

Казанский федеральный университет

Кафедра прикладной математики

Кафедра аэрогидромеханики

А.А. САЛАМАТИН, А.М. КАМАЛУТДИНОВ

ЗАДАЧИ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
В ПРОЦЕССАХ
С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Казань, 2021

УДК 519.677

ББК 22.193

*Принято на заседании учебно-методической комиссии
Института вычислительной математики и
информационных технологий КФУ
Протокол № 8 от 19 марта 2021 года*

Рецензент

доктор физико-математических наук **И. Б. Бадриев**

Саламатин А. А., Камалутдинов А. М.

Задачи прикладной математики в процессах с сосредоточенными параметрами (с примерами на языке MatLab): учебное пособие. — Казань: Казан. ун-т, 2021. — 111 с.

В учебном пособии на основе математических моделей, представленных задачами для обыкновенных дифференциальных уравнений, обсуждаются подходы к изучению физических процессов с сосредоточенными параметрами. Рассмотренные примеры демонстрируют особенности применения основных численных и аналитических методов (Рунге–Кутты, пристрелки, регулярных асимптотических разложений) решения подобных задач. Обсуждение сопровождается примерами реализации в пакете прикладных программ MatLab.

Пособие предназначено для студентов, аспирантов и научных работников, специализирующихся в области прикладной математики и математического моделирования.

© Саламатин А. А., 2021

© Камалутдинов А. М., 2021

© Казанский университет, 2021

Оглавление

Предисловие	5
Глава 1. Типы задач с сосредоточенными параметрами	9
§ 1.1. Пример задачи Коши: полет снаряда под действием силы тяжести	9
§ 1.2. Формальное определение задачи Коши	14
§ 1.3. Элементы теории задач Коши	18
§ 1.4. Автономные задачи: фазовое пространство	23
§ 1.5. Двухточечные краевые задачи	31
§ 1.6. Задания для самостоятельного выполнения	35
Глава 2. Семейство методов Рунге-Кутты	38
§ 2.1. Историческая справка	38
§ 2.2. Сеточные функции	40
§ 2.3. Эквивалентная интегральная формулировка задачи Коши	43
§ 2.4. Методы Рунге-Кутты	46
§ 2.5. Автоматический выбор шага	50
§ 2.6. Задания для самостоятельного выполнения	52
Глава 3. Примеры процессов с сосредоточенными параметрами	53
§ 3.1. Пример плохо обусловленной задачи Коши	53
§ 3.2. Гравитационный маневр	63

§ 3.3. Сверхкритическая флюидная экстракция . . .	79
§ 3.4. Автомодельная задача в теории сверхкритической флюидной экстракции	96
Рекомендуемая литература	111

Предисловие

В настоящем учебном пособии демонстрируется спектр возможностей математического моделирования при исследовании технологических процессов и физических явлений на основе подходов и методов механики сплошной среды. В настоящее время математические модели широко применяются при прогнозировании, оптимизации и контроле процессов и явлений. Для этого развиты методы количественного и качественного исследования соответствующих математических задач. Применению этих методов отводится значительная часть пособия.

Круг рассматриваемых методов, а также примеры их применения ограничены задачами с «сосредоточенными параметрами». В литературе под сосредоточенным параметром принято понимать такой параметр системы, который связан с одной точкой пространства или телом. В данном пособии это понятие трактуется значительно шире.

К рассматриваемому кругу задач отнесены процессы, для которых математическая запись модели может быть параметризована характеристиками, зависящими только от одной, но весьма произвольной независимой переменной. В классическом понимании это время. В случае (квази)стационарных процессов с определенным видом пространственной симметрии это пространственная координата; определению подлежат мгновенные пространственные распределения характеристик.

Наконец, явление развивающееся в двух «координатных

направлениях», одним из которых может быть время, является примером автомоделного процесса, если его параметризация может быть выбрана так, что определяемые характеристики являются функциями одной независимой переменной. Сама переменная при этом может представлять собой сложную комбинацию «координат» и самих характеристик.

Применение моделей неизбежно требует привлечения качественных и/или количественных методов их исследования. Рассматриваемые качественные методы включают подходы теории подобия и анализа размерностей с выделением характерных масштабов процесса, метод регулярного асимптотического разложения и другие. Класс рассматриваемых количественных (численных) методов Рунге–Кутты является основным и достаточно мощным при исследовании большинства процессов с сосредоточенными параметрами.

Количественные методы исследования физических процессов предоставляют принципиальную возможность строить решения соответствующих математических задач с любой наперед заданной точностью. Однако для этого необходимо многократное выполнение арифметических операций по определенному алгоритму, описывающему выбранный численный метод. Человеческий мозг не способен решать такие задачи с достаточной скоростью. Именно созданием электронных вычислительных машин (ЭВМ) и их широким внедрением в последние десятилетия объясняется рост возможностей математического моделирования и его влияние на научно-технический прогресс.

Учебное пособие содержит подробное обсуждение реализации рассматриваемых численных алгоритмов в виде комплекса программ для ЭВМ. В качестве среды разработки выбран «пакет прикладных программ для решения задач технических вычислений» MatLab (сокращение от Matrix Laboratory) с од-

ноименным языком программирования. Этот пакет в настоящее время активно развивается и является одним из наиболее мощных программных комплексов с точки зрения производительности, набора реализованных алгоритмов и возможности интеграции с библиотеками, написанными на других языках программирования.

Учебное пособие организовано следующим образом. В первых двух главах обсуждаются вопросы теории задач для процессов с сосредоточенными параметрами. В главе 1 приводятся определения задач для дифференциальных уравнений с начальными данными – задачи Коши – и краевых задач, формулируются условия существования решения и метод пристрелки для решения краевых задач. В главе 2 излагается понятие сеточной функции, и приводятся основные методы численного решения задач Коши из класса методов Рунге–Кутты.

В главе 3 рассмотрены конкретные процессы. В первом параграфе на примере плохообусловленной системы дифференциальных уравнений демонстрируется общая идея применения численных методов. В сравнении с аналитическим решением демонстрируется понятие «сеточной сходимости» и преимущество методов более высокого порядка точности. Во втором параграфе рассматривается задача о гравитационном маневре космического аппарата около небесного тела. Эта задача изначально формулируется как задача с сосредоточенными параметрами, в роли которых выступают координаты и скорости взаимодействующих тел, и является типичным представителем этого класса проблем. Наоборот, процесс сверхкритической флюидной экстракции, рассмотренный в двух последних параграфах, характеризуется существенно распределенными параметрами. Однако его параметризацию оказалось возможным свести к задаче относительно одной независимой переменной. На этом примере демонстрируется решение краевых

и автомодельных задач.

Авторы были бы весьма благодарны читателям, приславшим свои замечания и предложения по данному пособию на адрес электронной почты aasalamatin@kpfu.ru.

Результаты, изложенные в отдельных разделах издания, получены при поддержке средств РФФИ, проект № 18-41-160001.

Глава 1

Типы задач с сосредоточенными параметрами

§ 1.1. Пример задачи Коши: полет снаряда под действием силы тяжести

Для того чтобы пояснить основные понятия, которые будут использоваться далее, рассмотрим задачу о полете снаряда под действием силы тяжести. Соответствующая модель, выраженная дифференциальным уравнением, является типичным примером задачи Коши.

Сформулируем задачу и основные допущения. Схема полета снаряда с основными обозначениями изображена на рисунке 1.1. Снаряд выпущен из некоторой точки \mathbf{r}^0 с начальной скоростью \mathbf{v}^0 . Примем, что гравитационное поле Земли однородно и направлено параллельно самому себе, «вертикально вниз», во всех точках области, через которые может пролететь снаряд. Таким образом, мы пренебрегли кривизной поверхности Земли. Следовательно, вектор ускорения свободного падения \mathbf{g} постоянен. Влияние остальных сил не учитывается. Тогда в условиях механики Ньютона уравнение движения снаряда — материальной точки¹ — в векторном виде можно

¹В физике под материальной точкой понимают физический объект, размеры которого несущественны для рассматриваемой задачи.

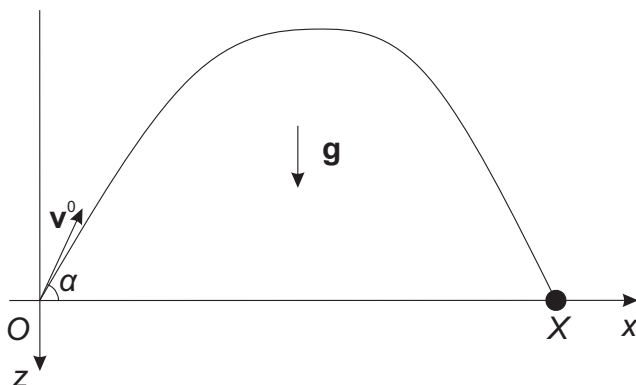


Рис. 1.1: Траектория – парабола – полета снаряда, выпущенного из начала координат, под углом α к горизонту с начальной скоростью \mathbf{v}^0 . Вертикальная стрелка указывает направление вектора ускорения свободного падения \mathbf{g} . Система координат выбрана так, что полет осуществляется в плоскости Oxz . Начало системы координат совпадает с начальным положением снаряда. Точка $x = X$ на горизонтальной оси координат, отмеченная маркером, показывает цель, в которую должен попасть снаряд.

записать следующим образом

$$\ddot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{g}, \quad (1.1)$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор материальной точки в текущий момент времени t , точка над символом означает дифференцирование по времени. Соответственно, $\ddot{\mathbf{r}}$ означает вторую производную радиус-вектора — ускорение материальной точки в текущий момент времени, которое в силу второго закона Ньютона для рассматриваемой задачи равно постоянному вектору — \mathbf{g} — ускорению, обусловленному силой тяжести.

Простота векторного уравнения (1.1) допускает его непосредственный анализ. Однократное интегрирование уравнения по времени позволяет найти зависимость скорости полета снаряда от времени

$$\dot{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{v} = \mathbf{v}^0 + \mathbf{g}(t - t_0), \quad (1.2)$$

где t_0 — начальный момент времени, в который был выпущен снаряд. Повторным интегрированием найдем текущее положение материальной точки, заданное ее радиус-вектором

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}^0 + \mathbf{v}^0(t - t_0) + \mathbf{g}\frac{(t - t_0)^2}{2}, \quad (1.3)$$

где \mathbf{r}^0 — радиус-вектор начального положения снаряда, в момент времени $t = t_0$.

Уравнения (1.1)–(1.3) следует понимать в векторном смысле. В трехмерном Евклидовом пространстве они эквивалентны трем скалярным компонентам. Конкретный вид каждого из трех скалярных уравнений зависит от выбора системы координат, ее ориентации относительно исследуемой системы тел. Выберем Декартову систему координат, в которой положение \mathbf{r} любой точки пространства дается тройкой чисел (x, y, z) . Если известна зависимость текущего положения снаряда от времени, то набор функций $(x(t), y(t), z(t))$ задает траекторию движения точки² в материальном (физическом) пространстве³ в параметрическом виде, где время t выступает в роли параметра. Каждое уникальное значение t определяет единственное положение снаряда в пространстве.

²В механике траекторией движения материальной точки называется множество точек пространства, через которые проходит точка в процессе своего движения.

³Мы также будем различать фазовое пространство, о котором речь пойдет дальше

Общее решение (1.3) дифференциального уравнения (1.1) содержит 6 неизвестных констант. Они имеют смысл трех компонент начального положения материальной точки, \mathbf{r}^0 , и трех компонент начальной скорости, \mathbf{v}^0 . Таким образом, у материальной точки остается шесть степеней свободы, которые фиксируются соответствующим заданием компонент векторов \mathbf{r}^0 и \mathbf{v}^0 . Однако часто исследователя не интересует положение материальной точки относительно других объектов. Тогда систему координат можно выбирать весьма произвольно. Примем для удобства записи решения уравнений в компонентном виде, что начало системы координат совпадает с начальным положением материальной точки. Ось z направим параллельно вектору \mathbf{g} . Поворотом системы координат вокруг оси z можно добиться того, чтобы оси x и z вместе с начальной скоростью \mathbf{v}^0 стали компланарными. Тогда начальные условия, векторы \mathbf{r}^0 и \mathbf{v}^0 , примут следующий вид

$$\mathbf{r}^0 = (0, 0, 0), \quad \mathbf{v}^0 = (v_x^0, 0, v_z^0).$$

Конкретная траектория получается в результате задания двух оставшихся свободных констант, v_x^0 и v_z^0 . Их задание эквивалентно заданию модуля v^0 начальной скорости и угла α , под которым вылетел снаряд

$$v_x^0 = v^0 \cos \alpha, \quad v_z^0 = -v^0 \sin \alpha.$$

Теперь можно считать, что аналитическое решение задачи⁴ о полете снаряда получено в общем виде. Однако исследование задачи и знакомство с основными понятиями, связанными с задачами Коши, на этом не завершены.

⁴Решение, заданное в аналитическом виде, предполагает, что любые интересующие исследователя характеристики могут быть вычислены точно на основе имеющейся формулы. Наоборот, численное, то есть приближенное, решение позволяет получить искомые значения лишь с некоторой наперед заданной точностью.

Запишем векторное уравнение (1.1) в компонентном виде в указанной Декартовой системе координат

$$\ddot{x} = g_x = 0, \quad \ddot{y} = g_y = 0, \quad \ddot{z} = g_z = g. \quad (1.4)$$

Такая система уравнений называется системой дифференциальных уравнений второго порядка (по величине старшей производной) размерности 3 (по числу уравнений). Система уравнений разрешена относительно старшей производной. Это означает, что правая часть всех уравнений не зависит от старшей производной искомой функции, то есть от ускорения материальной точки. Применяя стандартный подход, известный из курса дифференциальных уравнений, уравнения (1.4) можно свести к эквивалентной системе первого порядка размерности 6. Для этого набор искомых функций – координат материальной точки – дополним тремя компонентами скорости точки (v_x, v_y, v_z) с учетом определения

$$\dot{x} = v_x, \quad \dot{y} = v_y, \quad \dot{z} = v_z, \quad (1.5)$$

$$\dot{v}_x = g_x, \quad \dot{v}_y = g_y, \quad \dot{v}_z = g_z. \quad (1.6)$$

Обратите внимание, что правая часть всех уравнений по-прежнему не содержит явным образом ни одной производной. Как отмечалось выше, в общем случае произвольного задания системы координат, ее ориентации относительно вектора начальной скорости точки, траектория снаряда определяется шестью свободными параметрами. Количество свободных параметров совпадает с количеством неизвестных функций в системе (1.5)–(1.6). Это наблюдение важно для дальнейших рассуждений.

Совокупность дифференциальных уравнений (1.5)–(1.6) и заданных начальных условий

$$\mathbf{v}|_{t=t_0} = \mathbf{v}^0, \quad \mathbf{r}|_{t=t_0} = \mathbf{r}^0$$

образует задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Иногда такие задачи называют начальными по аналогии с английским термином «initial-value problem». Задание начального условия необходимо, чтобы выделить единственное решение из семейства траекторий, удовлетворяющих дифференциальным уравнениям задачи. В дальнейшем без ограничения общности будем считать, что начальный момент времени отвечает $t = t_0 \equiv 0$.

§ 1.2. Формальное определение задачи Коши

Рассмотренный пример демонстрирует, что динамика полета снаряда может быть описана обыкновенными дифференциальными уравнениями (ОДУ). Однако область применения ОДУ к описанию окружающих явлений этим не ограничивается. Обыкновенными дифференциальными уравнениями можно описать задачи движения системы взаимодействующих материальных точек (задачи небесной механики или баллистики), химической кинетики, электрических цепей с сосредоточенными параметрами, задачи капиллярности и гидростатики и многие другие. Ряд важных задач для уравнений в частных производных также сводится к задачам для обыкновенных дифференциальных уравнений; примеры этого будут даны в следующих главах. Таким образом, решение обыкновенных дифференциальных уравнений занимает важное место среди прикладных задач физики, химии и техники. При этом конкретная прикладная задача может приводить к дифференциальному уравнению любого порядка, или к системе уравнений любого порядка. Например, химическая кинетика описывается системой уравнений первого порядка; число уравнений равно числу химических веществ. Как мы видели ранее, трехмерное движение материальной точки описывается системой

трех уравнений второго порядка.

Определим понятия, необходимые для дальнейших рассуждений. Через $u(t)$ будем обозначать искомую функцию независимого аргумента t . Выбор обозначения для аргумента объясняется тем, что, как правило, ОДУ описывают эволюцию некоторого процесса по времени⁵. Скалярное дифференциальное уравнение первого порядка, разрешенное относительно производной, записывается следующим образом

$$\dot{u} = f(t, u), \quad (1.7)$$

где f — заданная функция своих двух аргументов, а точка над обозначением функции — производная по аргументу t . Таким образом, f задает скорость \dot{u} изменения текущего состояния системы. Последнее однозначно характеризуется набором чисел (t, u) . Некоторая функция $u(t)$ называется решением уравнения (1.7), если для всех t из отрезка $[0; T]$ выполняется тождественно

$$\dot{u}(t) \equiv f(t, u(t)).$$

Еще Ньютон, Лейбниц и Эйлер заметили, что решение уравнения (1.7) обычно содержит свободный параметр. Этот факт отмечался и в предыдущем разделе. Таким образом, уравнению (1.7), как правило, удовлетворяет семейство функций. Единственное решение⁶ может быть выделено⁷, если за-

⁵Иногда роль времени играет другая физическая величина. Так, к решению задачи Коши можно свести проблему построения кривой в пространстве, заданной пересечением нескольких поверхностей. Тогда роль «времени» будет играть длина дуги вдоль траектории. Начальное условие — некоторая точка, принадлежащая траектории.

⁶Под решением будем понимать однозначную непрерывную функцию, значения которой определяются величиной независимого аргумента — времени. Значение времени изменяется в некотором интервале $0 \leq t \leq T$.

⁷Достаточные условия существования единственного решения задачи Коши обсуждаются в § 1.3.

дано значение искомой функции в начальный момент времени⁸

$$u|_{t=0} = u^0. \quad (1.8)$$

В более общей постановке рассматривается дифференциальное уравнение порядка n

$$\frac{d^n u}{dt^n} = f(t, \dot{u}, \ddot{u}, \dots, u^{(n-1)}) \quad (1.9)$$

или система из I таких уравнений. В последнем случае уравнения могут быть разных порядков, которые обозначим n_1, n_2, \dots, n_I , и примем, что $n = n_1 + n_2 + \dots + n_I$. При любом числе уравнений система таких ОДУ, разрешенных относительно старшей производной⁹, может быть сведена к системе n уравнений первого порядка. Продемонстрируем подход на примере уравнения (1.9). Припишем искомой функции индекс: $u(t) = u_1(t)$. Все производные, кроме старшей, будем считать новыми искомыми функциями: $u^{(i)}(t) = u_{i+1}(t)$, $i = 0..n - 1$. Тогда с учетом определений для новых искомым функций уравнение (1.9) можно переписать в виде системы n уравнений первого порядка

$$\begin{aligned} \dot{u}_n &= f(t, u_1, u_2, \dots, u_n), \\ \dot{u}_i &= u_{i+1}, \quad i = 1..n - 1. \end{aligned}$$

Заметим, что такое преобразование было выполнено в параграфе § 1.1, когда система трех уравнений второго порядка была сведена к системе шести уравнений первого порядка относительно трех компонент радиус-вектора и скорости материальной точки.

⁸ Обычно достаточно указать некоторую точку $(t_1, y(t_1))$, $0 \leq t_1 \leq T$, которая принадлежит решению. Как правило, эта точка является начальной для траектории, $t_1 = 0$.

⁹ Уравнения, не разрешенные относительно старшей производной, выходят за рамки данного пособия.

