

**МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН**

**САМАРКАНДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени Алишера Навои**

МЕХАНИКО – МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА «ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ»

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ
РАБОТА**

**для получения степени бакалавра по направлению образования
«5480100 – Прикладная математика и информатика»**

Аблакулова Жалолиддина
на тему:

**СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕШЕНИЯ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЯ В
ЗАДАЧАХ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Допущено к защите:

Декан факультета:

проф. Солеев А.

Заведующий кафедрой:

доц. Абдирашидов А.

Научный руководитель:

доц. Амридинов С.

Самарканд – 2013

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3-5
§1. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ.....	6-13
§2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ.....	14-26
§3. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАВИСИМОСТИ КОНЦЕНТРАЦИИ.....	27-34
§4. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ПРОФИЛЯ ТЕМПЕРАТУР ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ.....	35-39
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	40-41
ПРИЛОЖЕНИЕ.....	42-49
ЛИТЕРАТУРА.....	50

ВВЕДЕНИЕ

Дифференциальные уравнения, устанавливающие связь между независимыми переменными, неизвестными функциями и их производными, широко используются в химической технологии для описания нестационарных процессов, а также процессов с распределенными параметрами. Аналогично, для определения числа ступеней разделения в процессе периодической ректификации необходимо определить состав кубовой остатка и дистиллата как функции степени отгона. Это можно осуществить путем решения системы дифференциальных уравнений материальной и тепловой балансов.

Дифференциальные уравнения являются основным математическим аппаратом при исследовании динамических свойств объектов, в частности переходных процессов.

Постановка задачи: Изучение методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений и составление оптимального алгоритма приближенного решения обыкновенных дифференциальных уравнений на компьютере и их практическое применение в задачах химии при построения математической модели нестационарных режимов тарельчатой ректификационной колонны и расчёта профиля температур при нестационарной теплопроводности.

Актуальность темы: Развитие науки и техники требует построение оптимальной математической модели и оптимального численного решения поставленной задачи. Методы вычислительной математики применяются во всех областях прогрессивной технологии при наименьших затратах.

На основании вышеизложенного перед выпускником спецификации бакалавра была поставлена задача построения оптимального алгоритма и математической модели приближенного решения обыкновенных дифференциальных уравнений и их применения в химической технологии.

Цели и задачи выпускной квалификационной работы:

Построение математической модели нестационарных процессов и нахождения эффективных приближенных методов, оценки точности применяемых численных методов.

Доказать эффективность составления математических моделей не прибегая к лабораторным исследованиям и сравнить полученные результаты с экспериментальными данными. Разработать рекомендации их использования для решения практических задач.

Методы исследования: В качестве метода исследования на основании сравнительных анализов применены метод Эйлера, Рунге-Кутта с двойным шагом и метод Адамса.

Содержание работы: В данной выпускной квалификационной работе рассматриваются различные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и проводится сравнительный анализ точности этих методов на компьютере. После выбора оптимального метода разрабатывается алгоритм и программа, который применяется для решения задач химии и химической технологии.

Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными.

Научная ценность работы: Данное направление является актуальным, т.е. методы вычислительной математики применяется в химии и химической технологии.

Впервые эти исследования встречаются в работах В. В. Кафарова.

«Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии».

Целью научного исследования является ознакомление химиков-исследователей и химиков-технологов с возможностями современных методов вычислительной математики и вычислительной техники на примерах решения разнообразных задач химии и химической технологии.

Аннотация: В данной выпускной квалификационной работе исследуются численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и методы реализации их на компьютере. В качестве примера рассматриваются практические примеры из области химии и химической технологии.

Полученные результаты сравниваются с данными лабораторных исследований.

§ 1. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ

Дифференциальные уравнения, устанавливающие связь между независимыми переменными, широко используются в химической технологии для описания нестационарных процессов, а также процессов с распределенными параметрами. Например, концентрация реагента, вступающего в реакцию, является функцией времени пребывания, условий ведения процесса, и для того чтобы определить закон ее изменения во времени, необходимо составить дифференциальное уравнение, решение которого и устанавливает необходимую функциональную зависимость. Аналогично, для определения числа ступеней разделения в процессе периодической ректификации необходимо определить состав кубового остатка и дистиллата как функции степени отгона. Это можно осуществить путем решения системы дифференциальных уравнений материального и теплового балансов.

Дифференциальные уравнения являются основным математическим аппаратом при исследовании динамических свойств объектов, в частности переходных процессов.

П р и м е р 1. Математическое описание нестационарных процессов, происходящих в ректификационной колонне, основывается на уравнениях материального и теплового балансов, являющихся количественным выражением закона сохранения. Однако в отличие от анализа статических свойств объекта здесь закон сохранения массы и энергии как равенство входных и выходных потоков не сохраняется. При протекании процесса происходит накопление массы и энергии, т.е.

$$\text{ВХОД} - \text{ВЫХОД} = \text{НАКОПЛЕНИЕ}.$$

Математическое описание динамики ректификационной колонны содержит: уравнения материального и теплового балансов; уравнения, описывающие механизм взаимодействия между паровой и жидкой фазами на отдельных тарелках; уравнения для описания фазового равновесия.

При решении ряда практических задач можно допустить, что мольные потоки пара и жидкости по высоте секций колонны постоянны, тем самым исключить рассмотрение теплового баланса, а также принять постоянство коэффициентов относительной летучести компонентов. Дальнейшим упрощением является принятие концепции теоретической тарелки, т.е. пар, покидающий тарелку, находится в равновесии с жидкостью. Исходя из принятых допущений математическое описание ректификационной колонны представляет систему дифференциальных уравнений, записанных для каждой тарелки, включая куб и дефлегматор.

Для произвольной тарелки дифференциальное уравнение, записанного для компонента j , имеет вид

$$\begin{aligned} L_{i+1}x_{i+1,j} + V_{i-1}Y_{i-1,j} - V_iY_{i,j} - L_ix_{i,j} = \\ = \frac{d(H_{L,i} + H_{V,i})}{dt} (1 \leq i \leq N), \quad (j=1,2,\dots,k), \quad (i \neq f). \end{aligned} \quad (1.1)$$

Уравнения, записанные для куба колонны, дефлегматора и тарелки питания при условии, что питание подается в жидкой фазе, соответственно имеют вид

$$L_1x_{1,j} - V_0Y_{0,j} - Wx_{0,j} = \frac{d(H_{L,0} + H_{V,0})}{dt}, \quad (1.2)$$

$$L_{f+1}x_{f+1,j} + V_{f-1}Y_{f-1,j} - V_fY_{f,j} - L_fx_{f,j} + Fx_{f,j} = \frac{d(H_{L,f} + H_{V,f})}{dt}, \quad (1.3)$$

$$V_NY_{N,j} - L_{N+1}x_{N+1,j} - Dx_{N+1,j} = \frac{d(H_{L,N+1} + H_{V,N+1})}{dt}. \quad (1.4)$$

где H_L - задержка жидкости на тарелке; H_V - задержка пара на тарелке;
 W – количество кубового продукта; D – количество дистиллата;
 L, V, F – количества жидкости, пара и питания соответственно.

Поскольку $H_L \succ H_V$, то задержкой пара на тарелке можно пренебречь без значительной потери точности. Тогда, учитывая, что

$$Y_{i,j} = K_{i,j} x_{i,j} = \frac{\alpha_j}{\sum_{z=1}^R a_z x_{i,j}} x_{i,j}, \quad (1.5)$$

систему уравнений (1.1) – (1.4) можно переписать в виде

$$\begin{pmatrix} \frac{dH_{0,j}}{dt} \\ \frac{dH_{1,j}}{dt} \\ \frac{dH_{2,j}}{dt} \\ \dots \\ \frac{dH_{i,j}}{dt} \\ \dots \\ \frac{dH_{N,j}}{dt} \\ \frac{dH_{N+1,j}}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B & C & 0 & 0 \dots 0 \\ & A & B & C & 0 \dots 0 \\ & 0 & A & B & C \dots 0 \\ & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 \dots A & B & C \dots 0 \\ & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 00 \dots A & B & C \\ 00 \dots 0 & A & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{0,j} \\ x_{1,j} \\ x_{2,j} \\ \dots \\ x_{f,j} \\ \dots \\ x_{N,j} \\ x_{N+1,j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ Fx_{1,j} \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

где $A = V_i K_{i,j}$; $B_i = -(L_i + V_i K_{i,j})$; $C = L_i x_{i,j}$

или
$$dH / dt = A(t) X(t) + F(t). \quad (1.7)$$

Система (1.7) в общем виде неразрешима обычными способами. Для ее решения необходимо воспользоваться приближенными методами.

