Лекція 19.
Рівняння в частинних похідних

З математики й фізики відомі випадки аналітичного опису систем з розподіленими параметрами рівняннями в частинних похідних. Ними є рівняння дифузії, тепломасопереносу й інших. Розглянемо варіанти їхньої імітації на комп'ютері.

Ще раз нагадаємо, що системи з розподіленими параметрами - це системи, у яких значення деякого досліджуваного параметра змінюється не тільки в часі, але й у просторі (одне-, двох- або багатомірному), міняючись від крапки до крапки простору за якимсь законом. Прикладом такого параметра може служити енергія, концентрація речовини, напруженість поля й інші фізичні величини. Незмінним досліджуваний параметр може вважатися тільки в нескінченно малій області простору. Тому систему з розподіленими параметрами часто представляють як систему з упорядкованого в просторі множини елементів, усередині яких (у кожній крапці окремого взятого елемента) описуваний параметр однаковий, а в різних елементів різний. Елементи системи утворять просторову структуру.

Як приклад приведемо проект для вивчення теплопровідності стіни будинку. На мал. 19.1 представлена реалізація такої системи в середовищі «Stratum-2000». Схема зібрана з елементів (іміджей). Елементи двомірної системи імітують цегли, з яких складена стіна. На мал. 19.1 видні цегли, зроблені з різного матеріалу (що позначено жовтими, блакитними, червоним квітами) і покладені в певному порядку, що, на думку автора схеми, поліпшує теплоізоляцію приміщення. Сірі й зелені елементи на краях стіни задають крайові умови, імітуючи навколишнє середовище. Поруч показано для приклада, як елементи в такій системі зв'язані один з одним. По зв'язках сусідні елементи в процесі розрахунку обмінюються інформацією між собою про температуру. Помітимо, що в даному проекті, що має вигляд конструктора, користувач схеми може міняти параметри елементів системи, умови, конструкцію стіни, порядок укладання (топологію), що при рішенні задачі аналітичними методами вкрай важко й вимагає застосування методів моделювання.

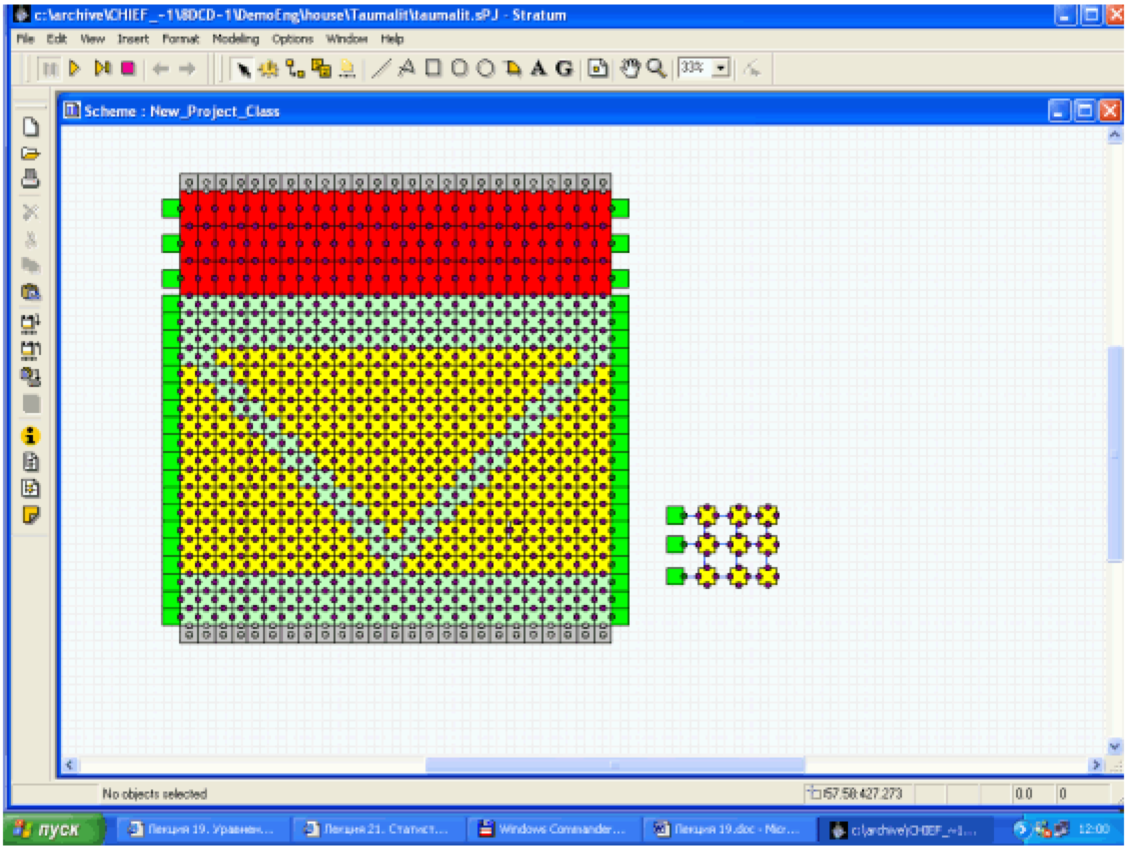

Рис. 19.1. Двомірна система з розподіленими параметрами
для дослідження властивостей теплопровідності стіни будинку

Існують типові рівняння, що описують окремі властивості систем з розподіленими параметрами. Розглянемо їх.

