

## ЗАДАНИЕ ФУНКЦИЙ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ, ПРИВЕДЕННЫХ ТЕПЛОЕМКОСТЕЙ И ПРИВЕДЕННЫХ ТЕПЛОВЫХ ЭФФЕКТОВ, ВХОДЯЩИХ В УРАВНЕНИЯ МЕТОДА МАТЕМАТИЧЕСКОГО ПРОТОТИПИРОВАНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

И. Е. Старостин<sup>1</sup>, С. И. Гавриленков<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>Московский государственный технический университет гражданской авиации, Москва, Россия  
<sup>1</sup> starostinigo@yandex.ru, <sup>2</sup> gavrilencov@mstuca.ru

**Аннотация.** *Актуальность и цели.* Основными требованиями к математическим моделям, применимым для решения практических задач современной техники и технологии, являются их точность и адекватность (т.е. не противоречивость физическим и химическим законам). Для построения таких моделей систем различной физической и химической природы был предложен в рамках механики, электродинамики и современной неравновесной термодинамики метод математического прототипирования энергетических процессов, дающий модели, не противоречащие общим физическим законам (законам термодинамики, механики и электродинамики) и физическим особенностям рассматриваемой системы. Для реализации уравнений упомянутого метода в численном виде необходимо корректно задать с точностью до экспериментально исследуемых постоянных коэффициентов функции состояния для свойств веществ и процессов, в частности, функций состояния для потенциалов взаимодействия, приведенных обратных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов – условию полного дифференциала энтропии и внутренних энергий. Заданию упомянутых функций состояния, удовлетворяющих упомянутым условиям, посвящена настоящая работа. *Материалы и методы.* Синтез уравнений динамики физических и химических процессов осуществляется на базе метода математического прототипирования энергетических процессов. Задание функций состояния для потенциалов взаимодействия, приведенных обратных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов осуществляется путем задания независимых составляющих упомянутых функций с последующим интегрированием необходимых и достаточных условий полного дифференциала энтропии и внутренних энергий. Упомянутые независимые составляющие строятся методами теории идентификации, в частности методами символьной регрессии. *Результаты.* Предложенная методика задания функций состояния для потенциалов взаимодействия, приведенных обратных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов дает корректные функции состояния упомянутых величин. *Выводы.* Предлагаемая методика построения функций состояния, удовлетворяющих упомянутым условиям полного дифференциала, сводит построение модели системы на основе метода математического прототипирования энергетических процессов к использованию классических методов идентификации (в частности методов символьной регрессии).

**Ключевые слова:** метод математического прототипирования энергетических процессов, функции состояния, условия полного дифференциала, корректность моделей

**Для цитирования:** Старостин И. Е., Гавриленков С. И. Задание функций состояния для потенциалов взаимодействия, приведенных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов, входящих в уравнения метода математического прототипирования энергетических процессов // Надежность и качество сложных систем. 2025. № 1. С. 36–43. doi: 10.21685/2307-4205-2025-1-5

## ASSIGNMENT OF STATE FUNCTIONS FOR INTERACTION POTENTIALS, REDUCED HEAT CAPACITIES AND REDUCED THERMAL EFFECTS INCLUDED IN THE EQUATIONS OF THE METHOD OF MATHEMATICAL PROTOTYPING OF ENERGY PROCESSES

I.E. Starostin<sup>1</sup>, S.I. Gavrilencov<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>Moscow State Technical University of Civil Aviation, Moscow, Russia  
<sup>1</sup> starostinigo@yandex.ru, <sup>2</sup> gavrilencov@mstuca.ru

**Abstract.** *Background.* The main requirements for mathematical models applicable to solving practical problems of modern engineering and technology are their accuracy and adequacy (i.e., non-contradiction with physical and

chemical laws). To construct such models of systems of various physical and chemical nature, a method of mathematical prototyping of energy processes was proposed within the framework of mechanics, electrodynamics and modern nonequilibrium thermodynamics, which yields models that do not contradict general physical laws (the laws of thermodynamics, mechanics and electrodynamics) and the physical features of the system under consideration. To implement the equations of the above-mentioned method in numerical form, it is necessary to correctly specify, with an accuracy of experimentally studied constant coefficients, the state function for the properties of substances and processes. In particular, the state functions for interaction potentials, reduced inverse heat capacities and reduced thermal effects – the condition of the total differential of entropy and internal energies. The present work is devoted to specifying the above-mentioned state functions that satisfy the above-mentioned conditions. *Materials and methods.* The synthesis of equations of the dynamics of physical and chemical processes is carried out on the basis of the method of mathematical prototyping of energy processes. The assignment of state functions for interaction potentials, reduced inverse heat capacities and reduced thermal effects is carried out by assigning independent components of the mentioned functions with subsequent integration of the necessary and sufficient conditions of the total differential of entropy and internal energies. The mentioned independent components are constructed by methods of identification theory, in particular by methods of symbolic regression. *Results.* The proposed method for specifying state functions for interaction potentials, reduced reciprocal heat capacities and reduced thermal effects gives correct state functions for the mentioned quantities. *Conclusions.* The proposed method for constructing state functions that satisfy the above-mentioned conditions of the total differential reduces the construction of a system model based on the method of mathematical prototyping of energy processes to the use of classical identification methods (in particular, symbolic regression methods).