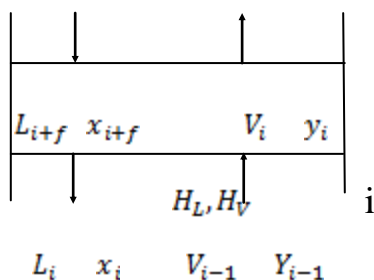


Рис. 1

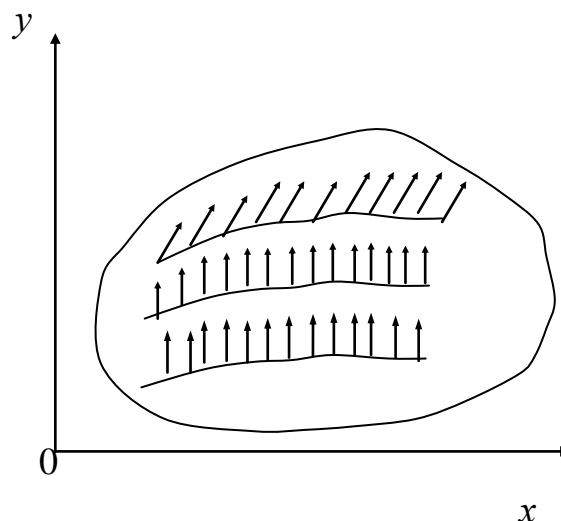


Рис. 2

Решением дифференциального уравнения является некоторая функциональная зависимость, которая в простейших случаях может быть получена аналитически, а в более сложных – численными методами в виде таблицы значений независимой переменной и соответствующих значений функции.

Если неизвестные функции рассматриваются как функции одной независимой переменной, то дифференциальные уравнения называются *обыкновенными*, в противном случае – уравнениями с *частными производными*. Порядок наивысшей производной, входящей в данное уравнение, называется порядком этого уравнения.

Рассмотрим дифференциальное уравнения первого порядка

$$y' = f(x, y). \quad (1.8)$$

Функцию $f(x, y)$ будем рассматривать заданной в некоторой области изменения ее аргументов $a \leq x \leq b$, $c \leq y \leq d$, причем переменные x, y можно

рассматривать как декартовы координаты произвольной точки A области определения G (рис. 2).

Дифференциальное уравнение (1.8) устанавливает в каждой точке A связь между координатами и производной от функции y в этой точке. Таким образом, для любой точки области G по уравнению (1.8) можно вычислить производную т.е. тангенс угла наклона кривой $y = y(x)$. Выбирая достаточно большое число точек в области G и вычисляя в каждой точке угол наклона, можно затем соединить точки, имеющие один и тот же угол наклона, некоторыми кривыми, которые называются изоклинами дифференциального уравнения. Любая функция $y(x)$, у которой в каждой точке области G производная определяет направление, совпадающее с направлением, задаваемым для изоклины, проходящей через эту точку (рис.2, кривая $P_0 P_1 P_2 P_3$), является решением уравнения (1.8). На этом свойстве изоклин основаны некоторые графоаналитические методы интегрирования дифференциальных уравнений. Число кривых решения, направление касательных к которым в каждой точке совпадает с полем направлений изоклин, вообще говоря, бесконечно, что непосредственно следует из рис. 2.

Для того чтобы выбрать из бесконечного числа решений единственное, необходимо зафиксировать некоторую начальную точку, через которую должно проходить решение. Это эквивалентно заданию дополнительного условия, накладываемого на решение дифференциального уравнения и называемого начальным условием.

Наряду с одним дифференциальным уравнением во многих теоретических и практических задачах используются также и системы дифференциальных уравнений. Система обыкновенных дифференциальных уравнений имеет столько уравнений, сколько в нее входит неизвестных функций, причем все неизвестные функции являются функциями одной независимой переменной. Для систем уравнений в частных производных число независимых переменных больше единицы, но число уравнений также

равно числу неизвестных функций. При решении дифференциальных уравнений системы имеют важное значение, поскольку любое уравнение порядка выше первого может быть путем замены переменных преобразовано в систему уравнений первого порядка. Действительно, если имеется уравнение

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}), \quad (1.9)$$

то, полагая $y_1 = y', \quad y_2 = y'', \dots, \quad y_n = y^{(n-1)}$, его можно записать в виде системы уравнений

$$\begin{aligned} y' &= y_1, \\ y_1' &= y_2, \\ &\dots \\ y_{n-2}' &= y_{n-1}, \\ y_{n-1}' &= f(x, y, y_1, y_2, \dots, y_{n-1}) \end{aligned}$$

или, воспользовавшись матричными обозначениями,

$$y' = f(x, y), \quad (1.10)$$

где y' и y - вектор-функции.

Решением уравнения (1.10) будет вектор-функция y , определяющая некоторую линию в $n + 1$ -мерном пространстве, в котором начальное условие изображается как точка.

Методы решения одного дифференциального уравнения первого порядка с начальным условием часто можно распространить и на системы уравнений первого порядка, а следовательно, на уравнения более высокого порядка. Поэтому в дальнейшем будут рассматриваться методы решения применительно только к уравнениям первого порядка.

1. Интегрирование дифференциальных уравнений разложением в ряд Тейлора. Пусть для заданного интервала изменения аргумента требуется вычислить ряд значений функций $y = y(x)$, являющийся решением уравнения (1.8), если известно начальное условие $y_0 = y(x_0)$.

Предположим, что правая часть уравнения (1.8) является аналитической функцией в области определения решения, тогда решение дифференциального уравнения является аналитическим и допускает разложение в ряд Тейлора.

Разложим интегральную кривую уравнения (1.8) в окрестности точки x_k в ряд Тейлора

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + hy'(x_k) + \frac{h^2}{2!} y''(x_k) + \dots + \frac{h^m}{m!} y^{(m)}(x_k) + \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} y^{(m+1)}(\bar{x}), \quad (1.11)$$

где $h = x_{k+1} - x_k$ и $x_k \leq \bar{x} \leq x_{k+1}$; величина h называется обычно шагом интегрирования.

Поскольку производная $y^{(m+1)}$ непрерывная и ограниченная, шаг интегрирования h можно выбрать настолько малым, что последним членом ряда (1.11) можно пренебречь. Поскольку $y_{k+1} = y(x_{k+1})$, выражение (1.11) запишется в виде

$$y_{k+1} = y_k + hy'_k + \frac{h^2}{2!} y''_k + \dots + \frac{h^m}{m!} y^{(m)}_k. \quad (1.12)$$

Выражение (1.12) является основной формулой интегрирования дифференциального уравнения (1.8) путем разложения решения в ряд Тейлора. Полагая в ней последовательно $k = 0, 1, 2, \dots, n$, $n = (b - a)/h$, можно вычислить решение уравнения (1.8) в n точках интервала (a, b) . Очевидно, чем больше членов разложения и чем меньше шаг интегрирования, тем точнее будет получено решение.

Производные, входящие в формулу (1.12), вычисляются непосредственным дифференцированием уравнения (1.8). Поскольку первая производная равна

$$y'_k = f(x_k, y_k), \quad (1.13)$$

То выражение для второй производной может быть получено дифференцированием (1.13) по x :

$$y_k'' = \frac{\partial}{\partial x} f(x_k, y_k) + f(x_k, y_k) \frac{\partial}{\partial y} f(x_k, y_k)$$

или

$$y_k'' = f_x + f f_y, \quad (1.14)$$

где

$$f_x = \frac{\partial}{\partial x} f(x_k, y_k), \quad f_y = \frac{\partial}{\partial y} f(x_k, y_k), \quad f = f(x_k, y_k).$$

Аналогично выражение для третьей производной получается в результате дифференцирования выражения (1.14)

$$y_k''' = f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f f_y^2. \quad (1.15)$$

Если выражения (1.13) – (1.15) подставить в (12-12), то для вычисления y в точке $x = x_{k+1}$ получим

$$y_{k+1} = y_k + h \left(f + \frac{h}{2!} (f_x + f_y f + \frac{h}{6} (f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_y f_x + f f_y^2)) \right) + 0(h^4), \quad (1.16)$$

где $0(h^4)$ - остаточный член ряда, определяемый членами выше третьего порядка малости по h .

Принципиально формула (1.12) может быть использована при интегрировании любого дифференциального уравнения с произвольной наперед заданной точностью, от которой будет зависеть число членов ряда. Однако с увеличением числа членов ряда увеличивается количество подлежащих определению производных, с практической точки зрения весьма трудоемко, поэтому формулы разложения решения в ряд как метод решения дифференциальных уравнений не получили широкого распространения. Обычно вместо разложения используются методы, опирающиеся на

разложение в ряд Тейлора, но позволяющие получить решение без вычисления производных. Метод же отыскания решения с помощью рядов Тейлора главным образом используется как способ оценки точности других формул интегрирования.

§ 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Формула Эйлера. Пусть дано уравнение (1.8), удовлетворяющее начальному условию $y_0 = y(x_0)$, решением которого является функция $y = y(x)$, определенная на интервале (a, b) (рис. 3). Выберем достаточно малый шаг h и построим систему точек

$$x_k = x_0 + kh \quad (k = 1, 2, \dots, n), \quad (x_0 = a), \quad (n = (b - a) / h).$$

Для интегрирования уравнения (1.8) воспользуемся формулой (1.12), ограничившись двумя членами ряда

$$y_{k+1} = y_k + hy'_k = y_k + hf(x_k, y_k). \quad (2.1)$$

Интегрирование по методу Эйлера заключается в последовательном применении формулы (2.1) к уравнению (1.8), начиная с $k=1$. При наличии начального условия $Y|_{x=x_0} = Y_0$ для вычисления y_1 не требуется никакой дополнительной информации: достаточно вычислить правую часть уравнения (1.8) при заданных значениях аргумента x_0 и функции y_0 . Процедура вычисления y_1 аналогична проведению касательной в точке (x_0, y_0) ,

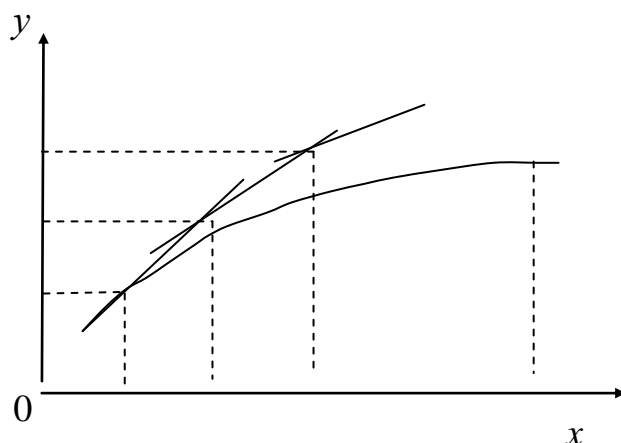


Рис. 3

тангенс угла наклона которой задается правой частью уравнения (1.8) при $x = x_0$ и $y = y_0$, до пересечения с вертикальной прямой, проведенной из точки $x = x_1$.

