План лекции № 1

Предмет курса

1. Предисловие
2. Типы дифференциальных уравнений, изучаемых в курсе
3. Классификация дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка
4. Начальные и граничные условия
5. Классификация граничных условий
6. Примеры математических моделей, содержащих обыкновенные дифференциальные уравнения 1-го и 2-го порядков
7. Примеры математических моделей, содержащих дифференциальные уравнения в частных производных
8. Математическая модель процесса массовой кристаллизации из растворов – пример системы интегро-дифференциальных уравнений
9. Задания для самоконтроля

1. Предисловие

Настоящее учебное пособие основано на материалах специального курса "**Алгоритмизация расчётов химико-технологических процессов**", читаемого студентам факультета кибернетики химико-технологических процессов Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева. В данном курсе изучаются методы численного решения дифференциальных уравнений на основе разностных схем.

Подавляющее большинство математических моделей физико-химических и химико-технологических систем включают в себя дифференциальные уравнения, описывающие изменение важных параметров изучаемой системы (температуры, давления, концентрации и т.д.) во времени и пространстве. При решении задач математического моделирования очень часто требуется уметь решать эти уравнения. При этом лишь в единичных, наиболее простых случаях дифференциальные уравнения удаётся решить аналитически. Как правило, математические модели включают в себя сложные дифференциальные уравнения или их системы, не поддающиеся аналитическому решению. В этом случае пользуются численными методами решения дифференциальных уравнений, позволяющими найти численные значения искомого параметра при определённых значениях переменных (времени, координат).

Цель настоящего пособия – помочь читателю овладеть численными методами решения дифференциальных уравнений различного типа и их систем, научиться правильно составлять разностные схемы, проверять их сходимость к истинному решению, определять ошибку аппроксимации.

Для ознакомления с материалом излагаемого курса помимо данного электронного учебного пособия также рекомендуется следующие книги:

1. *Годунов С.К., Рябенький В.С.* Введение в теорию разностных схем.
2. *Годунов С.К., Рябенький В.С.* Разностные схемы.
3. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем.
4. *Яненко Н.Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики.
5. *Яненко Н.Н.* Введение в разностные методы математической физики. Ч. 1, 2.
6. *Марчук Г.И.* Методы вычислительной математики.

2. Типы дифференциальных уравнений, изучаемых в курсе

Для того чтобы правильно выбрать метод численного решения дифференциального уравнения, сначала необходимо определить, к какому типу оно относится. Принадлежность дифференциальных уравнений к тому или иному типу обычно определяют по двум критериям: наибольшему порядку производной и количеству независимых переменных (*см. таблицу*).

<table>
<tr><th colspan="2" rowspan="2">по количеству
независимых переменных</th><th colspan="2">по наибольшему порядку производной</th></tr>
<tr><th>1-го порядка</th><th>2-го порядка</th></tr>
<tr><td rowspan="2">обыкновенные дифференциальные уравнения (искомая функция зависит от одной переменной – времени или координаты)</td><td>$u = f(t)$</td><td>$\frac{du}{dt} = f(t, u)$</td><td></td></tr>
<tr><td>$u = f(x)$</td><td>$\frac{du}{dx} = f(x, u)$</td><td>$\frac{d^2u}{dx^2} = f(x, u, u')$</td></tr>
<tr><td rowspan="3">дифференциальные уравнения в частных производных (искомая функция может зависеть от двух и более переменных)</td><td>$u = f(t, x)$</td><td>$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = f(t, x, u)$</td><td>$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(t, x, u, u'_x)$</td></tr>
<tr><td>$u = f(x, y)$</td><td>$\frac{\partial u}{\partial x} + a\frac{\partial u}{\partial y} = f(x, y, u)$</td><td>$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y, u, u'_x, u'_y)$</td></tr>
<tr><td>$u = f(t, x, y, z)$</td><td>$\frac{\partial u}{\partial t} + a_x\frac{\partial u}{\partial x} + a_y\frac{\partial u}{\partial y} +$
$+ a_z\frac{\partial u}{\partial z} = f(t, x, y, z, u)$</td><td>$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma_x\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma_y\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \sigma_z\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} +$
$+ f(t, x, y, z, u, u'_x, u'_y, u'_z)$</td></tr>
</table>

При составлении таблицы были использованы обозначения, которые также будут применяться далее в ходе всего курса: u – искомая функция (концентрация, температура и т.д.); t – время (независимая переменная); x, y, z – пространственные координаты (независимые переменные); u'_i – частная производная функции u по i-й независимой переменной; a, σ – константы.

