Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики
УЧЕБНЫЙ ЦЕНТР ОБЩЕЙ ФИЗИКИ ФТФ

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Группа N3149____________________________К работе допущен__________________________

Студент Синюта Анастасия______________Работа выполнена_________________________

Преподаватель Иванов Виктор Юрьевич Отчет принят______________________________

Рабочий протокол и отчет по Проектной работе №2

Вариант 2. Исследование процесса диффузии.

1. Формулировка задания.
   Общее задание:
   1) Ознакомиться с предложенной моделью, написать основные уравнения, описывающие модель и найти аналитическое решение
   2) Выбрать разностную схему, выбрать шаг по времени и пространственный шаг интегрирования уравнения, обосновать выбор (см. проект №1)
   3) Провести численный эксперимент, самостоятельно выбрать коэффициент диффузии (выбрать газ и найти к-т диффузии для него), размер сосуда и координаты перегородки.
   4) Изобразить результат графически

   Есть сосуд с перегородкой, заполненный воздухом при нормальных условиях. Примесный газ А с начальной концентрацией C0 находится в одной части сосуда, между плоскостями x = 0 и x = h (h – координата перегородки). Перегородку убрали и газ А начал диффундировать в область, ограниченную плоскостями x = h и x = l (l > h). Исследовать процесс диффузии - изменения концентрации газа А.

2. Аналитическое решение.

   Задача сводится к решению уравнения в частных производных:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x} \tag{1}$$

при краевых условиях

$$\left.\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0} = 0, \tag{2}$$

$$\left.\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\right|_{x=l} = 0, \tag{3}$$

$$C(x,0) = \begin{cases} C_0, x \in [0,h], \\ 0, x \in [h,l]. \end{cases} \tag{4}$$

При данных условиях решением уравнения (1) является функция

$$C(xt) = 2C_0(\frac{h}{2l} + \frac{1}{\pi}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k}\sin\frac{k\pi h}{l}\cos\frac{k\pi h}{l}e^{-Dk^2\pi^2 t/l^2}). \quad (5)$$

Код для аналитического решения на языке программирования Python + построение графика:

```
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits import mplot3d
import numpy as np
import math

#Исходные данные
D = 0.25
l = 10
h = l // 2
T = 90
n = 10
k = 800
p = l/n
q = T/k
C0 = 100
pi = math.pi

#Заполнение матрицы концентраций
C=[0]*k
for i in range(k):    C[i] = [0.0] * n
for j in range (k):
    for i in range (n):
        if j == 0:
            if (i+2) < (n//2):
                C[j][i] = C0
            else:
                C[j][i] = 0.0
        else:
            sum = 0
            for o in range(1,k):
                sinus = math.sin(o*pi*h/l)
                cosinus = math.cos(o*pi*i/l)
                exp = math.exp(-D*(o**2)*(pi**2)*j/(l**2))
                sum += (1/o) * sinus * cosinus * exp
            C[j][i] = 2*C0 * (h/(2*l) + (1/pi)*sum)

#Построение 3d графика
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.set(title =  'Аналитическое решение', xlabel = 'x', ylabel = 't', zlabel = 'C')
x_val = np.linspace(0, l, n)
y_val = np.linspace(0, T, k)
X, Y = np.meshgrid(x_val, y_val)
C=np.array(C)
ax.plot_surface(X, Y, C);
plt.show()
```

3. Численное решение.
   Решение будем искать в прямоугольнике П, ограниченном прямыми *t = 0*, *x = 0*, *x = l*, *t =T*. При этом должны быть заданы значения искомой функции С на стороне *t = 0*.
   Покроем П сеткой, образованной прямыми *x = ip*, *i =1..n*, *t = jq*, *j =1..k*, и будем определять приближенные значения решения в узлах (*i*, *j*) сетки, т. е. в точках пересечения этих прямых. Положим С(*ip*, *jq*) = *Cij*. Вместо (1) запишем соответствующее ему уравнение в конечных разностях для точки *Cij*. При решении уравнений в частных производных методом

конечных разностей производные заменяются соответствующими разностями:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} \approx \frac{C(x,t+q)-C(x,t)}{q}\,, \tag{6}$$

$$\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \approx \frac{1}{p}\left(\frac{C(x+p,t)}{p} - \frac{C(x,t)-C(x-p,t)}{p}\right). \tag{7}$$

Согласно (6), (7),

$$\frac{C_{i,j+1}-C_{i,j}}{q} = D\,\frac{C_{i+1,j}-2C_{i,j}+C_{i-1,j}}{p^2}. \tag{8}$$