**Keywords:** method of mathematical prototyping of energy processes, state functions, conditions of total differential, correctness of models

**For citation:** Starostin I.E., Gavrilin S.I. Assignment of state functions for interaction potentials, reduced heat capacities and reduced thermal effects included in the equations of the method of mathematical prototyping of energy processes. *Nadezhnost' i kachestvo slozhnykh sistem = Reliability and quality of complex systems.* 2025;(1):36–43. (In Russ.). doi: 10.21685/2307-4205-2025-1-5

## Введение

Математические модели систем имеют важное значение для решения различных практических задач [1]. Одним из важнейших требований, предъявляемых к математическим моделям систем различной природы, является их корректность [1]. Корректность моделей систем различной физической и химической природы заключается в непротиворечивости таких моделей общим физическим законам (законам сохранения, началам термодинамики, механики, электродинамики, и т.д.), а также физическим особенностям рассматриваемых систем [1–3]. Для построения корректных упомянутых моделей авторами был предложен в рамках механики, электродинамики и современной неравновесной термодинамики метод математического прототипирования энергетических процессов (ММПЭП) – единый подход построения моделей систем различной физической и химической природы [2–8], позволяющий в том числе получать аналитические модели, также вбирающие в себя физику и химию рассматриваемой системы [5, 6]. Отсюда вытекает целесообразность использования математических моделей систем различной физической и химической природы, построенных ММПЭП, в качестве математического ядра цифровых двойников систем различной физической и химической природы [5, 6, 9].

Для задания в численном виде полученных ММПЭП моделей систем различной физической и химической природы необходимо корректно задать функции состояния для свойств веществ и процессов с точностью до экспериментально исследуемых постоянных коэффициентов [2, 4, 5]. Так, функции состояния для диссипативной матрицы должны удовлетворять условию положительной определенности [2, 4], а функции состояния для потенциалов взаимодействия, приведенных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов – условию полного дифференциала энтропии, внутренних энергий и энергий взаимодействия [2, 4]. Настоящая работа посвящена заданию функции состояния для потенциалов взаимодействия, приведенных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов, удовлетворяющих упомянутым условиям полного дифференциала [2, 4].

## Материалы и методы

Система уравнений ММПЭП для общего случая систем различной физической и химической природы имеет вид [2]

$$dS = \sum_{i=1}^{m_U} \frac{\delta Q_i}{T_i}, \quad U = \sum_{i=1}^{m_U} U_i + \sum_{i=m_U+1}^{\bar{m}_U} \Phi_i, \quad (1)$$

$$d\Phi_i = -\sum_{k=1}^{m_x} X_{i,k}^{\circ} dx_k, \quad i = \overline{m_U + 1, \bar{m}_U}, \quad (2)$$

$$dU_i = \delta Q_i - \sum_{k=1}^{m_x} X_{i,k} dx_k, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (3)$$

$$dx_k = \sum_{r=1}^{m_{\Delta x}} \alpha_{k,r} \delta \Delta x_r + (dx_k)_{ext} + (dx_k)_{ext}^{(cn)}, \quad k = \overline{1, m_x}, \quad (4)$$

$$\delta Q_i = \sum_{j=1}^{i-1} \delta Q_{i,j}^{(nep)} - \sum_{j=i+1}^{m_U} \delta Q_{i,j}^{(nep)} + \sum_{r=1}^{m_{\Delta x}} \beta_{i,r} \delta Q_r^{(нек)} + (\delta Q_i)_{ext} + (\delta Q_i)_{ext}^{(cn)}, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (5)$$

$$\delta Q_r^{(нек)} = \left( \sum_{k=1}^{m_x} \left( \sum_{l=1}^{m_U} X_{l,k} + \sum_{l=m_U+1}^{\bar{m}_U} X_{l,k}^{\circ} \right) \alpha_{k,r} \right) \delta \Delta x_r, \quad r = \overline{1, m_{\Delta x}}, \quad (6)$$

$$\Delta F_{\Delta x, r} = \left( \sum_{i=1}^{m_U} \beta_{i,r} \frac{T_i^*}{T_i} \right) \left( \sum_{k=1}^{m_x} \left( \sum_{l=1}^{m_U} X_{l,k} + \sum_{l=m_U+1}^{\bar{m}_U} X_{l,k}^{\circ} \right) \alpha_{k,r} \right), \quad r = \overline{1, m_{\Delta x}}, \quad (7)$$

$$\Delta F_{Q_i, j} = \frac{T_i^*}{T_i} - \frac{T_j^*}{T_j}, \quad j = \overline{1, i-1}, \quad i = \overline{2, m_U}, \quad (8)$$

$$\frac{\delta \Delta x_r}{dt} = \sum_{l=2}^{m_U} \sum_{g=1}^{l-1} A_{\Delta x, r}^{Q_l, g} \Delta F_{Q_l, g} + \sum_{q=1}^{m_{\Delta x}} A_{\Delta x, r}^{\Delta x, q} \Delta F_{\Delta x, q}, \quad r = \overline{1, m_{\Delta x}}, \quad (9)$$

$$\frac{\delta Q_{i,j}^{(nep)}}{dt} = \sum_{l=2}^{m_U} \sum_{g=1}^{l-1} A_{Q_i, j}^{Q_l, g} \Delta F_{Q_l, g} + \sum_{q=1}^{m_{\Delta x}} A_{Q_i, j}^{\Delta x, q} \Delta F_{\Delta x, q}, \quad j = \overline{1, i-1}, \quad i = \overline{2, m_U}, \quad (10)$$

$$d\varepsilon_i = \sum_{j=1}^{m_U} \tilde{C}_{i,j} dU_j + \sum_{k=1}^{m_x} \tilde{H}_{i,k} dx_k, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (11)$$