Рівняння дифузії

Рівняння дифузії описує поширення (розтікання) згодом по протяжному тілу деякої субстанції, наприклад, тепла або концентрації. В одномірному випадку тіло представляється протяжним уздовж осі x.

На мал. 19.2 показаний приклад розподілу уздовж осі x такого параметра як температура T. Зі звичайного досвіду добре відомо, що в кожен момент часу t температура T на різних ділянках тіла x має різні значення, тобто міняється залежно від ділянки й часу. Тобто повинен існувати закон, по якому змінюється величина цього параметра T як функції від (x, t). Для температури цей закон найчастіше задається рівнянням дифузії.

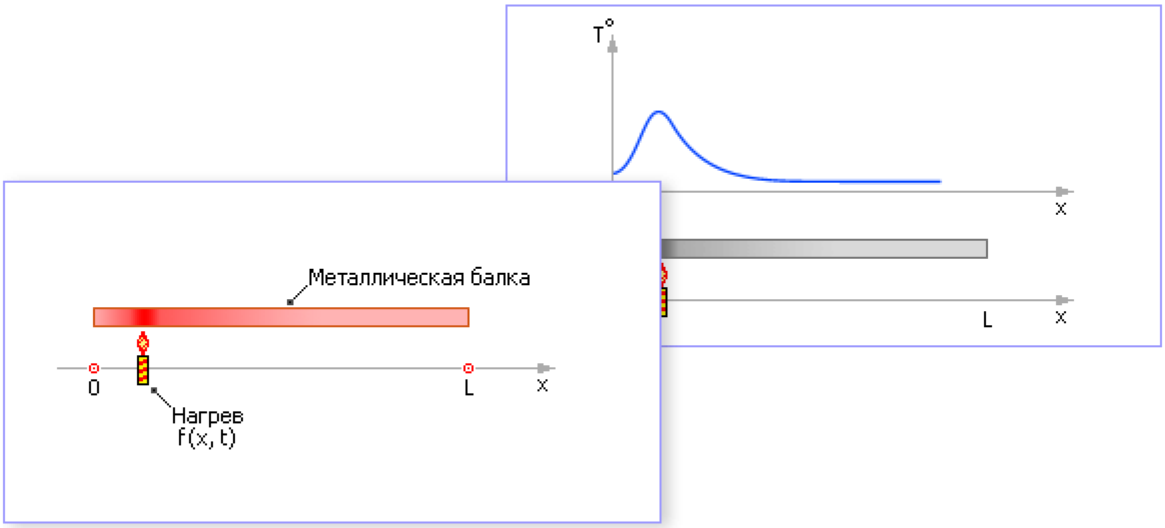

Рис. 19.2. Приклад застосування рівняння дифузії
до опису процесу нагрівання протяжного одномірного тіла

Якщо змінюваний параметр (у загальному випадку) позначити як y, час, протягом якого відслідковуються зміни параметра, позначити як t, а вісь, уздовж якого відбуваються зміни параметра, як x, то рівняння дифузії має вигляд:

і звичайно доповнюється умовами — значеннями змінної y на краях і границях: на лівому краї $x = 0$, на правому краї $x = L$, на границі — початкові умови ($t = 0$):

$y(x, 0) = f_1(x)$,
$y(0, t) = f_2(t)$,
$y(L, t) = f_3(t)$,
де $f_1(x)$, $f_2(t)$ і $f_3(t)$ — задані функції.

На мал. 19.3 представлений схематично вид області, для якої визначені граничні й початкові умови. Функції $f_1(x)$, $f_2(t)$, $f_3(t)$ і саме рівняння дифузії визначають поводження функції $y(x, t)$ усередині цієї області, чий повний вид звичайно треба визначити. Якщо на схемі додатково побудувати вісь y (див. мал. 19.4), то візуально на малюнку можна відобразити й сам вид функцій. На малюнку чітко видно, що в кутах схеми значення заданих функцій повинне збігатися.

Рис. 19.3. Схема завдання початкових і крайових умов
для систем з розподіленими параметрами в осях x, t (приклад)

Рис. 19.4. Схема завдання початкових і крайових умов
для систем з розподіленими параметрами в осях x, t, y (приклад)

Коефіцієнт α має сенс коефіцієнта теплопровідності; $f(x, t)$ має сенс функції, що описує роботу джерел і стоків тепла.