Для компактной записи задач, включающих n неизвестных функций, удобно пользоваться векторной формой. Так неизвестная, подлежащая определению вектор-функция \mathbf{u} содержит n скалярных компонент (u_1, u_2, \dots, u_n) . Вектор правых частей \mathbf{f} также содержит n скалярных функций (f_1, f_2, \dots, f_n) , где каждая функция f_i , $i = 1..n$ зависит в общем случае от независимого аргумента t и от всех n искомым функций, вычисленных для текущего значения t . Математически это записывается следующим образом

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}), \quad (1.10)$$

что предполагает покомпонентное равенство левой и правой части векторного уравнения.

Для задачи о полете снаряда под действием силы тяжести можно установить однозначное соответствие между компонентами векторов \mathbf{u} и \mathbf{f} и их физическим смыслом

$$u_1 = x, \quad u_2 = y, \quad u_3 = z, \quad u_4 = v_x, \quad u_5 = v_y, \quad u_6 = v_z,$$

$$f_1 = v_x, \quad f_2 = v_y, \quad f_3 = v_z, \quad f_4 = g_x, \quad f_5 = g_y, \quad f_6 = g_z.$$

Аналогично придается физический смысл компонентам начального условия \mathbf{u}^0 . Такое соответствие между абстрактной записью (1.10) и искомыми функциями конкретной задачи должно устанавливаться каждый раз, когда решается прикладная задача. В частности, это предполагает установление порядкового номера для каждого уравнения задачи. Далее, обычно принимается, что функция, стоящая в левой части уравнения под номером i под знаком производной, есть i -ая компонента неизвестной вектор-функции \mathbf{u} . Естественно, что выбор нумерации для искомым функций ограничен только удобством исследования задачи и выполнения расчетов.

Как обсуждалось выше, система n -го порядка (1.10) характеризуется семейством решений, которое в общем случае

зависит от n параметров $\mathbf{c} = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}$ и может быть записано в форме $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t, \mathbf{c})$. Для определения значений этих параметров, т.е. для выделения единственного (или нужного) решения, необходимо наложить n дополнительных условий на функции $u_i(t)$. В случае задачи Коши для ОДУ все условия накладываются в единственной точке $t = 0$ ¹⁰

$$\mathbf{u}(0, \mathbf{c}) = \mathbf{u}^0. \quad (1.11)$$

Таким образом, задачей Коши (1.10)–(1.11) называется математическая запись модели некоторого процесса, для которого характерно изменение (эволюция) во времени. С математической точки зрения, определяющим условием является то, что искомая функция $u(t)$ или система функций $u_1(t), u_2(t), \dots, u_n(t)$ зависят лишь от одной независимой переменной, которую принято обозначать t ¹¹. При этом текущее состояние процесса однозначно характеризуется набором чисел $(t, u_1, u_2, \dots, u_n)$ и определяет скорость изменения процесса посредством задания правых частей f_1, f_2, \dots, f_n . Численные методы построения приближенного решения задачи Коши позволяют по заданному начальному состоянию процесса $(u_1^0, u_2^0, \dots, u_n^0)$, соответствующему некоторому $t = t_0$, определить состояния, отвечающие будущим (и/или прошлым) моментам времени. При выполнении стандартных ограничений на вид правой части задачи Коши интегрирование можно вести как в сторону возрастания времени, так и в сторону его убывания.

¹⁰ Существуют и другие классы задач, в которых дополнительные условия накладываются в разных точках. Они также будут рассмотрены в следующих параграфах. Методы их решения, как правило, сводятся к многократному решению эквивалентной задачи Коши.

¹¹ Набор искомым функций $(u_1(t), u_2(t), \dots, u_n(t))$ можно интерпретировать как координаты точек кривой в n -мерном пространстве. Такое пространство называется фазовым. Кривую называют интегральной кривой.

§ 1.3. Элементы теории задач Коши

Существование, единственность и непрерывность решения задачи Коши определяется следующими теоремами, которые приводятся здесь для полноты рассуждений, но без доказательства

Теорема 1. *Если правые части (1.10) непрерывны и ограничены в окрестности начальной точки $\{t = 0, \mathbf{u}^0\}$ интегральной кривой, то задача Коши (1.10)–(1.11) имеет решение. Однако это решение может быть не единственным.*

Теорема 2. *Если правые части не только непрерывны, но и удовлетворяют условию Липшица¹² по переменным u_i , то решение задачи Коши единственно и непрерывно зависит от координат начальной точки. Это означает корректность постановки задачи Коши.*

Теорема 3. *Если вдобавок правые части имеют непрерывные производные вплоть до p -го порядка по всем аргументам (включая t), то решение $u(t)$ имеет $(p + 1)$ -ю непрерывную производную по t .*

Эти теоремы следует учитывать при численных расчетах. Если выполнены только условия теоремы 1, то задача Коши некорректна, и численный расчет может «перескакивать» с

¹²Функция $f(t, u)$ удовлетворяет условию Липшица по переменной u на отрезке $[a; b]$, если существует такая константа L , что выполняется условие $|f(t, u') - f(t, u'')| < L|u' - u''|$ для любых пар значений u' и u'' из отрезка $[a; b]$.

одного допустимого решения на другое. При выполнении теоремы 2 численный расчет (по хорошей схеме) будет сходиться к точному решению, но оценку его точности невозможно получить. В условиях теоремы 3 целесообразно использовать схемы p -го порядка точности либо схемы меньшего порядка точности с уточнением по Ричардсону до p -го порядка; но использовать схемы порядка точности более p -го бессмысленно.

Методы решения можно условно разбить на точные, приближенные и численные. К *точным* относятся методы, позволяющие выразить решение через элементарные функции либо представить его в виде квадратур от элементарных функций. Так, решение в элементарных функциях было получено в параграфе § 1.1 для задачи о полете снаряда. Решение задачи в квадратурах получено в параграфе § 3.3 для модели, описывающей динамику сверхкритической флюидной экстракции (СКФЭ). Эти методы изучают в курсах ОДУ. Нахождение точного решения всегда желательно. Однако это удается сделать лишь для отдельных классов уравнений. Например, несложное уравнение

$$\dot{u} = u^2 + t^2$$

не решается в элементарных функциях.

Приближенными называют методы, в которых решение представляется как предел некоторой последовательности элементарных функций или их комбинаций $y_k(t)$ либо квадратур от таких комбинаций:

$$u(t) = \lim_{k \rightarrow \infty} y_k(t).$$

Соответствующий итерационный процесс предполагает, что каждое следующее приближение $y_k(t)$ ближе к точному решению в некоторой метрике с ростом номера k итерации. Конечная k -я итерация процесса дает приближенное выражение

$u(t)$ через элементарные функции или квадратуры. К приближенным методам относятся разложение решения в степенной или обобщенный степенной ряд, методы Пикара, Чаплыгина, Пуанкаре (малого параметра) и др. Их довольно часто использовали до появления компьютеров. Несмотря на то, что в настоящее время они почти полностью вытеснены численными методами, эти подходы остаются мощными инструментами анализа так как позволяют получить простые аналитические формулы, пригодные для инженерных расчетов и демонстрирующие основные особенности исследуемого процесса.

В *численных* методах (которые мы также будем называть приближенными) выбирается некоторая сетка значений аргумента $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_m = T$ и по некоторому алгоритму вычисляются (приближенные) значения решения $\mathbf{u}_n = \mathbf{u}(t_n)$ в узлах этой сетки. Решение при этом имеет вид таблицы. В отличие от двух других типов методов численные методы не позволяют найти общее решение системы дифференциальных уравнений (1.10). Они дают лишь какие-то частные решения, например, решение задачи (1.10)–(1.11), и существенно эксплуатируют дополнительные условия (1.11) для одновременного определения констант интегрирования. Зато эти методы применимы к широкому классу ОДУ, встречаемых на практике, и различным типам задач для них. Поэтому с появлением компьютеров численные методы стали основным инструментом решения прикладных задач.

Обусловленность. Численные методы можно применять только к корректно поставленным (или регуляризованным) задачам. Корректно поставленная задача отвечает трем требованиям: существование решения, его единственность и непрерывная зависимость от входных данных. Последнее означает, что если вариации входных данных

$\delta \mathbf{u}^0 \rightarrow 0$, то соответствующие вариации решения $\delta \mathbf{u} \rightarrow 0$. Это формально выполняется, например, если

$$\|\delta \mathbf{u}\| < c(t)\|\delta \mathbf{u}^0\|, \quad (1.12)$$

где $c(t)$ – ограниченная на $[0; T]$ функция.

Однако на практике возникают задачи, где $c(t)$ ограничена, но может принимать очень большие значения. Такие задачи называют плохо обусловленными. Они формально корректны, но весьма трудны для численного расчета. В них ничтожные ошибки начальных данных, или эквивалентные им погрешности численного метода, и даже ошибки компьютерного округления могут сильно исказить решение.

Для демонстрации обусловленности задачи Коши рассмотрим линейную задачу первого порядка

$$\dot{u} = \lambda u, \quad u(0) = u^0 + \varepsilon^0,$$

где ε^0 – погрешность в задании начального условия $u(0) = u^0$. Решение задачи имеет следующий вид

$$u = (u^0 + \varepsilon^0) \exp(\lambda t).$$

Вычислим вариацию решения при постоянных u^0 и λ

$$\delta u = \exp(\lambda t) \delta u^0, \quad \delta u^0 \equiv \varepsilon^0,$$

откуда немедленно идентифицируем $c(t) = \exp(\lambda t)$. Очевидно, что в данном случае обусловленность задачи определяется знаком множителя λ .

В рассмотренном примере множитель $c(t)$ равномерно ограничен только при $\lambda < 0$, когда выполняется $c(t) \leq c(0)$ при $t \geq 0$. При положительных λ функция $c(t) \leq c(T)$ также ограничена на конечных отрезках $0 \leq t \leq T$. Но верхнее значение увеличивается с ростом T , поэтому рассмотренный

пример является плохообусловленной задачей Коши (при положительных λ)¹³.

Рассмотрим процесс распространения погрешностей, внесенных в начальные значения в случае произвольной правой части $f = f(t, u)$. Пусть u — решение точной задачи с начальным условием $u(0) = u^0$, и u^* — решение возмущенной задачи, в которой возмущение внесено в начальное условие, $u^*(0) = u^0 + \varepsilon^0$. Через $\varepsilon(t) = u^* - u$ обозначим разность двух решений, которая удовлетворяет следующей дифференциальной задаче

$$\dot{\varepsilon} = f(t, u^*) - f(t, u) = \frac{\partial f(t, \tilde{u})}{\partial u}(u^* - u) \equiv \lambda(t)\varepsilon, \quad \varepsilon(0) = \varepsilon^0.$$

Здесь второе равенство — формула Лагранжа для конечных приращений, и \tilde{u} — промежуточное значение искомой функции. Решение этой задачи Коши дается следующей формулой

$$\varepsilon(t) = c(t)\varepsilon^0, \quad c(t) = \exp\left(\int_0^t \lambda(\tau)d\tau\right),$$

где величина $c(t)$ характеризует распространение возмущений. Заметим, таким образом, что на поведение ошибки существенное влияние оказывает производная правой части дифференциального уравнения по второму аргументу, $\partial f(t, u)/\partial u$.

§ 1.4. Автономные задачи: фазовое пространство

Автономизация задачи. В качестве особого класса выделяют задачи, в которых правая часть \mathbf{f} не содержит явным образом времени, то есть $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$. Такие задачи называются

¹³ Любопытно, что выводы изменяются на противоположные при интегрировании в сторону отрицательных значений t .

автономными. Задачи, правая часть которых зависит явным образом от t , будем называть *неавтономными*. Заметим, что неавтономную задачу можно свести к автономной, если определить новую «искомую» функцию $u_{n+1} = t$ и новую независимую переменную. Обозначим ее через s и положим $ds = dt$. Тогда дополнительное уравнение примет вид

$$\dot{u}_{n+1} = f_{n+1} \equiv 1. \quad (1.13)$$

В новой задаче точка над u_i понимается как дифференцирование по новому независимому аргументу s . Платой за произведенное преобразование является повышение размерности задачи на единицу.

Есть еще один способ автономизации задачи, который часто оказывается полезным применять даже для автономных систем. Рассмотрим интегральную кривую в n -мерном пространстве переменных (u_1, u_2, \dots, u_n) , где компонента u_n вектора неизвестных функций может быть результатом проведенной процедуры автономизации (1.13) для задачи порядка $n-1$. Длина дуги этой кривой определяется соотношением

$$(dl)^2 = \sum_{i=1}^n (du_i)^2. \quad (1.14)$$

Выразим дифференциалы искоемых функций, используя систему ОДУ задачи (1.10)–(1.11), и подставим их в уравнение (1.14)

$$(dl)^2 = (dt)^2 \sum_{i=1}^n f_i^2. \quad (1.15)$$

Заменим в (1.10) приращение dt на dl с помощью (1.15) и получим следующую эквивалентную систему n -го порядка:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dl} = \mathbf{F}(\mathbf{u}), \quad \mathbf{F} = (F_1, F_2, \dots, F_n), \quad (1.16)$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{f} / \sqrt{\sum_{i=1}^n f_i^2}. \quad (1.17)$$

Правые части системы (1.16)–(1.17) не зависят явно от нового независимого аргумента l , так что система автономна. Начальные данные для задачи Коши берутся из (1.11), а начальное значение $l = l_0$ длины дуги в силу автономности новой задачи можно принять любым, например, $l_0 = 0$. Однако значение $l = L(T)$, отвечающее конечному моменту времени, $t = T$, неизвестно. Оно определяется из условия, что интегрирование должно вестись пока не выполнится равенство $t = T$ ¹⁴. Соответствующее значение l и будет искомой величиной L .

Автономизация с помощью длины дуги имеет важное преимущество. При этом вектор правых частей в (1.16) имеет единичную длину:

$$\sum_{i=1}^n F_i^2(u) = 1.$$

Это означает, что среди производных du_i/dl нет больших по величине, что облегчает численное решение задачи.

Фазовое пространство. Решение автономной задачи Коши удобно интерпретировать как траекторию в многомерном пространстве, заданную параметрически. Ее также называют интегральной кривой. Отдельная траектория определяется уникальным набором значений неизвестных констант решения. Размерность пространства совпадает с количеством искомых функций. Сами функции определяют оси координат этого пространства, которое при-

¹⁴Для отслеживания момента прекращения интегрирования в случаях, когда правый конец отрезка интегрирования не задан явно, используется понятие «событие». Соответствующие примеры разобраны в главе 3.

нято называть фазовым¹⁵. Концепция фазового пространства была разработана в конце XIX века Людвигом Больцманом, Анри Пуанкаре и Уиллардом Гиббсом.

С помощью фазовых пространств возможно визуальное исследование задач второго порядка. Соответствующие траектории могут быть изображены на плоскости с координатами $(u_1; u_2)$. В качестве примера вновь рассмотрим задачу о полете снаряда, которая в частном случае может быть сведена к двум искомым функциям. По-прежнему, будем считать, что ось z направлена параллельно вектору ускорения силы тяжести. В начальный момент времени снаряд выпущен вертикально, вверх или вниз. Тогда можно показать на основе формул (1.2) и (1.3), что траектория полета снаряда в физическом пространстве (x, y, z) остается вертикальной прямой, заданной условиями $x = const$ и $y = const$. Текущее состояние снаряда описывается решением автономной задачи Коши второго порядка

$$\dot{z} = v_z, \quad \dot{v}_z = g, \quad z|_{t=0} = z^0, \quad v_z|_{t=0} = v_z^0. \quad (1.18)$$

Решение задачи (1.18) в параметрическом виде, $(z(t), v_z(t))$, запишется следующим образом

$$z(t) = z^0 + v_z^0 t + \frac{gt^2}{2}, \quad (1.19)$$

¹⁵ Фазовое пространство – пространство, каждая точка которого соответствует одному и только одному состоянию из множества всех возможных состояний системы. Точка пространства, соответствующая состоянию системы, называется «изображающей» или «представляющей» для него. Таким образом, изменению состояний системы, – т.е. её динамике – можно сопоставить движение изображающей точки; траекторию этой точки называют фазовой траекторией (следует отметить, что она не тождественна действительной траектории движения), а скорость такой изображающей точки называют фазовой скоростью. Фазовый портрет исследуемой системы – это совокупность фазовых траекторий для всевозможных начальных условий.

$$v_z(t) = v_z^0 + gt. \quad (1.20)$$

Выражая время из уравнения (1.20) и подставляя результат в уравнение (1.19), получим явную зависимость $z(v_z)$

$$z(v_z) = z^0 + \frac{v_z^2 - v_0^2}{2g}, \quad (1.21)$$

которую удобно представить в виде закона сохранения полной механической энергии материальной точки единичной массы

$$-gz + \frac{v_z^2}{2} = -gz^0 + \frac{v_0^2}{2} \equiv E_0. \quad (1.22)$$

Любопытно, что несмотря на то, что два постоянных параметра характеризуют траекторию полета материальной точки в физическом пространстве, из них можно составить комплекс, имеющий смысл механической энергии. Значения этого единственного комплекса достаточно для выделения единственной траектории, но не текущего положения на траектории фазового пространства.

Уравнение (1.22) также называется первым интегралом задачи. Оно связывает искомые функции и не содержит независимого аргумента. Часто первый интеграл можно получить иным способом, без аналитического решения задачи. Продемонстрируем это на текущем примере, который является частным случаем второго закона Ньютона для материальной точки. Домножим первое уравнение задачи на \dot{v}_z , в левой части заменим \dot{v}_z на g согласно второму уравнению и учтем, что $2v_z\dot{v}_z = dv_z^2/dt$. Тогда

$$g \frac{dz}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dv_z^2}{dt}. \quad (1.23)$$

В результате однократного интегрирования по времени получается искомый первый интеграл (1.22). Знак «-» в выражении для потенциальной энергии, $U = -gz$, отражает тот факт,

что ось z направлена вертикально вниз, и потенциальная энергия должна убывать вдоль направления действия силы тяжести. Последнее задано вектором \mathbf{g} .

Из полученного первого интеграла следует, что любая пара параметров (z^0, v_z^0) , отвечающая заданной полной энергии E_0 материальной точки, выделяет одну и ту же траекторию в фазовом пространстве решений задачи. На рисунке 1.2 изображены траектории в фазовой плоскости $(z; v_z)$, отвечающие вертикальному полету снаряда. Пунктирные участки обозначают состояния, при которых снаряд находился выше точки, принятой за начало отсчета $z = 0$. Вдоль каждой траектории можно задать направление, отвечающее росту времени. В данном примере движение вдоль фазовых траекторий осуществляется в сторону увеличения скорости v_z . Каждая траектория характеризуется своим значением полной механической энергии E_0 , которое увеличивается справа налево от 0 до 0.1 Дж.кг⁻¹.

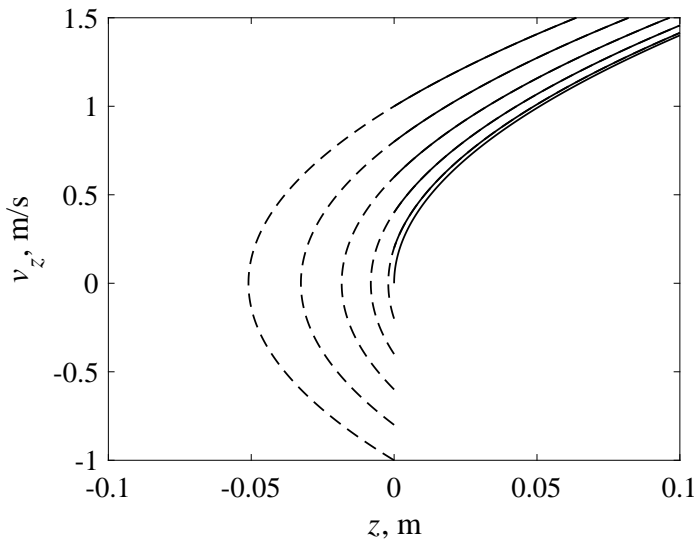


Рис. 1.2: Траектории фазовой плоскости для задачи о вертикальном полете снаряда. Снаряд вылетает из одной и той же точки физического пространства, $z = 0$, с разными начальными скоростями. Только при отрицательной начальной скорости (что отвечает полету «вверх») снаряд может подняться выше своего начального положения, $z > 0$. Соответствующие участки траектории отмечены пунктиром.