На следующем шаге, т.е. при вычислении y_2 , снова определяется производная, но только в точке (x_1, y_1) и из точки пересечения прямых $x = x_1$ и $y = y_1$ (точка A_1 на рис. 3) проводится касательная до пересечения с прямой $x = x_2$. Аналогичная процедура вычислений повторяется для y_3, y_4 и т.д.

Таким образом, в результате вычислений определяется некоторая ломаная линия, линейные отрезки которой имеют угол наклона, вычисляемый через производную в соответствующей точке интегральной кривой. Как следует из рис. 3, с ростом k ломаная линия все дальше отходит от истинного решения. Отсюда же из геометрических представлений легко заметить основной недостаток метода Эйлера: если, например, кривая решения выпуклая, то ломанная кривая, вычисляемая на каждом шаге, будет отходить от нее вверх, поскольку для вычисления положения последующей точки используется производная в предыдущей. Очевидно, чем больше кривизна интегральной кривой и шаг интегрирования, тем значительнее это отклонение. Другим неприятным свойством этого метода является также то, что ошибка интегрирования накапливается, т. е. увеличивается с каждым шагом.

При интегрировании по методу Эйлера полагается, что производная по x от x_k до x_{k+1} — постоянная величина, что соответствует кусочно-линейному представлению интегральной кривой на отдельных участках интегрирования. Из формулы (1.12) следует, что для получения решения используется ряд Тейлора с точностью до членов первого порядка малости по h , поэтому ошибка на каждом шаге может быть оценена как

$$e_k = \frac{h^2}{2!} y_k''(x) \quad (x_k \leq x \leq x_{k+1}). \quad (2.2)$$

Несмотря на простоту реализации, метод Эйлера относительно редко применяется при интегрировании дифференциальных уравнений, поскольку не обеспечивает достаточной точности вычислений и очень часто бывает неустойчив из-за накопления ошибок. Устойчивость метода увеличивается при уменьшении шага интегрирования, однако при интегрировании сложных уравнений уменьшение шага приводит к резкому увеличению объема вычислений и, как следствие, - к значительным затратам машинного времени.

Модифицированный метод Эйлера. В отличие от обычного метода Эйлера, когда для вычисления следующей точки интегральной кривой требуется информация только о предыдущей точке, модификация метода заключается в использовании прогноза поведения интегральной кривой в последующих точках. Модифицированный метод основан на усреднении положения концевой точки отрезка, которым заменяется интегральная кривая. Усреднение производится с учетом тангенса угла наклона в некоторой промежуточной точке, например в точке, отстоящей от начальной на половину шага интегрирования. Порядок построения решения в модифицированном методе Эйлера представлен на рис. 4 и заключается в следующем. Проводится касательная A_1 через точку (x_i, y_i) с тангенсом угла наклона $f(x_i, y_i)$ до пересечения с прямой $x = x_i + h/2$ и в точке пересечения вычисляется производная, равная

$$k_i = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} y'_i\right),$$

с учетом которой проводится касательная в этой точке (прямая A_2). Далее из точки (x_i, y_i) проводится прямая A_0 , параллельная A_2 , до пересечения с прямой $x = x_{i+1}$, уравнение которой имеет вид

$$y_{i+1} = y_i + (x_{i+1} - x_i)k_i = y_i + hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}y'_i\right). \quad (2.3)$$

Формула (2.3) и есть формула модифицированного метода Эйлера. Она может быть записана иначе, если промежуточная точка, производная в которой определяет направление отрезка интегральной кривой, отстоит от соседних точек на величину шага

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i), \quad (2.4)$$

Таким образом, при использовании модифицированного метода Эйлера на каждом шаге интегрирования необходимо иметь информацию о текущей и предшествующей точках. Поэтому этим методом нельзя воспользоваться на первом шаге интегрирования из начальной точки. На первом шаге обычно применяется простой метод Эйлера, после чего на последующих шагах уже можно воспользоваться формулой (2.3).

Усовершенствованный метод Эйлера – Коши заключается в том, что при вычислении следующей точки интегральной кривой производится усреднение тангенса угла наклона кривой в двух прилежащих точках. В этом случае тангенса угла наклона находится

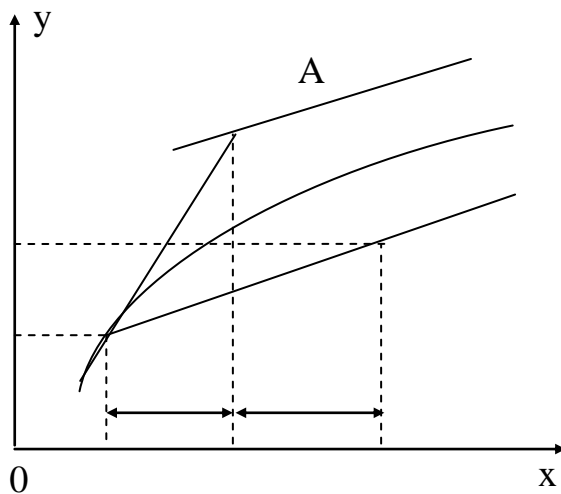


Рис.4

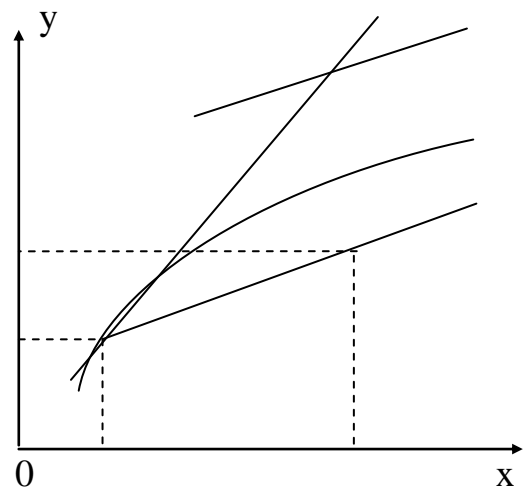


Рис.5

как среднее арифметическое тангенсов в точках (x_i, y_i) и (x_{i+1}, y_{i+1}) . Поэтому аналогично модифицированному методу Эйлера здесь также на каждом шаге необходимо дважды вычислять значение правой части дифференциального уравнения.

Порядок построения решения в методе Эйлера – Коши представлен на рис. 5. Через точку (x_i, y_i) проводится касательная A_1 до пересечения с прямой $x = x_{i+1}$. В этой точке пересечения вычисляется тангенс угла наклона касательной A_2 и из точки (x_i, y_i) проводится прямая A_0 , тангенс угла наклона которой есть среднее арифметическое тангенсов углов наклона прямых A_1 и A_2 , т.е.

$$k_i = \frac{1}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hy'_i)],$$

где $y'_i = f(x_i, y_i)$.

Для прямой A_0 можно записать уравнение

$$Y_{i+1} = y_i + hk_i = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hy'_i)], \quad (2.5)$$

которое и является формулой метода Эйлера – Коши.

При использовании формулы (2.5) сначала вычисляется приближенное решение в точке (x_{i+1}, y_{i+1})

$$Y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad (2.6)$$

которое затем уточняется.

Решение по формуле (2.5) можно улучшить, если воспользоваться итерационным способом уточнения каждого значения y_i . В этом случае, исходя из начального приближения (2.6), строится итерационный процесс по формуле

$$Y_{i+1}^{(k+1)} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k)})] \quad (k = 0, 1, 2, \dots, m, \dots) \quad (2.7)$$

и вычисления на каждом шаге повторяются до тех пор, пока два последовательных приближения $y_{i+1}^{(k)}$ и $y_{i+1}^{(k+1)}$ не совпадут с некоторой наперед заданной точностью.

Оценка точности формул Эйлера. Для того чтобы оценить точность улучшенных формул Эйлера, можно сравнить их с разложением решения в ряд Тейлора.

