

УДК: 004.942

## К проблеме программной реализации потенциально-потокowego метода описания физико-химических процессов

И. Е. Старостин<sup>1,а</sup>, В. И. Быков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ООО «Экспериментальная мастерская «НаукаСофт»,  
Россия, 129085, г. Москва, ул. Годовикова, д. 9, стр. 1

<sup>2</sup> Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля, РАН,  
Россия, 119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4

E-mail: <sup>а</sup> starostinigo@yandex.ru

*Получено 15.04.2018, после доработки — 05.09.2018.*

*Принято к публикации 10.09.2018.*

В рамках современной неравновесной термодинамики (макроскопического подхода описания и математического моделирования динамики реальных физико-химических процессов) авторами был разработан потенциально-потоковой метод описания и математического моделирования этих процессов, применимый в общем случае реальных макроскопических физико-химических систем. В соответствии с этим методом описание и математическое моделирование этих процессов заключаются в определении через потенциалы взаимодействия термодинамических сил, движущих эти процессы, и кинетической матрицы, определяемой кинетическими свойствами рассматриваемой системы, которые, в свою очередь, определяют динамику протекания физико-химических процессов в этой системе под действием термодинамических сил в ней. Зная термодинамические силы и кинетическую матрицу системы, определяются скорости протекания физико-химических процессов в системе, а через эти скорости согласно законам сохранения определяются скорости изменения ее координат состояния. Получается, таким образом, замкнутая система уравнений физико-химических процессов в системе. Зная потенциалы взаимодействия в системе, кинетические матрицы ее простых подсистем (отдельных процессов, сопряженных между собой и не сопряженных с другими процессами), коэффициенты, входящие в законы сохранения, начальное состояние рассматриваемой системы, внешние потоки в нее, можно получить полную динамику физико-химических процессов в этой системе. Однако в случае сложной физико-химической системы, в которой протекает большое количество физико-химических процессов, размерность системы уравнений этих процессов становится соответствующей. Отсюда возникает проблема автоматизации формирования описанной системы уравнений динамики физико-химических процессов в рассматриваемой системе. В настоящей статье разрабатывается архитектура библиотеки программных типов данных, реализующих заданную пользователем физико-химическую систему на уровне ее расчетной схемы (координат состояния системы, энергетических степеней свободы, физико-химических процессов, в ней протекающих, внешних потоков и взаимосвязи между этими перечисленными компонентами) и алгоритмов задания ссылок в этих типах данных, а также расчета описанных параметров системы.

Ключевые слова: физико-химическая система, потенциально-потоковой метод, программная реализация

UDC: 004.942

## To the problem of program implementation of the potential-streaming method of description of physical and chemical process

I. E. Starostin<sup>1,a</sup>, V. I. Bykov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Organization LLC «Experimental workshop «NaukaSoft»,  
9/1 Godovikova st., Moscow, 129085, Russia

<sup>2</sup>Institute of Biochemical Physics N. M. Emanuel, RAS,  
4 Kosygina st., Moscow, 119334, Russia

E-mail: <sup>a</sup> starostinigo@yandex.ru

*Received 15.04.2018, after completion — 05.09.2018.*

*Accepted for publication 10.09.2018.*

In the framework of modern non-equilibrium thermodynamics (macroscopic approach of description and mathematical modeling of the dynamics of real physical and chemical processes), the authors developed a potential-flow method for describing and mathematical modeling of real physical and chemical processes applicable in the general case of real macroscopic physicochemical systems. In accordance with the potential-flow method, the description and mathematical modeling of these processes consists in determining through the interaction potentials of the thermodynamic forces driving these processes and the kinetic matrix determined by the kinetic properties of the system in question, which in turn determine the dynamics of the course of physicochemical processes in this system under the influence of the thermodynamic forces in it. Knowing the thermodynamic forces and the kinetic matrix of the system, the rates of the flow of physicochemical processes in the system are determined, and according to these conservation laws the rates of change of its state coordinates are determined. It turns out in this way a closed system of equations of physical and chemical processes in the system. Knowing the interaction potentials in the system, the kinetic matrices of its simple subsystems (individual processes that are conjugate to each other and not conjugate with other processes), the coefficients entering into the conservation laws, the initial state of the system under consideration, external flows into the system, one can obtain a complete dynamics of physicochemical processes in the system. However, in the case of a complex physico-chemical system in which a large number of physicochemical processes take place, the dimension of the system of equations for these processes becomes appropriate. Hence, the problem arises of automating the formation of the described system of equations of the dynamics of physical and chemical processes in the system under consideration. In this article, we develop a library of software data types that implement a user-defined physicochemical system at the level of its design scheme (coordinates of the state of the system, energy degrees of freedom, physico-chemical processes, flowing, external flows and the relationship between these listed components) and algorithms references in these types of data, as well as calculation of the described system parameters. This library includes both program types of the calculation scheme of the user-defined physicochemical system, and program data types of the components of this design scheme (coordinates of the system state, energy degrees of freedom, physicochemical processes, flowing, external flows). The relationship between these components is carried out by reference (index) addressing. This significantly speeds up the calculation of the system characteristics, because faster access to data.

Keywords: physico-chemical system, potentially-flow method, software implementation

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2018, vol. 10, no. 6, pp. 817–832 (Russian).

## 1. Введение

Для описания, и соответственно, математического моделирования (ММ) физико-химических процессов (ФХП) в настоящее время существуют два подхода [Гроот, 1956; Квасников, 2003; Крутов и др., 1991; Жоу и др., 2006; Эткин, 2008]: микроскопический (основанный на статистической физике и кинетической теории) и макроскопический (основанный на современной неравновесной термодинамике). Микроскопический подход базируется на известных моделях молекул и применяется только для определенных классов ФХП [Гроот, 1956; Квасников, 2003], что делает его практически неприменимым [Гроот, 1956]. Макроскопический подход основывается на экспериментально исследуемых свойствах веществ и процессов (СВП), при этом данный подход не подразумевает вникания в молекулярно-кинетический механизм этих ФХП, что обуславливает его практическую применимость, [Гроот, 1956; Крутов и др., 1991; Жоу и др., 2006; Эткин, 2008].

В рамках современной неравновесной термодинамики (макроскопического подхода) состояние любой физико-химической системы (ФХС) характеризуется ее параметрами состояния (ПС) — динамическими величинами, однозначно характеризующими состояние этой системы в любой момент времени независимо от ее предыстории, [Крутов и др., 1991; Жоу и др., 2006; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017]. Если рассматриваемая ФХС обладает эффектом памяти [Жоу и др., 2006], то для таких систем вводятся дополнительные динамические величины, характеризующие накопленный опыт этих систем, которые также являются ее ПС [Жоу и др., 2006; Старостин, Быков, 2017]. Для описания динамики произвольной ФХС ее ПС вводятся таким образом, что протекание в этой системе каждого процесса конкретной физической природы вызывает изменение только одного ее ПС, сопряженного с этим процессом [Крутов и др., 1991; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017]. Такие ПС называются координатами состояния (КС) [Крутов и др., 1991; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017]. К КС относятся внутренние энергии (ВЭ). Далее ВЭ будем обозначать как  $U_i$ ,  $i=1, m_U$ , где  $m_U$  — количество этих ВЭ. Изменение остальных КС любой ФХС сопряжено с совершением работы (конкретной физической природы, например, работы расширения, сжатия, работы по переносу электрического заряда, и т. д.) [Крутов и др., 1991; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017]. Эти остальные КС будем обозначать как  $z_k$ ,  $k=1, m_z$ , где  $m_z$  — количество этих прочих КС.