Если функция u зависит от одной пространственной координаты, то соответствующее дифференциальное уравнение называют **одномерным**, если от двух – **двумерным**, если от трёх – **трёхмерным**. Двумерные и трёхмерные дифференциальные уравнения также называют **многомерными**.

Дифференциальные уравнения 3-го и более высоких порядков в настоящем курсе не рассматриваются.

3. Классификация дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка

Дифференциальные уравнения в частных производных 2-го порядка не имеют единого метода численного решения. Поэтому следует рассмотреть их классификацию, позволяющую использовать единые методы для численного решения каждого из подтипов этих уравнений.

Общий вид дифференциального уравнения 2-го порядка в частных производных при условии, что искомая функция зависит от двух переменных, можно представить следующим образом:

$$a_{11}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2a_{12}\frac{\partial^2 u}{\partial x\,\partial y}+a_{22}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=f(x,y,u,u'_x,u'_y).$$

В зависимости от знака величины

$$D=a_{12}^2-a_{11}a_{22} \qquad (1.1)$$

дифференциальные уравнения в частных производных 2-го порядка относят к уравнениям:

при D > 0 – **гиперболического** типа,

при D < 0 – **эллиптического** типа,

при D = 0 – **параболического** типа.

Принадлежность многомерных дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка к тому или иному типу определяют, руководствуясь следующими правилами.

1. Если в уравнении присутствуют производные 2-го порядка по всем независимым переменным и знаки перед ними одинаковые – то данное уравнение относят к уравнениям **эллиптического** типа, например:

$$\sigma_x\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\sigma_y\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\sigma_z\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}=f(t,x,y,z,u,u'_x,u'_y,u'_z).$$

2. Если в уравнении отсутствует производная 2-го порядка хотя бы по одной из независимых переменных – то данное уравнение относят к уравнениям **параболического** типа, например:

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\sigma_x\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\sigma_y\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\sigma_z\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+f(t,x,y,z,u,u'_x,u'_y,u'_z).$$

4. Начальные и граничные условия

Для решения дифференциальных уравнений численными методами требуются дополнительные условия. Если искомая функция (концентрация, температура и т.д.) является функцией времени $u = f(t)$, то требуются **начальные условия**, характеризующие значение этой функции в момент времени, принятый за начальный:

$$u(t = 0) = u^0.$$

Если искомая функция также является функцией пространственных координат $u = f(t, x)$, то начальные условия характеризуют её распределение в пространстве в начальный момент времени:

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

В последнем случае помимо начальных условий, требуются ещё и **граничные** условия, характеризующие значение функции u на границе изучаемой системы с внешней средой для любого момента времени. Причём если искомая функция является функцией нескольких пространственных координат, то необходимо задавать граничные условия по каждой из них. Количество граничных условий по каждой пространственной координате определяется порядком старшей производной функции u по этой координате в дифференциальном уравнении. Например, для решения многомерного уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a_x \frac{\partial u}{\partial x} + a_y \frac{\partial u}{\partial y} = \sigma_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f(t, x, y, z, u)$$

требуются: начальное условие,

2 граничных условия по координате x,

1 граничное условие по координате y,

2 граничных условия по координате z.

5. Классификация граничных условий

В различных физико-химических задачах граничные условия могут быть представлены в разном виде. Рассмотрим классификацию граничных условий на примере уравнения теплового баланса трубчатого реактора с продольным перемешиванием:

$$\rho C_T \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \upsilon \frac{\partial T}{\partial x} \right] = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Delta H\, w,$$

где w – скорость реакции; ΔH – тепловой эффект реакции; C_T, ρ, T – теплоёмкость, плотность и температура смеси в реакторе; v – линейная скорость потока; λ – коэффициент теплопроводности; x – координата по длине реактора.