Построение фазовой плоскости в пакете прикладных вычислений MatLab. Опишем программу построения фазовой плоскости на примере рисунка 1.2. За основу возьмем первый интеграл задачи (1.21). Будем рассматривать только траектории, которые отвечают выстрелу вверх из начала координат

$$z|_{t=0} = z^0 = 0, \quad v_z|_{t=0} = v_z^0 < 0.$$

Программа будет строить траектории, отвечающие изменению v_z^0 с постоянным шагом 0.2 от -1 до 0 . Для формиро-

вания соответствующего массива значений в пакете MatLab используется следующая команда

```
vz0 = -1:0.2:0;
```

Далее в цикле последовательно перебираются элементы массива v_z^0 . Для каждого элемента формируются соответствующие массивы координат точек траектории фазовой плоскости

```
for j = 1:length(vz0)
    vz = linspace(vz0(j), 1.5, 101);
    z = z0+(vz.^2-vz0(j)^2)/(2*g);
plot(z, vz);
```

Когда задача не может быть решена в квадратурах, траектории фазовой плоскости, отвечающие разным начальным данным, формируются в результате численного решения. Соответствующие алгоритмы описаны в следующей главе.

Команда `linspace` создает вектор значений, равномерно расположенных на отрезке. Интервал задается первыми двумя параметрами, число узлов указывается третьим параметром. Точка перед оператором « \wedge » возведения в степень означает, что операция применяется к каждому элементу вектора. Последняя команда `plot` строит график в новом окне. В качестве входных параметров ей передаются все абсциссы и все ординаты точек.

По умолчанию отрисовка очередного графика удаляет предыдущие графики. Для изменения этой установки служит команда `hold on`. Для ее применения необходимо заранее создать окно для отображения графиков. Для этого используется команда `figure`. Затем команда `hold on` применяется к текущему активному графическому окну

```
figure(100)
hold on;
```

Аналогично команда `plot` добавляет график в последнее активное окно. Идентификатором окна является параметр ко-

манды figure, который можно использовать для повторного обращения к окну впоследствии.

§ 1.5. Двухточечные краевые задачи

Примеры краевых задач. Для системы дифференциальных уравнений порядка n полная постановка задачи содержит n дополнительных условий (1.11). Если $n = 1$, то дополнительное условие единственное, а точку его задания можно считать начальной. Если же $n \geq 2$, то дополнительные условия могут быть заданы в разных точках. Если таких точек две, их считают границами отрезка, а сами задачи называют краевыми.

В прикладных задачах Коши аргумент часто интерпретируется как время, поэтому его принято обозначать через t . В краевых задачах аргумент обычно интерпретируется как пространственная переменная и обозначается через x . При этом нередко более естественной оказывается запись дифференциальных уравнений не как системы n уравнений первого порядка, а как одного уравнения порядка n . При этом для производных наряду с обозначениями $d\mathbf{u}/dx$, $d^2\mathbf{u}/dx^2$ используются равнозначные обозначения \mathbf{u}_x , \mathbf{u}_{xx} и т.д. Приведем два примера задач, которые принято называть краевыми, и обсудим их фундаментальные отличия.

Струна. Горизонтально натянутая струна прогибается под действием внешних нагрузок и собственного веса. Из курса математической физики известно, что величина прогиба $u(x)$ описывается линейным дифференциальным уравнением второго порядка. Запишем общий вид такого уравнения:

$$u_{xx} + q(x)u_x - r(x)u = f(x), \quad a \leq x \leq b.$$

Пусть каждый конец струны закреплен на определенной вы-

соте. Тогда граничные условия имеют следующий вид:

$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta.$$

Такие граничные условия называют условиями первого рода.

Существуют задачи с более сложными по форме дополнительными условиями. Так, условия могут быть заданы во внутренних точках отрезка интегрирования (для задач более высокого порядка). В задачах квантовой механики часто возникают условия нормировки, когда дополнительное условие включает значения искомой функции на всем отрезке интегрирования.

Попадание снарядом в цель. Предположим, что снаряд вылетает из орудия с известной по модулю скоростью v^0 . Система координат выбрана так, как описано в § 1.1. Тогда компоненты скорости характеризуются углом α вылета снаряда к горизонту

$$v_x^0 = v^0 \cos \alpha, \quad v_z^0 = -v^0 \sin \alpha, \quad v_y^0 = 0.$$

Далее считаем, что угол α является свободным параметром, которым можно управлять, чтобы снаряд в итоге попал в некоторую удаленную точку с координатами $(X; 0)$. Следовательно, искомая траектория должна проходить через две точки, начальную, $(0; 0)$, и конечную, $(X; 0)$. Математически последнее условие можно записать следующим образом

$$\alpha_* = \arg \min_{\alpha} (x(T, \alpha) - X)^2. \quad (1.24)$$

То есть требуется найти такой угол выстрела $\alpha = \alpha_*$, что функционал в правой части уравнения (1.24) примет минимальное значение. Однако необязательно, что это значение будет равно нулю, и что начальной кинетической энергии снаряда окажется достаточно для того, чтобы достичь цели. Анализируя аналитическое решение (1.3), можно установить, что величина искомого угла

определяется уравнением

$$\sin 2\alpha_* = \frac{Xg}{(v^0)^2}.$$

Однако правая часть уравнения больше единицы при условии, что $X > (v^0)^2/g$. Следовательно, семейство анализируемых траекторий может не содержать таких, что они проходят через две выбранные точки пространства одновременно. Поэтому некоторые краевые задачи могут не иметь решения в строгом его понимании.

Обратим внимание на важное фундаментальное отличие двух рассмотренных примеров краевых задач. Физика процесса, определяющего статический прогиб струны, предполагает «двухсторонний» характер независимой переменной. То есть прогиб в каждой конкретной точке определяется прогибом во всей непосредственной окрестности этой точки, как справа, так и слева. Такие задачи, часто, допускают обобщение на двумерные и трехмерные случаи. Их сведение к системе уравнений первого порядка, разрешенных относительно производной, является искусственным приемом. Чаще эти задачи решаются с применением других методов математической физики. Главным образом они состоят из подходов конечных объемов, конечных элементов, граничных элементов и проч.

Наоборот, в задаче о полете снаряда время носит «односторонний» характер. Текущее состояние процесса зависит только(!) от его предыстории, и не определяется его будущим. Именно такие задачи были названы в начале главы задачей Коши, несмотря на то, что формально на основе соответствующего дифференциального уравнения можно составить краевую задачу. В таком случае это эквивалентно постановке вопроса «По какому пути должна развиваться система, чтобы прийти в некоторое наперед заданное состояние.» Одновременно должен быть найден ответ на вопрос «Может ли си-

стема в принципе попасть в данную точку.» Для краевых задач этой категории предложен эффективный метод численного решения, который был назван «методом пристрелки». Его идея очень проста. Если бы в нашем распоряжении находилось неограниченное число снарядов, то можно было бы выполнить процедуру «пристрелки», то есть стрелять из орудия в заданном направлении под разными углами до попадания в цель. Развитие метода позволяет выполнять оптимальный, направленный перебор значений параметра пристрелки. Для этого используется хорошо развитый аппарат поиска минимума функции одной переменной.

Метод пристрелки. Поясним идею метода на примере краевой задачи второго порядка

$$\dot{u}_1 = f_1(t, u_1, u_2), \quad u_1(0) = u_1^0, \quad (1.25)$$

$$\dot{u}_2 = f_2(t, u_1, u_2), \quad u_2(T) = u_2^T. \quad (1.26)$$

Здесь условия на каждую функцию заданы в разных концах отрезка интегрирования. Допустим, что решение этой задачи существует и единственно. Следовательно, существует единственное значение $u_2(0) = \gamma$. Если бы оно было известно заранее, то вместо краевой задачи можно было бы решать эквивалентную задачу Коши с начальными условиями $u_1(0) = u_1^0$, $u_2(0) = \gamma$. В силу единственности решения, оно было бы таким же, как и решение исходной краевой задачи (1.25)–(1.26). В рамках сформулированных допущений величины γ и u_2^T определяют друг друга взаимно однозначно. Метод пристрелки сводится к отысканию этого неизвестного значения γ на основе итерационного алгоритма. Начальное приближение постепенно уточняется, пока не будет достигнута приемлемая наперед заданная точность.

Значение γ должно быть определено так, чтобы удовлетворить граничному условию в точке $t = T$. Будем считать, что функция u_2 зависит от γ как от параметра

$$u_2 = u_2(t, \gamma).$$

Тогда при правильно выбранном значении γ на правом конце $t = T$ отрезка интегрирования должно выполняться

$$u_2(T, \gamma) = u_2^T. \quad (1.27)$$

Это условие можно заменить эквивалентным условием нахождения точки минимума функционала по аналогии с краевой задачей для полета снаряда

$$\gamma_* = \arg \min_{\gamma} (u_2(T, \gamma) - u_2^T)^2. \quad (1.28)$$

В таком случае решаются сразу две проблемы. Во-первых, методы минимизации квадратичного функционала от одной переменной достаточно хорошо развиты, и могут быть использованы стандартные библиотеки. Таким образом, решение краевой задачи сводится к многократному вычислению значения $u_2(T, \gamma)$ для разных значений независимого аргумента γ . Во-вторых, как было показано выше, краевая задача с дополнительным условием в виде равенства (1.27) может не иметь решения. В то же время в результате минимизации функционала (1.28) будет найдена траектория, которая ближе всего проходит к заданной точке.

§ 1.6. Задания для самостоятельного выполнения

Для усвоения изложенного материала к рассмотрению предлагаются следующие задачи, для которых необходимо провести такое же исследование, как и для рассмотренной задачи о полете снаряда.

Движение материальной точки под действием силы тяжести и силы сопротивления воздуха. Построить фазовый портрет для задачи о движении материальной точки, движущейся по вертикальной траектории под действием двух сил: силы тяжести и силы трения. По определению, сила трения направлена против направления движения материальной точки. Рассмотреть случай сопротивления, заданного законом Стокса. Действие силы трения на единицу массы тела выражается формулой $\mathbf{F} = -k\dot{\mathbf{r}}$. Второй закон Ньютона для такой системы примет следующий вид

$$\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{g} - k\dot{\mathbf{r}}. \quad (1.29)$$

Отношение $V = g/k$ определяет характерную скорость полета снаряда. В случае одномерного движения эта скорость называется терминальной. Скорость материальной точки асимптотически стремится к этому значению. В пределе правая часть уравнения тождественно обращается в ноль, равнодействующая сил равна нулю, и тело движется без ускорения. Исследовать предельные ситуации, когда $V \rightarrow 0$ или $V \rightarrow \infty$. Получить общее решение дифференциального уравнения (1.29). Сравнить траектории с рассмотренным случаем движения материальной точки без учета силы трения.

Задача о колебаниях математического маятника. Колебания математического маятника в линейном приближении описываются дифференциальным уравнением второго порядка

$$\ddot{\varphi} + \omega_0^2 \varphi = 0,$$

где ω_0 — собственная частота колебаний математического маятника. Определяя наряду с углом отклонения маятника от положения равновесия, $\varphi = 0$, угловую скорость $\omega = \dot{\varphi}$, уравнение может быть сведено к системе двух уравнений перво-

го порядка, разрешенных относительно старшей производной. Получить первый интеграл задачи, выражающий закон сохранения полной механической энергии. Построить фазовый портрет¹⁶.

Нелинейные колебания математического маятника.

Линейное приближение в задаче о колебании математического маятника справедливо при весьма малых углах отклонения от положения равновесия, $|\varphi| < \pi/6$. Для больших амплитуд необходимо рассматривать нелинейную постановку

$$\ddot{\varphi} + \omega_0^2 \sin \varphi = 0.$$

Провести тот же анализ, что и в предыдущем задании. Получить первый интеграл. Для этого уравнение необходимо домножить на $\dot{\varphi}$ и проинтегрировать по времени¹⁷.

Нелинейные колебания математического маятника в среде с сопротивлением. Рассмотреть нелинейные колебания математического маятника в среде со Стоксовым сопротивлением.

$$\ddot{\varphi} + \omega_0^2 \sin \varphi + k\dot{\varphi} = 0.$$

Получить первый интеграл задачи, построить фазовый портрет.

¹⁶ https://ru.wikipedia.org/wiki/Фазовое_пространство

¹⁷ <https://habr.com/ru/post/268507>

Глава 2

Семейство методов Рунге-Кутты

§ 2.1. Историческая справка

Дифференциальные уравнения были введены в науку Ньютоном и Лейбницем в XVII в. Сначала изучались те задачи, для которых удавалось найти точное решение (например, движение планет вокруг Солнца). Серьезной потребности в численных методах долго не возникало. Однако уже в XVIII в. Л. Эйлер предложил первый численный метод. Он позволяет найти приближенно значения искомой функции (или компонент вектора искомых функций) в дискретном наборе узлов сетки по времени. Таким образом, решение представлено в виде таблицы, где каждая строка таблицы содержит значение текущего узла сетки t_j независимого аргумента и вычисленные значения искомых функций $\mathbf{u}_j = \mathbf{u}(t_j)$. При этом первая строка таблицы известна точно. Она определяется начальным условием задачи (1.11).

Обозначим шаг сетки между двумя соседними узлами t_j и t_{j+1} через $h_j = t_{j+1} - t_j$ и грубо аппроксимируем приращение функции, раскладывая ее в ряд Тэйлора в окрестности точки $t = t_j$

$$\mathbf{u}(t_{j+1}) \approx \mathbf{u}(t_j) + h_j \left. \frac{d\mathbf{u}}{dt} \right|_{t=t_j} = \mathbf{u}(t_j) + h_j \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}_j). \quad (2.1)$$

В последнем равенстве учтено, что производная $(d\mathbf{u}/dt)|_{t=t_j}$

определяется правой частью задачи Коши (1.10)–(1.11). Получить более точные значения $\mathbf{u}(t_{j+1})$ можно за счет увеличения частоты расположения узлов, то есть за счет сгущения сетки $h_j \rightarrow 0^1$. Однако при этом требуется проводить больше вычислений. Формулу (2.1) называют схемой Эйлера или схемой ломаных². Точность схемы (2.1) низка, так что на практике ее не используют.

Серьезная потребность в численных расчетах возникла в середине XIX в. Скорости пуль и снарядов возросли настолько, что потребовался аккуратный расчет их траекторий с учетом сопротивления воздуха. Английский математик Адамс разработал семейство схем высоких порядков точности, являющееся обобщением схемы Эйлера. Схемы Адамса (их называют также схемами Адамса–Башфорта) быстро стали популярными и широко использовались до середины XX в.

Достоинством схем Адамса является то, что в них легко строятся схемы очень высоких порядков точности $p > 10$. Основной недостаток состоит в том, что это многошаговые схемы. Чтобы выполнить один шаг от момента t_j к следующему дискретному моменту t_{j+1} надо знать значения в p последних точках $t_j, t_{j-1}, \dots, t_{j-p+1}$. В начальной точке t_0 эти значения неизвестны, и приходится разрабатывать специальные алгоритмы начала расчета (что непросто). С появлением компьютеров эти схемы практически полностью вытеснились другими методами.

Указанного недостатка лишено принципиально другое, одношаговое обобщение схемы Эйлера. Первой такой схемой

¹Это утверждение следует из того факта, что приближенное равенство (2.1) становится точнее с уменьшением шага h_j . В данном случае ошибка аппроксимации составляет порядка $o(h_j)$.

²На каждом шаге j интегральная кривая заменяется прямолинейным звеном, наклон которого совпадает с касательной к искомой функции в точке t_j . Отсюда происходит название метода.

была двухстадийная схема Рунге (1895). Затем появились трехстадийные схемы и классическая четырехстадийная схема Кутты (1901). Бутчер разработал специальную технику построения схем типа Рунге-Кутты. Это позволило найти немало многостадийных схем высоких порядков точности. Все эти схемы оказались хорошо пригодными для автоматизированных компьютерных расчетов. Они постепенно вытеснили все прочие методы для большого класса прикладных задач (за исключением жестких, не рассматриваемых в данном курсе).

§ 2.2. Сеточные функции

В основе большинства численных методов лежит понятие *сеточных функций*.

Численное решение дифференциального уравнения состоит из набора чисел, по которому можно (с некоторой наперед заданной точностью) восстановить зависимость искомой функции \mathbf{u} от независимой переменной t . В этом смысле численный метод подобен лабораторному эксперименту, где мы имеем возможность определить распределение измеряемой величины в рассматриваемой области по набору показаний приборов. Как и экспериментатор, математик должен грамотно выбрать «серию экспериментов», чтобы с минимальными затратами времени получить наиболее полную информацию о решении. И исследователи, применяющие численный анализ, и экспериментаторы должны довольствоваться результатом, состоящим из конечного числа значений, хотя их количество можно, по крайней мере, в принципе сделать достаточным для практических целей.

Предположим, что мы хотим описать изменение u на некотором отрезке $[0; T]$ с помощью полинома

$$u = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + \dots + a_m t^m \quad (2.2)$$

и используем для определения значений конечного числа коэффициентов $a_0, a_1, a_2, \dots, a_m$ некоторый численный метод. Это позволит рассчитать значения u в любой точке t путем подстановки значения t и значений a_j в уравнение (2.2). Однако если конечная цель заключается в определении значений u в различных точках, эта процедура несколько неудобна. Во-первых, сами по себе значения коэффициентов a_i не представляют особого интереса. Их физический смысл, как правило, неочевиден. Во-вторых, для получения требуемых значений u необходимо выполнить операцию подстановки и вычисления значения полинома. Для полиномов высоких порядков эта операция требует достаточно много машинного времени. В-третьих, численный метод должен предлагать механизм, позволяющий описывать поведение u с любой наперед заданной точностью.

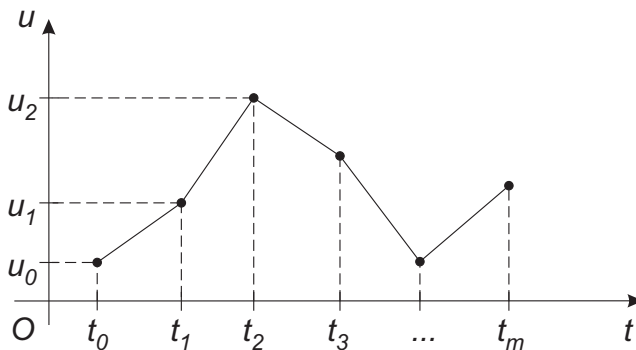


Рис. 2.1: График скалярной сеточной функции $u(t)$. Значения на оси абсцисс — узлы сетки по переменной t . Они могут располагаться с произвольным шагом $h_j = t_{j+1} - t_j$, $j = 0..m - 1$. По оси ординат отложены значения сеточной функции $u_j = u(t_j)$, $j = 0..m$ в соответствующих узлах. Между узлами применяется кусочно-линейное восполнение.

Данное рассуждение наводит на следующую мысль: почему бы не разработать метод, в котором в качестве первичных неизвестных использовались значения u в некоторых заданных точках вместо коэффициентов полинома в уравнении (2.2)? Действительно, большинство методов численного решения дифференциальных уравнений принадлежит как раз к этой категории, и поэтому ограничимся только такими методами. Методы этого семейства отличаются лишь способом получения искомых значений, вычислительной сложностью, скоростью сходимости к точному решению, границами применимости и проч.

Итак, в качестве основных неизвестных в численном методе рассматриваются значения зависимой переменной в конечном числе точек (называемых сеточными узлами или узловыми точками) расчетной области. Новые понятия проиллюстрированы на рисунке 2.1. Метод включает в себя получение системы алгебраических уравнений для этих неизвестных и алгоритм решения этих уравнений. Занумеруем узлы, в которых определяется искомая (вектор-)функция \mathbf{u} индексом $j = 0, 1, 2, \dots, m$ в порядке возрастания узлов, где m — число отрезков разбиения исходного отрезка $[0; T]$. Соответствующие пары значений независимого аргумента t и зависимых величин принято обозначать посредством индекса, $(t_j; \mathbf{u}_j)$. Здесь $\mathbf{u}_j = \mathbf{u}(t_j)$ — искомое значение, которое определяется с использованием численного метода, а для узлов разбиения t_j выполняется условие $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m = T$. Определим расстояние между соседними узлами, $h_j = t_{j+1} - t_j$. Если узлы расположены с постоянным шагом $h = T/m$, то $t_j = jh$. Аналогично вектор правых частей, вычисленных в точке t_j , сокращенно записывается как $\mathbf{f}_j = \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}_j)$.

