

## **Преобразование дифференциальной задачи в разностную**

1. Метод приведения уравнений к безразмерному виду
  - 1.1. Безразмерные переменные и необходимость их использования*
  - 1.2. Методика определения неизвестных характерных параметров процесса*
2. Аппроксимация простейших дифференциальных операторов
  - 2.1. Разностная аппроксимация производной первого порядка*
  - 2.2. Понятие порядка аппроксимации*
  - 2.3. Разностная аппроксимация производной второго порядка*
3. Аппроксимация дифференциальных уравнений
  - 3.1. Понятие разностной сетки*
  - 3.2. Понятие разностной схемы*
  - 3.3. Порядок аппроксимации разностной схемы*
  - 3.4. Аппроксимация начальных и граничных условий*
4. Задания для самоконтроля

# 1. Метод приведения уравнений к безразмерному виду

## 1.1. Безразмерные переменные и необходимость их использования

Значения параметров, получаемые с помощью методов численного решения дифференциальных уравнений, как правило несколько отличаются от их истинных значений из-за наличия ошибки аппроксимации. Поэтому алгоритмы решения уравнений математических моделей, изучаемые в данном пособии, могут оказаться непригодными, если уравнения модели содержат переменные, значения которых отличаются по порядкам. Так, погрешности при определении параметров, порядки которых велики, могут быть не значимы для них самих, но в то же время они будут сильно исказить значения параметров меньших порядков. Поэтому прежде чем перейти к созданию алгоритма для решения уравнений математической модели, необходимо привести эти уравнения к безразмерному виду, т.е. провести операцию *обезразмеривания переменных*, в результате которой все переменные математической модели будут иметь одинаковый порядок.

Рассмотрим процедуру обезразмеривания на примере математической модели процесса кристаллизации, протекающего в ёмкостном периодическом реакторе идеального смешения:

$$\frac{dc}{dt} = -\int_0^R \rho_2^0 f \eta dr, \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \eta \frac{\partial f}{\partial r} = 0, \quad (2.1)$$

где  $c$  – объёмная концентрация кристаллизующегося компонента;  $\rho_2^0$  – плотность кристалла;  $\eta$  – скорость роста кристалла;  $f(r) dr$  – число кристаллов в единице объёма смеси с размером от  $r$  до  $r + dr$ ;  $R$  – наибольший размер кристалла.

Безразмерные переменные вводятся с помощью соотношений:

$$c' = \frac{c}{c_0}, \quad t' = \frac{t}{t_0}, \quad r' = \frac{r}{r_0}, \quad \eta' = \frac{\eta}{\eta_0}, \quad f' = \frac{f}{f_0}, \quad \rho_2'^0 = \frac{\rho_2^0}{\rho_0},$$

где переменные с индексом (0) соответствуют характерным параметрам процесса.

Как правило, могут быть известны лишь некоторые характерные параметры процесса, например, в данном случае это характерное время процесса ( $t_0$ ), характерный размер кристалла ( $r_0$ ) и характерная концентрация кристаллизующегося компонента в растворе ( $c_0$ ). Кроме этого, обычно принимают равенство:

$$\rho_0 = c_0,$$

поскольку в модели (2.1) плотность и концентрация имеют одинаковую размерность. Однако характерную скорость роста кристаллов ( $\eta_0$ ) и характерное значение плотности функции распределения кристаллов по размерам ( $f_0$ ) непосредственно измерить невозможно. Их значения определяют из безразмерных комплексов характерных параметров согласно методике, рассмотренной ниже.

## 1. Метод приведения уравнений к безразмерному виду

### 1.2. Методика определения неизвестных характерных параметров процесса

Рассмотрим методику определения неизвестных характерных параметров. Для этого выразим переменные математической модели через характерные и безразмерные значения:

$$c = c' \cdot c_0, \quad t = t' \cdot t_0, \quad r = r' \cdot r_0, \quad \eta = \eta' \cdot \eta_0, \quad f = f' \cdot f_0, \quad \rho_2^0 = \rho_2'^0 \cdot c_0.$$

Затем подставим их в исходную систему уравнений (2.1):

$$\frac{c_0}{t_0} \frac{dc'}{dt'} = -c_0 f_0 \eta_0 r_0 \int_0^R \rho_2'^0 f' \eta' dr', \quad \frac{f_0}{t_0} \frac{\partial f'}{\partial t'} + \frac{f_0 \eta_0}{r_0} \eta' \frac{\partial f'}{\partial r'} = 0. \quad (2.2)$$

Рассмотрим второе уравнение в системе (2.2), которое после несложных преобразований можно представить в виде:

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + \frac{t_0 \eta_0}{r_0} \eta' \frac{\partial f'}{\partial r'} = 0.$$