Для $f(x, y)$ в окрестности точки (x_i, y_i) имеем

$$f(x, y) = f(x_i, y_i) + (x - x_i) \frac{\partial f}{\partial x} + (y - y_i) \frac{\partial f}{\partial y} + \dots$$

Тогда для величин k_i в формулах (2.3) и (2.5) можно записать соответственно

$$\begin{aligned} k_i &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} y_i'\right) = f + \frac{h}{2}(f_x + ff_y) + O(h^2), \\ k_i &= \frac{1}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hy_i')] = \frac{1}{2} [f + f + hf_x + hff_y] + \\ &\quad + O(h^2) = f + \frac{h}{2}(f_x + ff_y) + O(h^2). \end{aligned}$$

Формулы (2.3) и (2.5) после подстановки соответствующих выражений для k_i приводятся к виду

$$Y_{i+1} = y_i + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + ff_y) + O(h^3). \quad (2.8)$$

Из сравнения (1.16) и (2.8) можно заключить, что видоизмененные формулы Эйлера согласуются с разложением в ряд Тейлора с точностью до членов степени h^2 включительно, т.е. обеспечивают точность на порядок выше, чем формула (2.1). Можно также показать, что формула Эйлера – Коши с итерационным уточнением на каждом шаге позволяет получить точность порядка h^3 .

Устойчивость решения. При решении дифференциальных уравнений численными методами помимо вопросов точности важную роль приобретают

вопросы устойчивости решения. Под устойчивостью метода решения дифференциального уравнения понимается способность накопления и скорость роста ошибки интегрирования. Как уже отмечалось выше, при использовании формулы (2.1) ошибка вычислений накапливается в процессе интегрирования.

Скорость ее роста и абсолютную величину можно уменьшить только путем уменьшения шага интегрирования, однако при этом значительно возрастает объем вычислений. Вместе с тем не существует способов выбора шага интегрирования до начала решения, поэтому на практике шаг обычно выбирается исходя из сравнения решений, полученных с различным шагом, например с h и $h/2$. Если эти решения отличаются на величину, большую заданной точности, то производится уменьшение шага интегрирования. Оценка ошибки иногда может быть получена и другими способами, например исследованием производных правой части дифференциального уравнения. Однако это не всегда целесообразно, так как может оказаться, что повторное интегрирование с измененным шагом выполнить проще, чем исследовать поведение правой части уравнения на каждом шаге интегрирования.

Модифицированные формулы Эйлера относительно часто применяются в практике вычислений. Рассмотрим устойчивость решения, полученного по этим формулам.

Предположим, что для решения уравнения (1.8) используется модифицированная формула (2.4). Тогда для вычисленного значения y_{i+1} в точке x_{i+1} можно записать

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hy_i'. \quad (2.9)$$

Однако если Y_i - точное решение, то для него можно также записать

$$Y_{i+1} = Y_{i-1} + 2hY_i' + e_i, \quad (2.10)$$

где e_i - ошибка расчета по формуле (2.9) на одном шаге интегрирования.

Если обозначить ошибку вычисления величины y_i через $\varepsilon_i = Y_i - y_i$, то после вычитания выражения (2.9) из (2.10) получим

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_{i-1} + 2h(Y'_i - y'_i) + e_i = \varepsilon_{i-1} + 2h[f(x_i, Y_i) - f(x_i, y_i)] + e_i.$$

Последнее выражение можно переписать, используя теорему о среднем в виде

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_{i-1} + 2h \frac{\partial f(x_i, 0_i)}{\partial y} (Y_i - y_i) = \varepsilon_{i-1} + 2h \frac{\partial f}{\partial y} \varepsilon_i + e_i, \quad (2.11)$$

где $y_i \leq 0_i \leq Y_i$.

Допустим, что e_i и $A = df/dy$ постоянны, тогда выражение (2.11) запишется в виде соотношения

$$\varepsilon_{i+1} - 2Ah\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1} = e_i, \quad (2.12)$$

которое является линейным разностным неоднородным уравнением с постоянными коэффициентами.

Решение уравнения (2.12) может быть найдено как сумма общего решения однородного уравнения ε и частного решения неоднородного $\bar{\varepsilon}$ [27].

Общее решение однородного уравнения (2.12) определяется корнями характеристического уравнения $p^2 - 2Ahp - 1 = 0$

Введем вспомогательную функцию

$$\varphi_c(h) = y_{m+1} - y_m - [p_{c,1}k_1(h) + p_{c,2}k_2(h) + \dots + p_{c,c}K_c(h)] \quad (2.13)$$

и потребуем, чтобы эта функция при $h=0$ обладала свойствами

$$\varphi_c(0) = \varphi'_c(0) = \dots = \varphi_c^{(c)}(0) = 0, \quad \varphi_c^{(c+1)}(0) \neq 0. \quad (2.14)$$

Тогда соотношения (2.14) могут использоваться для выбора постоянных коэффициентов $p_{c,i}$, α_i , $b_{i,j}$.

Рассмотрим несколько частных случаев

Пусть $c=1$.

Тогда

$$y_{m+1} = y_m + p_{1,1}k_1 = y_m + p_{1,1}hf(x_m, y_m) \quad (2.15)$$

и

$$\begin{aligned} \varphi_1(h) &= y_{m+1} - y_m - p_{1,1}hf(x_m, y_m), \\ \varphi_1'(0) &= y_m' - p_{1,1}f(x_m, y_m). \end{aligned}$$

Поскольку при $h=0$ $y_{m+1}=y_m$, то $\varphi_1(0)=0$, а $\varphi_1'(0)=y_m' - p_{1,1}f(x_m, y_m)$.

Условие (2.14) для $\varphi_1'(0)$ будет выполнено лишь в том случае, если $p_{11}=1$, и, таким образом, при $c=1$ расчетная формула

$$y_{m+1} = y_m + hf(x_m, y_m) \quad (2.16)$$

т.е. получила вид формулы Эйлера.

Пусть $c=2$. Тогда

$$\begin{aligned} \xi_2 &= x_m + a_2h, & \xi_1 &= x_m + a_1h = x_m, \\ \eta_2 &= y_m + b_{2,1}k_1, & \eta_1 &= y_m. \end{aligned}$$

Поскольку

$$k_1 = hf(x_m, y_m), \quad k_2 = hf(x_m + a_2h, y_m + b_{2,1}k_1),$$

то

$$\begin{aligned} y_{m+1} &= y_m + [p_{2,1}k_1(h) + p_{2,2}k_2(h)] = \\ &= y_m + hp_{2,1}f(x_m, y_m) + hp_{2,2}[f(x_m + a_2h, y_m + b_{2,1}hf(x_m, y_m))] \end{aligned} \quad (2.17)$$

Формула (2.17) содержит четыре неизвестных коэффициента - $p_{2,1}$, $p_{2,2}$, a_2 и $b_{2,1}$, которые необходимо определить исходя из условий (2.14). Для того чтобы найти значения этих коэффициентов, нужно записать выражения для $\varphi_2'(h)$ и $\varphi_2''(h)$ и положить $h=0$. Тогда неизвестные коэффициенты могут быть найдены решением системы линейных уравнений.

Выражение для $\varphi_2(h)$ имеет вид

$$\varphi_2(h) = y_{m+1} - y_m - [p_{2,1}k_1(h) + p_{2,2}k_2(h)] \quad (2.18)$$

Вычислим $\dot{\varphi}_2(h)$

$$\dot{\varphi}_2(h) = \dot{y}_{m+1} - [p_{2,1}\dot{k}_1(h) + p_{2,2}\dot{k}_2(h)] \quad (2.19)$$

где

$$\dot{k}_1(h) = f(x_m, y_m) = f, \quad \dot{k}_2(h) = f(\xi_2, \eta_2) + h[a_2 f_x + b_{2,1} f f_y]$$

Для $\dot{\varphi}_2(0)$ можно записать $\dot{\varphi}_2(0) = f - [p_{2,1}f + p_{2,2}f]$ где $f = f(x_m, y_m)$, откуда следует, что условие (2.14) для $\dot{\varphi}_2(0)$ будет выполнено в том случае, если

$$p_{2,1} + p_{2,2} = 1. \quad (2.20)$$

Аналогично, дифференцируя $\dot{\varphi}_2(h)$ по h и учитывая, что $k_1''(h) = 0$, для $\varphi_2''(0)$ получим

$$\varphi_2''(0) = f_x + f f_y - 2p_{2,2}[a_2 f_x + b_{2,1} f f_y]$$

откуда следует, что для $\varphi_2''(0) = 0$ должно быть

$$2p_{2,2}a_2 = 1, \quad 2p_{2,2}b_{2,1} = 1. \quad (2.21)$$

Таким образом, коэффициенты $p_{2,1}$, $p_{2,2}$, a_2 , $b_{2,1}$ формулы Рунге – Кутты второго порядка удовлетворяют системе линейных уравнений

$$\begin{aligned} P_{2,1} + P_{2,2} &= 1, \\ P_{2,2}a_2 &= 1/2, \\ P_{2,2}b_{2,1} &= 1/2. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Поскольку система (2.22) имеет четыре неизвестных, то число ее решений бесконечно. Каждое решение дает формулу интегрирования с ошибкой порядка h^3 . На практике коэффициенты выбираются такими, чтобы формулы были удобны для вычислений. Например, если положить $\alpha_2 = 1$, то

тогда $p_{2,2}=1/2$; $p_{2,1}=1/2$; $b_{2,1}=1$. После подстановки этих значений в выражение (2.17) получим формулу

$$y_{m+1} = y_m + 1/2(k_1 + k_2) = y_m + h/2[f(x_m, y_m) + f(x_m + h, y_m + hy'_m)],$$

являющуюся формулой усовершенствованного метода Эйлера – Коши.

