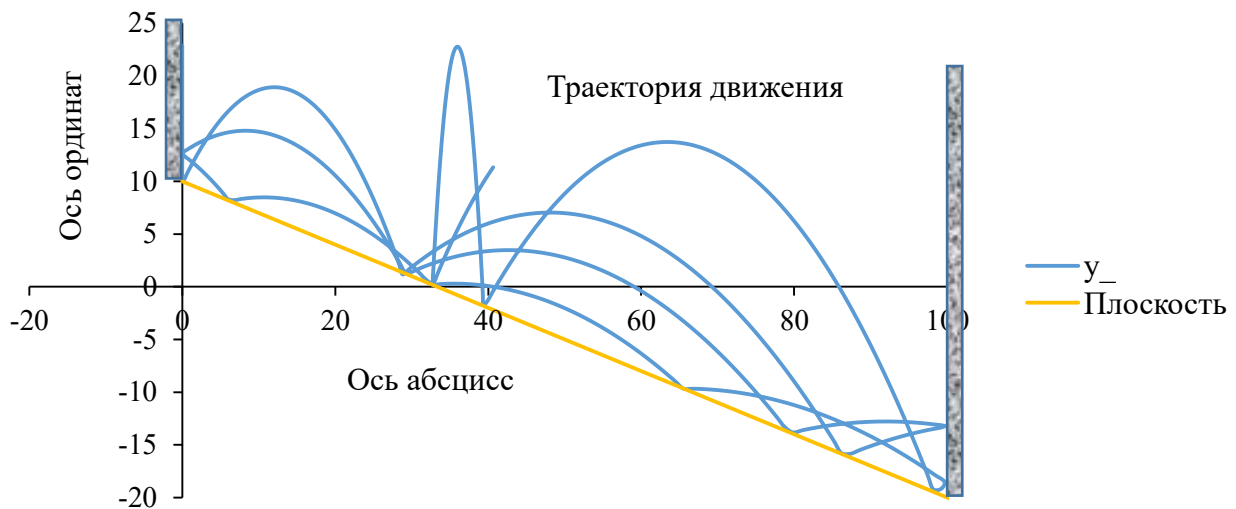


Рис. 9. Диаграмма упругих отскоков шара от наклонной плоскости с двумя с двумя ограничивающими вертикальными стенками справа и слева.

Fig. 9. Diagram of elastic bounces of a ball from an inclined plane with two bounding vertical planes on the right and left.

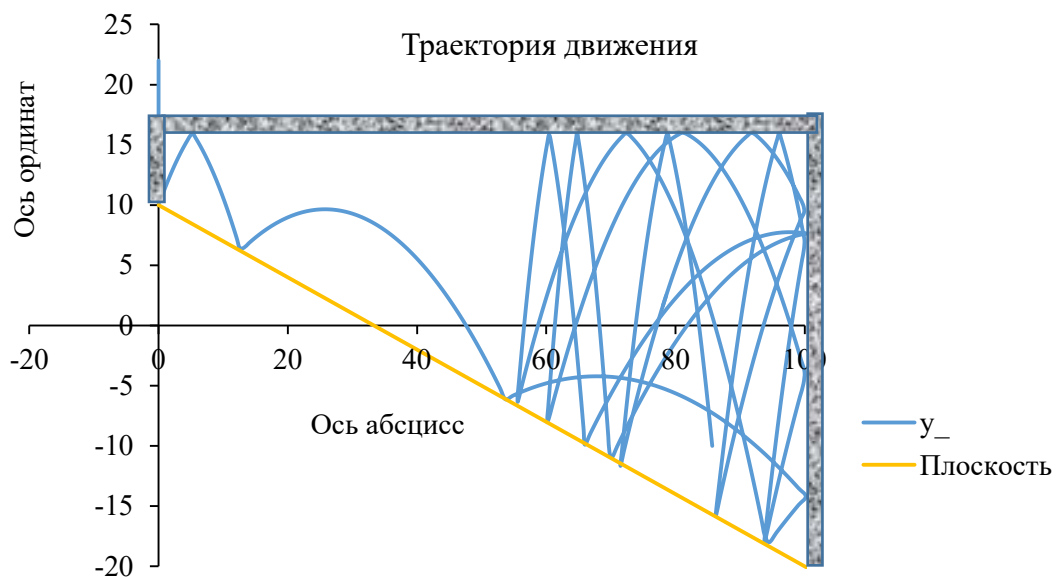


Рис. 10. Диаграмма упругих отскоков шара от наклонной плоскости с двумя ограничивающими стенками и потолком.