Начальные условия для данного уравнения характеризуют распределение температуры по длине реактора в начальный момент времени:

$$T(t=0, x) = T^0(x).$$

1) **Граничные условия 1-го рода** определяют температуры на границах реактора для любого момента времени:

$$T(t, x=0) = \varphi_1(t), \qquad T(t, x=l) = \varphi_2(t).$$

2) **Граничные условия 2-го рода** задают изменение температуры на границах реактора для любого момента времени:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x=0) = \varphi_1(t), \qquad \frac{\partial T}{\partial x}(t, x=l) = \varphi_2(t).$$

3) **Граничные условия 3-го рода** определяют закон свободного теплообмена с окружающей средой на границах реактора для любого момента времени:

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

4) **Смешанные граничные условия**, если при постановке задачи используются граничные условия разных родов, например:

$$T(t, x=0) = \varphi_1(t), \qquad \frac{\partial T}{\partial x}(t,\, x=l) = \alpha \left\{ T(t,\, x=l) - T_{cp} \right\}.$$

Здесь α – коэффициент теплоотдачи; l – длина реактора; T_{cp} – температура окружающей среды.

6. Примеры математических моделей, содержащих обыкновенные дифференциальные уравнения 1-го и 2-го порядков

Рассмотрим примеры математических моделей химических реакторов, в которых протекает простая необратимая реакция типа

$$n\mathrm{X} \to \mathrm{P}.$$

Скорость такой реакции определяется по формуле:

$$w = kc^n,$$

где k – константа скорости химической реакции; c – концентрация вещества X.

1. Математическая модель проточного реактора идеального смешения включает балансы по концентрации компонента X и температуре:

$$V\frac{dc}{dt} = \upsilon_q(c_0 - c) - wV, \quad V\rho C_T\frac{dT}{dt} = \upsilon_q(\rho_0 C_{T0} T_0 - \rho C_T T) + \Delta H\, wV,$$

где ν_q – объёмный расход поступающего раствора; ΔH – тепловой эффект реакции; V – рабочий объём реактора; C_T, ρ, T – теплоёмкость, плотность и температура смеси в реакторе; индекс (0) означает значение параметра на входе в реактор.

Таким образом, математическая модель состоит из двух обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го порядка, которые необходимо дополнить начальными условиями (задача Коши):

$$c(t=0) = c^0, \qquad T(t=0) = T^0.$$

2. Математическая модель трубчатого реактора (идеального вытеснения) в стационарном режиме имеет вид:

$$v\frac{dc}{dx} = -w, \qquad v\rho C_T\frac{dT}{dx} = \Delta H\, w,$$

где v – линейная скорость потока; x – координата по длине реактора.

Данная математическая модель также состоит из двух обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го порядка, которые необходимо дополнить граничными условиями:

$$c(x=0) = c_0, \quad T(x=0) = T_0.$$

3. Математическая модель трубчатого реактора с продольным перемешиванием в стационарном режиме имеет вид:

$$\upsilon\frac{dc}{dx} = D_L\frac{d^2c}{dx^2} - w, \quad \upsilon\rho C_T\frac{dT}{dx} = \lambda\frac{d^2T}{dx^2} + \Delta H\, w,$$

где D_L, λ – коэффициенты диффузии и теплопроводности.

Данная математическая модель состоит из двух обыкновенных дифференциальных уравнений 2-го порядка, которые необходимо дополнить граничными условиями:

$$\begin{cases} c(x=0) = c_0 \\ c(x=l) = c_l \end{cases} \qquad \begin{cases} T(x=0) = T_0 \\ T(x=l) = T_l \end{cases}$$

Здесь l – длина реактора.