Для того чтобы полученное обезразмеренное уравнение совпало с исходным, комплекс характерных параметров, стоящий перед вторым слагаемым, необходимо приравнять единице:

$$\frac{t_0 \eta_0}{r_0} = 1.$$

Следовательно, характерное значение скорости роста кристаллов определяется по формуле:

$$\eta_0 = \frac{r_0}{t_0}. \quad (2.3)$$

Рассмотрим теперь первое уравнение в системе (2.2), которое после несложных преобразований можно привести к виду:

$$\frac{dc'}{dt'} = -t_0 f_0 \eta_0 r_0 \int_0^R \rho_2'^0 f' \eta' dr'.$$

Для того чтобы полученное обезразмеренное уравнение совпало с исходным, комплекс характерных параметров, стоящий перед интегралом в правой части уравнения, необходимо приравнять единице:

$$t_0 f_0 \eta_0 r_0 = 1.$$

Отсюда, используя соотношение (2.3), получаем характерное значение плотности функции распределения кристаллов по размерам:

$$f_0 = \frac{1}{t_0 r_0 \eta_0} = \frac{1}{t_0 r_0 \frac{r_0}{t_0}} = \frac{1}{r_0^2}. \quad (2.4)$$

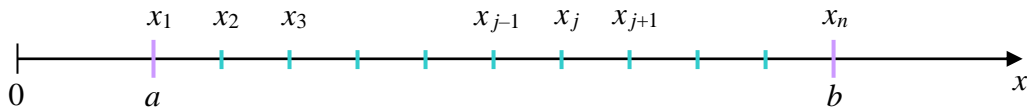
Таким образом, если характерные значения скорости роста кристаллов и плотности функции распределения кристаллов по размерам соответствуют выражениям (2.3), (2.4), то оба уравнения в системе (2.2) полностью совпадают с исходными уравнениями математической модели процесса кристаллизации (2.1). Однако порядки переменных в уравнениях системы (2.1) различны (например, функция  $f$  имеет порядок  $\sim 10^{20}$ , а  $\eta$  –  $\sim 10^{-10}$ ), вследствие чего расчётные ошибки при определении функции  $f$ , не значимые для неё самой, могут привести к сильным искажениям значений  $\eta$ . В то же время при численном решении уравнений системы (2.2) этого не произойдёт, так как все переменные в них имеют одинаковый порядок.

## 2. Аппроксимация простейших дифференциальных операторов

### 2.1. Разностная аппроксимация производной первого порядка

В основе методов численного решения дифференциальных уравнений, изучаемых в настоящем учебном пособии, лежит преобразование дифференциальной задачи в разностную задачу, называемое **аппроксимацией**. Однако прежде, чем перейти к проблемам аппроксимации дифференциальных уравнений, рассмотрим аппроксимацию простейших дифференциальных операторов, т.е. производных первого и второго порядков.

Рассмотрим функцию одной переменной  $u = u(x)$ , для которой задан интервал её изменения  $x \in [a; b]$ . Разобьём интервал  $[a; b]$  на  $n$  равных частей (см. рисунок).



Введём следующие обозначения:

$u(x_j) = u_j$  – значение функции  $u(x)$  в точке  $x_j$ ;

$x_{j+1} - x_j = \Delta x = h$  – величина интервала между точками.

Введём понятие **нормы функции**  $u(x_j)$  с помощью соотношения:

$$\|u\| = \left[ h \sum_{j=1}^n u_j^2 \right]^{1/2}.$$

Рассмотрим производную функции  $u$  в точке  $x_j$ :

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_j}.$$

Аппроксимация этой производной может быть введена с помощью следующих разностных операторов:

- с помощью **правой конечной разности**

$$\lambda_x^+ u = \frac{u_{j+1} - u_j}{h}; \quad (2.5)$$

- с помощью **левой конечной разности**

$$\lambda_x^- u = \frac{u_j - u_{j-1}}{h}; \quad (2.6)$$

- с помощью **центральной конечной разности**

$$\lambda_x^0 u = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h}. \quad (2.7)$$

Кроме того, разностную аппроксимацию производной первого порядка можно задать в виде линейной комбинации выражений (2.5) и (2.6):

$$\lambda_x^\sigma u = \sigma \frac{u_{j+1} - u_j}{h} + (1 - \sigma) \frac{u_j - u_{j-1}}{h}, \quad (2.8)$$

где  $0 \leq \sigma \leq 1$ .

Видно, что при  $\sigma = 0$  выражение (2.8) становится левой конечной разностью, при  $\sigma = 1$  – правой конечной разностью, при  $\sigma = 1/2$  – центральной конечной разностью.

## 2. Аппроксимация простейших дифференциальных операторов

### 2.2. Понятие порядка аппроксимации

Выясним, с какой точностью конечные разности (2.5), (2.6), (2.7) аппроксимируют значение производной функции  $u$  в точке  $x_j$ . Для этого разложим значения функции  $u_{j+1}$ ,  $u_{j-1}$  в ряд Тейлора относительно точки  $x_j$ :

$$u_{j+1} = u_j + u'_j h + u''_j \frac{h^2}{2!} + u'''_j \frac{h^3}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^4}{4!} + \dots, \quad (2.9)$$

$$u_{j-1} = u_j - u'_j h + u''_j \frac{h^2}{2!} - u'''_j \frac{h^3}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^4}{4!} - \dots \quad (2.10)$$

Подставляя выражение (2.9) в правую конечную разность (2.5), получаем:

$$\lambda_{x^+} u = \frac{u_{j+1} - u_j}{h} = u'_j + u''_j \frac{h}{2!} + u'''_j \frac{h^2}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^3}{4!} + \dots \quad (2.11)$$

Первое слагаемое в правой части выражения (2.11) является производной функции  $u$  в точке  $x_j$ , а все остальные составляют так называемую **ошибку аппроксимации**, показывающую насколько значение производной функции  $u$  в точке  $x_j$ , определяемое с помощью разностного оператора, аппроксимирующего эту производную, отличается от её истинного значения.