где  $U_i$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – внутренние энергии (ВЭ) энергетических степеней свободы (ЭСС) (число ЭСС  $m_U$ );  $x_k$ ,  $k = \overline{1, m_x}$  – прочие координаты состояния;  $Q_i$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – количества теплот, полученные ЭСС системы;  $\alpha_{k,r}$ ,  $k = \overline{1, m_x}$ ,  $r = \overline{1, m_{\Delta x}}$  – коэффициенты матрицы баланса (получаются из законов сохранения);  $(\delta Q_i / dt)_{ext}$ ,  $(\delta Q_i / dt)_{ext}^{(cn)}$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – внешние потоки теплоты к ЭСС системы и их случайные составляющие соответственно;  $(dx_k / dt)_{ext}$ ,  $(dx_k / dt)_{ext}^{(cn)}$ ,  $k = \overline{1, m_x}$  – внешние потоки в систему прочих координат состояния и их случайные составляющие соответственно;  $Q_{i,j}^{(nep)}$ ,  $j = \overline{1, i-1}$ ,  $i = \overline{2, m_U}$  – перенесенные между ЭСС теплоты;  $\Delta x_r$ ,  $r = \overline{1, m_{\Delta x}}$  – прочие координаты процессов;  $Q_r^{(нек)}$ ,  $r = \overline{1, m_{\Delta x}}$  – некомпенсированные теплоты, образующиеся в результате протекания физических и химических процессов (необратимый переход работы в теплоту);  $\beta_{i,r} > 0$ ,  $r = \overline{1, m_{\Delta x}}$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – коэффициенты (доли) распределения некомпенсированных теплот по ЭСС, удовлетворяющие условию  $\sum_{i=1}^{m_U} \beta_{i,r} = 1$ ,  $r = \overline{1, m_{\Delta x}}$ ;  $T_i > 0$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – температуры (в общем случае отсутствия локального термодинамического равновесия неравновесные [3, 7, 8]) ЭСС;  $X_{i,k}$ ,  $k = \overline{1, m_x}$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – прочие потенциалы взаимодействия (ПВЗ) ЭСС по координатам состояния  $x_k$ ,  $k = \overline{1, m_x}$ ;  $X_{i,k}^{\circ}$ ,  $k = \overline{1, m_x}$ ,  $i = \overline{m_U+1, \bar{m}_U}$  – ПВЗ по координатам состояния  $x_k$ ,  $k = \overline{1, m_x}$ , обусловленные взаимодействием между ЭСС;  $\Delta X_{Q_i, j}$ ,  $j = \overline{1, i-1}$ ,  $i = \overline{2, m_U}$  – динамические силы, движущие процессы переноса теплоты между ЭСС;  $\Delta X_{\Delta x, r}$ ,  $r = \overline{1, m_{\Delta x}}$  – динамические силы, движущие прочие процессы;  $T^*$  – опорная температура, через которую задается свободная энергия системы  $W$ ;  $\Delta A_{Q_i, j}^{Q_l, g}$ ,  $g = \overline{1, l-1}$ ,  $j = \overline{1, i-1}$ ,  $i, l = \overline{2, m_U}$ ,  $\Delta A_{Q_i, j}^{\Delta x, q}$ ,  $q = \overline{1, m_{\Delta x}}$ ,  $j = \overline{1, i-1}$ ,  $i = \overline{2, m_U}$ ,  $\Delta A_{\Delta x, r}^{Q_l, g}$ ,  $g = \overline{1, l-1}$ ,  $l = \overline{2, m_U}$ ,  $r = \overline{1, m_{\Delta x}}$ ,  $\Delta A_{\Delta x, r}^{\Delta x, q}$ ,  $r, k = \overline{1, m_{\Delta x}}$  – коэффициенты положительно определенной диссипативной матрицы;  $S$  – энтропия системы;  $U$  – полная внутренняя энергия системы;  $\Phi_i$ ,  $i = \overline{m_U+1, \bar{m}_U}$  – энергии взаимодействия между ЭСС (сюда же относятся и полная механическая энергия и энергия электромагнитного поля [2]);  $\tilde{C}_{i,j}$ ,  $i, j = \overline{1, m_U}$  – приведенные обратные

теплоемкости, а  $\tilde{H}_{i,k}$ ,  $k = \overline{1, m_x}$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – приведенные тепловые эффекты. Для реализации системы (1)–(11) уравнений, полученной ММПЭП, необходимо задать в численном виде функции состояния для положительно определенной диссипативной матрицы, удовлетворяющей условию положительной определенности, ПВЗ по ЭСС, приведенных обратных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов ЭСС, удовлетворяющих условиям полного дифференциала энтропии и внутренних энергий ЭСС, а также ПВЗ по ЭСС, также удовлетворяющих условиям полного дифференциала энергий взаимодействия между ЭСС [2].