Если же положить, что $p_{2,1}=0$, то из (2.22) получим $p_{2,2}=1$; $b_{2,1}=\alpha_2=1/2$. Тогда после подстановки полученных значений в (2.17) последнее преобразуется к виду (2.3), т.е. получим формулу модифицированного метода Эйлера. Отсюда следует, что формулы Эйлера является частными случаями формул Рунге-Кутты первого и второго порядков.

Наибольшее распространение в вычислительной практике имеют формулы Рунге-Кутты четвертого порядка, которые получаются из общих соотношений (2.14) – (2.15) при $c=4$.

При этом

$$y_{m+1} = y_m + p_{4,1}k_1 + p_{4,2}k_2 + p_{4,3}k_3 + p_{4,4}k_4, \quad (2.23)$$

где

$$\begin{aligned} k_1(h) &= hf(x_m, y_m), \\ k_2(h) &= hf(x_m + a_2h, y_m + b_{2,1}K_1), \\ k_3(h) &= hf(x_m + a_3h, y_m + b_{3,1}K_1 + b_{3,2}K_2), \\ k_4(h) &= hf(x_m + a_4h, y_m + b_{4,1}K_1 + b_{4,2}K_2 + b_{4,3}K_3), \end{aligned}$$

Коэффициенты выражения (2.23) также вычисляются исходя из условий (2.14) теперь уже для производных до четвертого порядка включительно. Точность формул четвертого порядка пропорциональна h^5 , т.е. формулы соответствуют разложению решения в ряд Тейлора до членов h^4 включительно.

При повышении порядка формулы возрастает произвол в выборе коэффициентов. Для формул четвертого порядка уже имеется две степени свободы, что приводит к еще большему разнообразию соотношений.

Примером формулы Рунге – Кутта четвертого порядка может служить соотношение

$$y_{m+1} = y_m + 1/6 (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(h^5). \quad (2.24)$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_m, y_m), \\ k_2 &= hf(x_m + h/2, y_m + 1/2k_1), \\ k_3 &= hf(x_m + h/2, y_m + 1/2k_2), \\ k_4 &= hf(x_m + h, y_m + k_3). \end{aligned} \quad (2.4a)$$

На каждом шаге интегрирования по формулам Рунге – Кутта четвертого порядка необходимо четыре раза вычислять правую часть дифференциального уравнения. Это приведет к увеличению времени счета, однако компенсируется более высокой точностью формулы, в силу чего интегрирование можно вести с большим шагом. При использовании вычислительных машин выбор величины шага интегрирования производится автоматически в процессе интегрирования. Изменение шага обычно производится по результатам сравнения решений, получаемых на некотором интервале интегрированием с целым и половинным шагом. Если результаты этих двух вычислений совпадают с заданной точностью, то шаг для дальнейшего интегрирования остается прежним или увеличивается, в противном случае уменьшается.

При автоматическом выборе шага интегрирования затраты машинного времени на решение дифференциального уравнения в значительной степени определяются стратегией определения шага, обеспечивающего заданную точность. Так, для формул

$$y_{m+1} = y_m + 1/2 (k_1 + 4k_4 + k_5), \quad (2.25)$$

где

$$\begin{aligned}
k_1 &= 1/3 hf(x_m, y_m), \\
k_2 &= 1/3 hf(x_m + 1/3h, y_m + k_1), \\
k_3 &= 1/3 hf(x_m + 1/3h, y_m + 1/2k_1 + 1/2k_2), \\
k_4 &= 1/3 hf(x_m + 1/2h, y_m + 3/8k_1 + 9/8k_3), \\
k_5 &= 1/3 hf(x_m + h, y_m + 3/2k_1 - 9/2k_3 + 6k_4),
\end{aligned} \tag{2.25a}$$

предлагается следующая стратегия оценки точности интегрирования и выбора шага. Если правая часть выражения $\varepsilon = k_1 - 9/2k_3 + 4k_4 - 1/2k_5$ превышает заданную точность более чем в пять раз, то шаг уменьшается вдвое и интегрирование продолжается. Если же правая часть меньше, чем $5/31\varepsilon$, то шаг может быть удвоен. По оценке интегрирование по формулам (2.25) на 20% быстрее, чем по формулам (2.24) с постоянным шагом.

§ 3. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАВИСИМОСТИ КОНЦЕНТРАЦИИ

Рассмотрим сравнительную оценку различных формул интегрирования на простейшем примере. Пусть в сосуд объемом V , заполненный жидкостью состава x_0 , с постоянной скоростью F подается жидкость состава x_F и с такой же скоростью выводится жидкость из сосуда. Полагая, что жидкость в сосуде идеально перемешивается, найти зависимость концентрации на выходе сосуда, используя формулы Эйлера и Рунге – Кутты.

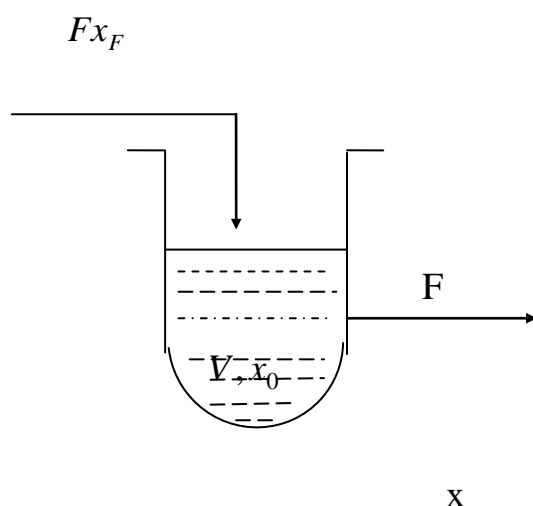


Рис. 6

Запишем уравнение материального баланса сосуда, схематически представленного на рис. 6.

$$F(x_F - x) = d(Vx)/dt. \quad (3.1)$$

Так как скорость ввода питания равна скорости вывода, то $dV/dt=0$, и, таким образом, уравнение, описывающее изменение концентрации в сосуде, имеет вид

$$V(dx/dt) = F(x_F - x) \quad (3.2)$$

и интегрируется с начальным условием $x|_{t=0} = x_0$.

Решением уравнения (3.2) по формулам Эйлера (2.1) и (2.3), а также по формулам Рунге – Кутта (2.25) для интервала времени $0 \leq t \leq 40$ приведено в табл.22.

Исходные данные: $x_0=0$, $F=1\text{ м}^3/\text{час}$, $x_F=0,9$, $V=5\text{ м}^3$.

Таблица

Метод	Шаг H	Независимая переменная t						
Точное решение	-	0,1631	0,5689	0,7781	0,8552	0,8835	0,8977	0,8996
Рунге – Кутта	1	0,1631	0,5689	0,7781	0,8551	0,8835	0,8977	0,8996
	5	-	0,5687	0,7780	0,8551	0,8835	0,8977	0,8996
	10	-	-	0,8000	-	0,8888	0,8996	0,8998
	15	-	-	-	1,1812	-	0,8121	-
Эйлера	1	0,1799	0,6051	0,8033	0,8683	0,8996	0,8988	0,8998
	5	-	0,8999	1,8999	0,8999	0,8999	0,8999	0,8999
	10	-	-	1,1800	-	0,0000	1,8000	0,000
	15	-	-	-	2,7000	-	-2,700	-
Модифициро- ванный Эйлера	1	0,1620	0,4930	0,7762	0,8541	0,8829	0,8976	0,8995
	5	-	0,4500	0,6750	0,7875	0,8437	0,8859	0,8964
	10	-	-	0,0000	-	0,0000	0,0000	0,0000
	15	-	-	-	-1,3500	-	-4,7250	-

Из сравнения точного и приближенных решений можно заметить, что формула Эйлера на каждом шаге интегрирования дает завышенное значение функции, в то время как видоизмененные формулы Эйлера заниженные; формулы Эйлера наименее устойчивы при увеличении шага интегрирования

– в них колебательность решения проявляется уже при $H=7$, а формулы Рунге – Кутта – при $H=15$.

Интегрирование системы дифференциальных уравнений. Методы интегрирования одного дифференциального уравнения могут быть распространены и на системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Пусть задана система двух уравнений

$$y' = f(x, y, z), \quad z' = g(x, y, z) \quad (3.3)$$

с начальными условиями в точке $x=x_0$: $y|_{x=x_0} = y_0$; $z|_{x=x_0} = z_0$.