Величина y, що описує розподіл температури, є функцією двох змінних — довжини тіла x і часу t: $y(x, t)$. Графічно функція представляється поверхнею (див. мал. 19.5) або набором ізоліній (див. мал. 19.6), вид яких звичайно потрібно визначити.

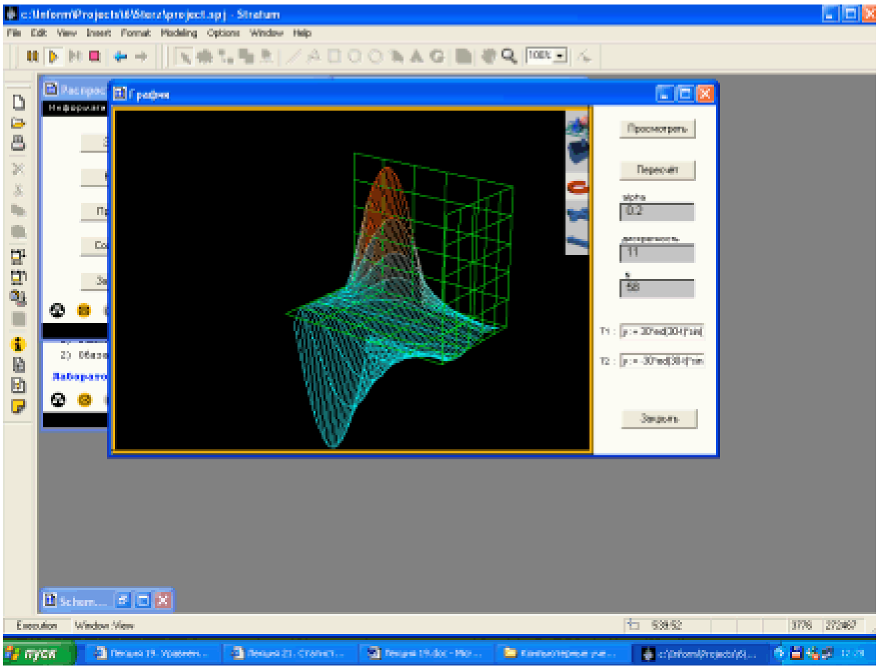

Рис. 19.5. Розрахунок поширення тепла в одномірному стрижні згодом

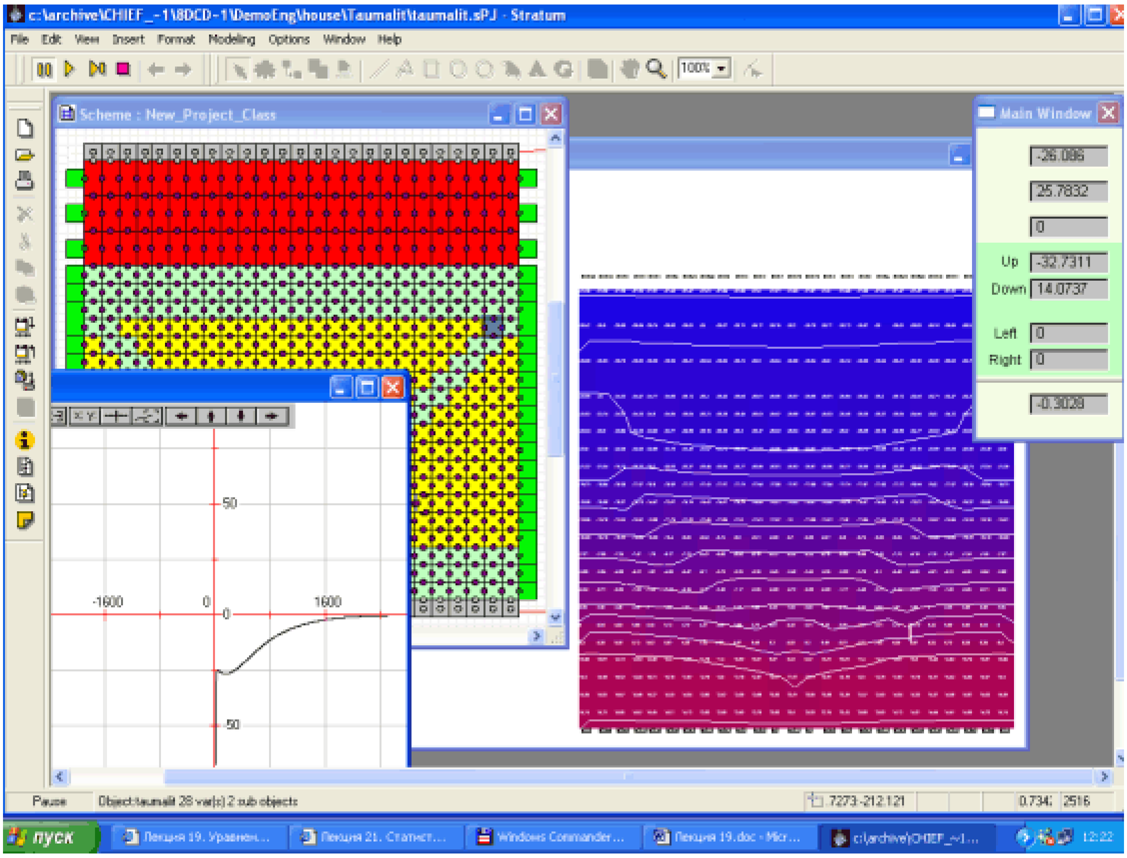

Рис. 19.6. Поширення тепла по елементах двомірної системи (розрахунок статичної задачі, представленої на мал. 19.1). В окремому вікні видна оцінка точності розрахунку залежно від кількості ітерацій

Якщо замінити вираження похідних їхнім дискретним аналогом, то в різницевому виді рівняння буде виглядати так:

$$\frac{y(x,t)-y(x,t-\Delta t)}{\Delta t}=\alpha\cdot\frac{y(x+\Delta x,t-\Delta t)-2y(x,t-\Delta t)+y(x-\Delta x,t-\Delta t)}{\Delta x^2}+f(x,t-\Delta t)$$

або, виражаючи невідоме через відомі величини:

$$y(x,t)=\frac{\Delta t\cdot\alpha}{\Delta x^2}y(x-\Delta x,t-\Delta t)+(1-\frac{2\Delta t\cdot\alpha}{\Delta x^2})\cdot y(x,t-\Delta t)+\frac{\Delta t\cdot\alpha}{\Delta x^2}y(x+\Delta x,t-\Delta t)+\Delta t\cdot f(x,t-\Delta t)$$

або

$$y(x,t)=a\cdot y(x-\Delta x,t-\Delta t)+b\cdot y(x,t-\Delta t)+c\cdot y(x+\Delta x,t-\Delta t)+f(x,t-\Delta t)\cdot\Delta t$$

У результаті отримана розрахункова формула, реалізована на цифровій обчислювальній машині. Завдяки цій формулі можна розрахувати значення параметра y у будь-якій крапці (x, t).