Полный дифференциал энтропии в силу (1) и (3) примет вид [4]

$$dS = \sum_{i=1}^{m_U} \left( \frac{1}{T_i} \right) dU_i + \sum_{i=1}^{m_x} \left( \sum_{k=1}^{m_U} \frac{X_{k,i}}{T_k} \right) dx_i. \quad (12)$$

Также в силу (11) имеем

$$dU_i = \sum_{j=1}^{m_U} C_{i,j} d\varepsilon_j + \sum_{k=1}^{m_x} H_{i,k} dx_k, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (13)$$

где  $C_{i,j}$ ,  $i, j = \overline{1, m_U}$  – приведенные теплоемкости, в классическом случае сводящиеся к классическим теплоемкостям [4, 10];  $H_{i,k}$ ,  $k = \overline{1, m_x}$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – приведенные тепловые эффекты, в классическом случае сводящиеся к классическим тепловым эффектам [4, 10], определяемые в силу

$$\begin{pmatrix} C_{1,1} & \cdots & C_{1,m_U} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{m_U,1} & \cdots & C_{m_U,m_U} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{C}_{1,1} & \cdots & \tilde{C}_{1,m_U} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{C}_{m_U,1} & \cdots & \tilde{C}_{m_U,m_U} \end{pmatrix}^{-1}, \quad (14)$$

$$\begin{pmatrix} H_{1,1} & \cdots & H_{1,m_x} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{m_U,1} & \cdots & H_{m_U,m_x} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \tilde{C}_{1,1} & \cdots & \tilde{C}_{1,m_U} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{C}_{m_U,1} & \cdots & \tilde{C}_{m_U,m_U} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{H}_{1,1} & \cdots & \tilde{H}_{1,m_x} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \tilde{H}_{m_U,1} & \cdots & \tilde{H}_{m_U,m_x} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Выражение (13) получено из выражения (11), исходя из предположения выбора приведенных внутренних энергий таким образом, что матрица теплоемкостей невырожденная [11]. Согласно выражениям (12) и (13) имеем окончательно

$$dS = \sum_{j=1}^{m_U} \left( \sum_{i=1}^{m_U} \frac{C_{i,j}}{T_i} \right) d\varepsilon_j + \sum_{k=1}^{m_x} \left( \sum_{i=1}^{m_U} \frac{X_{i,k} + H_{i,k}}{T_i} \right) dx_k. \quad (16)$$

Согласно уравнениям (2) и (13) в силу условия полного дифференциала имеем

$$\left( \frac{\partial C_{i,j}}{\partial \varepsilon_l} \right)_x = \left( \frac{\partial C_{i,l}}{\partial \varepsilon_j} \right)_x, \quad j = \overline{1, l-1}, \quad l = \overline{2, m_U}, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (17)$$

$$\left( \frac{\partial C_{i,j}}{\partial x_k} \right)_\varepsilon = \left( \frac{\partial H_{i,k}}{\partial \varepsilon_j} \right)_x, \quad k = \overline{1, m_x}, \quad j = \overline{1, m_U}, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (18)$$

$$\left( \frac{\partial H_{i,k}}{\partial x_q} \right)_\varepsilon = \left( \frac{\partial H_{i,q}}{\partial x_k} \right)_\varepsilon, \quad k = \overline{1, q-1}, \quad q = \overline{2, m_x}, \quad i = \overline{1, m_U}. \quad (19)$$

$$\frac{\partial X_{i,k}^\circ}{\partial x_q} = \frac{\partial X_{i,q}^\circ}{\partial x_k}, \quad k = \overline{1, q-1}, \quad q = \overline{2, m_x}, \quad i = \overline{1, m_U}. \quad (20)$$

Согласно выражению (16) в силу условия полного дифференциала, учитывая выражения (17)–(19), имеем

$$\sum_{i=1}^{m_U} \frac{C_{i,j}}{T_i^2} \left( \frac{\partial T_i}{\partial x_k} \right)_\varepsilon = \sum_{i=1}^{m_U} \frac{1}{T_i} \left( \frac{X_{i,k} + H_{i,k}}{T_i} \left( \frac{\partial T_i}{\partial \varepsilon_j} \right)_x - \left( \frac{\partial X_{i,k}}{\partial \varepsilon_j} \right)_x \right), \quad k = \overline{1, m_x}, \quad j = \overline{1, m_U}, \quad (21)$$

$$\sum_{i=1}^{m_U} \frac{1}{T_i} \left( \left( \frac{\partial X_{i,q}}{\partial x_k} \right)_\varepsilon - \frac{X_{i,q} + H_{i,q}}{T_i} \left( \frac{\partial T_i}{\partial x_k} \right)_\varepsilon \right) = \sum_{i=1}^{m_U} \frac{1}{T_i} \left( \left( \frac{\partial X_{i,k}}{\partial x_q} \right)_\varepsilon - \frac{X_{i,k} + H_{i,k}}{T_i} \left( \frac{\partial T_i}{\partial x_q} \right)_\varepsilon \right), \quad k = \overline{1, q-1}, \quad q = \overline{2, m_x}, \quad (22)$$

$$\sum_{i=1}^{m_U} \frac{C_{i,j}}{T_i^2} \left( \frac{\partial T_i}{\partial \varepsilon_l} \right)_x = \sum_{i=1}^{m_U} \frac{C_{i,l}}{T_i^2} \left( \frac{\partial T_i}{\partial \varepsilon_j} \right)_x, \quad j = \overline{1, l-1}, \quad l = \overline{2, m_U}. \quad (23)$$

В классическом случае выражения (17)–(23) сводятся к соответствующим классическим соотношениям полного дифференциала энтропии и ВЭ [10].