7. Примеры математических моделей, содержащих дифференциальные уравнения в частных производных

Рассмотрим ещё несколько примеров математических моделей химических реакторов, в которых протекает простая необратимая реакция типа

$$n\mathrm{X} \to \mathrm{P}.$$

4. Математическая модель (баланс по концентрации компонента X) трубчатого реактора в нестационарном режиме имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x} = -w,$$

причём концентрация компонента X является функцией двух переменных:

$$c = c(t,\, x).$$

Данное уравнение необходимо дополнить начальным и граничным условиями:

$$c(t=0,\, x) = c^0(x), \qquad c(t,\, x=0) = \varphi(t).$$

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

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

причём концентрация компонента X является функцией двух переменных:

$$c = c(t,\, x).$$

Определим тип данного уравнения с помощью выражения (1.1):

$$a_{11} = D_L, \quad a_{22} = 0, \quad a_{12} = 0 \quad \Rightarrow \quad D = 0 - D_L \cdot 0 = 0.$$

Следовательно, данное уравнение является уравнением параболического типа. Его необходимо дополнить начальным и двумя граничными условиями:

$$c(t=0,\, x) = c^0(x), \qquad c(t,\, x=0) = \varphi_1(t), \qquad c(t,\, x=l) = \varphi_2(t).$$

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

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x} = D_L\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_R\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D_R}{r}\frac{\partial c}{\partial r} - w,$$

где r – координата по радиусу реактора; D_L, D_R – коэффициенты диффузии в продольном и поперечном направлениях.

Данное уравнение является многомерным, поскольку концентрация компонента X – функция трёх переменных:

$$c = c(t,\, x,\, r).$$

Так как отсутствует производная 2-го порядка по времени, данное уравнение является уравнением параболического типа. Его необходимо дополнить начальным и граничными условиями:

$$c(t=0,\, x,\, r) = c^0(x,\, r) \qquad \begin{cases} c(t,\, x=0,\, r) = \varphi_1(t,\, r) \\ c(t,\, x=l,\, r) = \varphi_2(t,\, r) \end{cases} \qquad \begin{cases} c(t,\, x,\, r=0) = \psi_1(t,\, x) \\ c(t,\, x,\, r=R) = \psi_2(t,\, x) \end{cases}$$

Здесь R – радиус реактора.

7. Математическая модель трубчатого реактора с продольным и поперечным перемешиванием в стационарном режиме имеет вид:

$$v\frac{\partial c}{\partial x} = D_L\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_R\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D_R}{r}\frac{\partial c}{\partial r} - w.$$

Концентрация компонента X в данном случае – функция двух переменных:

$$c = c(x, r).$$

Определим тип данного уравнения с помощью выражения (1.1):

$$a_{11} = D_L, \quad a_{22} = D_R, \quad a_{12} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad D = 0 - D_L \cdot D_R < 0.$$

Следовательно, данное уравнение является уравнением эллиптического типа. Его необходимо дополнить граничными условиями:

$$\begin{cases} c(t, x = 0, r) = \varphi_1(t, r) \\ c(t, x = l, r) = \varphi_2(t, r) \end{cases} \qquad \begin{cases} c(t, x, r = 0) = \psi_1(t, x) \\ c(t, x, r = R) = \psi_2(t, x) \end{cases}$$

8. Математическая модель процесса массовой кристаллизации из растворов – пример системы интегро-дифференциальных уравнений

Математические модели некоторых физико-химических процессов помимо дифференциальных уравнений содержат ещё и интегро-дифференциальные уравнения. Примером может служить математическая модель процесса массовой кристаллизации из растворов:

$$\frac{dc}{dt} = -\int_0^R \rho_2^0 \, f \, \eta \, dr, \qquad \rho C_T \frac{dT}{dt} = \Delta H \int_o^R \rho_2^0 \, f \, \eta \, dr + K F (T - T_x), \qquad \frac{\partial f}{\partial t} + \eta \frac{\partial f}{d r} = 0,$$

где c – концентрация кристаллизующегося компонента; ρ_2^0 – плотность кристалла; η – скорость роста кристалла; $f(r)\,dr$ – число кристаллов в единице объёма смеси с размером от r до $r + dr$; R – наибольший размер кристалла; C_T, ρ, T – теплоёмкость, плотность и температура смеси в кристаллизаторе; ΔH – тепловой эффект процесса; K – коэффициент теплопередачи; F – поверхность кристаллизатора; T_x – температура хладагента.