Для характеристики скоростей протекания ФХП вводятся координаты процессов (КП) — динамические величины, изменение каждой из которых связано с протеканием соответствующего процесса и только этого процесса. В число КП входят как переданные теплоты, так и остальные КП, изменение которых связано с совершением соответствующей работы. Далее перенесенные теплоты мы будем обозначать как  $Q_{i,j}^{(nep)}$ ,  $j=i+1, m_U$ ,  $i=1, m_U-1$ , а прочие КП — как  $\Delta z_r$ ,  $r=1, m_{\Delta z}$ , где  $m_{\Delta z}$  — число этих КП в системе [Крутов и др., 1991; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017].

В работах [Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017; Быков, Старостин, 2012; Быков, Старостин, 2013] с позиций современной неравновесной термодинамики был разработан потенциально-потоковой метод (ППМ), применимый в общем случае для математического описания (с позиций макроскопического подхода) ФХП. В соответствии с этим методом для описания ФХП определяются термодинамические силы (ТС), являющиеся в силу второго начала термодинамики причиной и необходимым условием протекания этих ФХП (в рамках законов сохранения и первого начала термодинамики) [Гроот, 1956; Жоу и др., 2006; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017]. Также необходимо знать еще и кинетические свойства ФХС, определяющих динамику протекания ФХП в этих системах, движимых ТС независимо от последних, [Старостин, Быков, 2017]. В уравнениях ППМ кинетические свойства ФХС входят в виде кинетической матрицы (КМ) — «шкалы» кинетических свойств этих процессов [Старостин, Быков, 2017]. ТС (определяемые через потенциалы взаимодействия (ПВЗ)), кинетические свойства, уравнения баланса дают возможность в общем случае составить полную систему уравнений ФХП

[Гроот, 1956; Крутов и др., 1991; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017]. В работах [Гроот, 1956; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017; Быков, Старостин, 2012; Быков, Старостин, 2013] рассмотрены примеры математического описания ФХП, полученных ППМ. Поэтому настоящая работа посвящена разработке архитектуры программной библиотеки, реализующей ППМ, которая может быть использована в составе математического обеспечения аналитических и моделирующих информационных систем.

В работе используются следующие сокращения:

ВЭ	— внутренние энергии,
ДС	— дисперсные системы,
КМ	— кинетическая матрица,
КП	— координаты процессов,
КС	— координаты состояния,
ММ	— математическое моделирование, математическая модель,
ПВЗ	— потенциалы взаимодействия,
ППМ	— потенциально-поточковый метод,
ПС	— параметры состояния,
СВП	— свойства веществ и процессов,
ТС	— термодинамические силы,
ФХП	— физико-химические процессы,
ФХС	— физико-химические системы,
ЭСС	— энергетические степени свободы.

## 2. Постановка цели и задач

Целью настоящей статьи является разработка архитектуры программной библиотеки, реализующей ППМ, подключаемой к математическому ядру аналитических и моделирующих информационных систем. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- анализ в общем случае структуры реальных ФХС;
- формулирование допущений, в рамках которых осуществляется математическое описание реальных ФХС;
- описание (на базе [Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017]) алгоритма расчета (в рамках сформированных допущений) характеристик реальных ФХС (ПВЗ, ТС, КМ, скоростей протекания ФХП, скоростей изменения КС и т. д.);
- разработка схемы реализации в памяти ЭВМ структуры заданной пользователем ФХС;
- описание системы алгоритмов синтеза (в памяти ЭВМ) пользовательской структуры заданной ФХС и расчета ее характеристик.

## 3. Общая структура реальных физико-химических систем

Вещества или их смеси в произвольной ФХС могут находиться в одном из агрегатных состояний: твердом, жидком, газообразном, т. е. представляют собой пространственно разделенные фазы, ограниченные поверхностью раздела [Гуров и др., 2004]. Межфазные границы могут представлять собой естественные границы раздела фаз [Гуров и др., 2004], мембранные перегородки [Тимашев, 1988], а также перегородки, пропускающие только энергию, но не пропускающие вещество [Гуров и др., 2004].

При смешивании двух и более веществ образуется их смесь, в которой могут протекать химические превращения и образовываться новые вещества. Такие смеси, называемые дисперсными системами (ДС), могут быть неоднородными (гетерогенными) и однородными (гомогенными), называемыми растворами (см. таблицу 1) [Гуров и др., 2004].

Таблица 1. Виды растворов по агрегатному состоянию

Агрегатное состояние раствора	Виды растворов
Твердое	Раствор замещения: атомы растворенного вещества заменяют в кристаллической структуре атом растворителя
	Раствор внедрения: атомы растворенного вещества располагаются в междоузлиях кристаллической решетки растворителя
Жидкое	Атомы растворенного вещества в сольватных оболочках
Газообразное	Смесь газов

Табл. 2. Виды гетерогенных дисперсных систем [Гуров и др., 2004]

Дисперсионная среда	Дисперсные фазы	Примеры гетерогенных ДС
Твердая	Твердые	Твердые гетерогенные ДС: минералы, сплавы, композиционные материалы, бетон
	Жидкие	Капиллярные системы: жидкость в пористых телах, адсорбенты в растворах, почвы, грунты
	Газообразные	Пористые тела: адсорбенты и катализаторы в газах
Жидкая	Твердые	Суспензии и золи: промышленные суспензии, пульпы, пасты, илы
	Жидкие	Эмульсии: природная нефть, молоко, молочные соки растений, кремы
	Газообразные	Газовые эмульсии и пены: флотационные, противопожарные, мыльные пены
Газообразная	Твердые	Аэрозоли: пыли, дымы, порошки
	Жидкие	Аэрозоли: туманы, в том числе промышленные, облака
	Газообразные	Гетерогенные системы отсутствуют

Гетерогенные ДС состоят из двух и более фаз (см. таблицу 2). Одна из этих фаз является сплошной и называется дисперсионной средой. Остальные фазы, называемые дисперсными фазами, размеры которых больше размеров молекул, раздроблены и распределены в дисперсионной среде [Гуров и др., 2004].

Если в гетерогенной ДС размеры дисперсных фаз велики по сравнению с молекулами, то такие системы называют взвесями. Промежуточное положение между взвесями и растворами занимают коллоидные растворы (или золи), размеры распределенных частиц которых находятся между размерами этих частиц взвесей и растворов [Гуров и др., 2004].

ФХП в реальных ФХС подразделяются на гомогенные процессы (протекающие внутри одной фазы) и гетерогенные процессы (протекающие на границе раздела фаз) [Гуров и др., 2004]. Отдельно следует рассматривать теплообмен излучением, в том числе и инерционные эффекты [Жоу и др., 2006], связанные с этим теплообменом (рис. 1).

Внутри фазы отдельные вещества могут иметь разные температуры. Примерами таких фаз являются смеси газов, молекулярные массы которых сильно различаются между собой. Так как в случае коллоидных растворов размеры частиц дисперсных фаз близки к размерам молекул, то коллоидные растворы целесообразно рассматривать как одну фазу, в которой могут иметь место и нарушения максвелловских распределений, в том числе и различные температуры дисперсионной среды и дисперсных фаз [Жоу и др., 2006; Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017]. Из таблицы 2 видно, что как одну фазу, в которой существуют две или более температур, можно рассматривать гетерогенные дисперсные системы (как минимум одна температура дисперсионной среды и как минимум одна температура дисперсной фазы в ней). В таких условиях имеет место внутрифазный теплообмен между различными веществами в одной фазе. Также могут и температуры степеней свободы молекул газов различаться (в случае двух- или трехатомных газов). В этом случае имеет место и теплообмен между разными степенями свободы молекул [Гроот, 1956; Полак, 1979].