Учитывая, что производные любых порядков функции  $u$  ограничены в точках интервала  $[a; b]$ , а величина  $h$  после выполнения операции обезразмеривания переменных не будет превышать 1, наиболее существенный вклад в ошибку аппроксимации вносит слагаемое, в котором порядок  $h$  наименьший. На основании этого говорят, что рассматриваемая конечная разность имеет **порядок аппроксимации** по  $h$ , соответствующий этой наименьшей степени  $h$  в выражении для ошибки аппроксимации.

Таким образом, понятие "**порядок аппроксимации**" характеризует точность, с которой разностный оператор аппроксимирует производную функции  $u$  в точке  $x_j$ : чем выше порядок аппроксимации, тем точнее аппроксимация и, соответственно, меньше её ошибка.

В случае правой конечной разности наибольший вклад в ошибку аппроксимации вносит второе слагаемое в правой части выражения (2.11) и, следовательно, *правая конечная разность имеет первый порядок аппроксимации*, что записывается в виде:

$$\lambda_{x^+} u = u'_j + O(h).$$

Подставляя выражение (2.10) в левую конечную разность (2.6), получаем:

$$\lambda_{x^-} u = \frac{u_j - u_{j-1}}{h} = u'_j - u''_j \frac{h}{2!} + u'''_j \frac{h^2}{3!} - u^{IV}_j \frac{h^3}{4!} + \dots = u'_j + O(h).$$

Таким образом, *левая конечная разность также имеет первый порядок аппроксимации*.

Подставляя выражения (2.9), (2.10) в центральную конечную разность (2.7), получаем:

$$\lambda_x^0 u = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} = u'_j + u'''_j \frac{h^2}{3!} + \dots = u'_j + O(h^2).$$

Таким образом, *центральная конечная разность имеет второй порядок аппроксимации* и, следовательно, значение производной функции  $u$  в точке  $x_j$ , полученное при использовании центральной конечной разности, будет ближе к истинному значению, чем при использовании правой или левой конечных разностей.

## 2. Аппроксимация простейших дифференциальных операторов

### 2.3. Разностная аппроксимация производной второго порядка

Рассмотрим вторую производную функции  $u$  в точке  $x_j$ :

$$\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{x_j}.$$

Поскольку первая производная функции  $u$  является некоторой функцией  $w$  от той же независимой переменной  $x$ , что и сама функция  $u$ , тогда вторую производную функции  $u$  можно представить как первую производную функции  $w$ :

$$\frac{du}{dx} = w(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 u}{dx^2} = \frac{dw}{dx}.$$

Аппроксимируя производную функции  $w$  в точке  $x_j$  правой конечной разностью (2.5), получаем:

$$\left. \frac{dw}{dx} \right|_{x_j} \rightarrow \frac{w_{j+1} - w_j}{h} = \frac{\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_{j+1}} - \left. \frac{du}{dx} \right|_{x_j}}{h}.$$

Используя для аппроксимации производной функции  $u$  левую конечную разность (2.6), **разностный оператор для аппроксимации второй производной** функции  $u$  в точке  $x_j$  можно представить в следующем виде:

$$\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{x_j} \rightarrow \lambda_{xx} u = \frac{\frac{u_{j+1} - u_j}{h} - \frac{u_j - u_{j-1}}{h}}{h} = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2}. \quad (2.12)$$

Определим порядок аппроксимации полученного разностного оператора. Подставляя соотношения (2.9), (2.10) в (2.12), получаем:

$$\lambda_{xx} u = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = \frac{2u_j'' \frac{h^2}{2!} + 2u_j^{IV} \frac{h^4}{4!}}{h^2} = u_j'' + u_j^{IV} \frac{h^2}{12} = u_j'' + O(h^2).$$

Таким образом, разностный оператор (2.12), аппроксимирующий вторую производную функции  $u$  в точке  $x_j$ , имеет второй порядок аппроксимации.