Назвемо значення $y(x, t)$ вузлом розрахунку. Тоді схематично розрахунок виглядає як сітка вузлів на поле, складеному із частин тіла й відрізків часу (див. мал. 19.7). Сама формула розрахунку одного вузла залежить від стану трьох вузлів (лівого $y(x-\Delta x, t-\Delta t)$, правого $y(x+\Delta x, t-\Delta t)$, власного $y(x, t-\Delta t)$) у попередній $(t-\Delta t)$ момент часу й нагадує трикутний шаблон. До початку розрахунку відомі стани всіх вузлів для $t = 0$. Застосовуючи формулу послідовно до всіх вузлів для наступного моменту часу, можна визначити температуру у всіх вузлах наступного тимчасового шару $(t + \Delta t)$. Крім самого лівого й самого правого вузлів - їхній стан обчислений бути не може, але воно задано крайовими умовами.

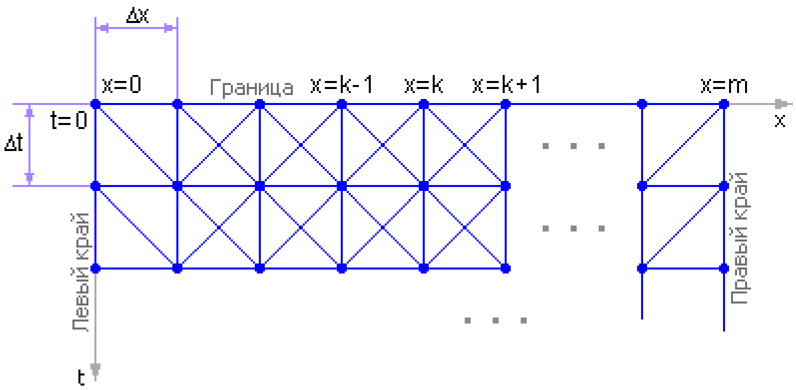

Рис. 19.7. Схема розрахунку одномірної динамічної системи з розподіленими параметрами методом кінцевих різниць з використанням явного шаблона

Якщо процедуру повторювати, переходячи від однієї крапки тіла x до інший, і далі від одного тимчасового шару до іншого, то по даній формулі можна обчислити значення температури в будь-якій частині тіла в будь-який момент часу. Таким чином, розрахунком покривається все поле **(L x T)** (див. мал. 19.7). Послідовне визначення невідомих значень у цьому випадку можливо, тому що шаблон має вигляд явного вираження - єдине невідоме у формулі виражено через раніше обчислені значення.

