Численные методы решения систем дифференциальных уравнений

Задачи, в которых необходимо решить систему из нескольких дифференциальных уравнений с несколькими искомыми функциями, очень распространены в предметной области химической технологии.

Будем рассматривать системы, в которых число неизвестных функций совпадает с числом уравнений, разрешенных относительно производных.

К примеру, система из двух уравнений с двумя неизвестными функциями y и z от одного и того же аргумента x имеет вид:

$$\begin{cases} y' = f_1\left(x, y, z\right) \\ z' = f_2\left(x, y, z\right) \end{cases} \tag{1}$$

при этом штрих означает производную по x.

Численные методы решения систем дифференциальных уравнений

Общий вид системы из n уравнений с n неизвестными функциями $x_1, x_2, \ldots, x_n$ от переменной t имеет вид:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1}{dt} = f_1\left(t, x_1, x_2, \ldots, x_n\right) \\ \dfrac{dx_2}{dt} = f_2\left(t, x_1, x_2, \ldots, x_n\right) \\ \quad \ldots \\ \dfrac{dx_n}{dt} = f_n\left(t, x_1, x_2, \ldots, x_n\right) \end{cases} \tag{2}$$

Ранее мы рассмотрели численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений вида $y' = f(x, y)$ (методы Эйлера и Рунге-Кутты). Данные методы применяются и в случае решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Метод Эйлера

Пусть дана следующая система обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{dy_1}{dx} = f_1\left(x, y_1, y_2\right) \\ \dfrac{dy_2}{dx} = f_2\left(x, y_1, y_2\right) \end{cases} \tag{3}$$

с начальными условиями:

$$\begin{aligned} y_1\big|_{x=x_0} &= y_{01} \\ y_2\big|_{x=x_0} &= y_{02} \end{aligned} \tag{4}$$

При использовании метода Эйлера, расчетные формулы примут следующий вид:

$$\begin{cases} y_{(i),1} = y_{i-1,1} + h \cdot f_1\left(x_{i-1}, y_{(i-1),1}, y_{(i-1),2}\right) \\ y_{(i),2} = y_{i-1,2} + h \cdot f_2\left(x_{i-1}, y_{(i-1),1}, y_{(i-1),2}\right) \\ \quad x_i = x_{i-1} + h \end{cases} \tag{5}$$

где h – шаг интегрирования; $f_1\left(x_i, y_{i,1}, y_{i,2}\right)$ и $f_2\left(x_i, y_{i,1}, y_{i,2}\right)$ – правые части дифференциальных уравнений.

Пример 1

Пусть требуется решить систему дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{cases} \dfrac{dy_1}{dx} = y_2 \\ \dfrac{dy_2}{dx} = e^{-x \cdot y_1} \end{cases}$$

методом Эйлера на отрезке $[0, 1]$ с шагом $h = 0.1$.

Начальные условия: $x_0 = 0$; $y_1(0) = 0$; $y_2(0) = 0$.

Воспользуемся формулой (5) и запишем выражения для $y_{i,1}$ и $y_{i,2}$:

$$\begin{cases} y_{i,1} = y_{(i-1),1} + 0.1 \cdot y_{(i-1),2} \\ y_{i,2} = y_{(i-1),2} + 0.1 \cdot e^{-x_{i-1} \cdot y_{(i-1),1}} \\ \quad x_i = x_{i-1} + h \end{cases}$$

Пример 1

Результаты вычислений сведем в таблице.

i	x_i	$y_{i,1} = y_{(i-1),1} + 0.1 \cdot y_{(i-1),2}$	$y_{i,2} = y_{(i-1),2} + 0.1 \cdot e^{-x_{i-1} \cdot y_{(i-1),1}}$
0	0.0	0.0000	0.0000
1	0.1	0.0000	0.1000
2	0.2	0.0100	0.2000
3	0.3	0.0300	0.2998
4	0.4	0.0600	0.3989
5	0.5	0.0999	0.4965
6	0.6	0.1495	0.5917
7	0.7	0.2087	0.6831
8	0.8	0.2770	0.7695
9	0.9	0.3539	0.8496
10	1.0	0.4389	0.9223