### 3. Аппроксимация дифференциальных уравнений

#### 3.1. Понятие разностной сетки

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, t, x). \quad (2.13)$$

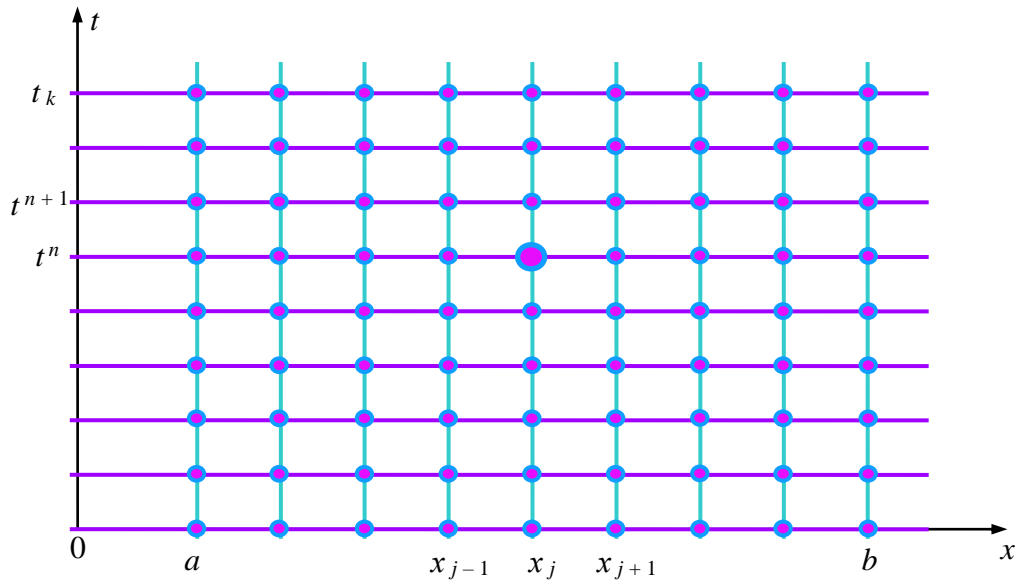
Здесь  $u$  – функция двух независимых переменных:

$$u = u(t, x),$$

для которых задан интервал их изменения:

$$t \in [0; t_k], \quad x \in [a; b].$$

Введём двумерную систему координат, отложив по оси абсцисс независимую переменную  $x$ , а по оси ординат – независимую переменную  $t$ , и отметим на осях заданные интервалы изменения переменных  $x$  и  $t$ . Разобьём интервал  $[a; b]$  на некоторое количество



равных частей и проведём из каждой точки деления прямую, перпендикулярную оси  $x$ . Выполним те же действия для интервала изменения другой независимой переменной. Тогда построенные прямые составят так называемую **разностную сетку** (см. рисунок). Точки пересечения проведённых прямых будем называть **узлами разностной сетки**, причём каждый из них будет соответствовать некоторым значениям независимых переменных  $x$  и  $t$  из заданных интервалов.

Введём следующие обозначения:

$j$  – порядковый номер точки деления по оси  $x$ ;

$n$  – порядковый номер точки деления по оси  $t$ ;

$x_{j+1} - x_j = \Delta x = h$  – величина интервала между точками по оси  $x$ ;

$t^{n+1} - t^n = \Delta t$  – величина интервала между точками по оси  $t$ ;

$u(t^n, x_j) = u_j^n$  – значение функции  $u$ , соответствующее точкам  $t^n, x_j$ .

Введём нумерацию точек разностной сетки по каждой из осей следующим образом:

по оси  $x$  -  $j = 1, 2, 3, \dots, N$ ;

по оси  $t$  -  $n = 0, 1, 2, \dots, M$ .

### 3. Аппроксимация дифференциальных уравнений

#### 3.2. Понятие разностной схемы

Рассмотрим производные в уравнении (2.13) в точке  $(t^n, x_j)$  на разностной сетке.

Для аппроксимации производной функции  $u$  по времени будем использовать правую конечную разность, стабилизируя при этом значение независимой переменной  $x$  в точке с порядковым номером  $j$ :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t^n, x_j} \rightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}.$$

Для аппроксимации второй производной функции  $u$  по координате будем использовать разностный оператор (2.12), стабилизируя при этом значение независимой переменной  $t$  в точке с порядковым номером  $n$  (или, иначе говоря, на  $n$ -ом шаге):

$$\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{t^n, x_j} \rightarrow \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}.$$

Если подставить записанные конечные разности в исходное дифференциальное уравнение (2.13), получим соотношение, аппроксимирующее это дифференциальное уравнение в точке  $(t^n, x_j)$  на разностной сетке, и называемое **разностной схемой**:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(u_j^n, t^n, x_j). \quad (2.14)$$

В записанной разностной схеме (2.14) аппроксимация второй производной функции  $u$  по координате рассматривается на  $n$ -ом шаге по времени, то есть относительно точки  $t^n$ , для которой рассматривается аппроксимация всего уравнения. Такая разностная схема называется **явной**.

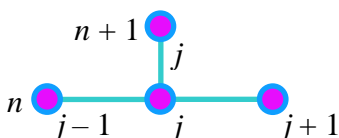
Однако аппроксимацию второй производной функции  $u$  по координате можно рассматривать и на  $(n+1)$ -ом шаге по времени, в точке  $t^{n+1}$ ; такая разностная схема называется **неявной**:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(u_j^{n+1}, t^n, x_j). \quad (2.15)$$

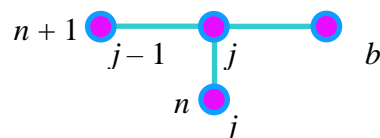
Отметим, что если в состав свободного члена входит сама функция  $u$ , то её значение должно соответствовать  $n$ -му шагу по времени при составлении явной разностной схемы и  $(n+1)$ -му шагу по времени при составлении неявной разностной схемы. Значение же переменной  $t$ , входящей в состав свободного члена, всегда берётся на  $n$ -ом шаге.