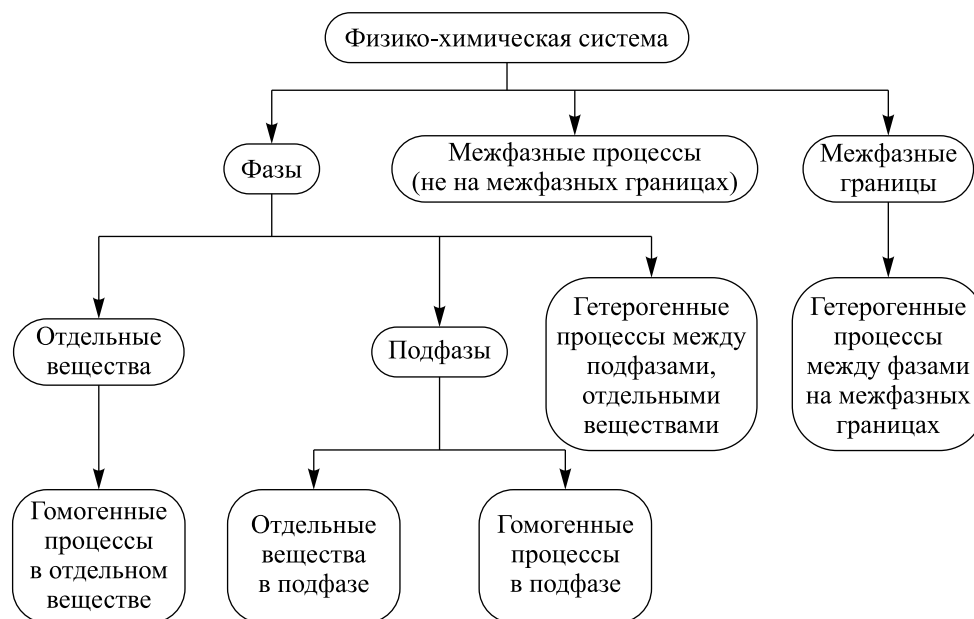


Рис. 1. Общая структура произвольной физико-химической системы и процессов, в ней протекающих

Таким образом, внутри одной фазы целесообразно выделить отдельные подфазы, в которые входят вещества с одинаковыми температурами и отдельные вещества, температуры различных степеней свободы молекул которых различаются. В таком случае внутри одной фазы имеют место ФХП внутри подфаз, между подфазами, отдельными веществами (температуры различных степеней свободы молекул которых различаются). Отсюда, в силу сказанного выше, в частности из таблиц 1 и 2, в общем случае произвольная ФХС имеет структуру, показанную на рис. 1.

Далее любая подфаза, имеющая свою температуру, а также степени свободы молекул любых веществ, имеющие свою температуру, будут называться энергетическими степенями свободы (ЭСС).

#### 4. Ограничения на расчетную схему произвольной заданной пользователем физико-химической системы

Расчет характеристик заданной пользователем ФХС и ФХП в ней осуществляется в рамках следующих допущений:

- пространственные эффекты не учитываем (уравнения ФХП формируются в сосредоточенных параметрах);
- контакт между фазами идеальный.

#### 5. Формализм формирования уравнений физико-химических процессов в произвольной физико-химической системе потенциально-потоквым методом

Согласно результатам, полученным в работах [Эткин, 2008; Старостин, Быков, 2017], имеем в рамках приведенных выше допущений следующий алгоритм формирования системы уравнений ФХП произвольной заданной ФХС (рис. 1) ППМ.

1. Исходя из структуры произвольной заданной ФХС составляем список ФХП в этой системе.

2. Задаем:

- КС-системы ( $U_i$ ,  $i=1, m_U$  — ВЭ отдельных ЭСС;  $z_k$ ,  $k=1, m_z$  — прочие КС, изменение которых связано с совершением работы в этой системе);
- перенесенные теплоты  $Q_{i,j}^{(nep)}$ ,  $j=i+1, m_U$ ,  $i=1, m_U-1$ ;
- прочие КП  $\Delta z_k$ ,  $k=1, m_{\Delta z}$ ;
- температуру  $T^*$ , относительно которой определяем ТС, движущие ФХП в рассматриваемой ФХС.

3. Определяем доли образовавшихся в результате протекания ФХП некомпенсированных теплот  $Q_k^{(нек)}$ ,  $k=1, m_{\Delta z}$ , полученных ЭСС,  $\beta_{i,k} > 0$ ,  $i=1, m_U$ ,  $k=1, m_{\Delta z}$ . Причем

$$\sum_{i=1}^{m_U} \beta_{i,k} = 1, \quad k=1, m_{\Delta z}.$$

4. Определяем коэффициенты матрицы баланса  $\alpha_{j,k}$ ,  $j=1, m_z$ ,  $k=1, m_{\Delta z}$ .

5. Определяем ПВЗ:

- ПВЗ  $Z_{i,k}$ ,  $i=1, m_U$ ,  $k=1, m_z$ , соответствующих  $i$ -м ЭСС  $U_i$ ,  $i=1, m_U$  и КС  $z_k$ ,  $k=1, m_z$ ;
- ПВЗ  $Z_{i,k}^{\circ}$ ,  $i=m_U+1, m'_U$ ,  $k=1, m_z$ , соответствующих  $i$ -м энергиям взаимодействия  $\Phi_i$ ,  $i=m_U+1, m'_U$  и КС  $z_k$ ,  $k=1, m_z$ ;
- неравновесные температуры  $T_i$ ,  $i=1, m_U$ , соответствующих  $i$ -м ЭСС  $U_i$ ,  $i=1, m_U$ .

Проверяем условия корректности (условия полного дифференциала энтропии (нелинейной) [Старостин, Быков, 2017] и энергий  $\Phi_i$ ,  $i=m_U+1, m'_U$ ) для этих ПВЗ:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial U_j} \frac{1}{T_i} \right)_z &= \left( \frac{\partial}{\partial U_i} \frac{1}{T_j} \right)_z, \quad j=i+1, m_U, \quad i=1, m_U-1; \\ \left( \frac{\partial}{\partial z_k} \frac{1}{T_i} \right)_U &= \left( \frac{\partial}{\partial U_i} \left( \sum_{j=1}^{m_U} \frac{Z_{j,k}}{T_j} \right) \right)_z, \quad i=1, m_U, \quad k=1, m_z; \\ \left( \frac{\partial}{\partial z_q} \left( \sum_{j=1}^{m_U} \frac{Z_{j,k}}{T_j} \right) \right)_U &= \left( \frac{\partial}{\partial z_k} \left( \sum_{j=1}^{m_U} \frac{Z_{j,q}}{T_j} \right) \right)_U, \quad q=k+1, m_z, \quad k=1, m_z; \\ \frac{\partial Z_{i,k}^{\circ}}{\partial z_q} &= \frac{\partial Z_{i,q}^{\circ}}{\partial z_k}, \quad q=k+1, m_z, \quad k=1, m_z, \quad i=m_U+1, m'_U. \end{aligned}$$

6. Определяем коэффициенты матрицы баланса простых подсистем (совокупностей параллельных стадий отдельных процессов, сопряженных между собой и не сопряженных с другими такими стадиями):  $\gamma_{j,k,p}$ ,  $j=1, m_z$ ,  $k=1, \bar{m}_{\Delta z,p}$ ,  $p=1, n_c$ , где  $\bar{m}_{\Delta z,p}$  — число ФХП в  $p$ -й простой подсистеме;  $n_c$  — число простых подсистем.

7. Определяем коэффициенты положительно-определенных КМ простых подсистем:

- главные коэффициенты переноса теплоты в простой подсистеме:  $\Delta \bar{A}_{Ql,g}^{Op,i,j}$ ,  $j=i+1, m_U$ ,  $g=l+1, m_U$ ,  $i,l=1, m_U-1$ ,  $p=1, n_c$ ;
- перекрестные коэффициенты переноса теплоты в простой подсистеме:  $\Delta \bar{A}_{Qp,i,j}^{\Delta zk}$ ,  $j=i+1, m_U$ ,  $i=1, m_U-1$ ,  $k=1, \bar{m}_{\Delta z,p}$ ,  $p=1, n_c$ ;

- перекрестные коэффициенты остальных процессов в простой подсистеме:  $\Delta \bar{A}_{\Delta z p, r}^{Ql, g}$ ,  $g = l + 1, m_U, l = 1, m_U - 1, r = 1, \bar{m}_{\Delta z, p}, p = 1, n_c$ ;
- главные коэффициенты остальных процессов в простой подсистеме:  $\Delta \bar{A}_{\Delta z k}^{\Delta z p, r}$ ,  $k, r = 1, \bar{m}_{\Delta z, p}, p = 1, n_c$ .