Выражения (2), (13) и (16) позволяют определить внутренние энергии ЭСС, энергии взаимодействия между ЭСС и энтропию с точностью до соответствующих постоянных аддитивных составляющих [12], так как на практике из экспериментальных данных можно получить лишь величины, определяющие частные производные энтропии, ВЭ и энергий взаимодействия между ЭСС [12]. Но и, как видно из выражений (1)–(11), для решения практических задач достаточно лишь частных производных упомянутых функций состояния [12]. Упомянутые частные производные, как видно из выражений (13) и (16)–(23), задаются через ПВЗ, приведенные теплоемкости и приведенные тепловые эффекты с учетом выражений (17)–(23) [4, 10, 12, 13].

Для того, чтобы задать ПВЗ, приведенные теплоемкости и приведенные тепловые эффекты, удовлетворяющие (17)–(23), необходимо решать дифференциальные уравнения в частных производных (17)–(23) [14]. По сути, рассматриваемая задача сводится к задаче восстановления скалярного потенциала векторного поля [15]. Как нетрудно видеть из выражений (13) и (16), аналитические решения уравнений (17)–(23) целесообразно искать путем задания функциональных разложений для функций энтропии и ВЭ, а также энергий взаимодействия между ЭСС [6, 16], так как в противном случае необходимо будет выполнять операцию интегрирования (в большинстве случаев численного) [15]. Частные производные упомянутых функций будут задаваться в виде частных производных компонентов упомянутых функциональных разложений [6, 16].

Упомянутые задания ВЭ, энергий взаимодействия между ЭСС и энтропии через функциональные разложения примут вид [6, 16]

$$S = \sum_{i=1}^{N_s} c_i^{(S)} \varphi_i^{(S)} \left( \left\{ \varepsilon_{j'}^{*(S)} \right\}_{j'=1}^{m_U^{*(S)}}, \left\{ x_{k'}^{*(S)} \right\}_{k'=1}^{m_x^{*(S)}} \right) + \sum_{i=1}^{m_U} \gamma_i^{(S)} U_i + S^{(C)}, \quad (24)$$

$$U_i = \sum_{l=1}^{N_{U,i}} c_{i,l}^{(U)} \varphi_{i,l}^{(U)} \left( \left\{ \varepsilon_{i,j'}^{*(U)} \right\}_{j'=1}^{m_{U,i}^{*(U)}}, \left\{ x_{i,k'}^{*(U)} \right\}_{k'=1}^{m_{x,i}^{*(U)}} \right) + U_i^{(C)}, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (25)$$

$$\Phi_i = \sum_{l=1}^{N_{\Phi,i}} c_{i,l}^{(\Phi)} \varphi_{i,l}^{(\Phi)} \left( \left\{ x_{i,k'}^{*(\Phi)} \right\}_{k'=1}^{m_{x,i}^{*(\Phi)}} \right) + \Phi_i^{(C)}, \quad i = \overline{m_U + 1, \overline{m_U}}, \quad (26)$$

$$\varepsilon_j^{*(S)} = \varepsilon_j^{*(S)} \left( \left\{ \varepsilon_{j'}^{m_U} \right\}_{j'=1}^{m_U}, \left\{ x_{k'}^{m_x} \right\}_{k'=1}^{m_x} \right), \quad j = \overline{1, m_U^{*(S)}}, \quad (27)$$

$$x_k^{*(S)} = x_k^{*(S)} \left( \left\{ x_{k'}^{m_x} \right\}_{k'=1}^{m_x} \right), \quad k = \overline{1, m_x^{*(S)}}, \quad (28)$$

$$x_{i,k}^{*(U)} = x_{i,k}^{*(U)} \left( \left\{ x_{k'}^{m_x} \right\}_{k'=1}^{m_x} \right), \quad k = \overline{1, m_{x,i}^{*(U)}}, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (29)$$

$$x_{i,k}^{*(\Phi)} = x_{i,k}^{*(\Phi)} \left( \left\{ x_{k'}^{m_x} \right\}_{k'=1}^{m_x} \right), \quad k = \overline{1, m_{x,i}^{*(\Phi)}}, \quad i = \overline{m_U + 1, \overline{m_U}}, \quad (30)$$

$$\varepsilon_{i,j}^{*(U)} = \varepsilon_{i,j}^{*(U)} \left( \left\{ \varepsilon_{j'}^{m_U} \right\}_{j'=1}^{m_U}, \left\{ x_{k'}^{m_x} \right\}_{k'=1}^{m_x} \right), \quad j = \overline{1, m_{U,i}^{*(U)}}, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (31)$$

где в качестве функций  $\varphi$  с индексами можно взять, например, степенные полиномы [16] (теорема Вейерштрасса о равномерном приближении функции полиномами [16, 17]), а функции (27)–(31)