Помітимо, що при більших значеннях похідних і більших значеннях кроків розрахунок може дати невірні рішення. Рішення можуть виявитися неточними або навіть нестійкими (якісно невірними) (див. лекцію 10).

Умова стійкості для трикутного шаблона при рішенні рівняння дифузії: $\Delta x/\Delta t > \alpha$ (см. докладніше мал. 19.12).

При моделюванні можливе застосування інших різницевих формул (шаблонів) (див. мал. 19.8). При виборі шаблона необхідно приймати в увагу: явний чи шаблон ні, яку він забезпечує точність і при яких значеннях кроків він забезпечує стійкість розрахунку. Так, наприклад, шаблон у вигляді прямокутника — неявний: в одній розрахунковій формулі втримується відразу дві невідомі величини. Тому при використанні такого шаблона необхідно вирішувати систему алгебраїчних рівнянь розміром **(L · T)**.

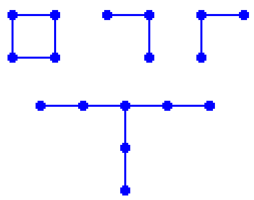

Рис. 19.8. Схеми типових шаблонів
для рішення рівнянь
із розподіленими параметрами

На практиці стійкості, а далі — точності домагаються одержанням рішень із використанням різних шаблонів і різних значень кроку. Якщо значення шуканої змінної, обчислені із кроком h і із кроком $h/2$, відрізняються у вузлах з однаковими індексами не більше ніж на 1—5%, то обчислене значення приймають за наближене рішення задачі. Інакше зменшують крок ще у два рази, і процедуру оцінки повторюють.

Властивості рівняння дифузії відбиті на мал. 19.9 і полягають у тім, що при виникненні неоднорідності в якийсь із частин тіла згодом тепло за рахунок процесів теплообміну перетікає в сусідні області. Температури сусідніх областей вирівнюються, усредняются. Темп процесу залежить від величини коефіцієнта теплопровідності.

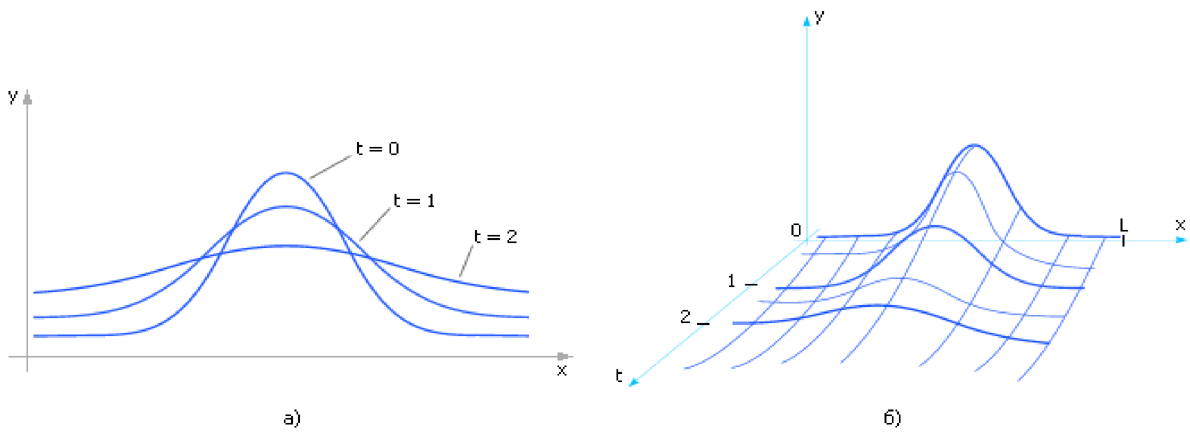

Рис. 19.9. Характерний вид рішення рівняння дифузії. На малюнку відбита зміна розподілу параметра y уздовж осі x у часі. а) — у двох осях; б) — у трьох осях

Якщо прийняти умову, що задача стаціонарна, тобто процеси протікають так довго, що всі перехідні процеси встигли закінчитися (похідна за часом дорівнює 0), те рівняння дифузії здобуває наступний вид (для випадку двомірного простору — осі x й z) без джерел і стоків:

$$?^2y/\partial x^2 + \partial^2y/\partial z^2 = 0.$$

У різницевому виді рівняння має вигляд:

$$(Y_{i+1,j} - 2 \cdot Y_{i,j} + Y_{i-1,j})/\Delta x^2 + (Y_{i,j-1} - 2 \cdot Y_{i,j} + Y_{i,j+1})/\Delta z^2 = 0.$$