Рассматривая значения в узловых точках, мы заменили непрерывное функциональное представление точного реше-

ния дифференциального уравнения счетным набором дискретных значений. Таким образом, мы дискретизировали исходную функцию \mathbf{u} .

Алгебраические уравнения, которые назовем дискретным аналогом исходного (непрерывного, дифференциального) уравнения (или системы уравнений), включающие неизвестные значения \mathbf{u}_j в выбранных узловых точках, получаются из дифференциального уравнения, описывающего изменение величины \mathbf{u} . При получении этих уравнений необходимо использовать некоторое предположение о характере изменения \mathbf{u} в интервале между узловыми точками. Часто бывает удобным использовать кусочные профили, такие, что данный участок профиля описывает изменение \mathbf{u} только в небольшой части этой области через значения \mathbf{u} в узловых точках, находящихся внутри и вокруг этой части. Основные способы построения дискретных аналогов обсуждаются далее.

При применении численных методов важно помнить, что они позволяют вычислить лишь приближенные значения искомой функции. Сила описываемого ниже класса методов заключается в том, что степень точности можно увеличивать за счет более частого расположения узлов. Таким образом, для настройки метода используется лишь один параметр.

§ 2.3. Эквивалентная интегральная формулировка задачи Коши

Для пояснения «физического» смысла рассматриваемых далее методов заметим, что абстрактную задачу Коши (1.8)–(1.10) можно представить в эквивалентном виде, формально проинтегрировав обе части уравнения по переменной t

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}^0 + \int_0^t \mathbf{f}(\tau, \mathbf{u}(\tau)) d\tau, \quad (2.3)$$

где интегрирование записывается для каждой компоненты отдельно.

Рассмотрим упрощенную ситуацию, когда вектор правых частей $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)$ не зависит явно от искомых функций

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}^0 + \int_0^t \mathbf{f}(\tau) d\tau. \quad (2.4)$$

В этом случае решение задачи Коши сводится к интегрированию системы линейных ОДУ первого порядка. При этом каждое уравнение можно рассматривать отдельно. Если правая часть не имеет аналитического выражения, то соответствующее решение может быть построено численно, с привлечением методов численного интегрирования функций одного переменного. Среди них наиболее простыми и часто употребляемыми являются метод левых, правых и центральных прямоугольников, метод трапеций, метод Симпсона, а также более сложные, предполагающие специальным образом задание узлов интегрирования. Подробно квадратурные формулы обсуждаются в рамках курса численных методов.

Как указывалось выше, первый шаг заключается в разбиении расчетной области на достаточно малые отрезки $[t_j; t_{j+1}]$ длины $h_j = t_{j+1} - t_j$. Тогда уравнение (2.4) можно записать в эквивалентном виде

$$\mathbf{u}_{j+1} - \mathbf{u}_j = \int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\tau) d\tau. \quad (2.5)$$

При $j = 0$ получим соотношение, включающее начальную точку $(t_0; \mathbf{u}_0)$

$$\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_0 = \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{f}(\tau) d\tau. \quad (2.6)$$

Уравнения (2.5) и (2.6) устанавливают правило итерационного (индукционного) перехода между соседними узлами

разбиения. Здесь уравнение (2.5) представляет собой шаг индукции в предположении, что значения во всех предыдущих узлах известны, и требуется определить значение в точке t_{j+1} . Уравнение (2.6) представляет собой «базу», так как значение в начальном узле, $j = 0$, известно. Оно определяется начальным условием задачи Коши. Правую часть можно приближенно вычислять по следующим формулам

1. метода левых прямоугольников

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\tau) d\tau = \mathbf{f}(t_j) h_j + O(h^2); \quad (2.7)$$

2. метода правых прямоугольников

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\tau) d\tau = \mathbf{f}(t_{j+1}) h_j + O(h^2); \quad (2.8)$$

3. метода центральных прямоугольников

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\tau) d\tau = \mathbf{f}(t_{j+1/2}) h_j, \quad t_{j+1/2} = t_j + \frac{h_j}{2} + O(h^3); \quad (2.9)$$

4. метода трапеций

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\tau) d\tau = \frac{h_j}{2} (\mathbf{f}(t_j) + \mathbf{f}(t_{j+1})) + O(h^3); \quad (2.10)$$

5. метода Симпсона

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\tau) d\tau = \frac{h_j}{6} (\mathbf{f}(t_j) + 4\mathbf{f}(t_{j+1/2}) + \mathbf{f}(t_{j+1})) + O(h^4). \quad (2.11)$$

Таким образом, проблема численного интегрирования задачи Коши, правая часть которой не зависит явно от искомых функций, решена. Очередное приближенное значение \mathbf{u}_{j+1} является линейной комбинацией производных точного решения в разных промежуточных точках отрезка $[t_j; t_{j+1}]$. Остается

только выбрать оптимальную комбинацию узлов и весов для аппроксимации правой части уравнения (2.5). Как будет видно из следующего раздела, наиболее оптимальное решение предполагает применение метода Симпсона.

Случай, когда подынтегральная функция явно зависит от значений искомой функции, является более сложным. Проблема заключается в том, что при переходе между соседними узлами на основе соотношений (2.5) и предложенных схем (2.8)–(2.11) численного интегрирования текущая производная решения, $f(t, u)$, не может быть вычислена явно и должна быть аппроксимирована на основе текущей информации. В таком случае важно предложить такую аппроксимацию искомой функции, что при ее подстановке в подынтегральную функцию получится достаточно точное приближение исходной задачи, которое при этом будет достаточно просто решить. Это достигается за счет комбинирования перечисленных методов (2.7)–(2.11).

§ 2.4. Методы Рунге–Кутты

Наиболее часто при решении типовых задач Коши выбирается один из методов семейства методов Рунге–Кутты. В рамках подхода Рунге–Кутты возможно построить метод любой требуемой точности. Однако вместо изложения общего подхода, ограничимся лишь наиболее популярными его частными случаями первого, второго и четвертого порядков.

Все методы строятся по индукционной схеме. Допустим, что приближенные значения искомых функций известны в некоторой последовательности узлов разбиения вплоть до узла j включительно. Это означает, что используя эти найденные значения, требуется определить значение \mathbf{u}_{j+1} в точке $j + 1$. Класс методов Рунге–Кутты использует лишь одно, предыдущее значение. В нашем случае оно отвечает узлу j .

Такие методы называются одношаговыми в отличие от методов Адамса, которые используют значения в большем количестве узлов сетки. Однако одношаговые методы могут быть многостадийными.

Приведенные ниже схемы Рунге–Кутты обладают рядом свойств, необходимых для компьютерных расчетов. 1) Они одношаговые, то есть для вычисления очередного значения \mathbf{u}_{j+1} достаточно знать только одно значение в предыдущем узле \mathbf{u}_j , поэтому не требуют специальных формул начала счета; каждый шаг, включая первый, выполняется по одинаковым стандартным формулам. 2) Одношаговость позволяет легко менять шаг сетки при переходе от узла к узлу, так как во все расчетные формулы входит только величина h_j с данного шага. 3) Многостадийные схемы имеют не только высокий порядок точности, но и малый численный коэффициент в остаточном члене.

Метод первого порядка: явный метод Эйлера. Самый простой метод построения приближенного решения задачи Коши называется «явный метод Эйлера». Он является исторически первым методом численного решения задачи Коши. Ввиду невысокой точности и вычислительной неустойчивости на практике он применяется только в комбинации с другими методами. Метод находит применение в теоретических исследованиях дифференциальных уравнений, задач вариационного исчисления и ряда других математических проблем. Он получается на основе метода левых прямоугольников (2.7), где правая часть задачи вычисляется лишь на левом конце отрезка разбиения. Здесь искомое значение функции \mathbf{u}_j уже вычислено, и остается вычислить

$$\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j + \int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\tau, \mathbf{u}(\tau)) d\tau \approx \mathbf{u}_j + \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}_j) h_j. \quad (2.12)$$

Этот метод плохо аппроксимирует исходную задачу и быстро теряет устойчивость, перескакивая на другие интегральные кривые, отвечающие другим начальным условиям. Для его успешного применения необходимо использовать чересчур мелкий шаг интегрирования.

Метод первого порядка: неявный метод Эйлера. Устойчивость предыдущего метода может быть повышена, если в его основу положить метод правых прямоугольников (2.8) и для аппроксимации касательной использовать наклон на правом конце отрезка $[t_j; t_{j+1}]$. В результате получается следующее нелинейное индукционное соотношение

$$\mathbf{u}_{j+1} \approx \mathbf{u}_j + \mathbf{f}(t_{j+1}, \mathbf{u}_{j+1})h_j. \quad (2.13)$$

Однако определение искомого значения \mathbf{u}_{j+1} сводится к решению нелинейного алгебраического уравнения. Такая задача может быть решена только итерационно, что является сложной с вычислительной точки зрения проблемой. Поэтому неявный метод Эйлера также практически не применяется на практике.

Метод второго порядка: «улучшенный» метод Эйлера. Существенного повышения устойчивости численной схемы и точности получаемого решения при некотором росте количества вычислений правой части задачи удается добиться, если положить в основу алгоритма метод центральных прямоугольников (2.9)

$$\mathbf{u}_{j+1} \approx \mathbf{u}_j + \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \mathbf{u}_{j+1/2})h_j. \quad (2.14)$$

При этом необходимо вычислить значение $\mathbf{u}_{j+1/2}$ в центральной точке отрезка разбиения $t = t_{j+1/2}$. Оказывается, что на

этой стадии достаточно использовать явный метод Эйлера

$$\mathbf{u}_{j+1/2} \approx \mathbf{u}_j + \frac{h_j}{2} \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}_j),$$

выполнив переход лишь на полшага, $h_j/2$. Такой подход обеспечивает согласованный уровень точности.

Докажем это утверждение. Точное выражение для уравнения (2.14) с учетом погрешности формулы центральных прямоугольников имеет следующий вид

$$\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j + \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \mathbf{u}_{j+1/2})h_j + O(h_j^3). \quad (2.15)$$

На основе явного метода Эйлера значение $\mathbf{u}_{j+1/2}$ получается со следующей точностью

$$\mathbf{u}_{j+1/2} = \mathbf{u}_j + \frac{h_j}{2} \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}_j) + O(h_j^2). \quad (2.16)$$

Подстановка (2.16) в (2.15) эквивалентна ошибке порядка $O(h_j^2)$

$$\mathbf{f}(t_{j+1/2}, \mathbf{u}_{j+1/2}) = \mathbf{f}\left(t_{j+1/2}, \mathbf{u}_j + \frac{h_j}{2} \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}_j)\right) + O(h_j^2).$$

С учетом множителя h_j при \mathbf{f} в правой части уравнений (2.15) окончательно имеем

$$\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j + \mathbf{f}\left(t_{j+1/2}, \mathbf{u}_j + \frac{h_j}{2} \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}_j)\right)h_j + O(h_j^3). \quad (2.17)$$

Последнее уравнение есть ничто иное как комбинация двух стадий улучшенного метода Эйлера. Из вывода уравнения следует, что локальная погрешность вычисления искомого значения \mathbf{u}_j убывает пропорционально h_j^3 . Однако локальная погрешность накапливается в процессе перехода между узлами и общая точность метода составляет $O(h_j^2)$.

Таким образом, улучшенный метод Эйлера является двухстадийным. На каждом отрезке разбиения требуется выполнить два расчета, одного вспомогательного значения, $\mathbf{u}_{j+1/2}$, и одного искомого значения, \mathbf{u}_{j+1} . Обратим внимание, что в этом методе нет необходимости на каждом шаге решать систему нелинейных алгебраических уравнений. Поэтому метод называется явным, как и оригинальный метод Эйлера.

Метод четвертого порядка. «Классический» явный метод Рунге-Кутты. Из всего семейства методов Рунге-Кутты наиболее часто применяется следующий метод четвертого порядка. Он является четырехстадийным и обеспечивает четвертый порядок точности. Для перехода между соседними узлами разбиения t_j и t_{j+1} необходимо вычислить три вспомогательных значения в разных промежуточных точках и искомого значение \mathbf{u}_{j+1} . Схема является обобщением метода Симпсона и может быть записана следующим образом

$$\mathbf{u}_{j+1} \approx \mathbf{u}_j + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4), \quad (2.18)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_j, \mathbf{u}_j), & \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \mathbf{u}_j + h_j \mathbf{k}_1 / 2), \\ \mathbf{k}_3 &= \mathbf{f}(t_{j+1/2}, \mathbf{u}_j + h_j \mathbf{k}_2 / 2), & \mathbf{k}_4 &= \mathbf{f}(t_{j+1}, \mathbf{u}_j + h_j \mathbf{k}_3). \end{aligned}$$

Описанный метод четвертого порядка является оптимальным с точки зрения количества вычислений, требуемых для определения очередного значения \mathbf{u}_j , и точности, с которой эти значения вычисляются при заданном шаге h_j .

§ 2.5. Автоматический выбор шага

Очевидно, что применение формул (2.12)–(2.18) не ограничивается равномерным разбиением отрезка интегрирования.

Локальный шаг в данной точке t_j принято определять динамически. Для этого в настоящее время предложены разные подходы. Один из них называется «правило Рунге». Определим понятие погрешности численного метода на примере скалярной задачи Коши. Численный метод характеризуется погрешностью порядка $p - 1$ в точке $t = t_{j+1}$, если разность между точным значением $u(t_{j+1})$ и приближенным $u_{j+1}^{(h)}$ можно представить в следующем виде

$$u(t_{j+1}) - u_{j+1}^{(h)} = Ch^p + o(h^p),$$

где C — некоторая константа, независящая от шага $h_j = h$, верхний индекс (h) показывает шаг, с которым было выполнено интегрирование на отрезке $[t_j; t_{j+1}]$. Если выполнить дважды аналогичные вычисления с шагом вдвое меньшим, $h_j = h/2$, то справедливым оказывается следующее соотношение

$$u(t_{j+1}) - u_{j+1}^{(h/2)} = 2C \frac{h^p}{2^p} + o(h^p). \quad (2.19)$$

Вычитанием найдем оценку для неизвестной константы C

$$C = \frac{2^{p-1} u_j^{(h)} - u_j^{(h/2)}}{h^p (2^{p-1} - 1)} + o(1).$$

Подставляя результат в соотношение (2.19), получим окончательно

$$u(t_{j+1}) - u_{j+1}^{(h/2)} = \varepsilon + o(h^p), \quad \varepsilon = \frac{u_{j+1}^{(h)} - u_{j+1}^{(h/2)}}{2^{p-1} - 1}. \quad (2.20)$$

Таким образом, погрешность ε метода в главном члене оценивается по простой формуле (2.20). Однако для этого необходимо выполнить три интегрирования по выбранному методу, чтобы дважды перейти из точки $t = t_j$ в точку $t = t_{j+1}$. Один раз с шагом $h_j = h$ и два раза с шагом $h_j = h/2$. Полученные

значения $u_{j+1}^{(h)}$ и $u_{j+1}^{(h/2)}$ используются для вычисления оценки главного члена реальной погрешности ε . Если абсолютная величина ε превышает некоторую заранее выбранную величину $\varepsilon_0 > 0$, то шаг интегрирования уменьшается. Например, в качестве базового можно принять $h_j = h/2$. Тогда одно интегрирование уже было выполнено. Остается применить дважды численный алгоритм с шагом $h_j = h/4$. Если, напротив, ε существенно меньше ε_0 , то текущее значение $u_{j+1}^{(h/2)}$ принимается. Одновременно осуществляется попытка увеличить шаг h_{j+1} до следующего узла разбиения.

Разумеется, алгоритмы выбора шага интегрирования могут основываться и на иных принципах. Например, можно выбирать шаг h_j адаптирующимся к решению: уменьшать при увеличении абсолютной величины производной и увеличивать при ее уменьшении. Подробное обсуждение этих вопросов можно найти в специализированной литературе.

§ 2.6. Задания для самостоятельного выполнения

Для усвоения изложенного материала предлагается решить задачи § 1.6 численно, применяя различные методы, изложенные в этой главе. Подробно программирование этих методов разобрано на примере задачи § 3.1.

Глава 3

Примеры процессов с сосредоточенными параметрами

§ 3.1. Пример плохо обусловленной задачи Коши

Постановка задачи. Продемонстрируем применение численных методов на примере следующей системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{u}_1 = \frac{u_1}{2 + 2t} - 2tu_2, \quad (3.1)$$

$$\dot{u}_2 = \frac{u_2}{2 + 2t} + 2tu_1. \quad (3.2)$$

Ее решение при начальных условиях

$$u_1(0) = 1, \quad u_2(0) = 0 \quad (3.3)$$

может быть выражено следующим образом

$$u_1 = \sqrt{1+t} \cos(t^2), \quad u_2 = \sqrt{1+t} \sin(t^2). \quad (3.4)$$

В качестве проверки полезно вычислить, например, производную функции u_1 , которая равна

$$\dot{u}_1 = \frac{\cos(t^2)}{2\sqrt{1+t}} - 2t\sqrt{1+t} \sin(t^2). \quad (3.5)$$

После подстановки выражений (3.4) в правую часть уравнения (3.1), легко видеть, что последнее становится эквивалентно уравнению (3.5). Аналогичным образом проверяется и уравнение (3.2). Таким образом, функции (3.4) удовлетворяют начальному условию (3.3) и обращают дифференциальные уравнения (3.1)–(3.2) в тождество. Это и является определением решения задачи Коши.

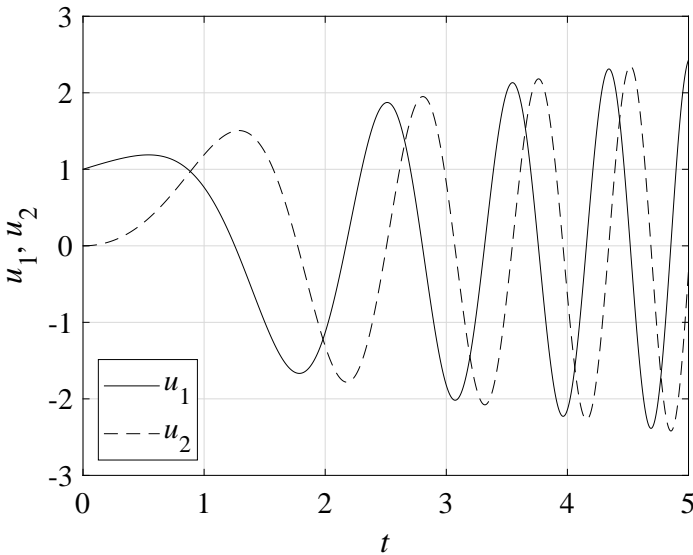


Рис. 3.1: График решения (3.4) задачи Коши (3.1)–(3.3). Рост амплитуды колебаний связан с множителем $\sqrt{1+t}$, а увеличение частоты — с квадратичной зависимостью периодических функций в структуре решения от аргумента t .

Предложенная задача (3.1)–(3.3) хорошо подходит для исследования основных свойств решений, получаемых с привлечением численных методов. В частности, задача характеризуется выраженной нелинейностью, и для нее известно аналитическое решение (3.5), которое можно сравнивать с численным

решением. График решения задачи (3.1)–(3.3) в явном виде представлен на рисунке 3.1. Благодаря периодическим тригонометрическим функциям \sin и \cos в структуре решения (3.5) с квадратичной зависимостью от независимой переменной t частота осцилляций решения быстро нарастает с ростом аргумента.