Схематическое изображение узлов разностной сетки, связанных уравнением разностной схемы, называют **разностным шаблоном**. Разностный шаблон может служить хорошим ориентиром при выборе метода решения разностной схемы и составлении алгоритма решения. Разностные шаблоны для разностных схем (2.14) и (2.15) имеют вид:

для явной разностной схемы



для неявной разностной схемы





В дальнейшем мы неоднократно будем сопоставлять возможности и методы решения явных и неявных разностных схем для дифференциальных уравнений различного типа.

### 3. Аппроксимация дифференциальных уравнений

#### 3.3. Порядок аппроксимации разностной схемы

Мы ввели понятие разностной схемы путём составления её из отдельных разностных операторов. Напомним, что каждый разностный оператор имеет определённый порядок аппроксимации, характеризующий точность аппроксимации. Следовательно, разностная схема также будет иметь порядок аппроксимации, причём по каждой независимой переменной отдельно.

Определим порядок аппроксимации явной разностной схемы (2.14). Для этого запишем разложение значений  $u_j^{n+1}$ ,  $u_{j+1}^n$ ,  $u_{j-1}^n$  в ряд Тейлора относительно точки  $(t^n, x_j)$  на разностной сетке:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_j^n (\Delta t)^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \Big|_j^n (\Delta t)^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} \Big|_j^n (\Delta t)^4 + \dots, \quad (2.16)$$

$$u_{j+1}^n = u_j^n + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_j^n h + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n h^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_j^n h^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_j^n h^4 + \dots, \quad (2.17)$$

$$u_{j-1}^n = u_j^n - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_j^n h + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n h^2 - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_j^n h^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_j^n h^4 - \dots \quad (2.18)$$

Подставляя зависимости (2.16)-(2.18) в разностную схему (2.14), получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_j^n \Delta t + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \Big|_j^n (\Delta t)^2 &= \sigma \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_j^n h^2 \right) + f(u_j^n, t^n, x_j) \\ \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n + O(\Delta t) &= \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n + O(h^2) + f(u_j^n, t^n, x_j). \end{aligned}$$

Таким образом, явная разностная схема (2.14) аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение (2.13) с первым порядком по времени и со вторым порядком по координате, что записывается в следующем виде:

$$O(\Delta t) + O(h^2) \quad \text{или} \quad O(\Delta t, h^2).$$

Легко видеть, что и неявная разностная схема (2.15) имеет тот же порядок аппроксимации.

### 3. Аппроксимация дифференциальных уравнений

#### 3.4. Аппроксимация начальных и граничных условий

Для решения дифференциальных уравнений численными методами требуются начальные и граничные условия. Рассмотрим, как эти условия следует представлять в разностном виде.

1. Для подавляющего большинства задач начальное условие имеет вид:

$$u(t=0, x) = \xi(x).$$

Левая часть данного выражения соответствует нижнему ряду точек на разностной сетке, поэтому с учётом введённой ранее нумерации точек начальное условие в разностном виде записывается следующим образом:

$$u_j^0 = \xi(x_j),$$

причём значение  $x_j$  вычисляется согласно правилу:

$$x_1 = a, \quad x_2 = a + h, \quad x_3 = a + 2h, \quad \dots, \quad x_j = a + (j-1)h.$$

Отметим, что если  $a = 0$ , то

$$x_1 = 0, \quad x_2 = h, \quad x_3 = 2h, \quad \dots, \quad x_j = (j-1)h. \quad (2.19)$$

2. Граничные условия 1-го рода имеют вид:

$$u(t, x=a) = \varphi_1(t), \quad u(t, x=b) = \varphi_2(t).$$

Левая часть левого граничного условия соответствует крайнему слева ряду точек на разностной сетке; левая часть правого граничного условия – крайнему справа ряду точек. Поэтому с учётом введённой ранее нумерации точек граничные условия 1-го рода в разностном виде записываются следующим образом:

$$u_1^n = \varphi_1(t^n), \quad u_N^n = \varphi_2(t^n), \quad (2.20)$$

причём значение  $t^n$  вычисляется согласно правилу:

$$t^0 = 0, \quad t^1 = \Delta t, \quad t^2 = 2\Delta t, \quad \dots, \quad t^n = n \cdot \Delta t. \quad (2.21)$$

3. Граничные условия 2-го рода имеют вид:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x=a) = \varphi_1(t), \quad \frac{\partial u}{\partial x}(t, x=b) = \varphi_2(t).$$

Левая часть левого граничного условия в некоторой точке  $t^n$  аппроксимируется крайней слева конечной разностью на разностной сетке; левая часть правого граничного условия – крайней справа конечной разностью. Поэтому с учётом введённой ранее нумерации точек граничные условия 2-го рода в разностном виде записываются следующим образом:

$$\frac{u_2^n - u_1^n}{h} = \varphi_1(t^n), \quad \frac{u_N^n - u_{N-1}^n}{h} = \varphi_2(t^n). \quad (2.22)$$