Якщо прийняти $\Delta x = \Delta z$, те рівняння прийме вид:

$$4 \cdot Y_{i,j} - Y_{i+1,j} - Y_{i-1,j} - Y_{i,j-1} - Y_{i,j+1} = 0.$$

Легко зрозуміти, що шаблон розрахунку рівняння неявний і має вигляд хреста (щоб розрахувати значення температури у вузлі сітки, треба знати температури його сусідів ліворуч, праворуч, зверху й знизу). Якщо стіна будинку має розміри 2 метри на 2 метри, а крок $\Delta x = \Delta z = 20$ мм, те всього для розрахунку температурного режиму стіни прийде вирішувати систему з 10 000 лінійних рівнянь с 10 000 невідомих $Y_{i,j}$:

$$4 \cdot Y_{i,j} - Y_{i+1,j} - Y_{i-1,j} - Y_{i,j-1} - Y_{i,j+1} = 0, \text{ для } i = 1ч100 \text{ й } j = 1ч100,$$

до яких варто приєднати 400 штук крайових умов:
$Y_{0,j} = f_1(j)$;
$Y_{101,j} = f_2(j)$;
$Y_{i,0} = f_3(i)$;
$Y_{i,101} = f_4(i)$.

Вид рішення рівняння показаний на мал. 19.6.

Рівняння тепломасопереносу

У ряді фізичних процесів маса речовини або енергія рухаються усередині уявлюваної системи, переміщаючись із одних її частин в інші. Такі процеси описуються рівнянням тепломасопереносу . Для одномірного випадку це рівняння має такий вигляд: $\partial\rho/\partial t + \partial q/\partial x = B$, де $\rho(x, t)$ — густина речовини або енергії; $q(x, t)$ — потік речовини або енергії; $B(x, t)$ — функція джерел і стоків. $\rho(x, t)$, $q(x, t)$, $B(x, t)$ — функції розподілу відповідних змінних у просторі x і часу t.

Розіб'ємо потік уздовж осі x на елементарні осередки, взаємодіючі один з одним. Кожен осередок характеризується щільністю ρ речовини, що перебуває в ній, і потоком речовини q через її границі (ліву й праву). Осередку пронумеруємо індексом i. Осередок прийнято називати елементарним об'ємом.

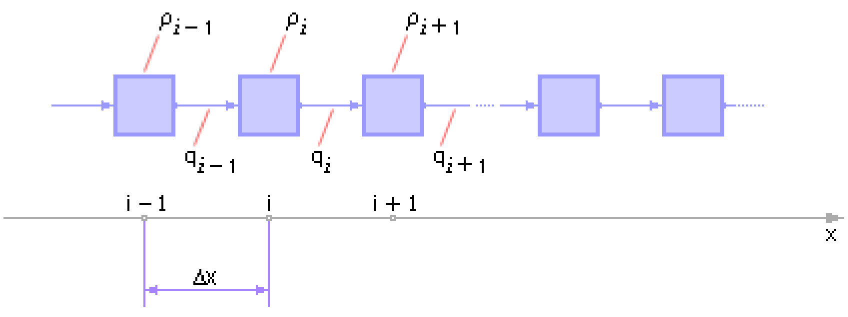

Рис. 19.10. Схема рівняння теплопровідності (приклад)

У різницевому виді (після підстановки виражень чисельного обчислення похідних) рівняння теплопровідності буде мати вигляд:

$$\rho(x,t+\Delta t)=\rho(x,t)+\frac{\Delta t}{\Delta x}\cdot(q(x+\Delta x,t)-q(x,t)+b(x,t))$$

Рівняння й відповідна йому схема на мал. 19.10 показує, скільки речовини додасться в елементарному об'ємі $\partial\rho/\partial t$ за час Δt, якщо через ліву границю цієї ділянки x за цей час перетікає $q(x)\cdot\Delta t$ часток речовини, і якщо через праву границю цієї ділянки $(x+\Delta x)$ за цей же час перетікає $q\cdot(x+\Delta x)\cdot\Delta t$ часток речовини, і на ділянці є джерело або стік речовини величиною b.

Залежно від розв'язуваної задачі рівняння може бути доповнено. Функція $b(x, t)$ звичайно задана. Якщо потрібно визначити закон руху речовини $q(x, t)$, щоб забезпечити задане користувачем розподіл речовини по осі x згодом $\rho(x, t)$, те для такого розрахунку досить одного рівняння.

Есчи заданий закон руху речовини $q(x, t)$ і потрібно визначити, де в результаті цих рухів, коли й скільки буде речовини $\rho(x, t)$, те також досить одного рівняння.