Из (8) следует:

$$C_{i,j+1} = \left(1-\frac{2Dq}{p^2}\right)C_{i,j} + Dq(C_{i+1,j}+C_{i-1,j})/p^2. \tag{10}$$

Из (10) следует, что если известны три значения в j-м ряду: $C_{i-1,j}, C_{i,j}, C_{i+1,j}$, то определяется значение $C_{i,j+1}$ в следующем ряду. Формула (10) упрощается, если $q = p^2 / (2D)$. Тогда

$$C_{i,j+1} = \frac{1}{2}\left(C_{i+1,j} + C_{i-1,j}\right). \tag{11}$$

Для выполнения условий (2), (3) мы сначала вычислим значения $C_{i,j+1}$ для *i = 2..n-1*, а затем положим

$$C_{1,j+1} = \frac{1}{2}\left(C_{1,j} + C_{2,j+1}\right),$$

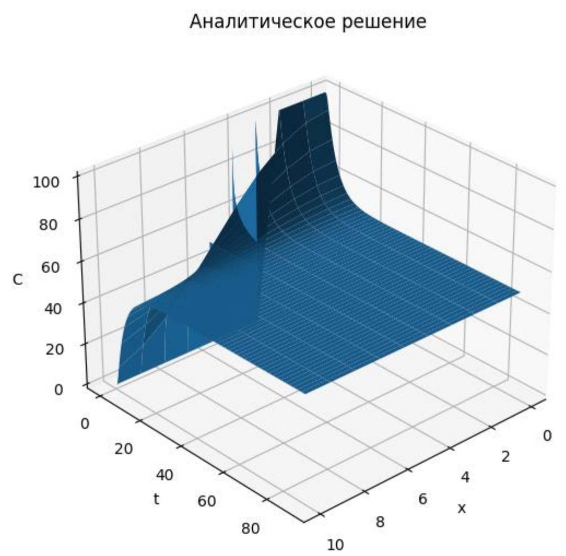
$$C_{n,j+1} = \frac{1}{2}\left(C_{n,j} + C_{n-1,j+1}\right).$$

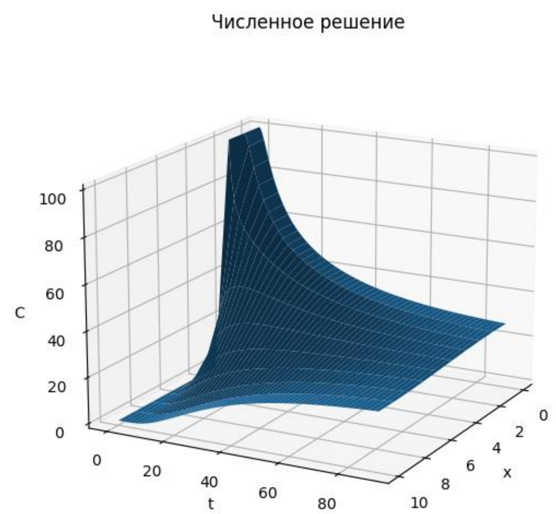
Код для численного решения на языке программирования Python + построение графика:

```
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits import mplot3d
import numpy as np

#Исходные данные
D = 0.25
l = 10
h = l // 2
T = 90
n = 10
k = 800
p = l/n
q = T/k
C0 = 100

#Заполнение матрицы концентраций
C=[0]*k
for i in range(k):    C[i] = [0.0] * n
for i in range(n):
    if (i+2) < (n // 2):
        C[0][i] = C0
    else:
        C[0][i] = 0.0
for j in range (1,k):
    for i in range (1,n-1):
        C[j][i] = C[j-1][i] + (D*q/(p*p))*(C[j-1][i+1] - 2*C[j-1][i] + C[j-1][i-1])
    C[j][0] = (C[j-1][0] + C[j][1])/2
    C[j][n-1] = (C[j-1][n-1] + C[j][n-2])/2

# Построение 3d графика
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.set(title =  'Численное решение', xlabel = 'x', ylabel = 't', zlabel = 'C')
x_val = np.linspace(0, l, n)
y_val = np.linspace(0, T, k)
```

```
X, Y = np.meshgrid(x_val, y_val)
C=np.array(C)
ax.plot_surface(X, Y, C);
plt.show()
```

4. Графики и вывод:
   Для исходных данных *D = 0.25, l = 10, h = l / 2, T = 90, n = 10, k = 800, C0 = 100* получились такие:





Вывод: По графикам видно, что к моменту времени T=90 произошло выравнивание концентрации по всей площади сосуда. Графики выглядят схоже, имеют одинаковое поведение, значит поставленная задача была выполнена правильно, правильность формул доказана. Однако второй график получился более сглаженный и точный, значит, численный метод для исследования процесса диффузии лучше.