Программная реализация


```python
import numpy as np


def eiler(func, x0, xf, y0, h):
    count = int((xf - x0) / h) + 1
    y = [y0[:]]  # создание массива y с начальными условиями
    x = x0

    for i in range(1, count):
        right_parts = func(x, y[i-1])
        y.append([])  # добавление пустой строки

        for j in range(len(y0)):
            y[i].append(y[i-1][j] + h * right_parts[j])

        x += h

    return y


```

Программная реализация

```python
def equations(x, y):  # Функция, содержащая правые части дифференциальных уравнений
    return [y[1], np.exp(-x * y[0])]


if __name__ == '__main__':
    print(eiler(equations, 0, 1, [0, 0], 0.1))

```

```
[[0, 0],
 [0.0, 0.1],
 [0.010000000000000002, 0.2],
 [0.030000000000000006, 0.29980019986673334],
 [0.05998001998667334, 0.39890423774402173],
 [0.09987044376107551, 0.4965335889709902],
 [0.14952380265817453, 0.591662693505973 2],
 [0.2086900720087718 5, 0.683081928459952 5],
 [0.276998264854767 1, 0.769490522211607 4],
 [0.353947317075927 86, 0.849614212888738 7],
 [0.438908738364801 7, 0.922334296571365 7]]
```

Пример 2

Закон действующих масс

Скорость химической реакции прямо пропорциональна произведению концентраций реагирующих веществ, возведенных в степени, равные их стехиометрическим коэффициентам.

Схема химической реакции:

$$n_1A_1 + n_2A_2 + n_3A_3 \xrightarrow{k} B$$

Скорость данной реакции:

$$r = k \cdot [A_1]^{n_1} \cdot [A_2]^{n_2} \cdot [A_3]^{n_3}$$

Изменение концентрации каждого компонента во времени:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_{A_1}}{\partial t} = -n_1 \cdot r \\ \dfrac{\partial C_{A_2}}{\partial t} = -n_2 \cdot r \\ \dfrac{\partial C_{A_3}}{\partial t} = -n_3 \cdot r \\ \dfrac{\partial C_B}{\partial t} = r \end{cases}$$

где k – константа скорости химической реакции; C_{A_1}, C_{A_2}, C_{A_3}, C_B – концентрации веществ (моль/л), участвующих в химической реакции, n_1, n_2, n_3 – стехиометрические коэффициенты в уравнении реакции.

Пример 2

Пусть дана схема химических реакций:

$$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B$$

Скорость прямой реакции: $r_1 = k_1 \cdot C_A$; скорость обратной реакции: $r_2 = k_2 \cdot C_B$. Константы скоростей реакций: $k_1 = 0.85$; $k_2 = 0.1$, C_A и C_B – концентрации компонентов A и B. Изменение концентрации реагирующих веществ во времени описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_A}{\partial t} = -r_1 + r_2 \\ \dfrac{\partial C_B}{\partial t} = r_1 - r_2 \end{cases}$$

Необходимо определить изменение концентрации каждого компонента по времени методом Эйлера на отрезке $[0, 1]$ с шагом $h = 0.1$. Начальные условия: $C_A(0) = 1$ (моль/л); $C_B(0) = 0$ (моль/л). Воспользуемся формулой (5) и запишем выражения для $C_{A,i}$ и $C_{B,i}$:

$$\begin{cases} C_{A,i} = C_{A,(i-1)} + 0.1 \cdot \left(-k_1 \cdot C_{A,(i-1)} + k_2 \cdot C_{B,(i-1)}\right) \\ C_{B,i} = C_{B,(i-1)} + 0.1 \cdot \left(k_1 \cdot C_{A,(i-1)} - k_2 \cdot C_{B,(i-1)}\right) \\ \quad t_i = t_{i-1} + h \end{cases}$$