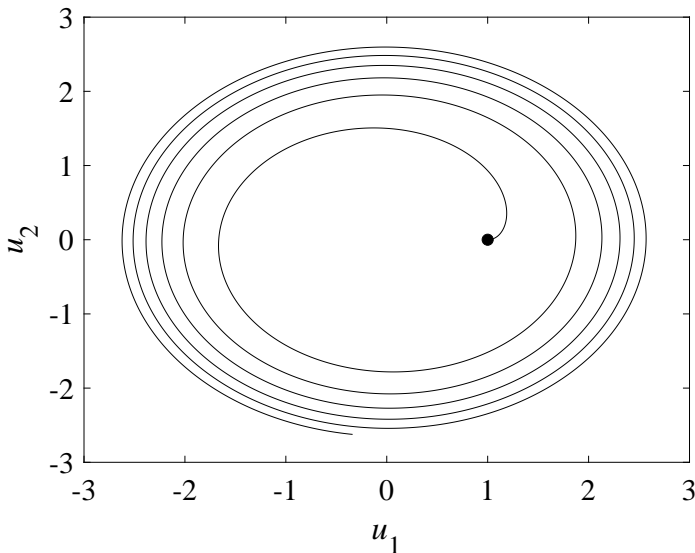


Рис. 3.2: График решения в плоскости $(u_1; u_2)$. Аргумент t выступает в качестве параметра вдоль траектории, которая по спирали расходится от начальной точки, отмеченной маркером. Исходная задача не является автономной, поэтому фазовый портрет должен изображаться в трехмерном пространстве с координатами $(t; u_1; u_2)$.

Интересно проанализировать решение задачи в фазовой плоскости. Так как задача не является автономной, то график должен изображаться в трехмерном пространстве, где переменная t выступает в качестве одной из осей. На рисунке 3.2

траектория представлена в проекции на плоскость (u_1, u_2) . Заметим, что траектория расходится по спирали от начальной точки. Однако при этом расстояние между соседними витками сокращается.

Задача является неавтономной и линейной по искомым функциям, с переменными коэффициентами. Теория устойчивости (обусловленности) таких задач остается вне круга вопросов, охватываемых данным пособием. Однако некоторое исследование возможно на основе подхода, изложенного в § 1.3 для задач с постоянными коэффициентами. Предположим, что в начальные данные внесена погрешность $\varepsilon^0 = (\varepsilon_1^0; \varepsilon_2^0)$, что отвечает возмущенному решению \mathbf{u}^* . Запишем задачу для разности возмущенного и точного решения

$$\dot{\varepsilon} = A\varepsilon, \quad \varepsilon(0) = \varepsilon^0, \quad \varepsilon(t) = \mathbf{u}^* - \mathbf{u},$$

$$A = \begin{pmatrix} (2 + 2t)^{-1} & -2t \\ 2t & (2 + 2t)^{-1} \end{pmatrix},$$

где матрица A — матрица Якоби правой части исследуемой задачи Коши (3.1)–(3.3). Собственные числа этой матрицы комплексные и имеют вид

$$\lambda = \frac{1}{2 + 2t} \pm i2t.$$

Здесь i — мнимая единица, корень квадратный из -1 . Действительная часть $(2 + 2t)^{-1}$ каждого из этих чисел остается положительной. Несмотря на то, что она убывает со временем, множитель $c(t)$ в уравнении (1.12) определяется экспонентой от интеграла собственного числа и растет с увеличением длины интервала интегрирования задачи Коши. Следовательно, численное решение будет все больше отклоняться от точного с каждым следующим шагом интегрирования h_j . Скорость накопления ошибки определяется точностью, с которой метод

позволяет вычислить очередное значение \mathbf{u}_{j+1} и аппроксимирует скорость его изменения на каждом интервале $[t_j; t_{j+1}]$ разбиения.

Анализ численного решения. До сих пор открытым оставался вопрос, из каких соображений подбирать шаг h_j сетки по переменной t , и как его значение влияет на результат. До некоторой степени ответить на эти вопросы позволяет численное исследование сходимости. Для этого выполняется расчет задачи на разных сетках. Продемонстрируем сходимость явного метода Эйлера первого и второго порядков. На рисунке 3.3 сплошной жирной линией изображен график точного решения $u_2(t)$. Остальные кривые отвечают той же функции, построенной численно с использованием метода первого порядка, § 2.4, при постоянном шаге интегрирования $h = 0.1, 0.01, 0.001$. Аналогично на рисунке 3.4 при построении численного решения используется улучшенный метод Эйлера, § 2.4. Очевидна тенденция завышения амплитуды приближенного решения по сравнению с точным. Эта тенденция сохраняется независимо от шага интегрирования. При измельчении шага удается лишь увеличить окрестность начальной точки, в которой приближенное решение достаточно близко к точному. Об этом свидетельствует анализ решения на больших временах. Соответствующая зависимость u_2 от времени для точного и приближенного решения показана на рисунке 3.5.

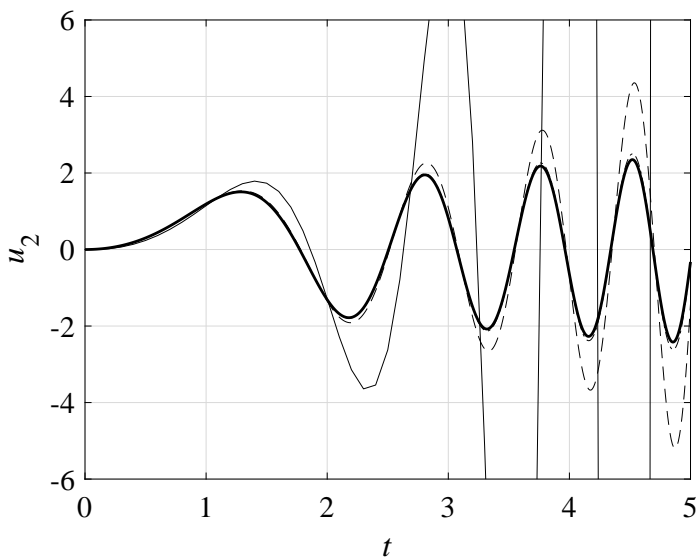


Рис. 3.3: Сходимость явного метода Эйлера первого порядка точности на примере функции $u_2(t)$. Толстая сплошная линия отвечает точному решению. Тонкие линии отвечают приближенному решению, построенному с постоянным шагом 0.1 (сплошная линия), 0.01 (пунктирная линия) и 0.001 (штрихпунктирная линия). Между узлами сетки используется линейное восполнение. Этим объясняется неплавный характер сплошной тонкой линии, для построения которой использовалась лишь 51 точка (узлы сеточной функции).

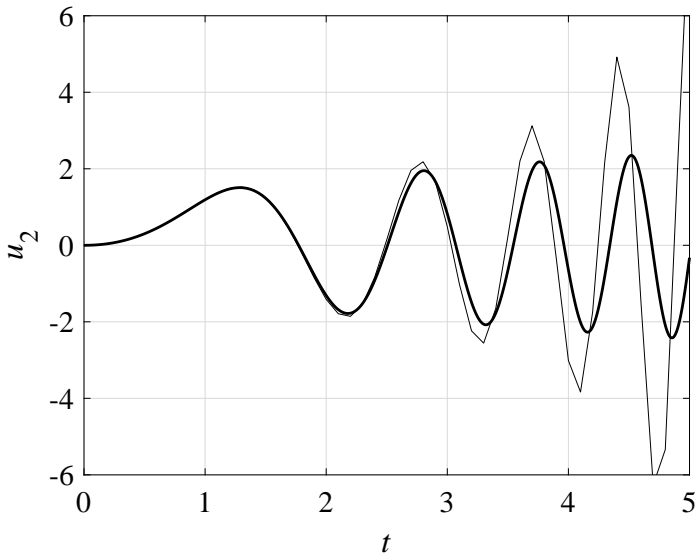


Рис. 3.4: Сходимость улучшенного метода Эйлера на примере функции $u_2(t)$. Толстая сплошная линия отвечает точному решению. Тонкие линии отвечают приближенному решению, построенному с постоянным шагом 0.1 (сплошная линия), 0.01 (пунктирная линия) и 0.001 (штрих-пунктирная линия). Между узлами сетки используется линейное восполнение. Этим объясняется неплавный характер сплошной тонкой линии, для построения которой использовалась лишь 51 точка (узлы сеточной функции). На выбранном отрезке интегрирования решения, построенные с шагом 0.01 и 0.001, практически неотличимы от точного. Решение, построенное при шаге 0.1, практически повторяет решение, полученное при шаге 0.01 по методу Эйлера первого порядка точности (пунктирная линия на рисунке 3.3).

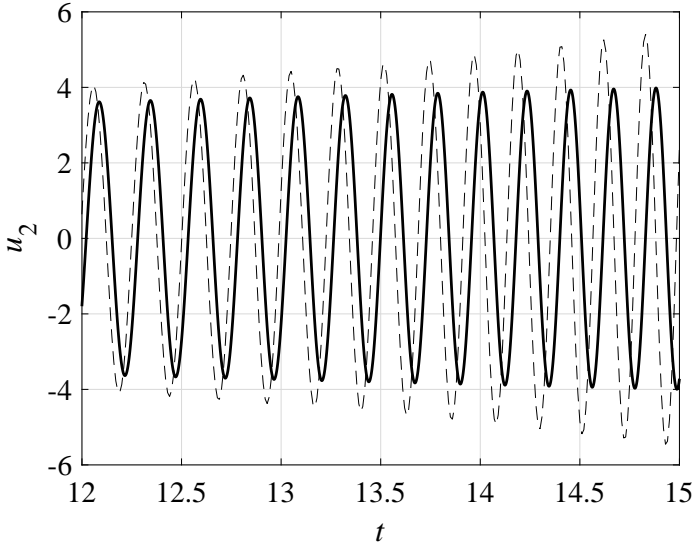


Рис. 3.5: Сходимость улучшенного метода Эйлера на примере функции $u_2(t)$. Толстая сплошная линия отвечает точному решению. Тонкие линии отвечают приближенному решению, построенному с постоянным шагом 0.01 (пунктирная линия) и 0.001 (штрих-пунктирная линия). Между узлами сетки используется линейное восполнение. Численное решение, изображенное пунктирной линией, неотлично от точного решения на малых временах. Однако с ростом t проявляется тенденция «разбалтывания» приближенного решения. Аналогичная ситуация наблюдается и при $h = 0.001$, но при значительно больших временах.

Решение задачи в пакете прикладных программ MatLab. При численном решении задачи (3.1)–(3.3) и сравнении приближенного решения с точным соответствующую программу на языке MatLab предлагается организовать следующим образом. Во-первых, в отдельном файле реализуем функцию, которая вычисляет точное значение решения по формулам (3.4)

```
function [u1, u2] = Analit(t)

u1 = cos(t.^2).*sqrt(1+t);
u2 = sin(t.^2).*sqrt(1+t);

end
```

Функция принимает на вход один аргумент — массив t моментов времени, для которых требуется вычислить значения функций u_1 и u_2 . Результат вычислений сохраняется в соответствующие переменные-массивы, размер которых совпадает с размером массива t . Массивы u_1 и u_2 являются выходными аргументами функции. Применение операторов умножения и возведения в степень со знаком «.» позволяет системе векторизовать вычисление каждого элемента массивов u_1 и u_2 . То есть соответствующая операция применяется к вектору поэлементно.

Любая схема методов Рунге–Кутты предполагает многократное вычисление правой части задачи Коши. Поэтому далее в отдельном файле напишем функцию, которая вычисляет правую часть системы дифференциальных уравнений

```
function dy = f(t, y)
dy = zeros(length(y), 1);
dy(1) = y(1)/(2+2*t)-2*t*y(2);
dy(2) = y(2)/(2+2*t)+2*t*y(1);
end
```

Здесь предписан порядок уравнений и неизвестных согласно принятой индексации в уравнениях (3.1)–(3.2).

Общая постановка задачи Коши предполагает, что ее правая часть зависит от двух аргументов: текущего момента времени t , для которого вычисляется правая часть, и соответствующих значений искомых функций, организованных в виде вектора y . В данном примере правая часть представляет собой вектор из двух элементов. Вызовом функции `zeros` в памяти компьютера резервируется место (и заполняется нулями) под вектор-столбец, число элементов в котором равно числу элементов массива y . Соответственно, первый элемент аргумента-массива y по своему смыслу есть значение первой функции, u_1 , отвечающее текущему моменту времени t . Аналогично раскрывается смысл второго элемента массива.

Реализуем один шаг улучшенного метода Эйлера, который в дальнейшем будет многократно вызываться из основной программы для перехода между соседними узлами сеточного решения. Назовем функцию `Euler2`

```
function result = Euler2(t, y, h)
K1 = f(t+h/2, y);
result = y + h*f(t+h, y+h*K1);
end;
```

Здесь значение первого аргумента t и второго аргумента – вектора-столбца y – отвечают узлу j в формуле (2.14). Соответственно, третий аргумент функции – шаг до очередного узла интегрирования.

Основной файл, который часто называют именем `main`, может выглядеть следующим образом

```
T = 10;
n = 1001;
h = T/(n-1);
u = zeros(2, n);
u(:, 1) = [1;0];
```

```
t = linspace(0,T,n);
for k = 1:(n-1)
    u(:, k+1) = Euler2(t(k), u(:, k), h);
end
figure
hold on
plot(t, u(2,:), 'k--')
[u1, u2] = Analit(t);
plot(t, u2, 'k-')
```

Здесь задается отрезок интегрирования $[0; T]$ и число n узлов сеточной функции с учетом начального узла, в котором заданы начальные условия задачи Коши. В третьей строчке вычисляется шаг интегрирования h . В данном примере он равен 0.01. Затем выделяется память для хранения n векторов-столбцов, каждый из которых – значение сеточных функций $(u_1; u_2)$ в соответствующий момент времени. Первый столбец заполняется согласно начальным условиям. Узлы интегрирования генерируются функцией `linspace`. Затем в цикле для каждого очередного узла $k - 1$ вызывается функция `Euler2` для вычисления приближенного значения в новом узле k . После выполнения этого цикла приближенное и точное решение для функции u_2 строятся в соответствующем окне.

§ 3.2. Гравитационный маневр

Постановка задачи. Движения небесных тел принято описывать обыкновенными дифференциальными уравнениями. Это связано с тем, что тела, участвующие в движении можно считать материальными точками, их размеры значительно меньше характерных пространственных масштабов перемещения тел. Рассмотрим задачу о гравитационном маневре. Гравитационный маневр – целенаправленное изменение траектории полета космического аппарата под действием гра-

витационных полей небесных тел. Гравитационный манёвр около движущегося по орбите массивного небесного тела — планеты или крупного естественного спутника планеты — позволяет изменить кинетическую энергию космического аппарата и направление его движения без затрат топлива. Фактически, речь идёт о перераспределении кинетической энергии небесного тела и космического аппарата. Насколько изменяется кинетическая энергия аппарата, настолько же изменяется в обратную сторону кинетическая энергия движения небесного тела по его орбите. Поскольку масса искусственного космического аппарата исчезающе мала в сравнении с массой любого пригодного для гравитационного манёвра небесного тела (включая спутники планет), изменение орбиты этого тела оказывается пренебрежимо малым. Таким образом, гравитационный манёвр является «бесплатным» и эффективным способом разгона, торможения или изменения направления движения космических аппаратов в целях исследования всей Солнечной системы и выхода за её пределы при существующих ракетных технологиях.

Впервые гравитационный маневр был успешно осуществлён в 1959 году советской автоматической межпланетной станцией (АМС) Луна-3. Гравитационный маневр часто используется для разгона автоматических межпланетных станций, отправляемых к отдалённым объектам Солнечной системы и за её пределы, с целью экономии топлива и сокращения времени полёта. В таком применении известен также под названием «гравитационная праща» (от англ. *gravitational slingshot*). Может использоваться и для замедления космического аппарата, а в некоторых случаях наиболее важное значение имеет изменение направления его движения. Наиболее эффективны гравитационные манёвры у планет-гигантов, но нередко используются манёвры у Венеры, Земли, Марса и даже Луны.

Серия гравитационных маневров применялась, в частности, для управления траекториями полета двух американских космических зондов, запущенных в 1977 году: «Вояджер-1» и «Вояджер-2».

Математическую задачу, описывающую гравитационный маневр, можно сформулировать следующим образом. Соответствующая схема движения изображена на рисунке 3.6. Предположим, что имеется некоторый притягивающий центр массы M_0 , например, Солнце, который генерирует основное, фоновое гравитационное поле с гравитационным потенциалом

$$\varphi_0(R_0) = G \frac{M_0}{R_0},$$

где $G = 6.674 \times 10^{-11} \text{ м}^3 \text{ кг}^{-1} \text{ с}^{-2}$ — гравитационная постоянная, R_0 — расстояние от «пробного тела» (планеты или летательного аппарата) до притягивающего центра. Пренебрегая движением притягивающего центра, свяжем с ним систему координат, и будем считать ее инерциальной. Тогда распределение потенциала φ_0 постоянно во времени.

Движение массивного тела, планеты или естественного спутника, массы M , около которого осуществляется гравитационный маневр, определяется этим потенциалом. Вообще, периодическое движение будет характеризоваться эллиптической траекторией. Однако эксцентриситет орбиты многих планет Солнечной системы близок к нулю. Также учитывая, что основное взаимодействие планеты и летательного аппарата происходит на малых временах по сравнению с периодом обращения массивного тела, будем считать, что траектория — окружность радиуса R . Тогда вектор скорости движения \mathbf{V} массивного тела направлен по касательной к траектории и равен по модулю $V = R\omega$, где ω — эффективная угловая скорость движения массивного тела вокруг Солнца на рассматриваемом участке траектории.

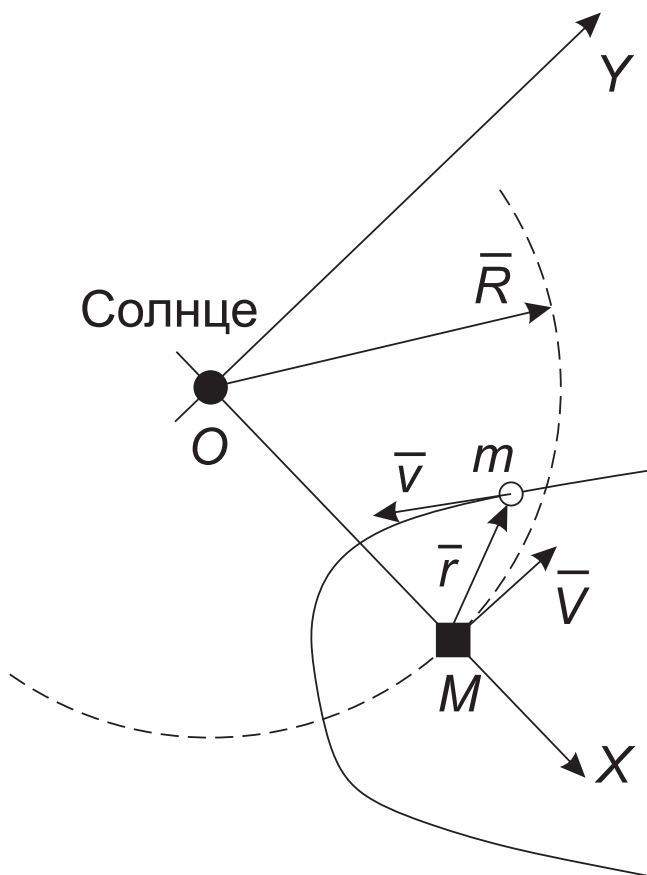


Рис. 3.6: Схема движения массивного тела массы M и космического аппарата массы m вокруг притягивающего центра (Солнце) массы M_0 . Сплошная линия — траектория движения космического аппарата. Пунктирная линия — окружность, по которой осуществляется «эффективное» движение массивного тела.