Для того чтобы проинтегрировать систему (3.3), например, по формулам Рунге – Кутта четвертого порядка, достаточно применить формулы (2.24) к каждому из уравнений

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + 1/6(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\ z_{i+1} &= z_i + 1/6(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4), \end{aligned} \quad (3.4)$$

где k_i и m_i вычисляются по соответствующим формулам

$$k_1 = hf(x_i, y_i, z_i), \quad (3.5)$$

$$k_2 = hf(x_i + y_i h/2, y_i + k_1/2, z_i + m_1/2), \quad (3.6)$$

$$k_3 = hf(x_i + h/2, y_i + k_2/2, z_i + m_2/2), \quad (3.7)$$

$$k_4 = hf(x_i + h, y_i + k_3, z_i + m_3), \quad (3.8)$$

$$m_1 = hg(x_i, y_i, z_i), \quad (3.9)$$

$$m_2 = hg(x_i + h/2, y_i + k_1/2, z_i + m_1/2), \quad (3.10)$$

$$m_3 = hg(x_i + h/2, y_i + k_2/2, z_i + m_2/2), \quad (3.11)$$

$$m_4 = hg(x_i + h, y_i + k_3, z_i + m_3). \quad (3.12)$$

Конечно-разностные формулы. Формулы Рунге-Кутта четвертого порядка получили наибольшее распространение в практике интегрирования дифференциальных уравнений с использованием вычислительных машин. Однако даже при относительно высокой точности их применение связано со значительным объемом вычислений, особенно если правые части уравнений являются сложными выражениями. Основным недостатком этих формул

является то, что приходится вычислять три-четыре значения функции и усреднять на каждом шаге интегрирования. Прогноз решения осуществляется исходя из информации лишь в данной точке, и совсем не используется информация о решении в предыдущих точках. В прикладных задачах, например, связанных с нестационарными процессами, решения часто представляют собой монотонные функции, приближающиеся к стационарному состоянию, причем значительные изменения тангенса угла наклона интегральной кривой наблюдаются только на начальном участке интегрирования. Поэтому для вычисления значения интегральной кривой в последующей точке иногда целесообразно аппроксимировать решение, используя информацию о нем в предыдущих точках, т.е. его предысторию.

Методы, в основе которых используется информация о решении в ряде предшествующих точек, называются конечно-разностными методами или методами прогноза и коррекции. В отличие от формул Рунге-Кутты, в этих методах на каждом шаге интегрирования правые части уравнений вычисляются один или два раза, а разность между прогнозированным и скорректированным решениями дает оценку точности интегрирования и может быть использована для контроля величины шага.

При интегрировании конечно-разностными методами наибольшее распространение получили формулы, в которых решение аппроксимируется алгебраическими полиномами. В частности, формулы Ньютона – для интерполирования назад используются в методе Адамса, а формулы Ньютона для интерполирования вперед в методе Милна. Рассмотрим порядок получения формул интегрирования для дифференциального уравнения первого порядка

$$y' = f(x, y), \quad (3.13)$$

для которого задано начальное условие $y|_{x=x_0} = y_0$.

Предположим, что некоторым образом удалось получить приближенные значения $y=y(x)$ для ряда равноотстоящих точек $x_i, x_{i-1}, \dots, x_{i-k}$.

Тогда приближенно можно считать, что

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi(x) dx, \quad (3.14)$$

где $\varphi(x)$ – приближенное представление правой части уравнения (3.13), основанное на аппроксимации решения по найденным точкам т.е. $\varphi(x) = f(x, y(x))$.

Метод Адамса. Воспользовавшись интерполяционной формулой Ньютона (11-39), с точностью до разностей третьего порядка включительно в выражении (3.14) можно записать.

$$\varphi(x) = y'_i + t\Delta^1 y'_{i-1} + \frac{t(i+1)}{2!} \Delta^2 y'_{i-2} + \frac{t(t+1)(t+2)}{3!} \Delta^3 y'_{i-3}, \quad (3.15)$$

где $t = (x - x_i)/h$.

Тогда

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(y'_i + t\Delta^1 y'_{i-1} + \frac{t(i+1)}{2!} \Delta^2 y'_{i-2} + \frac{t(t+1)(t+2)}{3!} \Delta^3 y'_{i-3} \right) dx. \quad (3.16)$$

Если в последнем выражении произвести замену переменной $dx = hdt$, то можно заметить, что многочлен $\varphi(x)$ не зависит ни от шага интегрирования h , ни от i , и, следовательно,

$$y_{i+1} = y_i + h \int_0^1 \left(y'_i + t\Delta^1 y'_{i-1} + \frac{i^2 + t}{2} \Delta^2 y'_{i-2} + \frac{t^3 + 3t^2 + 2t}{6} \Delta^3 y'_{i-3} \right) dx. \quad (3.17)$$

Почленно интегрируя выражение (3.17), получим экстраполяционную формулу Адамса

$$y_{i+1} = y_i + h(y'_i + 1/2\Delta^1 y'_{i-1} + 5/12\Delta^2 y'_{i-2} + 3/8\Delta^3 y'_{i-3}) \quad (3.18)$$

Если учесть, что

$$\Delta^1 y'_{i-1} = y'_i - y'_{i-1}, \quad (3.19)$$

$$\Delta^2 y'_{i-1} = y'_i - 2y'_{i-1} + y'_{i-2} \quad (3.20)$$

$$\Delta^3 y'_{i-1} = y'_i - 3y'_{i-1} + 3y'_{i-2} - y'_{i-3}, \quad (3.21)$$

то окончательно формула Адамса запишется в виде

$$y_{i+1} = y_i + h/24(55y'_i - 59y'_{i-1} + 37y'_{i-2} - 9y'_{i-3}). \quad (3.22)$$

Формула (3.22) получена исходя из интерполяционного многочлена, включающего разности третьего порядка. Аналогично могут быть получены формулы Адамса с другим числом точек интерполирования. Так, например, если ограничиться разностями первого порядка, то в результате будет получена формула Эйлера. Однако чем выше порядок интерполяционного многочлена, тем больше точек необходимо знать для начала вычислительного процесса.

В этом смысле конечно-разностные формулы не являются самоначинающимися, поэтому для их применения необходимо знать решение в нескольких предыдущих точках, которое может быть получено любым другим ранее рассмотренным методом. Для применения формулы (3.22) таких точек должно быть четыре: y_0, y_1, y_2, y_3 . только после этого, воспользовавшись уравнением (3.13) для вычисления соответствующих производных, можно применить формулу Адамса (3.22).

точность разностных формул зависит от характера изменения разностей. Если третья разность, например, постоянна, то интегрирование по (3.22) будет точным. При работе на вычислительных машинах такой способ оценки точности решения в принципе возможен, однако применяется редко. Чаще используется одновременное интегрирование по двум формулам различного порядка с последующим сравнением результатов. Если решения различаются сильно, то шаг уменьшается и процесс повторяется.

Метод Милна. Формулы Милна для интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений могут быть получены аналогично формулам

Адамса, если воспользоваться уравнением для представления правой части уравнения (3.13). Пусть для равноотстоящих точек $x_{i-1}, x_{i-2}, x_{i-3}, x_{i-4}$ решение уравнения (3.13) известно и представлено в виде многочлена Ньютона с точностью разностей третьего порядка

$$y' = y'_{i-4} + t\Delta^1 y'_{i-4} + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y'_{i-4} + \frac{t(t-1)(t-2)}{3!}\Delta^3 y'_{i-4}, \quad (3.23)$$

где

$$t = (x - x_{i-4})/h. \quad (3.24)$$

Принимая во внимание, что

$$\begin{aligned} \Delta^1 y'_{i-4} &= y'_{i-3} - y'_{i-4}, \\ \Delta^2 y'_{i-4} &= y'_{i-2} - 2y'_{i-3} + y'_{i-4}, \\ \Delta^3 y'_{i-4} &= y'_{i-1} - 3y'_{i-2} + 3y'_{i-3} - y'_{i-4}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

в результате почленного интегрирования уравнения (3.23) по x от x_{i-4} до x_i и преобразования полученного выражения формула Милна запишется в виде

$$y_i = y_{i-4} + \frac{4h}{3}(y'_{i-1} - y'_{i-2} + 2y'_{i-3}). \quad (3.26)$$

Другая формула Милна получается в результате интегрирования уравнения (3.23) в пределах от x_{i-2} до x_i

$$y_i = y_{i-2} + \frac{h}{3}(y'_i + 4y'_{i-1} + y'_{i-2}). \quad (3.27)$$

При интегрировании дифференциальных уравнений по методу Милна обычно используются обе формулы (3.26), (3.27). Сначала определяется первое приближение $y_i^{(1)}$ по формуле (3.26), затем второе y_i^2 по формуле (3.27). Если при этом выполняется условие

$$\left| \frac{y_i^{(1)} - y_i^2}{2} \right| \leq \varepsilon,$$

где ε - точность решения, то в качестве решения принимается значение $y_i^{(2)}$. В противном случае расчеты по (3.26) и (3.27) повторяются с меньшим шагом.

Метод Милна обеспечивает более высокую точность по сравнению с методом Адамса. Другим его достоинством является то, что при корректировании вновь полученного решения нет необходимости пересчета интеграла с измененным шагом. Метод Милна обеспечивает устойчивое решение, если производная $\partial f / \partial y$ во всем интервале интегрирования положительна.

§ 4. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ПРОФИЛЯ ТЕМПЕРАТУР ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Электрод диаметром D с внешней стороны печи на расстоянии 1 м охлаждается водой до температуры $T=300^{\circ}\text{ G}$. Как изменяется температура по длине стержня если известно что температура печи $T=2000^{\circ}\text{ G}$, температура окружающей среды $T_0=50^{\circ}\text{ G}$; коэффициент теплопроводности $K=80-0,01\,T$ (ккал/м. ч. $^{\circ}\text{ G}$).

Распределение температуры по длине электрода можно вычислить путем решения дифференциального уравнения теплового баланса, записанного для элементарного участка.

Приток тепла внутрь элемента описывается уравнением Фурье и равен $-KA dT/dx$ ккал\час.