4. Граничные условия 3-го рода в общем виде записываются следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x=a) = \varphi_1(t) u(t, x=a) + \psi_1(t), \quad \frac{\partial u}{\partial x}(t, x=b) = \varphi_2(t) u(t, x=b) + \psi_2(t).$$

Левая часть левого граничного условия в некоторой точке  $t^n$  аппроксимируется крайней слева конечной разностью на разностной сетке, а выражение в правой части соответствует

крайней слева точке; левая часть правого граничного условия аппроксимируется крайней справа конечной разностью, а выражение в правой части соответствует крайней справа точке. Поэтому граничные условия 3-го рода в разностном виде записываются следующим образом:

$$\frac{u_2^n - u_1^n}{h} = \varphi_1(t^n) u_1^n + \psi_1(t^n), \quad \frac{u_N^n - u_{N-1}^n}{h} = \varphi_2(t^n) u_N^n + \psi_2(t^n). \quad (2.23)$$

## Задания для самоконтроля

1. Математическая модель трубчатого реактора с продольным перемешиванием в нестационарном режиме имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - k c^2,$$

где  $k$  – константа скорости химической реакции;  $c$  – концентрация исходного реагента;  $v$  – линейная скорость потока;  $x$  – координата по длине реактора;  $D$  – коэффициент диффузии.

Выберите правильное решение задачи обезразмеривания этого дифференциального уравнения и определения характерных значений линейной скорости потока, коэффициента диффузии и константы скорости химической реакции.

◊ А.  $c' = \frac{c}{c_0}, \quad t' = \frac{t}{t_0}, \quad x' = \frac{x}{x_0}, \quad v' = \frac{v}{v_0}, \quad D' = \frac{D}{D_0}, \quad k' = \frac{k}{k_0};$

$$\frac{c_0}{t_0} \frac{\partial c'}{\partial t'} + v_0 v' \frac{c_0}{x_0} \frac{\partial c'}{\partial x'} = D_0 D' \frac{c_0^2}{x_0^2} \frac{\partial^2 c'}{\partial x'^2} - k_0 k' c_0^2 c'^2;$$

$$\frac{\partial c'}{\partial t'} + v_0 \frac{t_0}{x_0} v' \frac{\partial c'}{\partial x'} = D_0 \frac{t_0 c_0}{x_0^2} D' \frac{\partial^2 c'}{\partial x'^2} - k_0 c_0 t_0 k' c'^2;$$

$$v_0 \frac{t_0}{x_0} = 1 \Rightarrow v_0 = \frac{x_0}{t_0}; \quad k_0 c_0 t_0 = 1 \Rightarrow k_0 = \frac{1}{c_0 t_0};$$

$$D_0 \frac{t_0 c_0}{x_0^2} = 1 \Rightarrow D_0 = \frac{x_0^2}{t_0 c_0} = \frac{x_0 v_0}{c_0}.$$

◊ Б.  $c' = \frac{c}{c_0}, \quad t' = \frac{t}{t_0}, \quad x' = \frac{x}{x_0}, \quad v' = \frac{v}{v_0}, \quad D' = \frac{D}{D_0}, \quad k' = \frac{k}{k_0};$

$$\frac{c_0}{t_0} \frac{\partial c'}{\partial t'} + v_0 v' \frac{c_0}{x_0} \frac{\partial c'}{\partial x'} = D_0 D' \frac{c_0^2}{x_0^2} \frac{\partial^2 c'}{\partial x'^2} - k_0 k' c_0^2 c'^2;$$

$$\frac{\partial c'}{\partial t'} + v_0 \frac{t_0}{x_0} v' \frac{\partial c'}{\partial x'} = D_0 \frac{t_0}{x_0^2} D' \frac{\partial^2 c'}{\partial x'^2} - k_0 t_0 k' c'^2;$$

$$v_0 \frac{t_0}{x_0} = 1 \Rightarrow v_0 = \frac{x_0}{t_0}; \quad k_0 t_0 = 1 \Rightarrow k_0 = \frac{1}{t_0};$$

$$D_0 \frac{t_0}{x_0^2} = 1 \Rightarrow D_0 = \frac{x_0^2}{t_0} = x_0 v_0.$$

$$\diamondsuit \text{ B.} \quad c' = \frac{c}{c_0}, \quad t' = \frac{t}{t_0}, \quad x' = \frac{x}{x_0}, \quad v' = \frac{v}{v_0}, \quad D' = \frac{D}{D_0}, \quad k' = \frac{k}{k_0};$$

$$\frac{c_0}{t_0} \frac{\partial c'}{\partial t'} + v_0 v' \frac{c_0}{x_0} \frac{\partial c'}{\partial x'} = D_0 D' \frac{c_0}{x_0^2} \frac{\partial^2 c'}{\partial x'^2} - k_0 k' c_0^2 c'^2;$$