Первые два уравнения системы (*концентрационный и тепловой балансы*) являются интегро-дифференциальными уравнениями, а третье (*уравнение баланса числа частиц*) – дифференциальным уравнением в частных производных 1-го порядка.

Для этой системы требуются следующие начальные и граничные условия:

$$c(t=0) = c^0, \qquad T(t=0) = T^0, \qquad f(t=0, r) = f^0(l), \qquad f(t, r = r_0) = \varphi(t),$$

где r_0 – размер зародыша.

Задания для самоконтроля

1. Выберите правильное решение задачи определения типа уравнения:

$$7\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+5\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial u}{\partial x}+3\frac{\partial u}{\partial y}=0; \qquad u=f(x,\,y).$$

<> А. $a_{11}=7,\quad a_{22}=5,\quad a_{12}=3 \quad\Rightarrow\quad D=3^2-7\cdot 5=-26 \quad\Rightarrow$ эллиптический тип

<> Б. $a_{11}=7,\quad a_{22}=0,\quad a_{12}=5 \quad\Rightarrow\quad D=5^2-7\cdot 0=25 \quad\Rightarrow$ гиперболический тип

<> В. $a_{11}=7,\quad a_{22}=5,\quad a_{12}=0 \quad\Rightarrow\quad D=0^2-7\cdot 5=-35 \quad\Rightarrow$ эллиптический тип

<> Г. $a_{11}=0,\quad a_{22}=5,\quad a_{12}=0 \quad\Rightarrow\quad D=0^2-5\cdot 0=0 \quad\Rightarrow$ параболический тип

2. Определите тип уравнений, если $u = f\,(x, y)$:

I. $6\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 3\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \dfrac{\partial u}{\partial x} + 7u = 0$

II. $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial u}{\partial y} = 3y$

III. $2\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0{,}5\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} - u + 8\dfrac{x}{y} = 0$

IV. $-11\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} + 9\dfrac{\partial u}{\partial x} = 7u - 2y$

V. $4\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -6\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} + 3\dfrac{\partial u}{\partial x} - 7y$

3. Определите тип уравнений, если $u = f\,(t, x, y)$:

I. $3\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} + 8\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \dfrac{\partial u}{\partial x} + 11\dfrac{\partial u}{\partial t} = 7u + 5t$

II. $3\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 4\dfrac{\partial u}{\partial x} + 7\dfrac{\partial u}{\partial y}$

III. $\dfrac{\partial u}{\partial t} = 2\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 10\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} + e^{3xy}$

4. Определите, какое количество начальных и граничных условий требуется для следующих уравнений (в первое окошко введите количество требуемых начальных условий, во второе – количество граничных условий по координате x, в третье – по координате y):

	по t	по x	по y
I. $3\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}+8\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\dfrac{\partial u}{\partial x}+11\dfrac{\partial u}{\partial t}=7u+5t$	< >	< >	< >
II. $3\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}-\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}=4\dfrac{\partial u}{\partial x}+7\dfrac{\partial u}{\partial y}$	< >	< >	< >
III. $\dfrac{\partial u}{\partial t}=7\dfrac{\partial u}{\partial x}-3\dfrac{\partial u}{\partial y}+xy$	< >	< >	< >
IV. $\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}=8\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}-3\dfrac{\partial u}{\partial x}-11\dfrac{\partial u}{\partial y}+7t$	< >	< >	< >
V. $\dfrac{\partial u}{\partial t}=2\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+10\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}+e^{3xy}$	< >	< >	< >

5. Определите тип граничных условий для уравнения:

$$\rho C_T\left[\frac{\partial T}{\partial t}+v\frac{\partial T}{\partial x}\right]=\lambda_L\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\Delta H\,w, \qquad T(t=0,\,x)=T^0(x).$$

I. $T(t,\,x=0)=20,$

$\dfrac{\partial T}{\partial x}(t,\,x=l)=0{,}5;$

II. $\dfrac{\partial T}{\partial x}(t,\,x=0)=\alpha\left\{T(t,\,x=0)-T_{cp}\right\},$

$\dfrac{\partial T}{\partial x}(t,\,x=l)=0{,}2t.$