задаются для конкретной физико-химической системы;  $S^{(C)} = \text{const}$  и  $U_i^{(C)} = \text{const}$ ,  $i = \overline{1, m_U}$ ,  $\Phi_i^{(C)} = \text{const}$ ,  $i = \overline{m_U + 1, \overline{m_U}}$  – вышеупомянутые аддитивные константы энтропии, ВЭ и энергий взаимодействия между ЭСС [12];  $\gamma_i^{(S)} \geq 0$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  – коэффициенты, гарантирующие положительность температур ЭСС (в общем случае нарушения локального термодинамического равновесия неравновесных [3, 7, 8]), определяемых, как частные производные энтропии по ВЭ соответствующих ЭСС при фиксированных значениях прочих координат состояния [3, 7, 8];  $c$  – экспериментально исследуемые константы. Согласно выражениям (2), (13), (16), (24)–(31) имеем

$$C_{i,j} = \sum_{l=1}^{N_{U,l}} c_{i,l}^{(U)} \sum_{r=1}^{m_{U,l}^{*(U)}} \left( \frac{\partial \varphi_{i,l}^{(U)}}{\partial \varepsilon_{i,r}^{*(U)}} \right)_{x^*} \left( \frac{\partial \varepsilon_{i,r}^{*(U)}}{\partial \varepsilon_j} \right)_x, \quad i, j = \overline{1, m_U}, \quad (32)$$

$$H_{i,k} = \sum_{l=1}^{N_{U,l}} c_{i,l}^{(U)} \left( \sum_{r=1}^{m_{U,l}^{*(U)}} \left( \frac{\partial \varphi_{i,l}^{(U)}}{\partial \varepsilon_{i,r}^{*(U)}} \right)_{x^*} \left( \frac{\partial \varepsilon_{i,r}^{*(U)}}{\partial x_k} \right)_x + \sum_{r=1}^{m_{x,l}^{*(U)}} \left( \frac{\partial \varphi_{i,l}^{(U)}}{\partial x_{i,r}^{*(U)}} \right)_{\varepsilon^*} \frac{\partial x_{i,r}^{*(U)}}{\partial x_k} \right), \quad k = \overline{1, m_x}, \quad i = \overline{1, m_U}, \quad (33)$$

$$X_{i,k}^{\circ} = - \sum_{l=1}^{N_{\Phi,l}} c_{i,l}^{(\Phi)} \sum_{r=1}^{m_{x,l}^{*(\Phi)}} \frac{\partial \varphi_{i,l}^{(\Phi)}}{\partial x_{i,r}^{*(\Phi)}} \frac{\partial x_{i,r}^{*(\Phi)}}{\partial x_k}, \quad k = \overline{1, m_x}, \quad i = \overline{m_U + 1, \overline{m_U}}, \quad (34)$$

$$\sum_{i=1}^{m_U} \left( \frac{1}{T_i} - \gamma_i^{(S)} \right) C_{i,j} = \sum_{l=1}^{N_s} c_l^{(S)} \sum_{r=1}^{m_{U,l}^{*(S)}} \left( \frac{\partial \varphi_l^{(S)}}{\partial \varepsilon_r^{*(S)}} \right)_{x^*} \left( \frac{\partial \varepsilon_r^{*(S)}}{\partial \varepsilon_j} \right)_x, \quad j = \overline{1, m_U}, \quad (35)$$

$$\sum_{i=1}^{m_U} \frac{X_{i,k}}{T_i} = \sum_{l=1}^{N_s} c_l^{(S)} \left( \sum_{r=1}^{m_{U,l}^{*(S)}} \left( \frac{\partial \varphi_l^{(S)}}{\partial \varepsilon_r^{*(S)}} \right)_{x^*} \left( \frac{\partial \varepsilon_r^{*(S)}}{\partial x_k} \right)_x + \sum_{r=1}^{m_x^{*(S)}} \left( \frac{\partial \varphi_l^{(S)}}{\partial x_r^{*(S)}} \right)_{\varepsilon^*} \frac{\partial x_r^{*(S)}}{\partial x_k} \right) - \sum_{i=1}^{m_U} \left( \frac{1}{T_i} - \gamma_i^{(S)} \right) H_{i,k}, \quad k = \overline{1, m_x}. \quad (36)$$

Выражения (32)–(34) явно определяют приведенные теплоемкости и приведенные тепловые эффекты, а также ПВЗ, обусловленные взаимодействием между ЭСС, соответственно. Соотношения (35) представляют собой систему линейных уравнений относительно обратных температур (в общем случае неравновесных). Причем в силу вышеупомянутой невырожденности матрицы приведенных теплоемкостей система (35) линейных уравнений относительно обратных температур имеет одно решение [11], которое численно может быть найдено методами численного решения систем линейных уравнений (методом Гаусса или итерационным) [18]. Затем, используя выражение (36), задав независимые ПВЗ по ЭСС, соответствующие  $k$ -й координате состояния [7], определяем остальные ПВЗ по ЭСС.

Также из выражения (35) видно, что неотрицательные коэффициенты  $\gamma_i^{(S)} \geq 0$ ,  $i = \overline{1, m_U}$  гарантируют положительность обратных температур (в общем случае неравновесных). Для этого необходимо задавать  $\gamma_i^{(S)} \geq 0$ ,  $i = \overline{1, m_U}$ , исходя из минимума результатов решения системы линейных уравнений (35) относительно  $\frac{1}{T_i} - \gamma_i^{(S)}$ ,  $i = \overline{1, m_U}$ . Такой минимум существует, так как в общем случае

функции состояния для ПВЗ, теплоемкостей и тепловых эффектов (в том числе и приведенных) задаются для ограниченного температурного диапазона, а также для ограниченной области прочих координат состояния (например, уравнение состояния и калорическое уравнение идеального газа) [10, 13], что гарантирует существование упомянутых минимумов [17]. В частности, в области низких температур задаются свои функции состояния [10, 13].