$$\frac{\partial c'}{\partial t'} + v_0 \frac{t_0}{x_0} v' \frac{\partial c'}{\partial x'} = D_0 \frac{t_0}{x_0^2} D' \frac{\partial^2 c'}{\partial x'^2} - k_0 c_0 t_0 k' c'^2;$$

$$v_0 \frac{t_0}{x_0} = 1 \quad \Rightarrow \quad v_0 = \frac{x_0}{t_0}; \quad k_0 c_0 t_0 = 1 \quad \Rightarrow \quad k_0 = \frac{1}{c_0 t_0};$$

$$D_0 \frac{t_0}{x_0^2} = 1 \quad \Rightarrow \quad D_0 = \frac{x_0^2}{t_0} = x_0 v_0.$$

$$\diamondsuit \text{ } \Gamma. \quad c' = \frac{c}{c_0}, \quad t' = \frac{t}{t_0}, \quad x' = \frac{x}{x_0}, \quad v' = \frac{v}{v_0}, \quad D' = \frac{D}{D_0}, \quad k' = \frac{k}{k_0};$$

$$\frac{c_0}{t_0} \frac{\partial c'}{\partial t'} + v_0 v' \frac{c_0}{x_0} \frac{\partial c'}{\partial x'} = D_0 D' \frac{c_0}{x_0^2} \frac{\partial^2 c'}{\partial x'^2} - k_0 k' c_0^2 c'^2;$$

$$v_0 \frac{c_0}{x_0} = 1 \quad \Rightarrow \quad v_0 = \frac{x_0}{c_0}; \quad k_0 c_0^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad k_0 = \frac{1}{c_0^2};$$

$$D_0 \frac{c_0}{x_0^2} = 1 \quad \Rightarrow \quad D_0 = \frac{x_0^2}{c_0}.$$

2. Выберите правильное решение задачи определения порядка аппроксимации левой конечной разности, аппроксимирующей производную функции  $u$  в точке  $x_j$ :

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_j} \rightarrow \lambda_x^- u = \frac{u_j - u_{j-1}}{h}.$$

◊ А.  $u_{j-1} = u_j - u'_j h + u''_j \frac{h^2}{2} - u'''_j \frac{h^3}{3} + u^{IV}_j \frac{h^4}{4} - \dots$

$$\lambda_x^- u = u'_j - u''_j \frac{h}{2} + u'''_j \frac{h^2}{3} - u^{IV}_j \frac{h^3}{4} = u'_j + O(h)$$

◊ Б.  $u_{j-1} = u_j - u'_j h + u''_j \frac{h^2}{2!} - u'''_j \frac{h^3}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^4}{4!} - \dots$

$$\lambda_x^- u = u'_j - u''_j \frac{h}{2!} + u'''_j \frac{h^2}{3!} - u^{IV}_j \frac{h^3}{4!} = u'_j + O(h)$$

◊ В.  $u_{j-1} = u_j - u'_j h + u''_j \frac{h^2}{2!} - u'''_j \frac{h^3}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^4}{4!} - \dots$

$$\lambda_x^- u = u'_j - u''_j \frac{h}{2!} + u'''_j \frac{h^2}{3!} - u^{IV}_j \frac{h^3}{4!} = u'_j + O(h^3)$$

◊ Г.  $u_{j-1} = u_j - u'_j h + u''_j \frac{h^2}{2!} - u'''_j \frac{h^3}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^4}{4!} - \dots$

$$\lambda_x^- u = u'_j + u'''_j \frac{h^2}{3!} = u'_j + O(h^2)$$

3. Выберите правильное решение задачи определения порядка аппроксимации разностного оператора (2.8), аппроксимирующего производную функции  $u$  в точке  $x_j$ , при  $\sigma = 1/3$ :

$$\lambda_x^\sigma u = \sigma \frac{u_{j+1} - u_j}{h} + (1 - \sigma) \frac{u_j - u_{j-1}}{h}.$$

◊ А.  $\lambda_x^{1/3} u = u'_j + u'''_j \frac{h^2}{6} = u'_j + O(h^2).$

◊ Б.  $\lambda_x^{1/3} u = u'_j - u''_j \frac{h}{2!} + u'''_j \frac{h^2}{3!} - u^{IV}_j \frac{h^3}{4!} = u'_j + O(h).$

◊ В.  $\lambda_x^{1/3} u = u'_j - u^{IV}_j \frac{h^3}{72} = u'_j + O(h^3).$

◊ Г.  $\lambda_x^{1/3} u = u'_j - u''_j \frac{h}{6} + u'''_j \frac{h^2}{6} - u^{IV}_j \frac{h^3}{72} = u'_j + O(h).$

4. Выберите из представленных ниже разностных соотношений то, которое является явной разностной схемой, аппроксимирующей дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 5 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + x; \quad u = u(t, x); x \in [0; 1].$$

◊ А.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 5 \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} + h(j-1)$	◊ Г.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 5 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + n \cdot \Delta t$
◊ Б.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} = 5 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + n \cdot \Delta t$	◊ Д.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 5 \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2}$
◊ В.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 5 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + nh$	◊ Е.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 5 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + h(j-1)$