Поток тепла из элемента равен

$$-KA \frac{dT}{dx} + \frac{d}{dx} \left(-KA \frac{dT}{dx} \right) \Delta x + \pi DR(T-T_0) \Delta x \quad \text{ккал\час.}$$

Следовательно, уравнение теплового баланса запишется

$$(K_0 - \alpha T) \frac{d^2 T}{dx^2} - \alpha \left(\frac{dT}{dx} \right)^2 - \frac{\pi DR}{A} (T - T_0) = 0, \quad (4.1)$$

где R – теплопотери в окружающую среду, ккал\час $^{\circ}\text{ G}$;

A – площадь поперечного сечения электрода, м^2 .

Граничные условия

$$x=0, T=2000^{\circ} G; \quad x=1, T=300^{\circ} G; \quad \beta = \frac{\pi DR}{A} = 2.$$

Для того чтобы решить уравнение (4.1) как начальную задачу, необходимо для одной из границ, например для $x=1$, определить значение dT/dx . С этой целью была использована процедура метода деления отрезка пополам и формулы (2.25). Значение производной dT/dx , соответствующее граничным условиям задачи с точностью до $1^{\circ} C$, равно 1944, 21. Некоторые значения, полученные в результате решения уравнения (4.1), приведены ниже

$T^{\circ} G$	1999,7	1808,7	1444,8	1101,7	776,1	465,4	302,8
$x, м$	0,0	0,1	0,3	0,5	0,7	0,9	1,0

*Расчет разделительной способности тарелки
ректификационной колонны для диффузионной модели
движения потока жидкости*

При движении жидкости по тарелке в ректификационной колонне ее концентрация x изменяется от некоторого значения x_0 на входе до значения x_1 на выходе. Изменение состава жидкости происходит за счет взаимодействия с паровым потоком, поступающим на тарелку в количестве V , и эффекта продольного перемешивания, учитываемого коэффициентом турбулентной диффузии D_E . Если положить, что локальный к.п.д. Мерффри –

$$E_{0v} = (y - y_{i-1}) / (y^* - y_{i-1})$$

постоянная величина, а в пределах одной тарелки равновесие описывается уравнением $y^* = mx + b$, то уравнение для концентрации компонента в жид-

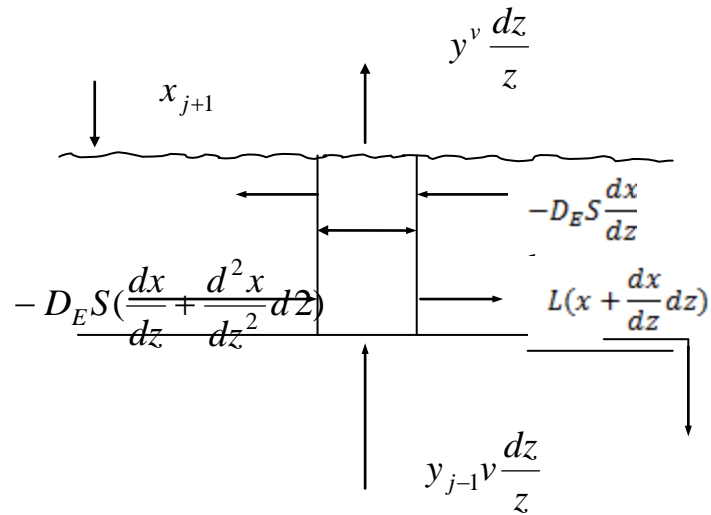


Рис. 7

кости запишется в виде

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2x}{d\omega^2} - \frac{dx}{d\omega} - m \frac{V}{L} E_{0v} (x - x^*) = 0,$$

где $Pe = Uz_e / D_E$ – критерий Пекле; $\omega = z / Z$ – доля площади сечения тарелки; S – сечение потока, $U = L / S$ – скорость жидкостного потока.

Если для x^* воспользоваться выражением

$$x^* = \frac{y/a}{1 + (1-a)y/a},$$

то окончательно дифференциальное уравнение запишется как

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2x}{d\omega^2} - \frac{dx}{d\omega} - m \frac{V}{L} E_{0v} x = -m \frac{V}{L} E_{0v} \frac{y/a}{1 + (1-a)y/a}, \quad (4.2)$$

где α – коэффициент относительной летучести.

Граничные условия:

$$\begin{aligned} \omega=0, \quad Lx_{j+1} &= Lx_i(0) - E_{0v} \frac{dx_j(0)}{d\omega}; \\ \omega=1, \quad \frac{dx(1)}{dx} &= 0. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Для заданных условий составим программу расчета профиля концентрации жидкости по длине тарелки.

Пусть число узловых точек интегрирования равно $n+1$. Тогда для уравнения (4.2) и граничных условий (4.3) можно записать трехдиагональную систему алгебраических уравнений вида

[illegible]

где

$$K = mEov \frac{V}{L} \frac{y/\alpha}{1 + (1-a) y/\alpha}.$$

Программа, приведенная ниже, состоит из процедуры решения трехдиагональной системы уравнений и группы операторов для вычисления коэффициентов системы (4.4). После ввода исходных данных в операторе цикла по / рассчитываются коэффициенты системы для данного разбиения и производится обращение к процедуре CODIA. Решение располагается на месте столбца правых частей системы.

Пример решения уравнения (4.2) для различного числа узловых точек представлен в табл. Исходные данные: $E=0,5$; $L=15$; $\alpha=5$; $m=1$; $\nu=20$; $y_{i-1}=0,5$; $x_{i+1}=0,6$; $Pe=2$.

Таблица

ω	10	50	100	500	900
0,0	0,57639	0,57586	0,57581	0,57576	0,57575
0,1	0,57638	0,54777	0,54445	0,54181	0,54150
0,2	0,54095	0,51583	0,51290	0,51057	0,51028
0,3	0,50935	0,48726	0,48467	0,48260	0,48233
0,4	0,48142	0,46193	0,45964	0,45779	0,45754
0,5	0,45704	0,43981	0,43767	0,43611	0,43587
0,6	0,43618	0,42091	0,41909	0,41761	0,41738
0,7	0,41889	0,40539	0,40377	0,40244	0,40222
0,8	0,40543	0,39350	0,39206	0,39089	0,39068
0,9	0,39578	0,38565	0,38443	0,39341	0,38322
1,0	0,39069	0,38248	0,38150	0,38068	0,38051

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выпускная квалификационная работа состоит из введения, четырех параграфов, заключения, списка использованной литературы и приложения.

В введении даются основные характеристики дифференциальных уравнений и задачи приводящие к ним. Кроме этого, дается постановка задачи, актуальность темы, цели и задачи, методы исследования, содержание работы, научная ценность работы и краткая аннотация проделанной работы. Первый параграф посвящен дифференциальным уравнениям, являющимся основным математическим аппаратом при исследовании динамических свойств объектов, в частности, переходных процессов. Здесь дается математическое описание динамики ректификационной колонны, содержащее уравнение материальной и тепловой балансов, уравнения, описывающего механизм взаимодействия между паровой и жидкой фазами на отдельных тарелках.

Во втором параграфе приводятся методы численного интегрирования дифференциальных уравнений. Графическая иллюстрация этих методов: метод Эйлера, модификация метода Эйлера, Эйлера-Коши, Рунге-Кутта и другие. Даются алгоритм, блок-схема и универсальные программы. Определяется оптимальный выбор метода для решения той или иной задачи в зависимости от сложности поставленной задачи.

В третьем и четвертом параграфах в качестве примера приводятся применения программы, разработанной во втором параграфе, расчёт профиля температур при нестационарной теплопроводности. Полученные результаты сравниваются с опытными данными. Сравнения дают удовлетворительные результаты.

В качестве примера в работе приводится расчёт разделительной способности тарелки ректификационной колонны для диффузионной модели движения потока жидкости, который сводится к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

В третьем параграфе рассматривается сравнительная оценка различных формул интегрирования на примере. В этом параграфе полагая, что жидкость в сосуде идеально перемешивается, определяется зависимость концентрации на выходе сосуда. В качестве метода исследования используется метод Рунге-Кутты, Эйлера, модифицированный метод Эйлера. Из полученных результатов и сравнения точного и приближенного решения можно сделать вывод: формула Эйлера на каждом шаге интегрирования дает завышенное значение функции, в то же время как видоизмененные формулы Эйлера заниженные. Кроме этого, формулы Эйлера наименее устойчивы при увлечении шага интегрирования – в них колебательность решения проявляется уже при $N=7$, а формулы Рунге-Кутты при $N=15$.

Выпускник Ж. Аблакулов изучил множество литературы, касающихся химии и химической технологии. Составил пакет прикладных программ, позволяющих сделать оптимальный выбор того или иного метода при решении различного рода сложности поставленной задачи.

Все приведенные примеры сопоставлены с экспериментальными данными, полученными в лабораторных условиях. Сделан вывод о том, что численные методы наиболее эффективны.

Даются рекомендации о применении составленных программ для решения прикладных задач химии и химической технологии.