## Результаты

Непосредственными преобразованиями возможно убедиться, что выражения (32)–(36) удовлетворяют условиям (17)–(23) полного дифференциала энтропии, ВЭ, а также энергий взаимодействия между ЭСС. Отсюда задание функций состояния для ПВЗ, обратных приведенных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов сводится к заданию в виде (27)–(31) функций состояния для замененных параметров состояния и выбору функций  $\varphi$  с индексами, которыми чаще всего будут степенные полиномы, радиально-базисные функции [16]. Такой выбор функций  $\varphi$  с индексами упрощает учет в выражениях (32)–(36) физических особенностей конкретной системы. Затем задаем в силу (32)–(36) функции состояния для ПВЗ, приведенных теплоемкостей и приведенных тепловых

эффектов. И наконец, мы в силу (14) и (15) определим приведенные обратные теплоемкости и приведенные тепловые эффекты, уже непосредственно используемые в системе уравнений динамики процессов различной физической и химической природы, полученной ММПЭП.

### Обсуждение

Предложенная в настоящей работе методика задания функций состояния для ПВЗ, приведенных обратных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов, гарантирующая выполнение условий полного дифференциала энтропии, полного дифференциала ВЭ, а также полного дифференциала энергий взаимодействия между ЭСС, сводит экспериментальное исследование упомянутых функций состояния к классическим методам идентификации [19], в частности, к индукционным методам символьной регрессии [20], существенно упрощающим построение ММПЭП модели [5].

### Заключение

Как уже отмечалось выше, задание функций состояния для ПВЗ, приведенных обратных теплоемкостей и приведенных тепловых эффектов через замененные параметры состояния гарантирует условия полного дифференциала энтропии, ВЭ и энергий взаимодействия между ЭСС. Это обуславливает задачу формирования класса функций замененных переменных, через которые определяются упомянутые характеристики системы.

### Список литературы

1. Антонов А. В. Системный анализ. М. : Высш. шк., 2004. 454 с.
2. Старостин И. Е., Халютин С. П., Париевский В. В. Виды и формы представления основных уравнений метода математического прототипирования энергетических процессов // Электропитание. 2022. № 4. С. 4–14.
3. Эткин В. А. Энергодинамика (синтез теорий переноса и преобразования энергии). СПб. : Наука, 2008. 409 с.
4. Starostin I. E., Khalyutin S. P., Vykov V. I. Setting the State functions for the properties of substances and processes in a differential form // The Complex Systems. 2022. № 1. P. 4–16.
5. Старостин И. Е., Гавриленков С. И. Архитектура математического ядра цифровых двойников различных физико-химических систем на базе метода математического прототипирования энергетических процессов // Надежность и качество сложных систем. 2024. № 4. С. 160–168. doi: 10.21685/2307-4205-2024-4-17
6. Старостин И. Е., Дружинин А. А. Аналитическое приближение решений уравнений метода математического прототипирования энергетических процессов путем качественного анализа этих уравнений // Надежность и качество сложных систем. 2023. № 2. С. 22–31.
7. Starostin I. E., Vykov V. I. Kinetic theorem of modern non-equilibrium thermodynamics. Raley, Noth Caroline, USA : Open Science Publishing, 2017. 229 p.
8. Demirel Ya., Gerbaud V. Nonequilibrium Thermodynamics. Transport and Rate Processes in Physical, Chemical and Biological Systems, 3rd ed. Amsterdam, Netherlands : Elsevier, 2014. 880 p.
9. Петров А. В. Имитация как основа технологии цифровых двойников // Вестник ИрГТУ. 2018. Т. 22, № 10. С. 56–66. doi: 10.21285/1814-3520-2018-10-56-66
10. Пригожин И., Дефей Р. Химическая термодинамика. Новосибирск : Наука, Сибирское отделение, 1966. 512 с.
11. Беклемишев Д. В. Курс аналитической геометрии и линейной алгебры. М. : Физматлит, 2005. 304 с.
12. Гуров А. А., Бадаев Ф. З., Овчаренко Л. П., Шаповал В. Н. Химия. М. : Изд-во МГТУ им. Баумана, 2017. 777 с.
13. Квасников И. А. Термодинамика и статистическая физика: теория равновесных систем. Термодинамика. М. : Едиториал УРСС, 2003. Т. 1. 240 с.
14. Мизохата С. Теория уравнений с частными производными. М. : Мир, 1977. 504 с.
15. Кочин Н. Е. Векторное исчисление и начала тензорного исчисления. М. : Наука, 1965. 424 с.
16. Дзядзык В. К. Введение в теорию равномерного приближения функции полиномами. М. : Наука, 1977. 512 с.
17. Ильин В. А., Садовничий В. А., Сендов Бл. Х. Математический анализ. Продолжение курса. М. : Изд-во Московского университета, 1967. 350 с.
18. Калиткин Н. Н. Численные методы. СПб. : БХВ-Петербург, 2011. 592 с.
19. Eukhoff P. Systems identification: parameters and state estimation. Eindhoven, Netherlands : University of technology, 1975. 680 p.
20. Стрижов В. В. Методы индуктивного порождения регрессионных моделей. М. : Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН, 2008. 56 с.

### References

1. Antonov A.V. *Sistemnyy analiz = System analysis*. Moscow: Vyssh. shk., 2004:454. (In Russ.)
2. Starostin I.E., Khalyutin S.P., Parievskiy V.V. Types and forms of representation of the basic equations of the method of mathematical prototyping of energy processes. *Elektropitanie = Power supply*. 2022;(4):4–14. (In Russ.)
3. Etkin V.A. *Energodinamika (sintez teoriy perenosa i preobrazovaniya energii) = Ergodynamics (synthesis of theories of energy transfer and transformation)*. Saint Petersburg: Nauka, 2008:409. (In Russ.)