Эти коэффициенты должны удовлетворять условию положительной определенности.

8. Определяем внешние потоки теплоты  $\delta Q_i^{(e)}/dt$ ,  $i = 1, m_U$ , и прочих КС  $d^{(e)}z_k/dt$ ,  $k = 1, m_z$ .
9. Определяем случайные величины:
  - случайные ТС, движущие процессы переноса теплоты в ФХС  $\Delta X_{Qi, j}^{(cn)}$ ,  $j = i + 1, m_U$ ,  $i = 1, m_U - 1$ , а также движущие прочие ФХП в этой системе  $\Delta X_{\Delta z k}^{(cn)}$ ,  $k = 1, m_{\Delta z}$ ;
  - случайные составляющие внешних потоков теплоты  $(\delta Q_i^{(e)}/dt)_{cn}$ ,  $i = 1, m_U$ , и потоков прочих КС в систему  $(d^{(e)}z_k/dt)_{cn}$ ,  $k = 1, m_z$ .
10. Определяем ТС, движущие процессы переноса теплоты в ФХС  $\Delta X_{Qi, j}$ ,  $j = i + 1, m_U$ ,  $i = 1, m_U - 1$ , в соответствии с

$$\Delta X_{Qi, j} = \frac{T^*}{T_i} - \frac{T^*}{T_j}, \quad j = i + 1, m_U, \quad i = 1, m_U - 1,$$

а также ТС, движущие прочие ФХП в этой системе  $\Delta X_{\Delta z k}$ ,  $k = 1, m_{\Delta z}$ , в соответствии с

$$\Delta X_{\Delta z k} = \left( \sum_{i=1}^{m_U} \beta_{i, k} \frac{T^*}{T_i} \right) \sum_{j=1}^{m_z} \left( \sum_{l=1}^{m_U} Z_{l, j} + \sum_{l=m_U+1}^{m'_U} Z_{l, j} \right) \alpha_{j, k}, \quad k = 1, m_{\Delta z}.$$

11. Определяем ТС в простых подсистемах  $\Delta \bar{X}_{Qi, j, p}$ ,  $j = i + 1, m_U$ ,  $i = 1, m_U - 1$ ,  $p = 1, n_c$ , движущие перенос теплоты:

$$\Delta \bar{X}_{Qi, j, p} = \Delta X_{Qi, j}, \quad j = i + 1, m_U, \quad i = 1, m_U - 1, \quad p = 1, n_c,$$

а также ТС  $\Delta \bar{X}_{\Delta z k, p}$ ,  $k = 1, \bar{m}_{\Delta z, p}$ ,  $p = 1, n_c$ , движущие прочие процессы:

$$\Delta \bar{X}_{\Delta z k, p} = \sum_{j=1}^{m_{\Delta z}} \gamma_{j, k, p} \Delta X_{\Delta z j}, \quad k = 1, \bar{m}_{\Delta z, p}, \quad p = 1, n_c.$$

12. Определяем случайные ТС в простых подсистемах  $\Delta \bar{X}_{Qi, j, p}^{(cn)}$ ,  $j = i + 1, m_U$ ,  $i = 1, m_U - 1$ ,  $p = 1, n_c$ , движущие перенос теплоты:

$$\Delta \bar{X}_{Qi, j, p}^{(cn)} = \Delta X_{Qi, j}^{(cn)}, \quad j = i + 1, m_U, \quad i = 1, m_U - 1, \quad p = 1, n_c,$$

а также случайные ТС  $\Delta \bar{X}_{\Delta z k, p}^{(cn)}$ ,  $k = 1, \bar{m}_{\Delta z, p}$ ,  $p = 1, n_c$ , движущие прочие процессы:

$$\Delta \bar{X}_{\Delta z k, p}^{(cn)} = \sum_{j=1}^{m_{\Delta z}} \gamma_{j, k, p} X_{\Delta z j}^{(cn)}, \quad k = 1, \bar{m}_{\Delta z, p}, \quad p = 1, n_c.$$



13. Определяем положительно-определенную КМ всей системы:

- главные коэффициенты переноса теплоты в системе  $\Delta A_{Ql,g}^{Qi,j}$ ,  $j = i + 1, m_U$ ,  $g = l + 1, m_U$ ,  $i, l = 1, m_U - 1$ :

$$\Delta A_{Ql,g}^{Qi,j} = \sum_{p=1}^{n_c} \Delta \bar{A}_{Ql,g}^{Qp,i,j}, \quad j = i + 1, m_U, \quad g = l + 1, m_U, \quad i, l = 1, m_U - 1;$$

- перекрестные коэффициенты переноса теплоты в системе  $\Delta A_{Ql,j}^{\Delta zk}$ ,  $j = i + 1, m_U$ ,  $i = 1, m_U - 1$ ,  $k = 1, m_{\Delta z}$ :

$$\Delta A_{Ql,j}^{\Delta zk} = \sum_{p=1}^{n_c} \sum_{r=1}^{\bar{m}_{\Delta z,p}} \Delta \bar{A}_{Qp,i,j}^{\Delta zr} \gamma_{k,r,p}, \quad j = i + 1, m_U, \quad i = 1, m_U - 1, \quad k = 1, m_{\Delta z};$$

- перекрестные коэффициенты остальных процессов в системе  $\Delta A_{\Delta zr}^{Ql,g}$ ,  $g = l + 1, m_U$ ,  $l = 1, m_U - 1$ ,  $r = 1, m_{\Delta z}$ :

$$\Delta A_{\Delta zr}^{Ql,g} = \sum_{p=1}^{n_c} \sum_{k=1}^{\bar{m}_{\Delta z,p}} \gamma_{r,k,p} \Delta \bar{A}_{\Delta zp,k}^{Ql,g}, \quad g = l + 1, m_U, \quad l = 1, m_U - 1, \quad r = 1, m_{\Delta z};$$

- главные коэффициенты остальных процессов в системе  $\Delta A_{\Delta zk}^{\Delta zr}$ ,  $k, r = 1, m_{\Delta z}$ :

$$\Delta A_{\Delta zk}^{\Delta zr} = \sum_{p=1}^{n_c} \sum_{g=1}^{\bar{m}_{\Delta z,p}} \sum_{q=1}^{\bar{m}_{\Delta z,p}} \gamma_{k,g,p} \Delta \bar{A}_{\Delta zg}^{\Delta zp,q} \gamma_{r,q,p}, \quad k, r = 1, m_{\Delta z}.$$

14. Определяем скорости протекания ФХП в ФХС:

$$\frac{\delta Q_{l,g}^{(nep)}}{dt} = \sum_{i=1}^{m_U} \sum_{j=i+1}^{m_U} \Delta A_{Ql,g}^{Qi,j} \left( \Delta X_{Qi,j} + \Delta X_{Qi,j}^{(cn)} \right) + \sum_{k=1}^{m_{\Delta z}} \Delta A_{Ql,g}^{\Delta zk} \left( \Delta X_{\Delta zk} + \Delta X_{\Delta zk}^{(cn)} \right), \quad g = l + 1, m_U, \quad l = 1, m_U - 1;$$

$$\frac{\delta \Delta z_r}{dt} = \sum_{i=1}^{m_U} \sum_{j=i+1}^{m_U} \Delta A_{\Delta zr}^{Qi,j} \left( \Delta X_{Qi,j} + \Delta X_{Qi,j}^{(cn)} \right) + \sum_{k=1}^{m_{\Delta z}} \Delta A_{\Delta zr}^{\Delta zk} \left( \Delta X_{\Delta zk} + \Delta X_{\Delta zk}^{(cn)} \right), \quad r = 1, m_{\Delta z}.$$