Согласно принципу суперпозиции траектория движения летательного аппарата массы m , который осуществляет управляемый гравитационный маневр, определяется суммой ϕ двух потенциалов. Один создается притягивающим центром, второй — результат притяжения планеты

$$\phi = \varphi_0(|\mathbf{R} + \mathbf{r}|) + G \frac{M}{r},$$

где r — расстояние от космического аппарата до массивного тела.

Равнодействующая сил, действующих на космический зонд, есть градиент суммарного потенциала ϕ . В результате второй закон Ньютона примет следующий вид

$$\ddot{\mathbf{r}} = -G \left(\frac{M_0}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|^3} (\mathbf{R} + \mathbf{r}) + \frac{M}{r^3} \mathbf{r} \right). \quad (3.6)$$

Упрощенная постановка. Проанализируем влияние каждого из массивных тел на движение космического аппарата в окрестности планеты. Во-первых, учтем, что расстояние от аппарата до планеты, r , значительно меньше, чем такое же расстояние до Солнца, $r \ll R$. Тогда абсолютные значения слагаемых в скобках в уравнении (3.6) по порядку величины есть

$$\frac{M_0}{R^2}, \quad \frac{M}{r^2}.$$

Рассмотрим в качестве примера систему Солнце–Юпитер. Тогда $M_0 \asymp 10^{30}$ кг, $M \asymp 10^{27}$ кг, $R \asymp 10^9$ км, и оба слагаемых «уравновешиваются» при $r = 0.03R \asymp 10^7$ км. Соответственно, в непосредственной окрестности планеты можно выделить три зоны

$$r < \frac{1}{3} \sqrt{\frac{M}{M_0}} R \sim 0.01R,$$

$$\frac{1}{3}\sqrt{\frac{M}{M_0}}R < r < 3\sqrt{\frac{M}{M_0}}R \sim 0.1R,$$

$$r > 3\sqrt{\frac{M}{M_0}}R.$$

В первой зоне влияние Солнца на движение космического аппарата несущественно, и уравнение (3.6) упрощается до

$$\ddot{\mathbf{r}} = -G\frac{M}{r^3}\mathbf{r}. \quad (3.7)$$

Во второй зоне влияние обоих массивных тел на траекторию зонда сопоставимо, и необходимо решать полное уравнение с учетом обоих слагаемых в правой части. В третьей зоне, на достаточном удалении от планеты, определяющей остается только гравитация Солнца.

В качестве упрощенной постановки задачи о гравитационном маневре будем рассматривать уравнение (3.7). Дополнительно предположим, что масса Солнца достаточно мала, чтобы считать, что уравнение справедливо в области $r < 0.1R$. При анализе динамики полета примем, что траектории движения планеты и космического аппарата лежат в одной плоскости. Тогда задача является двумерной. Пусть $X^*(t^*)$ и $Y^*(t^*)$ — текущие координаты планеты в системе координат, связанной с притягивающим центром. Пусть ось OX системы координат проходит через начальное положение планеты. Тогда $X^*(0) = R$, $Y^*(0) = 0$, и с учетом направления ее движения

$$X^*(t^*) = R\cos(\omega t^*), \quad Y^*(t^*) = R\sin(\omega t^*).$$

Аналогично, $x^*(t^*)$, $y^*(t^*)$ — текущие координаты летательного аппарата. Тогда расстояние r между планетой и летательным аппаратом составит

$$r = ((X^* - x^*)^2 + (Y^* - y^*)^2)^{1/2},$$

и векторное уравнение (3.7) в координатной форме можно записать следующим образом

$$\ddot{x}^* = -GM \frac{X^* - x^*}{r^3}, \quad (3.8)$$

$$\ddot{y}^* = -GM \frac{Y^* - y^*}{r^3}. \quad (3.9)$$

Приведем уравнения (3.8)–(3.9) к системе уравнений первого порядка. Определим компоненты скорости движения летательного аппарата в заданной системе координат. Обозначим их соответственно

$$\dot{x}^* = v_x^*, \quad \dot{y}^* = v_y^*. \quad (3.10)$$

Тогда исходные уравнения переписутся следующим образом

$$\dot{v}_x^* = -GM \frac{X^* - x^*}{r^3}, \quad (3.11)$$

$$\dot{v}_y^* = -GM \frac{Y^* - y^*}{r^3}. \quad (3.12)$$

Замыкая постановку задачи, определим начальные значения компонент скорости и координат x^* и y^* . С учетом границ применимости упрощенного уравнения (3.7) примем, что начальные положения летательного аппарата распределены по окружности радиуса $0.1R$ вокруг начального положения планеты. Положения параметризованы «углом обзора» α , который определен на рисунке 3.7

$$x_0^* = R + 0.1R \cos \alpha, \quad y_0^* = 0.1R \sin \alpha. \quad (3.13)$$

Таким образом, траектория аппарата отслеживается с момента его попадания в область непосредственного влияния тела M . Начальную скорость будем характеризовать модулем v_0^* и «углом атаки» β , который также определен на рисунке

$$v_{x0}^* = -v_0^* \cos(\alpha - \beta), \quad v_{y0}^* = -v_0^* \sin(\alpha - \beta). \quad (3.14)$$

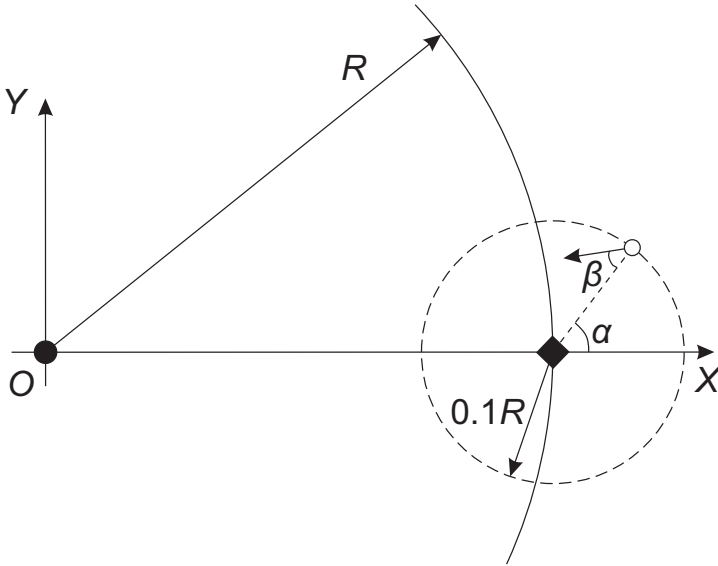


Рис. 3.7: Параметры траектории, характеризующие подлет летательного аппарата к области гравитационного влияния массивного тела (Юпитера). Обозначения: α — угол обзора, β — угол атаки.

Безразмерная постановка. Перейдем к новым, безразмерным переменным. За безразмерными переменными сохраним прежние обозначения, опуская верхний индекс «*». Нормируем все координаты и расстояния на R . В качестве характерного времени примем ω^{-1} , $t = \omega t^*$. Масштаб скорости примем равным v_0^* . Тогда задача (3.10)–(3.14) примет следующий эквивалентный вид

$$\dot{x} = \gamma v_x, \quad \dot{y} = \gamma v_y, \quad \gamma = \frac{v_0^*}{R\omega} \quad (3.15)$$

$$\dot{v}_x = -\delta \frac{X-x}{r^3}, \quad \dot{v}_y = -\delta \frac{Y-y}{r^3}, \quad \delta = \frac{GM}{v_0^* \omega R^2}. \quad (3.16)$$

$$x_0 = 1 + 0.1 \cos \alpha, \quad y_0 = 0.1 \sin \alpha. \quad (3.17)$$

$$v_{x0} = -\cos(\alpha - \beta), \quad v_{y0} = -\sin(\alpha + \beta), \quad (3.18)$$

где X , Y и r вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} X(t) &= \cos(t), & Y(t) &= \sin(t), \\ r &= ((X - x)^2 + (Y - y)^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Численный анализ задачи о гравитационном маневре. Рассмотрим гравитационный маневр около массивного тела при следующих значениях параметров $\omega = 10^{-9} \text{ с}^{-1}$, $\omega R = 1 \text{ км/с}$, $v_0^* = 10 \text{ км/с}$, $R = 10^9 \text{ км}$. Тогда безразмерные критерии подобия примут значения $\gamma = 10$, $\delta = 10^{-2}$. Эти условия соответствуют маневру зонда «Вояджер-1» около Юпитера.

Траектории движения летательного аппарата в окрестности массивного тела представлены на рисунке 3.8. Соответствующие зависимости модуля скорости от времени, $v = (v_x^2 + v_y^2)^{1/2}$, представлены на рисунке 3.9. Углы обзора выбраны с шагом $\pi/3$. Значение первого угла обзора составляет $11\pi/30$. В рассматриваемых условиях угол обзора $\alpha = 21\pi/30$ отвечает ускорению летательного аппарата по завершении маневра на $\sim 10\%$ от своей первоначальной скорости. Что характерно, направление движения аппарата изменяется на практически противоположное в результате такого маневра. Аналогичная картина наблюдается при угле обзора $\alpha = 41\pi/30$, когда аппарат замедляется на $\sim 20\%$ от своей первоначальной скорости. На остальные траектории полета взаимодействие с массивным телом оказывает гораздо меньшее влияние. Как видно из рисунка 3.9, слабое влияние оказывается и на зависимость кинетической энергии от времени.

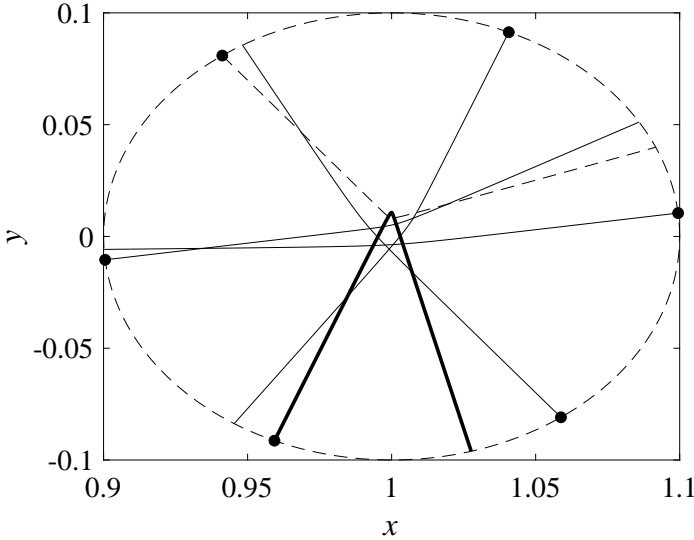


Рис. 3.8: Траектории космического аппарата в окрестности Юпитера при разных углах обзора. Угол атаки $\beta = -\pi/70$. Маркеры — начальная точка траектории. Пунктирная линия — окружность безразмерного радиуса 0.1 в принятых масштабах — окрестность Юпитера, в которой влияние тяготения Солнца пренебрежимо мало. Жирная линия — траектория при угле обзора $\alpha = 41\pi/30$. На данной траектории аппарат тормозится на $\sim 20\%$ от своей начальной скорости. Пунктирная линия — траектория аппарата при угле обзора $\alpha = 21\pi/30$. На данной траектории аппарат ускоряется на $\sim 10\%$ от своей начальной скорости.

Такое поведение кинетической энергии следует из закона сохранения полной энергии системы. В рамках рассматриваемой постановки задачи кинетическая энергия массивного тела M остается постоянной. Следовательно, наблюдаемые всплески кинетической энергии космического аппарата объясняются изменением его потенциальной энергии и малостью расстоя-

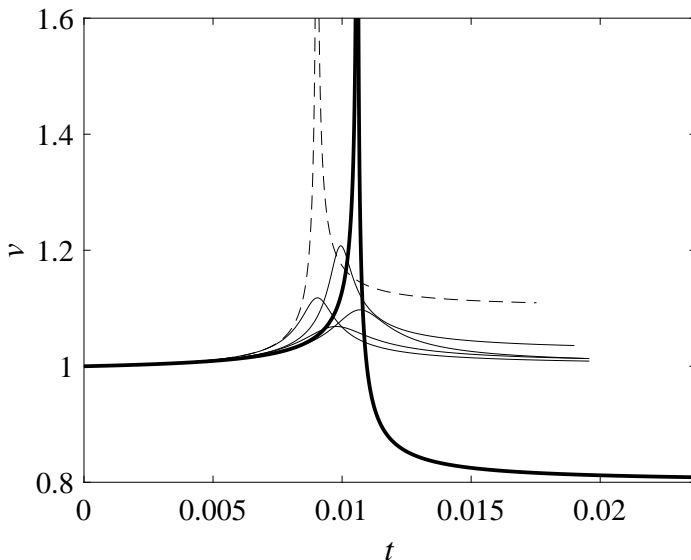


Рис. 3.9: Зависимость модуля скорости $v(t)$ космического аппарата в окрестности Юпитера от времени t при разных углах обзора. Угол атаки $\beta = -\pi/70$. Жирная линия — зависимость скорости, отвечающая углу обзора $\alpha = 41\pi/30$. Пунктирная линия — зависимость скорости, отвечающая углу обзора $\alpha = 21\pi/30$.

ния между двумя взаимодействующими космическими телами. Зависимости $r(t)$, вычисленные по формуле (3.19), демонстрируются на рисунке 3.10. Из них видно, что наибольшее воздействие на траекторию полета аппарата наблюдается в тех случаях, когда он проходит наиболее близко к массивному телу.

Из рисунка 3.10 видно также, что наибольшее влияние на траекторию космического аппарата происходит на исчезающе малом интервале времени. В связи с этим любопытно проанализировать зависимость ϕ направления скорости дви-

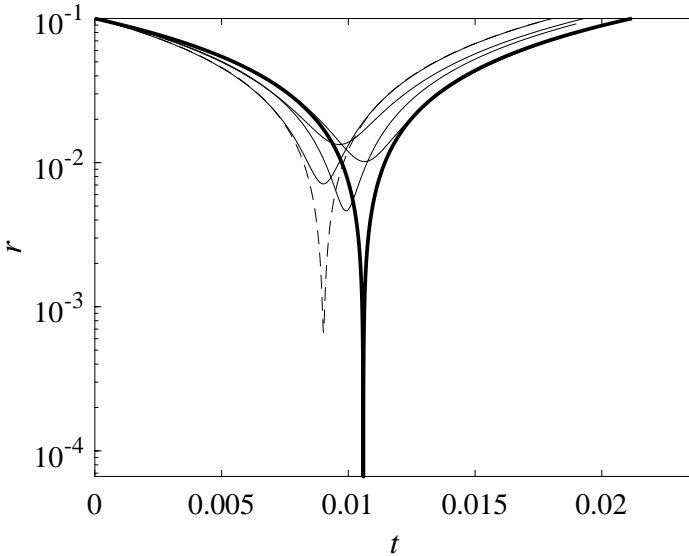


Рис. 3.10: Зависимость в логарифмической шкале расстояния $r(t)$ между космическим аппаратом и Юпитером от времени t при разных углах обзора. Угол атаки $\beta = -\pi/70$. Жирная линия отвечает углу обзора $\alpha = 41\pi/30$. Пунктирная линия отвечает углу обзора $\alpha = 21\pi/30$. Наибольшая эффективность гравитационного маневра достигается при условии, что допускается максимальное сближение двух тел.

жения космического аппарата от времени в выбранной системе координат. Эта зависимость представлена на рисунке 3.11. Действительно, для жирной и пунктирной линии, которые отвечают углу обзора $\alpha = 41\pi/30$ и $\alpha = 21\pi/30$ соответственно, направление движения космического аппарата остается неизменным на двух участках траектории. Изменение направления осуществляется скачком в масштабах всего полета. Поэтому часто при рассмотрении гравитационного маневра анализируют именно моменты времени, удаленные от мгновенной

смены направления движения. Зависимость изменения угла от параметров траектории можно получить в явном виде.

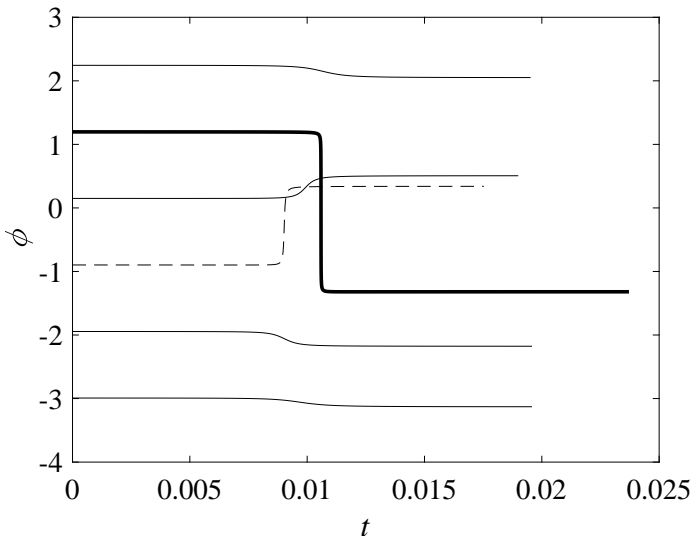


Рис. 3.11: Зависимость $\phi(t)$ направления скорости движения космического аппарата от времени t в выбранной системе координат при разных углах обзора. Угол атаки $\beta = -\pi/70$. Жирная линия отвечает углу обзора $\alpha = 41\pi/30$. Пунктирная линия отвечает углу обзора $\alpha = 21\pi/30$. В масштабах времени всего полета космического аппарата изменение направления его движения вследствие гравитационного маневра происходит скачком, мгновенно.

Решение задачи в пакете прикладных программ MatLab. Задачу о гравитационном маневре будем решать, используя встроенные функции MatLab. Одна из таких функций

```
[t, y] = ode45(odefun, tspan, y0, options)
```

реализует алгоритм Рунге–Кутты четвертого порядка с автоматическим подбором шага интегрирования. Здесь первый аргумент — указатель на функцию, которая вычисляет вектор правой части задачи Коши. Аргумент `tspan` — узлы t_j , в которых требуется вычислить приближенные значения. Аргумент y_0 — начальное значение задачи Коши. Структура `options` позволяет передавать различные параметры интегрирования, такие как, значение абсолютной и относительной точности интегрирования задачи, а также специальные условия остановки процесса интегрирования при наступлении некоторого «события».

В отдельном файле реализуем функцию, вычисляющую правую часть задачи Коши, также как это было сделано в прошлой задаче. Примем следующую нумерацию искомых функций

$$\mathbf{u} = (x; y; v_x; v_y).$$

Тогда

```
function dy = myode(t,y, gamma, delta)
% y = [x,y,vx,vy]
X = cos(t);
Y = sin(t);
r = sqrt((X - y(1)).^2+(Y-y(2)).^2);
dy = zeros(size(y));
dy(1) = gamma*y(3);
dy(2) = gamma*y(4);
dy(3) = delta*(X-y(1))./(r.^3);
dy(4) = delta*(Y-y(2))./(r.^3);
end
```

Здесь важно, что первый параметр функции — время, а второй — соответствующие значения искомых функций. Остальные параметры задачи, например, коэффициенты, входящие в правую часть, могут передаваться в качестве аргументов, начиная с третьего. Так, в функцию, вычисляющую правую

часть задачи Коши (3.15)–(3.19), передаются значения параметров γ и δ .

Для построения отдельной траектории основной файл программы организуем следующим образом

```
alpha = 11*pi/30;
beta = -pi/70;

gamma = 10;
delta = 0.01;
R = 0.1;

options = odeset('RelTol',1e-8,'AbsTol',1E-8);

x0 = 1 + R*cos(alpha(i));
y0 = R*sin(alpha(i));
vx0 = -cos(alpha(i)-beta);
vy0 = -sin(alpha(i)-beta);
IC = [x0,y0,vx0,vy0]; % initial conditions
[t,y] = ode45(@(t,y) myode(t,y,gamma,delta),
    [0,0.025], IC, options);

figure(23)
hold on
plot(y(:,1), y(:,2), 'k')
```

В данной программе создается указатель на функцию `myode`

```
@(t,y) myode(t,y,gamma,delta)
```

Причем первые два аргумента функции с именами t и y остаются свободными, а вместо двух последних, `gamma` и `delta`, подставляются значения, присвоенные им ранее в программе. Обобщение текущей версии программы с целью построения серии траекторий предполагает использование оператора цикла `for` и является очевидным.