Fig. 10. Diagram of elastic bounces of a ball from an inclined plane with two bounding walls and a ceiling.

В таблице 4 представлен диапазон ячеек листа «Формулы», ответственный за вычисление событийных функций для шарика с наклонной плоскостью, двумя вертикальными ограничивающими стенками и потолком.

Таблица 4. Диапазон ячеек листа «Формулы», ответственный за вычисление событийных функций для шарика с наклонной плоскостью, двумя вертикальными ограничивающими стенками и потолком.

Table 4. A range of Formula sheet cells responsible for calculating event functions for a ball with a sloped plane, two vertical bounding walls, and a ceiling.

События	Условия	Вычисления			Действия
Событие_1	$\neq(R_5 < 0)$	$\neq R_2 * \sin(\beta) + R_1 * \cos(\beta)$ $\neq R_2 * \cos(\beta) - R_1 * \sin(\beta)$ $\neq (v_t)$ $\neq -ABS(v_n) * \sin(\beta)$ $\neq v_{t1} * \cos(\beta) - v_{n1} * \sin(\beta)$ $\neq + v_{n1} * \cos(\beta) + v_{t1} * \sin(\beta)$ 1	v_t v_n v_{t1} v_{n1} rr_1 rr_2 rr_9	 $-->$ $-->$ $-->$	 R_1 R_2 R_9
Событие_2	$\neq(R_3 > L_1)$	$\neq -R_1$	v_x	$-->$	R_1
Событие_3	$\neq(R_3 < 0)$	$\neq -R_1$	v_x	$-->$	R_1
Событие_4	$\neq И((L_0 * 1 + h_0 / 2 - R_4 < 0); R_2 < 0); 1)$	$\neq -R_2$	rr_4	$-->$	R_2

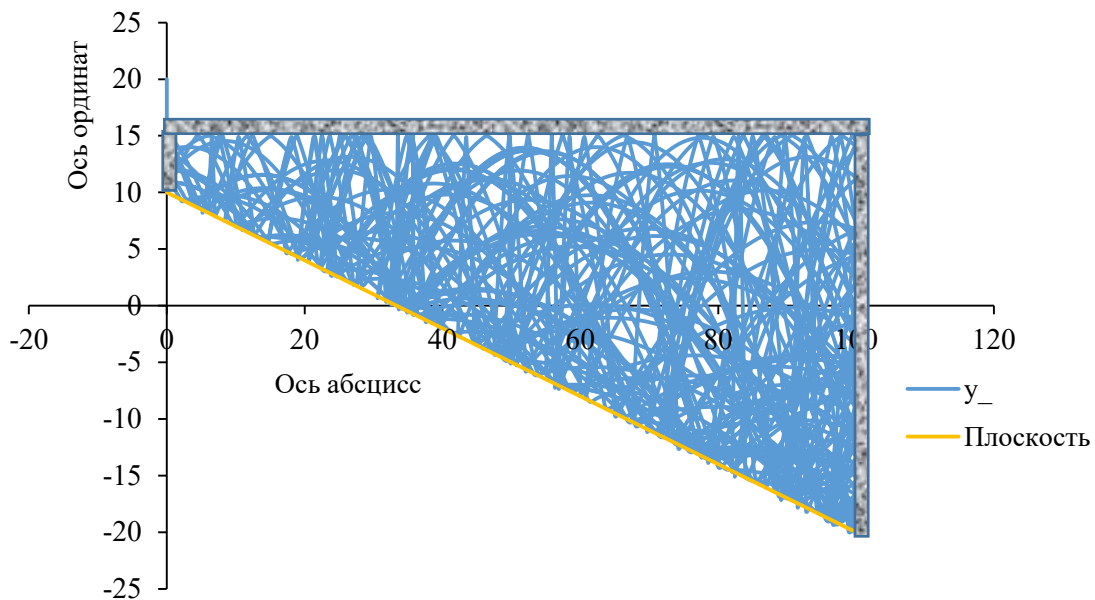


Рис. 11. Диаграмма упругих отскоков шара от наклонной плоскости – 10 тысяч секунд, траектория хаотически заполняет все доступное пространство.

Fig. 11. The diagram of elastic bounces of the ball from the inclined plane is 10 thousand seconds, the trajectory randomly fills all available space.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведенные примеры показывают, что созданная надстройка позволяет моделировать динамические гибридные системы с произвольным количеством режимов и применимой к системам достаточно серьезной сложности. В статье не ставилась задача перехвата «острых событий», чтобы сосредоточиться, главным образом, на простоте и универсальности надстройки.