4. Starostin I.E., Khalyutin S.P., Bykov V.I. Setting the State functions for the properties of substances and processes in a differential form. *The Complex Systems*. 2022;(1):4–16.
5. Starostin I.E., Gavrilencov S.I. Architecture of the mathematical core of digital twins of various physico-chemical systems based on the method of mathematical prototyping of energy processes. *Nadezhnost' i kachestvo slozhnykh system = Reliability and quality of complex systems*. 2024;(4):160–168. (In Russ.). doi: 10.21685/2307-4205-2024-4-17
6. Starostin I.E., Druzhinin A.A. Analytical approximation of solutions to equations of the method of mathematical prototyping of energy processes by qualitative analysis of these equations. *Nadezhnost' i kachestvo slozhnykh system = Reliability and quality of complex systems*. 2023;(2):22–31. (In Russ.)
7. Starostin I.E., Bykov V.I. *Kinetic theorem of modern non-equilibrium thermodynamics*. Raley, Noth Caroline, USA: Open Science Publishing, 2017:229.
8. Demirel Ya., Gerbaud V. *Nonequilibrium Thermodynamics. Transport and Rate Processes in Physical, Chemical and Biological Systems, 3rd ed.* Amsterdam, Netherlands: Elsevier, 2014:880.
9. Petrov A.V. Imitation as the basis of digital twin technology. *Vestnik IrGTU = Bulletin of IrSTU*. 2018;22(10): 56–66. (In Russ.). doi: 10.21285/1814-3520-2018-10-56-66
10. Prigozhin I., Defey R. *Khimicheskaya termodinamika = Chemical thermodynamics*. Novosibirsk: Nauka, Sibirskoe otделение, 1966:512. (In Russ.)
11. Beklemishev D.V. *Kurs analiticheskoy geometrii i lineynoy algebry = Course of analytical geometry and linear algebra*. Moscow: Fizmatlit, 2005:304. (In Russ.)
12. Gurov A.A., Badaev F.Z., Ovcharenko L.P., Shapoval V.N. *Khimiya = Chemistry*. Moscow: Izd-vo MGTU im. Baumana, 2017:777. (In Russ.)
13. Kvasnikov I.A. *Termodinamika i statisticheskaya fizika: teoriya ravnovesnykh sistem. Termodinamika = Thermodynamics and statistical physics: theory of equilibrium systems. Thermodynamics*. Moscow: Editorial URSS, 2003;1:240. (In Russ.)
14. Mizokhata C. *Teoriya uravneniy s chastnymi proizvodnymi = Theory of partial differential equations*. Moscow: Mir, 1977:504. (In Russ.)
15. Kochin N.E. *Vektornoe ischislenie i nachala tenzornogo ischisleniya = Vector calculus and the beginnings of tensor calculus*. Moscow: Nauka, 1965:424. (In Russ.)
16. Dzyadzyk V.K. *Vvedenie v teoriyu ravnomernogo priblizheniya funktsii polinomami = Introduction to the theory of uniform approximation of a function by polynomials*. Moscow: Nauka, 1977:512. (In Russ.)
17. Il'in V.A., Sadovnichiy V.A., Sendov Bl.Kh. *Matematicheskii analiz. Prodolzhenie kursa = Mathematical analysis. Continuation of the course*. Moscow: Izd-vo Moskovskogo universiteta, 1967:350. (In Russ.)
18. Kalitkin N.N. *Chislennyye metody = Numerical methods*. Saint Petersburg: BKhV-Peterburg, 2011:592. (In Russ.)
19. Eykhoff P. *Systems identification: parameters and state estimation*. Eindhoven, Netherlands: University of technology, 1975:680.
20. Strizhov V.V. *Metody induktivnogo porozhdeniya regressionnykh modeley = Methods of inductive generation of regression models*. Moscow: Vychislitel'nyy tsentr im. A.A. Dorodnitsyna RAN, 2008:56. (In Russ.)

### Информация об авторах / Information about the authors

#### Игорь Евгеньевич Старостин

доктор технических наук, профессор, профессор кафедры электротехники и авиационного электрооборудования, Московский государственный технический университет гражданской авиации (Россия, г. Москва, Кронштадтский бульвар, 20)  
E-mail: starostinigo@yandex.ru

#### Станислав Иванович Гавриленков

заведующий учебной лабораторией кафедры электротехники и авиационного электрооборудования, Московский государственный технический университет гражданской авиации (Россия, г. Москва, Кронштадтский бульвар, 20)  
E-mail: gavrilencov@mstuca.ru

#### Igor E. Starostin

Doctor of technical sciences, professor, professor of the sub-department of electrical engineering and aviation electrical equipment, Moscow State Technical University of Civil Aviation (20 Kronshtadtskiy boulevard, Moscow, Russia)

#### Stanislav I. Gavrilencov

Head of the educational laboratory of the sub-department of electrical engineering and aviation electrical equipment, Moscow State Technical University of Civil Aviation (20 Kronshtadtskiy boulevard, Moscow, Russia)

**Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов /**

**The authors declare no conflicts of interests.**

**Поступила в редакцию/Received 10.12.2024**

**Поступила после рецензирования/Revised 23.12.2024**

**Принята к публикации/Accepted 12.01.2025**