До настоящего времени нас интересовали только решения на фиксированном отрезке изменения независимого аргумента. Однако часто требуется вести расчеты вплоть до наступле-

ния некоторого события. При этом момент $t = t_e$ наступления события неизвестен и может представлять отдельный интерес. Так, в задаче о гравитационном маневре нет смысла выполнять расчеты, когда летательный аппарат покинул область влияния массивного тела. Размеры этой области в рассматриваемых условиях составляют $0.1R$ и определяют границы применимости модели (3.10)–(3.14). Таким образом, в безразмерных переменных событие можно охарактеризовать как выполнение равенства

$$S(t) \equiv ((X - x)^2 + (Y - y)^2)^{1/2} - 0.1 = 0.$$

Причем событие может наступить как при увеличении S из области отрицательных значений, так и при уменьшении S из области положительных значений. Это позволяет различать моменты попадания космического аппарата в область влияния (начальный момент интегрирования) и моменты, когда аппарат покидает эту область. Поставленная задача может быть решена в пакете прикладных программ MatLab. Для этого определим в отдельном файле функцию myEvent следующим образом

```
function [pos, isterm, dir] = myEvent(t, y, R)
pos = (y(1) - cos(t)).^2 + (y(2) - sin(t)).^2 - R^2;
isterm = 1;
dir = 1;
end
```

Она возвращает три параметра. Первый, pos, определяет наступление события и хранит значение функции S , которая должна принимать нулевое значение в момент $t = t_e$ наступления события. Параметр isterm определяет продолжение (isterm = 0) или прекращение (isterm = 1) интегрирования при наступлении события. Последний параметр, dir, показывает в каком направлении (S возрастает или убывает) событие долж-

но отслеживаться. В данном случае $\text{dir} = 1$ и событие регистрируется при увеличении S . Другие возможные значения: 0 и -1 . В первом случае событие регистрируется и при увеличении и при уменьшении S , во втором – только при уменьшении.

Для отслеживания событий, описанных в виде функции $S(t)$, необходимо передать «решателю» ode45 соответствующий указатель на функцию myEvent. Для этого в функции main инициализация переменной options заменяется на следующую команду

```
options = odeset('RelTol',1E-8,'AbsTol',1E-8, 'Event',  
    @(t,y)myEvent(t,y,R));
```

Здесь вновь создается указатель на функцию. Расчет прекращается либо в момент $t = t_e$ наступления события $S(t_e) = 0$, либо в конечный момент $t = T$. Пакет MatLab позволяет одновременно отслеживать несколько событий. Тогда все три параметра, pos, isterm, dir, являются векторными величинами. Каждая компонента отвечает своему событию $S_i(t)$.

§ 3.3. Сверхкритическая флюидная экстракция

Описание процесса. В качестве очередной прикладной задачи, анализ которой может быть сведен к решению задачи Коши, предлагается рассмотреть математическую модель процесса сверхкритической флюидной экстракции (СКФЭ) масла из полидисперсного высокомасличного растительного сырья. Процесс СКФЭ важен для фармацевтической, пищевой, химической и других отраслей мировой промышленности. Применение технологии для извлечения ценных фракций масла, триглицеридов, из высокомасличного растительного сырья такого, как семена рапса, подсолнечника, тыквы и других, позволяет существенно повысить каче-

ство конечного продукта, его доступность. Экстракция реализуется по схеме, изображенной на рисунке 3.12. Вначале собранный материал, содержащий целевые соединения – масло, измельчается до характерного размера, не превышающего 1–2 мм (сырьё тонкого помола). Сформированный таким образом ансамбль частиц (навеска сырья) засыпается в экстракционную колонну и образует стационарный зернистый слой. Его свободный поровый объем заполняется растворителем, CO_2 , при требуемых уровнях давления ($p \sim 25\text{--}80$ МПа) и температуры ($T \sim 320$ К), превышающих соответствующие критические значения для данного вещества. Диоксид углерода пропитывает сырьё и проникает в клетки, в которых изначально запасено масло. Оно растворяется в экстрагенте, диффундирует по транспортным каналам к поверхности сырья и попадает в поровое пространство зернистого слоя. Одновременно экстрагент прокачивается (фильтруется) через зернистый слой с известным расходом вследствие приложенного градиента давления. В результате межфазного массообмена экстрагированные соединения переходят из растительного сырья в фильтрующийся поток и выносятся им к выходному сечению аппарата. После экстракционной колонны, проходя через серию сепараторов, экстракт отделяется от растворителя путем многоступенчатого сброса давления. Таким образом, в разных сепараторах оказываются разные группы экстрагируемых соединений.

В результате измельчения получаются частицы не только разных характерных размеров, но и разной формы. Традиционно рассматриваются плоские (пластинчатые) и сферические частицы. Форма частиц характеризует в первую очередь симметрию процессов массопереноса на уровне измельченного сырья. Пластинки часто используются при описании СКФЭ из листьев в силу их анизотропного строения. Приближение

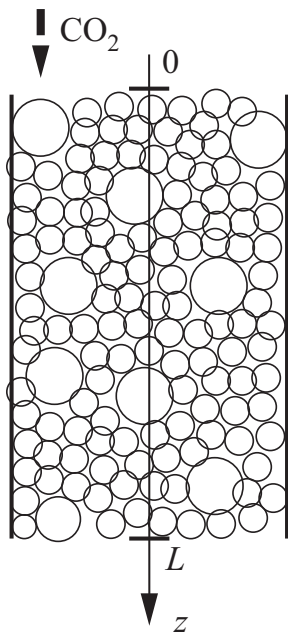


Рис. 3.12: Схема процесса сверхкритической флюидной экстракции на уровне аппарата. Круги показывают сферические частицы двух размеров. Вместе они образуют стационарный полидисперсный зернистый слой высоты L . На вход в аппарат подается растворитель – CO_2 – в сверхкритическом состоянии. Ось z направлена вдоль направления движения растворителя. Значение $z = 0$ отвечает входному сечению аппарата.

сферических частиц характерно для измельченных семян. Обе формы описываются одним характерным размером a . Он имеет смысл полутолщины для плоских частиц и радиуса — для сфер.

В последнее время СКФЭ активно исследуется отдельными научными группами с целью идентификации оптимальных условий производства и внедрения технологии на промышлен-

ном уровне. Наиболее полная информация о кинетике процесса, которая доступна в настоящее время, содержится в так называемой кривой выхода масла (КВМ). Она измеряется в эксперименте и показывает количество масла, извлеченного из аппарата (зернистого слоя) к текущему моменту времени. Полученные данные требуют теоретической интерпретации. Для этого строятся математические модели процесса, которые апробируются на этих данных. После апробации они могут быть использованы для предсказания динамики накопления масла в других условиях реализации процесса. Одна из таких моделей, апробированная на различных видах высокомасличного сырья, обсуждается далее в этом разделе.

Формулировка модели сверхкритической флюидной экстракции. Общий подход к построению математических моделей физических процессов, основанных на законах сохранения аддитивных величин – массы, импульса и энергии, называется подход механики сплошных и многофазных сред. В случае СКФЭ ансамбль частиц зернистого слоя и его поровое пространство эффективно рассматриваются как две взаимопроникающие и взаимодействующие среды. В результате полная модель складывается из макромасштабной, описывающей процессы фильтрации и межфазного массообмена в масштабах зернистого слоя, и микромасштабной, характеризующей диффузию и растворение масла в отдельной частице сырья. Экстракция из высокомасличного сырья хорошо описывается в рамках микромасштабной подмодели сжимающегося ядра (SC – shrinking core). При этом макромасштабная конвективная фильтрация растворителя записывается в квазистационарном приближении без учета эффекта конвективной диффузии (дисперсии). Соответствующие математические формулировки двух подмоделей приведены ниже с уче-

том следующих обозначений и дополнительных предположений. Обсуждение границ применимости этой модели выходит за рамки данного пособия.

Изначально целевые извлекаемые соединения локализованы в клетках сырья. Клетки занимают до 90% объема сырья, поэтому с высокой точностью можно принять, что изначально масло равномерно распределено по всему объему индивидуальной частицы. Плотность запасов на единицу объема обозначим через θ_0 . При заданной температуре и давлении процесс СКФЭ характеризуется предельной концентрацией θ_* насыщения растворенного масла в экстрагенте. Таким образом, θ_* – это константа, которая может быть оценена в результате адаптации модели к экспериментальным данным. Проницаемость клеточных мембран и проводимость транспортных каналов, окружающих клетки, контролируют интенсивность микромасштабного массопереноса при СКФЭ. Растворитель, проникая в клетки, растворяет масло до концентрации насыщения θ_* . Далее оно диффундирует из клетки через клеточную мембрану и попадает в транспортные каналы, роль которых играют межклеточное пространство и клеточные стенки. По ним растворенные соединения диффундируют к поверхности частицы по закону Фика с эффективным коэффициентом диффузии D_{eff} .

Границы применимости модели SC определяются двумя условиями. Во-первых, исходное содержание масла должно быть достаточно велико, $\theta_0 \gg \theta_*$. Во-вторых, сопротивление транспортных каналов является основным фактором, ограничивающим внутренний массоперенос, и сопротивление клеточных мембран несущественно для общей динамики микромасштабного транспорта. При выполнении этих допущений в частице образуется узкий диффузионный фронт, на котором локальные запасы масла падают от максимального значения θ_0

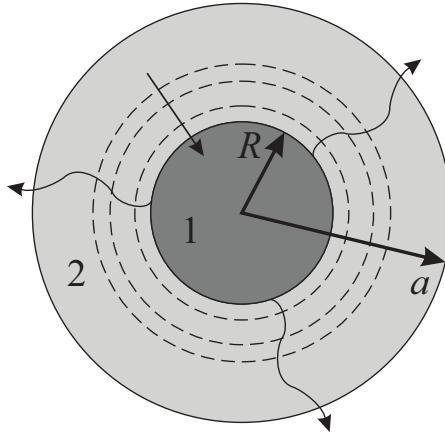


Рис. 3.13: Схема модели сжимающегося ядра для сферических частиц: 1 – маслосодержащее ядро, 2 – внешняя транспортная зона с растворенным веществом, диффундирующим к поверхности частицы по закону Фика, a – радиус частицы, R – текущее положение границы раздела (радиус ядра). Волнистые стрелки показывают пути диффузии растворенного масла, а пунктирные круги – предыдущие положения границы раздела. Уменьшение R показано стрелкой.

до концентрации насыщения θ_* . Как показано на рисунке 3.13, фронт отделяет две зоны внутри частицы: внутреннее маслосодержащее ядро (1) и внешнюю транспортную зону истощения (2). Концентрация масла в ядре равна θ_0 . В транспортной зоне присутствует только растворенное масло. Его плотность не превышает θ_* и монотонно убывает до значения на поверхности частицы, отвечающего концентрации омывающего потока. Ядро сжимается по мере того, как растворенное вещество диффундирует от фронта к поверхности частицы. В результате по мере истощения частицы растет диффузионное сопротивление транспортной зоны, и темпы экстракции замедляются.

ся. Частица считается полностью выработанной, когда фронт достигает ее центра. Маслом, оставшимся в частице в виде раствора в CO_2 пренебрегают.

В такой постановке текущее состояние плоской или сферической частицы полутолщины или радиуса a соответственно в любой момент времени t в зернистом слое характеризуется радиусом ядра, $0 \leq R(t) \leq a$. Истощение частицы определяется условием $R = 0$. При записи уравнений модели удобнее пользоваться эквивалентной характеристикой

$$s = 1 - \left(\frac{R}{a}\right)^m, \quad m = 1, 3.$$

Она равна объемной доле частицы, занятой транспортной зоной. Параметр m – индекс формы частиц. Он принимает значения 1 и 3 для плоских и сферических частиц соответственно.

Движущей силой экстракции является перепад концентрации в транспортной зоне частицы. Здесь она изменяется от максимального значения θ_* на границе раздела двух зон до минимального, равного $c\theta_*$, где $0 < c < 1$ – нормированная концентрация раствора, омывающего частицы. Тогда с учетом введенных обозначений микромасштабная схематизация принимает следующий вид

$$\frac{\theta_0}{\theta_*} \frac{\partial s}{\partial t} = \frac{m}{a} q_m, \quad q_m(t, z, a) = \frac{2D_{eff}}{a} \lambda_m(s)(1-c), \quad s|_{t=0} = 0. \quad (3.20)$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{2s}, \quad \lambda_3 = \frac{0.5(1-s)^{1/3}}{1-(1-s)^{1/3}}. \quad (3.21)$$

Здесь произведение $\theta_* q_m$ – массовый поток целевых соединений с единицы поверхности сырья в единицу времени. Функция λ_m характеризует форму частиц и диффузионное сопротивление транспортной зоны по мере выработки масла из ча-

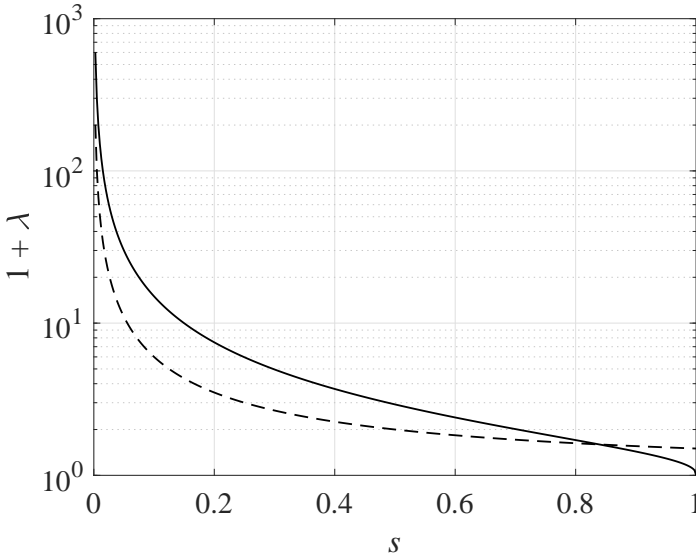


Рис. 3.14: Зависимость (3.21) безразмерной проводимости $\lambda_m(s)$ внешней транспортной зоны от количества извлеченного масла в логарифмическом масштабе по основанию 10. Сплошная линия — сферические частицы, $m = 3$, пунктирная линия — плоские частицы, $m = 1$.

стицы. Она изображена на рисунке 3.14 для двух рассматриваемых форм частиц. Обе функции, при $m = 3$ и $m = 1$, имеют интегрируемую особенность в окрестности $s \rightarrow 0$. Это говорит о том, что извлечение масла из приповерхностной области частицы ничем не лимитировано. По мере продвижения фронта истощения вглубь и увеличения толщины $1 - R$ транспортной зоны, ее проводимость падает.

Задача (3.20)–(3.21) выражает текущий баланс массы целевых извлекаемых соединений в пробной частице в переменных $(s; c)$. Она получается после преобразования общего уравнения баланса массы отдельных компонент раствора, извест-

ного из курса механики сплошных сред. Полученная задача служит для определения текущей степени истощения $s(t, z, a)$ частицы размера a в сечение $0 < z < L$ аппарата в текущий момент времени t , омываемой потоком растворителя при заданной концентрации масла $c(t, z)$. Последняя определяется из макромасштабного уравнения фильтрации растворителя

$$v \frac{\partial c}{\partial z} = (1 - e) \frac{m}{a} q_m, \quad c|_{z=0} = 0. \quad (3.22)$$

Здесь v – скорость фильтрации растворителя, e – пористость зернистого слоя.

Задача (3.20)–(3.22) представляет собой систему двух дифференциальных уравнений первого порядка в частных производных и определяет динамику процесса СКФЭ в переменных $(s; c)$ в монодисперсном приближении фракционного состава зернистого слоя. После решения этой задачи согласно своему определению КВМ, нормированная на начальные запасы масла, может быть получена интегрированием концентрации раствора у выходного сечения аппарата, $z = L$

$$Y(t) = \frac{\theta_*}{\theta_0} \frac{v}{(1 - e)L} \int_0^t c(\tau, L) d\tau. \quad (3.23)$$

Сформулированная задача расчета КВМ допускает дальнейшее упрощение. Ее исследование может быть сведено к многократному решению задачи Коши при разных значениях параметров, как будет показано далее в этом разделе.

Безразмерная постановка задачи. Дальнейшее исследование задачи (3.20)–(3.23) удобно проводить в новых безразмерных переменных. Для этого определим соответствующие масштабы процесса для координаты z вдоль оси аппарата, времени t и размера частиц a

$$z_{sc} = L, \quad t_{sc} = \frac{\theta_0}{\theta_*} \frac{H(1 - e)}{v}, \quad a_{sc}^2 = 2mD_{eff} \frac{H(1 - e)}{v}. \quad (3.24)$$

Соответственно безразмерные аналоги ζ , τ и ξ определены следующим образом

$$z = z_{sc}\zeta, \quad t = t_{sc}\tau, \quad a = a_{sc}\xi.$$

В новых обозначениях, где $c(\tau, \zeta)$ по-прежнему нормирована на θ_* , модель СКФЭ запишется следующим образом

$$\frac{\partial c}{\partial \zeta} = \frac{\partial s}{\partial t}, \quad c|_{\zeta=0} = 0. \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\lambda_m(s)}{\xi^2}(1 - c), \quad s|_{\tau=0} = 0. \quad (3.26)$$

$$Y(\tau) = \int_0^\tau c(\omega, 1)d\omega. \quad (3.27)$$

Безразмерная постановка задачи (3.25)–(3.27) не содержит явным образом ни одного параметра, определяющего сырье и условия процесса. Единственным параметром задачи является нормированный размер ξ частиц зернистого слоя. Для соотнесения решения задачи в безразмерной постановке с реальными условиями опыта наряду с a , L , v и e необходимо задание значений величин θ_0 , θ_* и D_{eff} , которые однозначно определяют характерные масштабы (3.24) и конкретизируют сырье в рамках принятой схематизации. Вообще, последняя тройка параметров зависит и от термодинамических условий процесса. Их значения, как правило, заранее неизвестны и должны определяться на основе идентификации модели по имеющимся экспериментальным данным.

Аналитическое решение задачи. Для построения решения задачи (3.25)–(3.27) в терминах функции $Y(\tau)$ введем дополнительно безразмерную характеристику

$$y(\tau, \zeta) = \int_0^\tau c(\omega, \zeta)d\omega. \quad (3.28)$$

По определению, y есть накопленное к моменту времени τ масло, извлеченное из части зернистого слоя $[0; \zeta]$ и нормированное на его начальную массу во всем реакторе, $0 \leq y(\tau, \zeta) \leq \zeta$. Сравнивая (3.27) и (3.28), легко видеть, что $Y(\tau) = y(\tau, 1)$.

Выполним интегрирование внутренней задачи (3.26), представляющей собой задачу Коши для дифференциального уравнения с разделяющимися переменными относительно функции s от переменной τ . Разделя переменные s и c , в результате интегрирования по τ получим неявную аналитическую зависимость s от τ , y и ξ

$$\varphi_m(s) = \min \left\{ 1, \frac{\tau - y}{\xi^2} \right\}, \quad (3.29)$$

$$0 \leq \varphi_m(s) = \int_0^s \frac{d\omega}{\lambda_m(\omega)} \leq 1.$$

Таким образом, y представляет собой «память» о предыдущих состояниях частицы.

Функция $\varphi_m(s)$ определена на интервале $0 \leq s \leq 1$ и монотонно возрастает на нем от нуля до единицы

$$\varphi_m(s) = \begin{cases} s^2, & m = 1; \\ 3 \left(1 - (1 - s)^{2/3} \right) - 2s, & m = 3. \end{cases} \quad (3.30)$$

Соответствующие зависимости приведены на рисунке 3.15. Оператор вычисления минимума из двух чисел в уравнении (3.29) отражает тот факт, что с наступлением полного истощения частицы, $s = 1$ и $\varphi_m(1) = 1$, ее состояние больше не изменяется с течением времени.