15. Определяем скорости протекания ФХП в простых подсистемах:

$$\frac{\delta \bar{Q}_{l,g,p}^{(nep)}}{dt} = \sum_{i=1}^{m_U} \sum_{j=i+1}^{m_U} \Delta \bar{A}_{Ql,g}^{Qp,i,j} \left( \Delta \bar{X}_{Qi,j,p} + \Delta \bar{X}_{Qi,j,p}^{(cn)} \right) + \sum_{k=1}^{\bar{m}_{\Delta z,p}} \Delta \bar{A}_{Qp,l,g}^{\Delta zk} \left( \Delta \bar{X}_{\Delta zk,p} + \Delta \bar{X}_{\Delta zk,p}^{(cn)} \right),$$

$$g = l + 1, m_U, \quad l = 1, m_U - 1, \quad p = 1, n_c;$$

$$\frac{\delta \Delta \bar{z}_{r,p}}{dt} = \sum_{i=1}^{m_U} \sum_{j=i+1}^{m_U} \Delta \bar{A}_{\Delta zp,r}^{Qi,j} \left( \Delta \bar{X}_{Qi,j,p} + \Delta \bar{X}_{Qi,j,p}^{(cn)} \right) + \sum_{k=1}^{\bar{m}_{\Delta z,p}} \Delta \bar{A}_{\Delta zr}^{\Delta zp,k} \left( \Delta \bar{X}_{\Delta zk,p} + \Delta \bar{X}_{\Delta zk,p}^{(cn)} \right), \quad r = 1, m_{\Delta z}, \quad p = 1, n_c,$$

где  $\bar{Q}_{l,g,p}^{(nep)}$ ,  $g = l + 1, m_U$ ,  $l = 1, m_U - 1$ ,  $p = 1, n_c$  — переданные теплоты, а  $\Delta \bar{z}_{r,p}$ ,  $r = 1, m_{\Delta z}$ ,  $p = 1, n_c$  — прочие КП в простых подсистемах.

16. Определяем мощности выделения некомпенсированной теплоты  $\delta Q_k^{(нек)}/dt$ ,  $k = 1, m_{\Delta z}$ :

$$\frac{\delta Q_k^{(нек)}}{dt} = \left( \sum_{j=1}^{m_z} \left( \sum_{l=1}^{m_U} Z_{l,j} + \sum_{l=m_U+1}^{m'_U} Z_{l,j}^\circ \right) \alpha_{j,k} \right) \frac{\delta \Delta z_k}{dt}, \quad k = 1, m_{\Delta z}.$$

17. Определяем скорости  $\delta Q_i/dt$ ,  $i=1, m_U$ , сообщения соответствующих теплот  $Q_i$ ,  $i=1, m_U$ , к ЭСС:

$$\frac{\delta Q_i}{dt} = \sum_{j=i+1}^{m_U} \frac{\delta Q_{i,j}^{(nep)}}{dt} - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\delta Q_{i,j}^{(nep)}}{dt} + \sum_{k=1}^{m_{Az}} \beta_{i,k} \frac{\delta Q_k^{(nek)}}{dt} + \frac{\delta Q_i^{(e)}}{dt} + \left( \frac{\delta Q_i^{(e)}}{dt} \right)_{ct}, \quad i=1, m_U.$$

18. Определяем скорости изменения КП:

$$\frac{dz_k}{dt} = \sum_{r=1}^{m_{Az}} \alpha_{k,r} \frac{\delta Az_r}{dt} + \frac{d^{(e)}z_k}{dt} + \left( \frac{d^{(e)}z_k}{dt} \right)_{ct}, \quad k=1, m_z, \quad \frac{dU_i}{dt} = \frac{\delta Q_i}{dt} - \sum_{k=1}^{m_z} Z_{i,k} \frac{dz_k}{dt}, \quad i=1, m_U.$$

В пунктах 3–9 соответствующие величины определяются с использованием функции состояния (ФС) для этих величин, которые свои для каждой системы и ФХП, в ней протекающих [Старостин, Быков, 2017].

В работе [Старостин, Быков, 2017] был проведен обзор существующих ММ различных ФХП и было показано, что ППМ вбирает в себя эти ММ. Именно это обстоятельство дает этому методу основное преимущество перед этими моделями [Старостин, Быков, 2017].

## 6. Реализация в памяти ЭВМ структуры заданной пользователем физико-химической системы

С точки зрения программирования структура произвольной ФХС (показанная на рис. 1) представляет собой структурный тип данных ФХС (на языке программирования С (Си) это структура, на С++ — это класс), показанный на рис. 2.

Структурные типы данных КС и ЭСС, входящие в структурный тип данных ФХС (рис. 2), показаны на рис. 3. Структурный тип данных ЭСС имеет массив ссылок на скорости изменения КС (рис. 3, б), входящих в структурный тип данных КС (рис. 3, а). Структурные типы данных процессов (кроме процессов теплообмена), входящие в структурный тип данных ФХС (рис. 2), имеют массивы ссылок (рис. 4, в) на:

- ТС перекрестных процессов;
- скорости изменения сопряженных КС и суммарные ПВЗ, обусловленные энергетическим взаимодействием между подфазами, сопряженные этим КС;
- температуры и скорости сообщения теплоты каждой сопряженной ЭСС, а также на ПВЗ сопряженных ЭСС, сопряженных соответствующим сопряженным процессу КС.

В типе данных процессов ссылки на сопряженные процессу ПВЗ и КС входят в структурный тип данных сопряженных КС (рис. 4, а).

Структурные типы данных процессов передачи теплоты, входящие в структурный тип данных ФХС (рис. 2), имеют массивы ссылок на (рис. 5):

- температуры и скорости сообщения теплоты сопряженных ЭСС;
- ТС сопряженных процессов.

Структурные типы данных внешних потоков (кроме тепловых), входящие в структурный тип данных ФХС (рис. 2), имеют массивы ссылок на сопряженные КС и ПВЗ, сопряженные этим КС (рис. 4, б). Эти ссылки входят в структурный тип данных сопряженных КС (рис. 4, а).

Структурные типы данных потоков теплоты, входящие в структурный тип данных ФХС (рис. 2), имеют ссылки на скорости сообщения теплоты сопряженных ЭСС и температуры этих ЭСС (рис. 5).

Структурные типы данных выходных параметров, ФС для СВП, функций для внешних потоков, входящие в структурный тип данных ФХС (рис. 2), имеют константные ссылки на:

- переменные аргументы (например, КС, в том числе и ВЭ ЭСС) этих функций;
- параметры системы.