МЕТОД РУНГЕ-КУТТА

Постановка задачи

Метод Эйлера и метод Эйлера – Коши относятся к семейству методов Рунге – Кутта имеющих следующий вид. Фиксируем некоторые числа:

$$\alpha_2, \dots, \alpha_q; \quad p_1, \dots, p_q; \quad \beta_{ij}, \quad 0 < j < i \leq q$$

Последовательно вычисляем:

$$k_1(h) = h \cdot f(x, y)$$

$$k_2(h) = h \cdot f(x + \alpha_2 \cdot h, y + \beta_{21}k_1(h)),$$

...

$$k_q(h) = h \cdot f(x + \alpha_q \cdot h, y + \beta_{q1}k_1(h) + \dots + \beta_{qq-1}k_{q-1}(h))$$

и полагаем

$$y(x+h) \approx y(x) + \sum_{i=1}^q p_i k_i(h) = z(h)$$

Рассмотрим вопрос о выборе параметров $\alpha_i, p_i, \beta_{ij}$. Обозначим

$\varphi(h) = y(x+h) - z(h)$. Будем предполагать, что $\varphi(0) = \varphi'(0) = \dots = \varphi^{(s)}(0) = 0$.

При любых функциях $f(x, y)$, а $\varphi^{(s+1)}(0) \neq 0$ для некоторой функции $f(x, y)$.

По формуле Тейлора справедливо равенство

$$\varphi(h) = \sum_{i=0}^s \frac{\varphi^{(i)}(0)}{i!} h^i + \frac{\varphi^{(s+1)}(\Theta h)}{(s+1)!} h^{s+1}$$

где $0 < \Theta < 1$. Величина $\varphi(h)$ называется погрешностью метода на шаге, а s – порядком погрешности метода.

При $q = 1$ будем иметь:

$$\varphi(h) = y(x+h) - y(x) - p_1 \cdot h \cdot f(x, y),$$

$$\varphi(0) = 0,$$

$$\varphi'(0) = (y'(x+h) - p_1 f(x, y))_{h=0} = 0 = f(x, y)(1 - p_1)$$

$$\varphi''(h) = y''(x+h)$$

Ясно, что равенство $\varphi'(0) = 0$ выполняется для любых функции $f(x, y)$ лишь при условии, что $p_1 = 1$. Легко видеть, что при этом значении p_1 из формулы получается формула, т.е. в этом случае мы получаем метод Эйлера. Для погрешности этого метода на шаге согласно будем иметь:

$$\varphi(h) = \frac{\varphi''(x + \Theta h) \cdot h^2}{2}$$

Рассмотрим случай $q = 2$, тогда

$$\varphi(h) = y(x+h) - y(x) - p_1 h f(x, y) - p_2 h f(\bar{x}, \bar{y}),$$

$$\text{где } \bar{x} = x + \alpha_2 h, \bar{y} = y + \beta_{21} h f(x, y)$$

Согласно исходному дифференциальному уравнению

$$e = f, y'' = f_x + f_y f, y''' = f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_y y''.$$

(Здесь для краткости через y и f обозначены $y(x)$ и $f(x, y)$ соответственно.)

Вычисляя производные функции $\varphi(h)$ и подставляя в выражения для $\varphi(h)$, $\varphi'(h)$ и $\varphi''(h)$ значение $h = 0$, получим:

$$\varphi(0) = 0$$

$$\varphi'(0) = (1 - p_1 - p_2) f,$$

$$\varphi''(0) = (1 - 2p_2 \alpha_2) f_x + (1 - 2p_2 \beta_{21}) f_y f$$

Хорошо видно, что требование

$$\varphi(0) = \varphi'(0) = \varphi''(0) = 0$$

будет выполняться для всех $f(x, y)$ лишь в том случае, если одновременно будут справедливы следующие три равенства относительно четырех параметров:

$$1 - p_1 - p_2 = 0,$$

$$1 - 2p_2 \alpha_2 = 0,$$

$$1 - 2p_2 \beta_{21} = 0.$$

Произвольно задавая значение одного из параметров и определяя значения остальных из системы, мы будем получить различные методы Рунге – Кутта с порядком погрешности $s = 2$.

Например, при $p_1 = 1/2$ из получаем: $p_2 = 1/2$, $\alpha_2 = 1$, $\beta_{21} = 1$. Для этих значений параметров формула (6.13) принимает вид:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})}{2}$$

Здесь y_{i+1} записано вместо $y(x+h)$, y_i - вместо $y(x)$, а через y_{i+1}^* обозначено выражение $y_i + hf(x_i, y_i)$. Таким образом, в рассматриваемом случае мы приходим к расчетным формулам, соответствующим методу Эйлера – Коши. Из следует, что при этом главная часть погрешности на шаге есть $\frac{\varphi'''(0)}{6}h^3$, т.е. пропорциональна третьей степени шага h .

В Вычислительной практике наиболее часто используется метод Рунге-Кутта с $q = 4$ и $s = 4$.

Приведем без вывода один из вариантов соответствующих расчетных формул:

$$k_1 = h \cdot f(x, y)$$

$$k_2 = h \cdot f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = h \cdot f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_2}{2}\right)$$

$$k_4 = h \cdot f(x + h, y + k_3)$$

$$\Delta_y = z(h) - y(x) = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Отметим, что в этом случае погрешность на шаге пропорциональна пятой степени шага (h^5). Отсюда, в частности, следует, что при достаточно малом h и малых погрешностях вычислений решение уравнения, полученное методом Рунге – Кутта по формулам, будет близким к точному.

Геометрический смысл использования метода Рунге – Кутта с расчетными формулами состоит в следующем. Из точки (x_i, y_i) сдвигаются в направлении, определяемом углом α_i , для которого $tg \alpha_1 = f(x_i, y_i)$. На этом направлении выбирается точка с координатами $(x_i + h/2, y_i + k_1/2)$. Затем из точки (x_i, y_i) сдвигаются в направлении, определяемом углом α , для которого $tg \alpha_2 = f(x_i + h/2, y_i + k_1/2)$. и на этом направлении выбирается точка с координатами $(x_i + h/2, y_i + k_2/2)$. Наконец, из точки (x_i, y_i) сдвигаются в направлении, определяемом углом α_3 , для которого $tg \alpha_3 = f(x_i + h/2, y_i + k_2/2)$ и на этом направлении выбирается точка с координатами $(x_i + h, y_i + k_3)$. Этим задается еще одно направление, определяемое углом α_4 , для которого $tg \alpha_4 = f(x_i + h, y_i + k_3)$. Четыре полученные направления усредняются в соответствии с последней из формул. На этом окончательном направлении и выбирается очередная точка $(x_{i+1}, y_{i+1}) = (x_i + h, y_i + \Delta y)$.

Для того чтобы составить программу решения дифференциального уравнения методом Рунге – Кутта, перечислим шаги описанного алгоритма исходя из расчетных формул/:

1. Ввести начальные условия, обозначив их соответственно А и Y.
2. Ввести шаг интегрирования Н и конечную точку В отрезка интегрирования.
3. Цикл по х от А до В с шагом Н.
4. Вывести х и у.
5. Вычислить k_1, k_2, k_3, k_4
6. Вычислить Δy
7. Вычислить новое значение $y = y + \Delta y$
8. Конец цикла по х.

{ МЕТОД РУНГЕ - КУТТА $y' = \sin(y) + x * x$ }

```
program Range;

uses crt;

var

x, y, a,b,h, k1, k2, k3, k4,d:real;

function f (x, y:real):real;

begin

f:=sin(y)+x*x;

end;

begin

clrScr ;

writeln (' введите начало отрезка ');

readln(a);

writeln (' введите конец отрезка ');

readln(b);

writeln (' введите начальное значение y(0) ');

readln(y);

writeln (' введите шаг ');

readln(h);

x:=a;

while x<=b do begin

writeln (' x=', x : 7 : 5, ' y=', y : 7 : 5 );

k1:=h* f ( x, y );

k2: h*f(x+h/2, y+k1/2);

k3:=h*f(x+h/2, y+k2/2);
```

```
k4:=h*f(x+h/2, y+k3/2) ;  
d: = (k1+2* k2+2*k3+k4) /6;  
y:y+d;  
x:=x+h  
end;  
readln;  
end.
```


Инструкция к использованию программы:

Интегрируемую функцию записать в коде программы в функции
function f(x, y: real):real;

После « f:= »

Запустить программу.

Ввести начало отрезка интегрирования и конец отрезка интегрирования.

Ввести начальное значение и шаг.

Результаты будут выведены на экран.

Тестовый пример:

Интегрируемая Функция равна $\sin(y) + x \cdot x \cdot (y')$

Ответ:

Введите шаг

0,1

x=0,00000 y=0,00000

x = 0,1

x = 0,2

— —

— —

— —

x = 0,8

x = 0,90000

```

{Метод Эйлера    $y' = \cos(y) + 3x$  }
program eyler;
uses crt;
var
x, y, a, b, h: real ;
begin:
clrScr;
writeln (' Ввод начальной точки сегмента ');
readln(a) ;
writeln (' Ввод конечной точки сегмента ');
readln (b);
writeln (' Ввод начального значения  $y(0)$  ');
readln (y);
writeln (' Ввод шага ');
readln (h);
x:=a ;
while x<=b do begin

writeln ('x=', x:7:5, '   y=', y:7:5 );
y: y+h*(cos(y) + 3*x);
x:=x+h;
end;
readln;
end.

```

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Н. С. Бахвалов и др. «Численные методы». М.Наука. 1987.
2. В. П. Демидович и др. «Основы вычислительной математики». М. Наука. 1987.
3. Березин И. С. и др. «Методы вычислений». М.Наука. 1996.
4. Исроилов М. «Ҳисоблаш усуллари» Тошкент. Ўзбекистон. 2003.
5. Б.Х. Хўжаёров «Қурилиш масалаларини сонли ечиш усуллари».-Тошкент 1995.