5. Выберите из представленных ниже разностных соотношений то, которое является неявной разностной схемой, аппроксимирующей дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 3t; \quad u = u(t, x); x \in [0; 1].$$

$\diamond$ А.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 2 \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - 3n \cdot \Delta t$	$\diamond$ Г.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 2 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} - 3h(j-1)$
$\diamond$ Б.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} = 2 \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2}$	$\diamond$ Д.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 2 \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - 3n \cdot \Delta t$
$\diamond$ В.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 2 \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} - 3n \cdot \Delta t$	$\diamond$ Е.	$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = 2 \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - 3h(j-1)$

6. Математическая модель трубчатого реактора с продольным перемешиванием в нестационарном режиме имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - k c.$$

Выберите правильное решение задачи определения порядка аппроксимации явной разностной схемы, записанной для этого дифференциального уравнения:

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} + v \frac{c_j^n - c_{j-1}^n}{h} = D \frac{c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n}{h^2} - k c_j^n.$$

$$\begin{aligned} \diamond \text{ А. } \quad & \frac{\partial c}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \Big|_j^n \Delta t + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} \Big|_j^n (\Delta t)^2 + v \left( \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j^n - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n h + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} \Big|_j^n h^2 \right) = \\ & = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 c}{\partial x^4} \Big|_j^n h^2 \right) - k c_j^n; \end{aligned}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} \Big|_j^n + O(\Delta t) + v \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j^n + O(h) = \sigma \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n + O(h^2) - k c_j^n \quad \Rightarrow \quad O(\Delta t, h).$$

$$\begin{aligned} \diamond \text{ Б. } \quad & \frac{\partial c}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \Big|_j^n \Delta t + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} \Big|_j^n (\Delta t)^2 + v \left( \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j^n - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n h + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} \Big|_j^n h^2 \right) = \\ & = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 c}{\partial x^4} \Big|_j^n h^2 \right) - k c_j^n; \end{aligned}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} \Big|_j^n + O(\Delta t) + v \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j^n + O(h) = \sigma \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n + O(h^2) - k c_j^n \quad \Rightarrow \quad O(\Delta t, h^2).$$

$$\begin{aligned} \diamond \text{ В. } \quad & \frac{\partial c}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \Big|_j^n \Delta t + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} \Big|_j^n (\Delta t)^2 + v \left( \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j^n - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n h + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} \Big|_j^n h^2 \right) = \\ & = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 c}{\partial x^4} \Big|_j^n h^2 \right) - k c_j^n; \end{aligned}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} \Big|_j^n + O(\Delta t) + v \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j^n + O(h) = \sigma \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n + O(h) - k c_j^n \quad \Rightarrow \quad O(\Delta t, h).$$

$$\begin{aligned} \diamond \text{ Г. } \quad & \frac{\partial c}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \Big|_j^n \Delta t + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} \Big|_j^n (\Delta t)^2 + v \left( \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j^n - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n h + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} \Big|_j^n h^2 \right) = \\ & = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 c}{\partial x^4} \Big|_j^n h^2 \right) - k c_j^n; \end{aligned}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} \Big|_j^n + O(\Delta t^2) + v \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_j^n + O(h^2) = \sigma \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j^n + O(h^2) - k c_j^n \quad \Rightarrow \quad O(\Delta t^2, h^2).$$

7. Математическая модель трубчатого реактора в нестационарном режиме имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{dc}{dx} = -kc.$$

Определите порядок аппроксимации разностной схемы, записанной для этого дифференциального уравнения:

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} + v \frac{c_{j+1}^n - c_{j-1}^n}{2h} = -kc_j^n.$$

◊ А.	$O(h^2)$	◊ Г.	$O(\Delta t^2, h)$
◊ Б.	$O(\Delta t)$	◊ Д.	$O(\Delta t, h^2)$
◊ В.	$O(\Delta t, h)$	◊ Е.	$O(\Delta t^2, h^2)$

8. Для уравнения теплового баланса трубчатого реактора с продольным перемешиванием заданы смешанные граничные условия:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x=0) = \alpha \{T(t, x=0) - T_{cp}\}, \quad \frac{\partial T}{\partial x}(t, x=l) = t.$$

Выберите из представленных ниже разностных соотношений те, которые аппроксимируют данные граничные условия:

◊ А.  $\frac{T_2^n - T_1^n}{h} = n \cdot \Delta t, \quad \frac{T_N^n - T_{N-1}^n}{h} = \alpha(T_N^n - T_{cp}).$

◊ Б.  $\frac{T_2^n - T_1^n}{h} = \alpha(T_2^n - T_{cp}), \quad \frac{T_N^n - T_{N-1}^n}{h} = n \cdot \Delta t.$

◊ В.  $\frac{T_2^n - T_1^n}{h} = \alpha(T_1^n - T_{cp}), \quad \frac{T_N^n - T_{N-1}^n}{h} = n \cdot \Delta t.$

◊ Г.  $\frac{T_2^n - T_1^n}{h} = \alpha(T_1^n - T_{cp}), \quad \frac{T_N^n - T_{N-1}^n}{h} = (n+1) \cdot \Delta t.$