Але часто потрібно визначити одночасно й $\rho(x, t)$ і $q(x, t)$ при заданих початкових умовах, тобто питання полягає в тому, як швидко $q(x, t)$ і скільки $\rho(x, t)$ речовини виявиться в певних крапках x. Тоді одного рівняння для розрахунку двох невідомих недостатньо. І основне рівняння повинне бути доповнене допоміжними вираженнями, що вказують, як зв'язані між собою $\rho(x, t)$, $q(x, t)$. Таке вираження повинне вказувати, як швидко рухається речовина, якщо задано його кількість. У виробництві й техніку ми називаємо таке вираження регулятором: **як зв'язана кількість деталей ρ, що зберігаються на ділянці x, з бажаною швидкістю обробки таких деталей q.**

В залежності від того, з якою речовиною ми маємо справу, можуть існувати різні вираження додаткового зв'язку (додаткові рівняння) між потоком q і щільністю ρ. Наприклад, для рідини, де *всі* частки рухаються *одночасно*: $q=\rho\cdot v$, де v — швидкість переміщення часток у потоці. Або більше складне рівняння руху, що зв'язує швидкість руху потоку $v(x, t)$ із причиною цих рухів, силою F:

$$\partial v/\partial t + v\cdot\partial v/\partial x = F/\rho.$$

У свою чергу, сила F може бути викликана до дії перепадом тиску P: $F=\partial P/\partial x$.

Легко побачити в даному рівнянні в якості його основи другий закон Ньютона, що зв'язує прискорення $\partial v/\partial t$ і силу F через масу ρ. Додатковий доданок $v\cdot\partial v/\partial x$ з'являється остільки, оскільки при русі з'являється приплив речовини через границі x й $(x+\Delta x)$ елементарної ділянки, що несе за собою імпульс $v\cdot\partial v/\partial x\cdot\rho$.

У різницевому виді при $q=\rho\cdot v$ рівняння переносу буде мати вигляд:

$$\rho(x,t+\Delta t)=\rho(x,t)+\frac{v\cdot\Delta t}{\Delta x}\cdot(\rho(x+\Delta x,t)-\rho(x,t)+b(x,t))$$

Розрахунок рівняння виробляється аналогічно рівнянню дифузії.

Властивості рівняння переносу полягають у переміщенні неоднородностей у потоці згодом уздовж просторової осі. Швидкість переміщення пов'язана з величинами v або q. На мал. 19.11 показаний вид одного з можливих варіантів рішення рівняння тепломасопереносу . Видно, що розподіл щільності (неоднорідність) може переміщатися уздовж осі згодом.

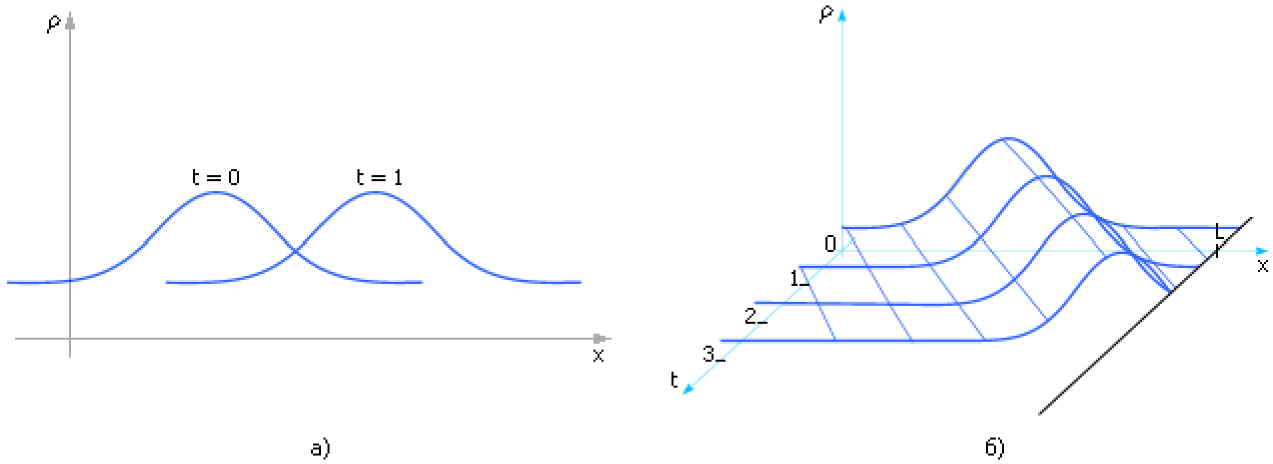

Рис. 19.11. Властивості рівняння тепломасопереносу . а) — у двох осях; б) — у трьох осях

Особлива увага при розрахунку рівняння варто обертати на його стійкість. Стійкість пов'язана з видом обраного різницевого шаблона і його параметрів: кроком по *t*, кроком по *x*, а також швидкістю (потоком) переміщення маси (див. мал. 19.12). Чим більше крок, тим більше ризик одержання нестійких (якісно невірних) рішень. Але чим менше кроки, тим повільніше відбувається комп'ютерний розрахунок усього поля, тому що об'єм обчислень зростає значно.