Ее применение доступно любому пользователю, знакомому с основами Excel и не требует никакой специальной подготовки в программировании.

В приложении к этой публикации также имеется видеоролик движения шара, полученный с помощью представленной надстройки.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 122040500068-0. Тема: Химические аспекты энергетики; моделирование процессов окисления и горения, углеродные и композитные наноматериалы для альтернативной энергетики.

ACKNOWLEDGEMENT

The work was carried out within the framework of the State Assignment No. 122040500068-0. Topic: Chemical Aspects of Energy; Simulation of Oxidation and Combustion Processes, Carbon and Composite Nanomaterials for Alternative Energy Industry.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

CONFLICT OF INTERESTS

The author declare no conflict of interests

Список литературы

- 1 Бенькович Е.С., Колесов Ю.Б., Сениченков Ю.В. (2002) *Практическое моделирование динамических систем*. СПб.: БХВ-Петербург.
- 2 Колесов Ю.Б. Сениченков Ю.В. (2006). *Моделирование систем. Объектно-ориентированный подход*. Учебное пособие. СПб.: БХВ- Петербург.
- 3 Колесов Ю.Б. (2004). *Объектно-ориентированное моделирование сложных динамических систем*. СПб.: Изд-во СПбГПУ.
- 4 Avrutin V., Schutz M. (2001). Remarks to simulation and investigation of hybrid. *Гибридные системы. Model Vision Studium: Труды международной научно-технической конференции*. СПб.: Изд-во СПбГТУ, С. 64–66.
- 5 Попов Е.А., Шорников Ю.В. (2020). Детекция событий разного типа в гибридных динамических системах. *Системы анализа и обработки данных*. 4(80), 159–176.
- 6 Шорников Ю.В., Кириллов В.Л., Бессонов А.В., Попов Е.А. (2015). Модели системной динамики в окружении ИСМА. *Сборник научных трудов НГТУ*. 4(82), 122–135.
- 7 Попов Е.А., Шорников Ю.В. (2021) Язык моделирования гетерогенных динамических систем LISMA_HDS. *Системы анализа и обработки данных*, 81(1), 103–122. <http://dx.doi.org/10.17212/2782-2001-2021-1-103-122>
- 8 Шорников Ю.В., Достовалов Д.Н., Томилов И.Н. (2013). Инструментально-ориентированный анализ гибридных систем различной природы. *Научный вестник НГТУ*. 3(52), 102–110
- 9 Yury V Shornikov and Evgeny A Popov (2020) IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 734 <https://doi.org/10.1088/1757-899X/734/1/012079>
- 10 Abdenov, A.Zh. Shornikov Yu.V. (2003). Instrumental tools for computer modeling of complex dynamical processes. *Proceedings. of the 7th Korea-Russian Intern. Symp. On Science and Technology KORUS*. Ulsan, Korea: University of Ulsan, P. 51–57.
- 11 Esposito J., Kumar V., Pappas G.J. (1998). Accurate event detection for simulating hybrid systems. *Hybrid Systems: Computation and Control (HSCC)*. LNCS, 2034.
- 12 Esposito J.M., Kumar V. (2004). An Asynchronous Integration and Event Detection Algorithm for Simulating Multi-Agent Hybrid Systems. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 14(4). 336–358.

- 13 Травин С.О., Громов О.Б. Разработка пакета программ VBA-EXCEL для моделирования задач химической кинетики. (2018). *Химическая безопасность*. 2(1), 50–72.
<https://doi.org/10.25514/CHS.2018.1.12882>
- 14 Gartner Research. <https://www.gartner.com/en/documents/2933817> (дата обращения 30.09.2022)
- 15 Новиков Е.А. (1997). *Явные методы для жестких систем*. М.: Наука.
- 16 Шорников Ю.В., Достовалов Д.Н. (2012). Моделирование жестких гибридных систем с односторонними событиями в среде ИСМА. *Компьютерное моделирование 2012. Труды международного семинара*. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 36–41.