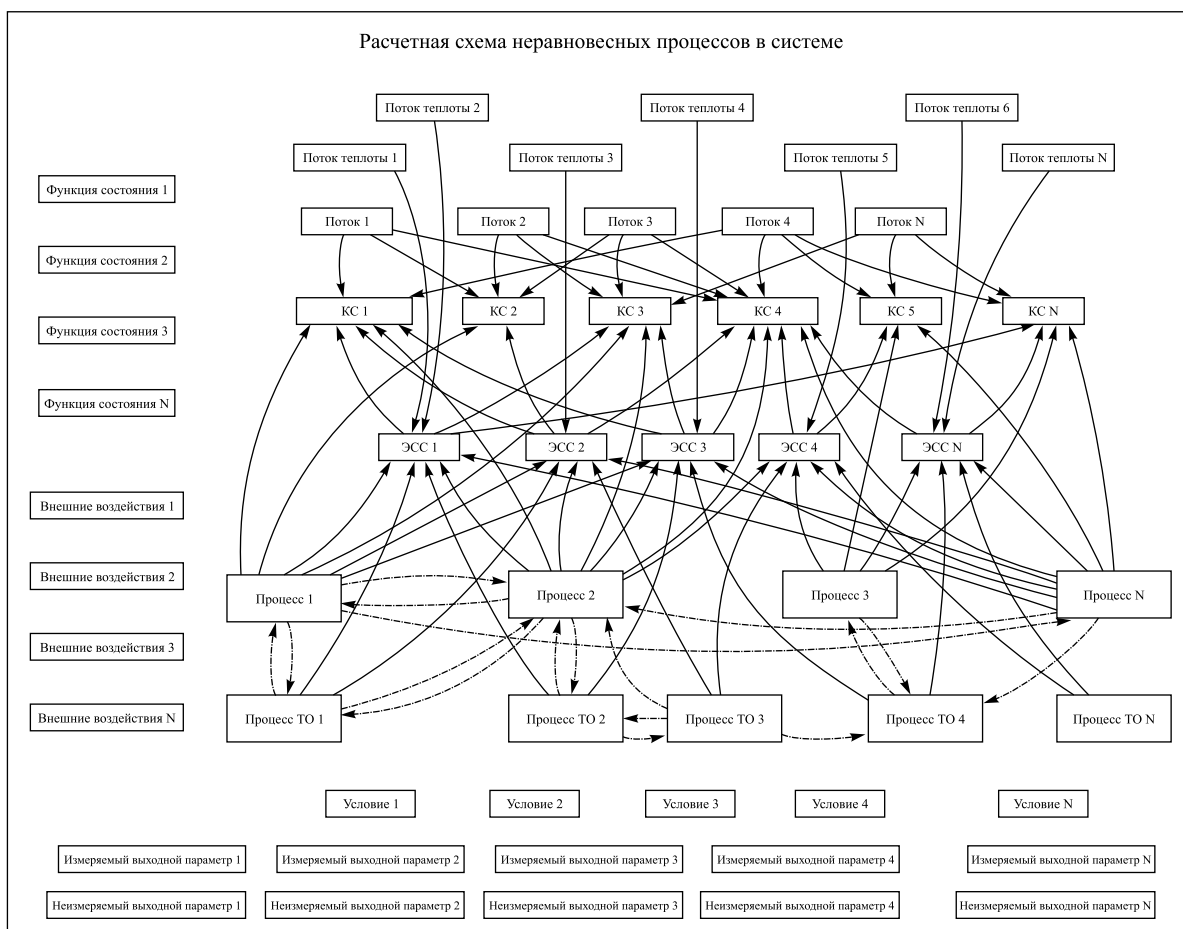


Рис. 2. Структурный тип данных произвольной физико-химической системы

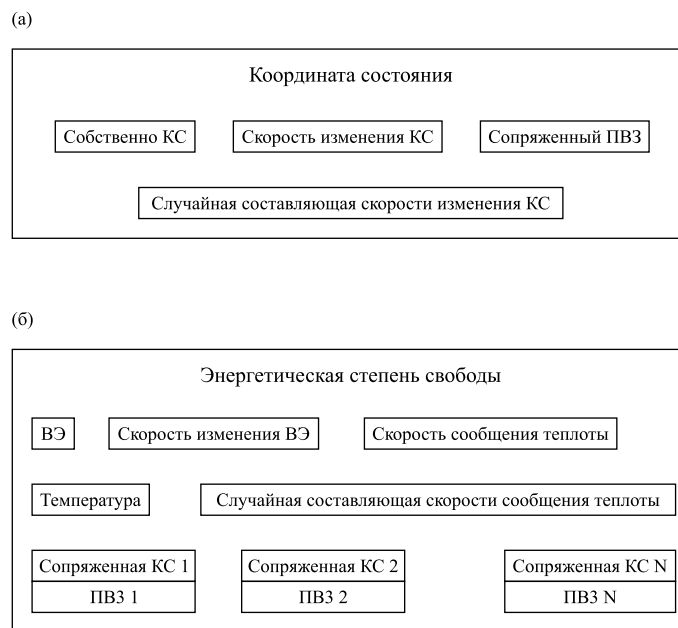


Рис. 3. Структурные типы данных КС (а) и ЭСС (б)

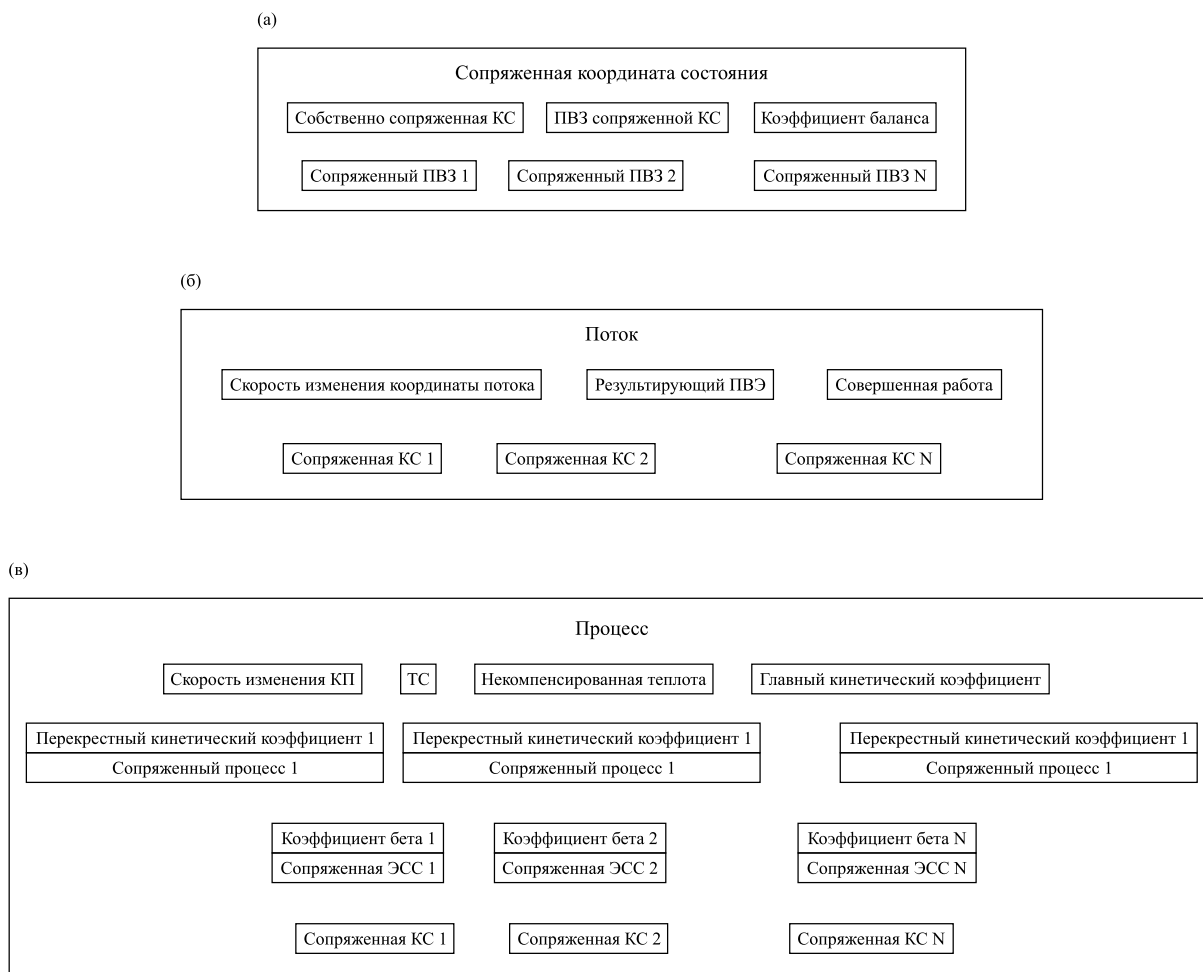


Рис. 4. Структурный тип данных процессов (кроме процессов теплообмена) (б), потоков (кроме тепловых) (в), а также структурный тип данных сопряженных координат состояния (а)