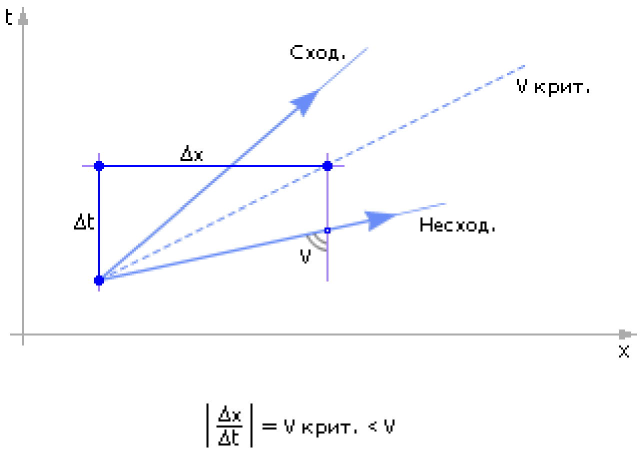

Рис. 19.12. Співвідношення параметрів розрахунку для одержання стійкого рішення

У реальних системах звичайно присутні як дифузійні властивості, так і властивості рівняння переносу, руху. Тому ефекти переносу й дифузії змішуються, і картини в результаті розрахунку виходять досить складні, залежні від крайових і початкових умов і співвідношення коефіцієнтів рівнянь, як показано, наприклад, на мал. 19.13.

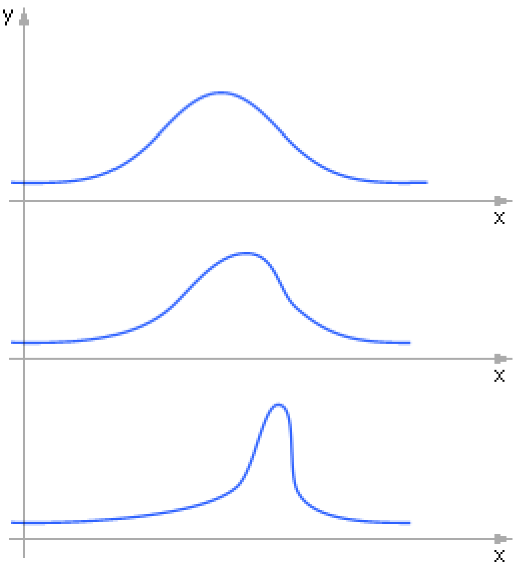

Рис. 19.13. Вид можливих рішень рівняння тепломасопереносу з елементами дифузії. На малюнку видно прояв декількох властивостей одночасно

До розподілених систем ставляться виробничі системи (див. лекцію 31. «Моделювання виробничих процесів і систем»).

Однієї із самих складних задач, розглянутих у класі систем з розподіленими параметрами, є прогноз погоди. При цьому враховуються температура, тиск, швидкість вітру, вологість, щільність повітря, рельєф місцевості. Всі ці величини є функцією трьох просторових координат і часу. Щодня аналізу в центрах прогнозування погоди піддається 10^6 вихідних даних, не вважаючи фотографій. Розрахунок виробляється два рази в на добу: в 00 годин й в 12 годин за Гринвічем. Обмін вимірювальною інформацією між метеостанціями різних країн іде в рамках Всесвітнього метеорологічного суспільства, куди входить і Україна. У середньому для розрахунку одного прогнозу враховується інформація від 4 000 приземних джерел (включаючи 800 морських) і 650 аероджерел. Мережа приладів, що вимірюють, покриває земна куля нерівномірно й це ускладнює розрахунки.

Неважко оцінити в середньому крок розрахункової сітки. При радіусі Землі $R = 6\,400$ км площа Північної півкулі дорівнює: $S = 260\,000\,000$ км^2. Таким чином, на одну аэростанцию падає $S/650 = 400\,000$ км^2 або квадрат зі стороною, рівної відстані від Москви до Петербурга. На одну наземну станцію падає квадрат зі стороною 300 км. Такий крок сітки розрахунку веде до величезних труднощів при боротьбі за стійкість розрахунку.

Свої проблеми вносить і недостатня точність вихідних даних, що надходить від джерел - погрішність вимірів на море становить звичайно 10%, на суші - 15%.

При розрахунках прогнозу погоди крім описаних рівнянь додатково враховують закони збереження (маси, імпульсу, енергії), властивості речовини (Клаузіса-Клапейрона, Ван-дер Ваальса, фазових переходів, поглинання сонячної енергії, випромінювання й інші). Ураховують також сили ваги, в'язкості, Коріоліса й інших. Розрахунок погоди ведуть звичайно на надпотужних комп'ютерах типу Cray.