References:

1. Benkovich, E.S., Kolesov, & Yu.B., Senichenkov, Yu.V. (2002) *Practical modeling of dynamic systems*. St. Petersburg: BHV-Petersburg. (in Russ.)
2. Kolesov, Yu.B., & Senichenkov, Yu.V. (2006). *Systems Modeling. Object-oriented approach*. Tutorial. St. Petersburg: BHV-Petersburg. (in Russ.)
3. Kolesov, Yu.B. (2004). *Object-oriented modeling of complex dynamic systems*. SPb.: Polytech. (in Russ.)
4. Avrutin, V., & Schutz, M. (2001). Remarks to simulation and investigation of hybrid. *Hybrid systems. Model Vision Studium: Proceedings of the international scientific and technical conference*. St. Petersburg: Polytech, P. 64–66.
5. Popov, E.A., & Shornikov, Yu.V. (2020). Detection of events of various types in hybrid dynamic systems. *Data analysis and processing systems*. 4(80), 159–176. (in Russ.)
6. Shornikov, Yu.V., Kirillov, V.L., Bessonov, A.V., & Popov, E.A. (2015). Models of system dynamics in the ISMA environment. *Collection of scientific works of NSTU*. 4(82), 122–135. (in Russ.)
7. Popov, E.A., & Shornikov, Yu.V. (2021). Language for modeling heterogeneous dynamical systems LISMA_HDS. *Data Analysis and Processing Systems*, 81(1), 103–122. (in Russ.)
<http://dx.doi.org/10.17212/2782-2001-2021-1-103-122> (in Russ.)
8. Shornikov, Yu.V., Dostovalov, D.N., & Tomilov, I.N. (2013). Instrument-oriented analysis of hybrid systems of various nature. *Scientific Bulletin of NSTU*. 3(52), 102–110. (in Russ.)
9. Shornikov, Yury, V., & Popov, Evgeny, A. (2020). IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 734
<https://doi.org/10.1088/1757-899X/734/1/012079>
10. Abdenov, A. Zh., & Shornikov, Yu.V. (2003). Instrumental tools for computer modeling of complex dynamical processes. *Proceedings of the 7th Korea-Russian Intern. Symp. On Science and Technology KORUS*. Ulsan, Korea: University of Ulsan, P. 51–57.
11. Esposito, J., Kumar, V., & Pappas, G.J. (1998). Accurate event detection for simulating hybrid systems. *Hybrid Systems: Computation and Control (HSCC)*. LNCS, 2034.
12. Esposito, J.M., & Kumar, V. (2004). An Asynchronous Integration and Event Detection Algorithm for Simulating Multi-Agent Hybrid Systems. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, 14(4). 336–358.
13. Travin, S.O., & Gromov, O.B. (2018). Development of VBA-EXCEL software package for simulation chemical kinetics tasks. *Khimicheskaya Bezopasnost' = Chemical Safety Science*. 2(1), 50–72. <https://doi.org/10.25514/CHS.2018.1.12882> (in Russ.)
14. Gartner Research. <https://www.gartner.com/en/documents/2933817> (accessed 30.09.2022) (in Russ.)
15. Novikov, E.A. (1997). *Explicit methods for rigid systems*. М.: Nauka. (in Russ.)
16. Shornikov, Yu.V., & Dostovalov, D.N. (2012). Simulation of rigid hybrid systems with one-way events in the ISMA environment. *Computer modeling 2012. Proceedings of the international seminar*. St. Petersburg: Politech., 36–41. (in Russ.)

Приложение

Листинг модуля обработки событий

Public Sub sbycha()

Dim rng As Range, cname As Variant

Dim kuda As Range, strelka As String, chto As String

Dim r As Integer, c As Integer, h As Integer, i As Integer

For Each cname In ThisWorkbook.Names

If InStr(cname.name, "Событие") > 0 Then

Set rng = Range(cname.name)

rng.Calculate

If [rng] Then

rng.CurrentRegion.Calculate

r = rng.Row

c = rng.Column + 3

h = rng.CurrentRegion.Rows.Count

For i = 1 To h

strelka = Worksheets("Формулы").Range(Worksheets("Формулы").Cells(r + i - 1, c), _
Worksheets("Формулы").Cells(r + i - 1, c)).Value

If strelka = "-->" Then

chto = Worksheets("Формулы").Range(Worksheets("Формулы").Cells(r + i - 1, c + 1), _
Worksheets("Формулы").Cells(r + i - 1, c + 1)).Value

Set kuda = Range(chto)

kuda.Value = Worksheets("Формулы").Range(Worksheets("Формулы").Cells(r + i - 1, c - 2), _
Worksheets("Формулы").Cells(r + i - 1, c - 2)).Value

kuda.Calculate

'Stop

End If

Next i

End If

End If

Next cname

Set rng = Range("Опять")

rng.Calculate

End Sub