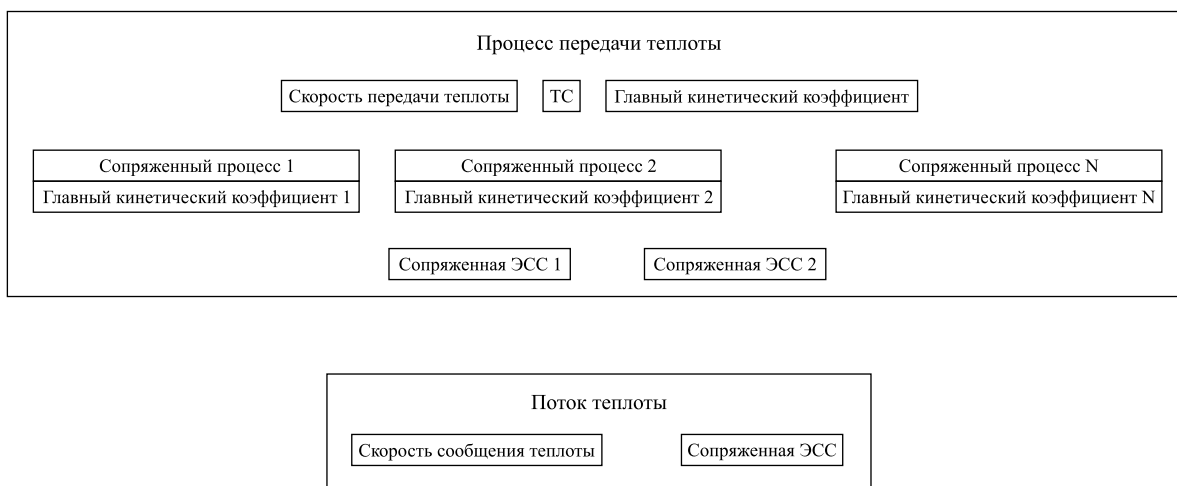


Рис. 5. Структурный тип данных процессов теплообмена и потоков теплоты

Также в структурный тип данных функций состояния для СВП входит ссылка на величину (например, на ПВЗ, коэффициент КМ), рассчитываемую этой функцией; функций для внешних потоков — ссылки на внешние потоки.

Описанные выше ссылки на языках С и С++ представляют собой указатели на соответствующие переменные.

Идентификатором каждого структурного типа данных, входящего в массивы структурного типа данных ФХС, является его индекс соответствующего элемента массива в структурном типе данных ФХС, а также индекс во внутренних массивах структурных типов данных, входящих в тип данных ФХС.

## 7. Синтез структуры пользовательской физико-химической системы

Итак, для задания пользовательской ФХС необходимо:

- 1) выделить память для массивов, входящих в структурный тип данных ФХС (алгоритм *AllocSystem*);
- 2) выделить память для каждой ЭСС, входящей в заданную пользователем ФХС (алгоритм *AllocEnPow*), и задать ссылки на сопряженные КС этой ЭСС (алгоритм *SyntEnergyPower*);
- 3) выделить память для процессов, кроме процессов теплообмена (алгоритм *AllocProc*), и задать связь со связанными КС (алгоритм *SyntProcCoordSt*), связанными ЭСС (алгоритм *SyntProcEnPow*), с сопряженными процессами (алгоритмы *SyntProcCrProc*, *SyntProcCrHProc*);
- 4) выделить память для процессов теплообмена и задать ссылки на связанные ЭСС (алгоритм *AllocHProc*) и память для процессов теплообмена с окружающей средой (алгоритм *AllocHProcOkr*), задать ссылки на сопряженные процессы (алгоритмы *SyntHProcCrProc*, *SyntHProcCrHProc*);
- 5) выделить память для внешних потоков, кроме тепловых (алгоритм *AllocStreams*), и задать ссылки на связанные КС (алгоритм *SyntStreamCoordSt*);
- 6) задать ссылки на сопряженные ЭСС внешних потоков теплоты (алгоритм *SyntHeatStream*);
- 7) выделить память для измеряемых выходных параметров системы (алгоритм *AllocMY*) и задать ссылки на входные аргументы и параметры (алгоритмы *SyntFunctArgMY* и *SyntFunctParMY*);
- 8) выделить память для неизменяемых выходных параметров системы (алгоритм *AllocY*) и задать ссылки на входные аргументы и параметры (алгоритмы *SyntFunctArgY* и *SyntFunctParY*);
- 9) выделить память для ФС СВП (алгоритмы *AllocPropT*, *AllocPropInterPot*, *AllocPropKinCf*, *AllocPropKinCfCr*, *AllocPropKinHCf*, *AllocPropKinHCfCr*, *AllocPropInPot*, *AllocPropBalProc*, *AllocPropBalStream*, *AllocPropBeta*, таблица 11) и задать ссылки на аргументы и параметры этих ФС (алгоритмы *SyntComFunctProp* и *SetArgFunctProp*);
- 10) выделить память для динамических функций внешних потоков (алгоритмы *AllocExActStream*, *AllocExActHStream*) и задать ссылки на аргументы и параметры системы (алгоритмы *SyntFunctExtAct* и *SetArgFunctExtAct*).

Упомянутые алгоритмы в качестве входных значений принимают идентификаторы соответствующих типов данных, числа элементов массивов, а результатом их действия являются выделение памяти и установление описанных ссылок.

## 8. Расчет заданной пользователем физико-химической системы

Задав в соответствии с предыдущим пунктом пользовательскую ФХС, мы переходим к расчету ее текущих характеристик (ПВЗ, КМ, ТС, скоростей протекания ФХП, скоростей изменения КС, переменные значения коэффициентов баланса процессов, потоков и коэффициентов бета и т. д.) в соответствии с алгоритмом *CountSystem*. На вход этого алгоритма

*CountSystem* подается ФХС с заданной в соответствии с предыдущим пунктом структурой, параметрами, ФС для СВП, динамическими функциями для потоков, условиями протекания ФХП и текущими значениями параметров состояния, а также константными значениями коэффициентов баланса процессов и потоков и также константными значениями коэффициентов бета. Возвращает *CountSystem* в эту же систему с рассчитанными ПВЗ, КМ, ТС, матрицей баланса, коэффициентов бета, скоростями протекания ФХС, скоростями изменения КС и т. д.

В алгоритме *CountSystem* выполняются пункты 3–5, 8, 10, 13, 14, 16–18 алгоритма формирования уравнений ППМ. Простые подсистемы любой заданной ФХП в рассматриваемой библиотеке не учитываются, так как учет этих простых подсистем необходим для задания функций состояния КМ рассматриваемой ФХС.

Описанные в приведенном алгоритме действия основываются на заданных ссылок в соответствии с изложенными в предыдущем пункте алгоритмами синтеза заданной пользователем ФХС.

## 9. Заключение

Итак, в настоящей работе была разработана архитектура программной реализации разработанного авторами ППМ математического описания ФХП. Потенциально-потоковый метод реализуется в виде библиотеки, подключаемой к математическому ядру информационных систем. В частности, эта библиотечная реализация ППМ может быть подключена к математическому ядру САПР, а также гибридных экспертных систем (комбинирующих алгоритм логического вывода и математические методы) как средство расчета текущего состояния ФХС, что дает возможность алгоритму численного интегрирования получить динамику рассматриваемой системы.

В работах [Быков, Старостин, 2012; Быков, Старостин, 2013; Старостин, Быков, 2017] было показано, что рассматриваемый ППМ является расширением химической кинетики и прочих математических моделей ФХП. Поэтому рассматриваемая программная библиотека является развитием таких существующих библиотек математического моделирования химических превращений, как, например, KINET [Абраменков и др., 2012]. Программа KINET позволяет решать прямые и обратные задачи химической кинетики; в основу математического ядра этой программы положен формализм химической кинетики [Абраменков и др., 2012] — частный случай рассматриваемого потенциально-потокового формализма.

Также рассматриваемая программная реализация ППМ, вбирающая в себя различные частные модели ФХП [Старостин, Быков, 2017], является расширением соответствующих реализаций математических моделей в технике и технологии [Емельянов, Шильникова, 2014; Coker, 2001; Dobre, Marciano, 2007; Kirkegaard et al., 2008; Regan et al., 2005]. Эта реализация представляет собой единый подход к компьютерной симуляции и компьютерному анализу ФХП, что существенно упрощает компьютерную реализацию задачи моделирования и анализа этих процессов.

## Список литературы (References)

- Абраменков А. В., Агеев Е. П., Атякшева Л. Ф. Практикум по физической химии. Кинетика и катализ. Электрохимия. — М.: Изд. центр «Академия», 2012.  
*Abramenkov A. V., Ageev E. P., Atiaksheva L. Ph. Praktikum po phizicheskoi khimii. Kinetika i kataliz. Elektrokhimiia. — Moscow: Izd. tsentr "Akademiiia", 2012 (in Russian).*
- Быков В. И., Старостин И. Е. Квазиградиентные модели динамики закрытых химических систем // Химическая физика. — 2012. — Т. 31, № 1. — С. 38–42.  
*Bykov V. I., Starostin I. E. Quasi-gradient models of the dynamics of closed chemical systems // Russian journal of physical chemistry b. — 2012. — Vol. 6, Issue 1. — P. 33–37. (Original Russian paper: Bykov V. I., Starostin I. E. Kvazigradiientnye modeli dinamiki zakrytykh khimicheskikh sistem // Khiicheskaiia fizika. — 2012. — Vol. 31, No. 1. — P. 38–42.)*

- Быков В. И., Старостин И. Е.* Описание динамики закрытых химических систем квази-градиентными моделями // Журнал физической химии. — 2013. — Т. 87, № 5. — С. 744–750.  
*Bykov V. I., Starostin I. E.* Describing the dynamics of closed chemical systems by means of quasigradient models // Russian journal of physical chemistry a. — 2013. — Vol. 87, Issue 5. — P. 724–729. (Original Russian paper: *Bykov V. I., Starostin I. E.* Opisanie dinamiki zakrytykh khimicheskikh sistem kvazigradientnymi modeliami // Zhurnal fizicheskoi khimii. — 2013. — Vol. 87, No. 5. — P. 744–750.)
- Гроот С. Р.* Термодинамика необратимых процессов. — М.: Гос. изд.-во техн.-теор. лит., 1956.  
*Groot S. R.* Termodinamika neobratimyykh protsessov [Thermodynamics of irreversible processes]. — Moscow: Gos. izd.-vo tekhn.-teor. lit., 1956 (in Russian).
- Гуров А. А., Бадаев Ф. З., Овчаренко Л. П., Шановал В. Н.* Химия. — М.: Изд-во МГТУ им. Баумана, 2004.  
*Gurov A. A., Badaev F. Z., Ovcharenko L. P., Shapoval V. N.* Khimiia [Chemistry]. — Moscow: Izd-vo MGTU im. Baumana, 2004 (in Russian).
- Емельянов А. А., Шильникова О. В.* Имитационное моделирование управляемых процессов химической кинетики // Прикладная информатика. — 2014. — № 5 (53). — С. 98–107.  
*Emelianov A. A., Shilnikova O. V.* Imitatsionnoe modelirovanie upravliaemykh protsessov khimicheskoi kinetiki // Journal of applied informatics. — 2014. — No. 5 (53). — P. 98–107 (in Russian).
- Жоу Д., Касас-Бескес Х., Лебон Дж.* Расширенная необратимая термодинамика. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований, 2006.  
*Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G.* Extended irreversible thermodynamics / Third, Revised and Enlarged Edition With 30 Figures and 15 Tables. — New York, USA: Springer, 2006. (Russ. ed.: *Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G.* Rasshirennaia neobratimaia termodinamika. — Moscow–Izhevsk: NITS “Regulamaia i khaoticheskaia dinamika”; Institut komputernykh issledovaniy, 2006.)
- Квасников И. А.* Термодинамика и статистическая физика: теория неравновесных систем. — Т. 3. — М.: Едиториал УРСС, 2003.  
*Kvasnikov I. A.* Termodinamika i statisticheskaiia fizika: teoriia neravnovesnykh sistem [Thermodynamics and statistical physics: the theory of non-equilibrium systems]. — 3 ed. — Moscow: Editorial URSS, 2003 (in Russian).
- Крутов В. И., Исаев С. И., Кожин И. А. и др.* Техническая термодинамика. — М.: Высшая школа, 1991.  
*Krutov V. I., Isaev S. I., Kozhinov I. A. et al.* Tekhnicheskaiia termodinamika [Technical thermodynamics]. — Moscow: Vishaia shkola, 1991 (in Russian).
- Полак Л. С.* Неравновесная химическая кинетика и ее применение. — М.: Наука, 1979.  
*Polak L. S.* Neravnovesnaia khimicheskaiia kinetika i ee primenenie [Non-equilibrium chemical kinetics and its application]. — Moscow: Nauka, 1979 (in Russian).
- Старостин И. Е., Быков В. И.* Кинетическая теорема современной неравновесной термодинамики. — Ралей, Северная Каролина, США: Открытая наука, 2017. — 228 с.  
*Starostin I. E., Bykov V. I.* Kinetic theorem of modern non-equilibrium thermodynamics. — Raleigh, North Carolina, USA: Open Science Publishing, 2017. (Russ. ed.: *Starostin I. E., Bykov V. I.* Kineticheskaiia teorema sovremennoi neravnovesnoi termodinamiki. — Raleigh, North Carolina, USA: Otkrytaia nauka, 2017.)
- Тимашев С. Ф.* Физико-химия мембранных процессов. — М.: Химия, 1988.  
*Timashev S. F.* Fiziko-khimiia membrannikh protsessov [Physicochemistry of membrane processes]. — Moscow: Khimiia, 1988 (in Russian).
- Эткин В. А.* Энергодинамика (синтез теории переноса и преобразования энергии). — СПб.: Наука, 2008.  
*Etkin V. A.* Energodinamika (sintez teorii perenosa i preobrazovaniia energii) [Energy Dynamics (synthesis of the theory of transport and energy conversion)]. — Saint-Petersburg: Nauka, 2008 (in Russian).
- Coker A. K.* Modeling of Chemical kinetics and reactor design. — Houston (Texas, US): Gulf Publishing Company, Book Division, 2001. — 1096 p.
- Dobre T. G., Marcano J. G. S.* Chemical Engineering: Modeling. Simulation and Similitude. — Weinheim (Baden-Wurttemberg, Germany): Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2007. — 570 p.

*Kirkegaard P., Bjergbakke B., Olsen J. V.* CHEMSIMUL: A chemical kinetics software package. — Roskilde (Zealand, Denmark): National Laboratory for Sustainable Energy. Technical University of Denmark, 2008. — 80 p.

*Regan M. T., Najm H. M., Pebay P. P., Knio O. M., Ghamen R. G.* Quantifying uncertainty in chemical system modeling // International journal of Chemical Kinetics. — 2005. — Vol. 30, No. 6. — P. 368–332.