Выражение (3.29) неявно определяет s как обратную функцию φ_m^{-1} на интервале $\tau \geq 0$

$$s(\tau, \zeta, \xi) = \varphi_m^{-1} \left(\min \left\{ 1, \frac{\tau - y(\tau, \zeta)}{\xi^2} \right\} \right). \quad (3.31)$$

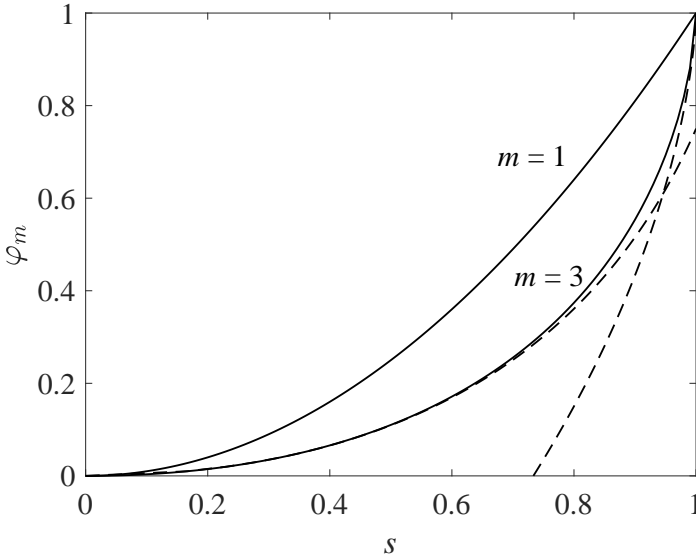


Рис. 3.15: Функции $\varphi_m(s)$ при $m = 1, 3$ (сплошные линии). Пунктирные линии — асимптотическое представление $s(\varphi_3)$ в окрестности $s \rightarrow 0$ и $s \rightarrow 1$ согласно уравнениям (3.33) и (3.34).

Для плоских частиц выражение может быть выписано явно

$$m = 1 : \quad s = \sqrt{\min \left\{ 1, \frac{\tau - y}{\xi^2} \right\}}.$$

Для сферических частиц явной аналитической формулы не существует. Однако можно получить два полинома, которые весьма точно приближают искомую функцию, применяя метод регулярных асимптотических разложений. Продемонстрируем возможности этого метода на примере рассматриваемой задачи. Получим разложение в окрестности точки $s = 0$, $\varphi = 0$. Для этого разложим правую часть уравнения (3.30) для сферических частиц в ряд Тейлора в окрестности иссле-

дуемой точки. Опуская далее индекс $m = 3$, запишем

$$\varphi = \frac{1}{3}s^2 + \frac{4}{27}s^3 + o(s^3), \quad s \rightarrow 0. \quad (3.32)$$

Очевидно, что в главном члене справедливо

$$s(\varphi) = \sqrt{3\varphi} + o(\varphi^{1/2}), \quad \varphi \rightarrow 0.$$

Чтобы получить следующий член разложения, воспользуемся более точным степенным представлением функции s

$$s(\varphi) = \sqrt{3\varphi} + C_1\varphi^{\alpha_1} + o(\varphi^{\alpha_1}), \quad \varphi \rightarrow 0,$$

где константы C_1 и α_1 подлежат определению. Для этого подставим выражение в общее разложение (3.32) и разложим его в окрестности $\varphi \rightarrow 0$ с сохранением слагаемых порядка $O(\varphi^{1/2+\alpha_1})$

$$\varphi = \frac{1}{3}(3\varphi + 2C_1\sqrt{3}\varphi^{1/2+\alpha_1} + \dots) + \frac{4}{27}(\sqrt{27}(\varphi)^{3/2} + \dots) + o(\varphi^{1/2+\alpha_1}).$$

Приравнявая коэффициенты при старших степенях, находим, что $\alpha_1 = 1$, и асимптотическое представление для $s(\varphi)$ в окрестности нуля примет вид

$$s^-(\varphi) = \sqrt{3\varphi} - \frac{2}{3}\varphi + o(\varphi), \quad \varphi \rightarrow 0. \quad (3.33)$$

Аналогичным образом строится асимптотическое разложение по малому параметру $0 < 1 - \varphi \rightarrow 0$ в окрестности точки $s \rightarrow 1$, $\varphi \rightarrow 1$

$$s^+(\varphi) = 1 - \frac{1}{\sqrt{27}}(1 - \varphi)^{3/2} - \frac{1}{8}(1 - \varphi)^2 + o\left((1 - \varphi)^2\right). \quad (3.34)$$

Для этого однако стоит перейти к новым переменным

$$s_* = 1 - s, \quad \varphi_* = 1 - \varphi.$$

Тогда уравнение (3.30) при $m = 3$ примет следующий вид

$$\varphi_* = 3s_*^{2/3} + 2s_*. \quad (3.35)$$

В результате применения метода регулярных асимптотических разложений к уравнению (3.35) в окрестности $s_* \rightarrow 0$ и $\varphi_* \rightarrow 0$ после обратного перехода к переменным s и φ получается искомое разложение (3.34).

Полученные соотношения (3.33) и (3.34) позволяют эффективно обращаться нелинейное алгебраическое уравнение (3.30) для сферических частиц, используя метод Ньютона. Начальное приближение для каждого текущего момента времени t вычисляется как максимум из двух значений, s^- и s^+ . Далее вычисляется производная функции $\varphi(s)$ по s и применяется стандартный алгоритм вычисления поправки к текущему приближению.

Считая, что функция $s(\tau, \zeta, \xi) = s((\tau - y)/\xi^2)$ нам известна, вернемся к анализу макромасштабной модели (3.25). Она тоже допускает интегрирование по времени τ . В результате получается следующее уравнение

$$\frac{\partial y}{\partial \zeta} = k(\tau - y) \equiv s\left(\frac{\tau - y}{\xi^2}\right), \quad y|_{\zeta=0} = 0. \quad (3.36)$$

Задача (3.29), (3.30) и (3.36) не содержит производную по времени. Таким образом, τ является параметром задачи, а уравнение (3.36) принимает вид обыкновенного дифференциального уравнения с разделяющимися переменными относительно функции y аргумента ζ при каждом значении τ . Таким образом, расчет накопленной добычи масла $Y(\tau) \equiv y(\tau, 1)$ к текущему моменту времени сводится к решению задачи Коши (3.36) на отрезке $0 < \zeta < 1$ при выбранном фиксированном значении τ . Правая часть задачи, функция $k(\tau - y)$, вычисляется в результате решения алгебраического уравнения (3.29).

Решение задачи в пакете прикладных программ MatLab. Наметим процедуру численного решения прямой задачи расчета кривой выхода масла (КВМ) для монодисперсного зернистого слоя на основе аналитических формул, полученных в этом разделе. Сначала рассмотрим решение задачи для плоских частиц. Для этого в отдельном файле реализуем функцию, которая возвращает текущее значение $s(y, \tau, \xi)$ для частицы размера ξ в момент времени τ . Положение частицы в аппарате характеризуется параметром $y(\tau, \zeta)$

```
function result = s1(y,tau,xi)
result = sqrt(min(1,(tau-y)/(xi*xi)));
end
```

Несколько более сложной оказывается реализация обращения функции $\varphi_3(s)$ для сферических частиц, которая предполагает вычисление начального приближения guess на основе полученных асимптотических разложений и его уточнение по схеме Ньютона

```
function result=s3(val)
if val>=1-1E-10
    result = 1;
elseif val<=0
    result = 0;
else
    ass1 = sqrt(3*val)-2/3*val-1/(18*sqrt(3))*val
    .^(3/2)-1/81*val.^2-7/(648*sqrt(3))*val.^(5/2);
    ass2 = 1-(1/3)^(3/2)*(1-val).^(3/2)-1/8*(1-val)
    .^(4/2)-7/(54*sqrt(3))*(1-val).^(5/2);

    guess = min(ass1, ass2);

    result = myfzero(@(x)phi3(x, val), 1e-7, guess);
end
end

function [y, dy] = phi3(s, val)
```

```

y = 3*(1-(1-s)^(2/3))-2*s - val;
if(nargout==2)
    dy = 2*((1-s).^(-1/3)-1);
end
end

function x0 = myfzero(fun, tol, x0)
% secant method for solution of equation
% fun(x) == 0
f = true;
while (f)
    [y, dy] = fun(x0);
    dx0 = - y/dy;
    x0 = max(min(x0+dx0,1), 0);
    f = (abs(y)>tol) && (abs(dx0)>tol);
end
end

```

Здесь вначале выполняется проверка. Текущее значение $\varphi_3(s)$, для которого определяется соответствующее значение функции истощения s , обозначено параметром `val` и должно лежать в интервале $[0; 1]$. Значения большие единицы, $\text{val} > 1$ означают, что частица полностью истощена. Отрицательные значения, $\text{val} < 0$, не могут возникать в рамках логики программы, но соответствующая проверка все равно предусмотрена. Функция `phi3` реализует вычисление разности $y = \varphi_3(s) - \text{val}$, а также производной $dy = d\varphi_3(s)/ds$. Функция `myfzero` реализует итерационный алгоритм уточнения текущего приближения `guess` искомого уровня истощения частицы по схеме Ньютона. Требуемая точность передается вторым параметром при вызове функции `myfzero`.

Далее приведем функцию, вычисляющую значение правой части задачи Коши (3.36) по пространственной переменной, которую необходимо решать в каждый момент времени

```

function dy = myode(zeta, y, tau, xi)
dy = s1(y,tau,xi);

```

```
end
```

Здесь, как требует документация системы MatLab, первые два входных аргумента — значения соответственно независимого аргумента и вектора искомых функций. Затем передаются дополнительные параметры, а именно текущий момент времени и полутолщина плоских частиц. Задача Коши является автономной, так как ее правая часть не зависит явно от ζ . Переход к расчету задачи для сферических частиц осуществляется простой заменой вызова функции `s1` на функцию `s3`. Описанная программа может быть записана в более универсальном виде с использованием шаблона разработки «стратегия». Для этого функция `myode` должна принимать в качестве одного из входных параметров указатель на функцию для вычисления уровня истощения s индивидуальной частицы. Это может оказаться весьма полезным, если требуется рассчитывать экстракцию и из частиц цилиндрической формы.

Отдельным файлом опишем функцию, которая вычисляет КВМ для заданного размера частиц в требуемые моменты времени

```
function [tau,Y] = getOEC1(tau, xi)
Y = zeros(size(tau));
opt=odeset('RelTol', 1e-3, 'AbsTol', 1e-5);
for i = 1:length(tau)
[~,z]=ode45(@ (t,y) myode(t,y, tau(i), xi), [0, 1], 0,
opt);
Y(i)=z(end);
end
```

Здесь интегрирование ведется на отрезке $[0; 1]$, где $\zeta = 0$ отвечает входному сечению аппарата, $\zeta = 1$ — выходному сечению. Начальное значение искомой функции равно нулю. Интегрирование выполняется для каждого момента времени $\tau(i)$.

В главном файле программы происходит вызов функции `getOEC1` для разных значений размеров частиц. Для получе-

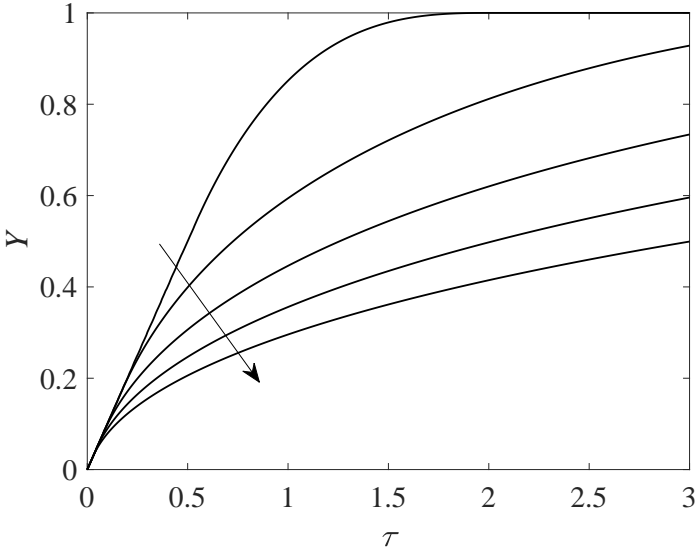


Рис. 3.16: Рассчитанные кривые выхода масла для монодисперсного зернистого слоя сферических частиц. Стрелка указывает направление роста размера ξ от 1 до 5 с шагом 1.

ния плавных графиков массив моментов времени можно инициализировать, например, следующим образом

```
tau = linspace(0,3,401);
```

Здесь, $\tau = 3$ — последний момент времени расчета КВМ. В результате выполнения описанной программы для разных размеров ξ частиц получается набор КВМ, представленный на рисунке 3.16.

§ 3.4. Автомодельная задача в теории сверхкритической флюидной экстракции

Постановка задачи. При исследовании задач механики

сплошных сред часто возникают так называемые автомодельные режимы. Как правило, такая ситуация наблюдается для задач относительно функций двух независимых аргументов. В рассматриваемой задаче такими аргументами являются время τ и пространственная координата ζ . Явление называется автомодельным, если распределения его характеристик получаются одно из другого преобразованием подобия. Автомодельность – особая симметрия физической системы, состоящая в том, что изменение масштабов независимых переменных может быть скомпенсировано преобразованием подобия других динамических переменных. Автомодельность приводит к эффективному сокращению числа независимых переменных.

Опуская подробное объяснение данного термина, приведем формальные математические выкладки, основанные на соответствующей симметрии СКФЭ при определенных режимах. Для этого необходимо принять следующие обобщающие допущения. Будем считать, что скорость фильтрации растворителя изменяется со временем. Безразмерную скорость фильтрации обозначим $\omega(\tau)$. Зернистый слой является полидисперсным и состоит из плоских частиц. Полидисперсность предполагает, что ансамбль частиц, формирующих слой, характеризуется разными характерными размерами. Такая ситуация описывается функцией $0 < F(\xi) < 1$ объемного распределения частиц по размерам. Согласно определению, значение $F(\xi_0)$ показывает объемную долю частиц в ансамбле, размер которых не превышает ξ_0 . Также потребуем, чтобы частицы были отсортированы перед их упаковкой в экстракционную колонну по убыванию размера в направлении фильтрации растворителя. Следовательно, в уравнении (3.26) в правой части ξ становится функцией ζ , $\xi = \xi(\zeta)$. Эта зависимость получается в ходе обращения тождества $F(\xi) = 1 - \zeta$.

Окончательно математическая запись модели процесса СКФЭ для плоских частиц, $m = 1$, при переменной скорости фильтрации растворителя и стратифицированной упаковке полидисперсных частиц в аппарат примет следующий вид

$$\omega(\tau) \frac{\partial c}{\partial \zeta} = \frac{\partial s}{\partial \tau}, \quad c|_{\zeta=0} = 0, \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial s^2}{\partial \tau} = \frac{1 - c}{\xi^2(\zeta)}, \quad F(\xi) = 1 - \zeta. \quad (3.38)$$

Легко получить выражение для изменения s у входного сечения аппарата, где $c \equiv 0$

$$s = \sqrt{\tau}/\xi(0). \quad (3.39)$$

Здесь оператор \min опущен, так как рассматриваемые далее режимы предполагают одновременное полное истощение всех частиц зернистого слоя в момент времени $\tau = 1$. То есть вплоть до окончания процесса, $\tau < 1$, ни одна частица полностью не истощилась, $s < 1$. С необходимостью получим ограничение на допустимые размеры частиц в аппарате, $0 \leq \xi \leq 1$. Изменится и определение КВМ с учетом непостоянства расхода растворителя со временем

$$Y(\tau) = \int_0^\tau \omega(\sigma)c(\sigma, 1)d\sigma.$$

В общем случае решение этой задачи дается разными формулами в двух областях аппарата. Соответствующая схема изображена на рисунке 3.17. Первая область (А) называется зоной экстракции, где концентрация c монотонно изменяется от 0 до 1. Здесь сырье частично обеднено, $s > 0$. С течением времени область А расширяется от входного сечения аппарата в сторону выходного и постепенно вытесняет вторую область (В) — зону насыщения, где $c \equiv 1$, и частицы еще не

начали выработку, $s \equiv 0$. Эти области разделены подвижной границей, $\zeta = \zeta_0(\tau)$. Вообще выделяют еще и третью область полного истощения. Однако для рассматриваемых режимов она не наблюдается вплоть до момента времени $\tau = 1$, когда все частицы достигают истощения одновременно.

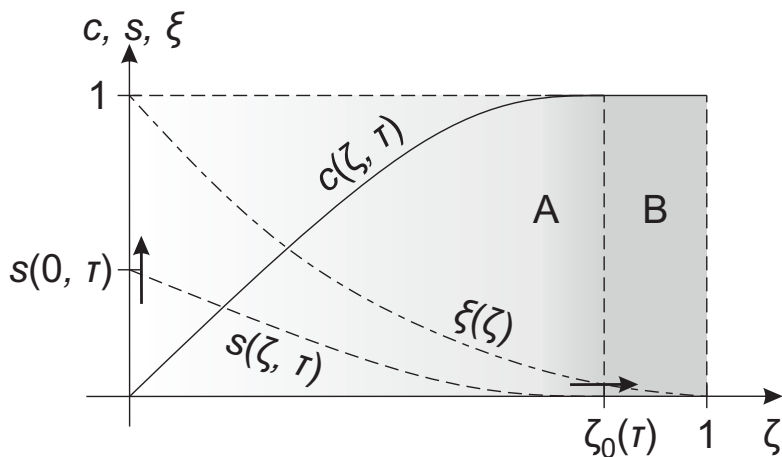


Рис. 3.17: Распределение концентрации c и степени истощения частиц s по длине аппарата $0 \leq \zeta \leq 1$ в промежуточный момент времени $0 < \tau < 1$. Вертикальная пунктирная линия отмечает границу раздела двух зон в аппарате, $\zeta = \zeta_0(\tau)$. А — зона экстракции, где текущая концентрация изменяется от 0 до 1. В — зона насыщения, где $c \equiv 1$ и $s \equiv 0$. Горизонтальная стрелка показывает направление движения границы раздела $\zeta = \zeta_0(\tau)$. Вертикальная стрелка показывает рост выработки частиц у выходного сечения аппарата. Убывающая штрих-пунктирная кривая — зависимость $\xi(\zeta)$ размера частиц от положения в аппарате. Оттенком серого показано изменение концентрации c по длине аппарата.

Автомодельность предполагает, что исходную задачу (3.37), (3.38) можно записать относительно новых неиз-

вестных функций $c(\varrho)$ и $S(\varrho)$ автомодельной переменной ϱ . Последнюю представим следующим образом

$$\varrho(\zeta, \tau) = \frac{x(\zeta)}{x_0(\tau)}, \quad x(\zeta) = \int_0^\zeta \frac{d\zeta}{\xi(\zeta)}, \quad (3.40)$$

где $x_0(\tau) \equiv x(\zeta_0(\tau))$ — значение функции x на границе раздела двух зон в аппарате. Выражение для $x_0(\tau)$ подлежит определению в ходе решения задачи. Таким образом, зона выработки, где $c(\varrho)$ строго монотонно возрастает от нуля до единицы, в каждый момент времени процесса взаимнооднозначно отображается на отрезок $[0; 1]$ изменения автомодельной переменной ϱ . Важно, что указанное определение x имеет смысл только в случае, когда $c(\tau, 1) \equiv 1$ при $\tau < 1$. Следовательно, из аппарата всегда выходит насыщенный раствор.

Будем искать концентрацию c в виде функции автомодельной переменной ϱ в области выработки и определим там же новую функцию

$$S = \frac{\xi(\zeta)s(\zeta, \tau)}{\sqrt{\tau}}, \quad S|_{\zeta=0} = 1. \quad (3.41)$$

Выписанное для нее граничное условие получается из (3.39) и, таким образом, является следствием того, что на вход в аппарат все время подается чистый растворитель, $c(\tau, 0) \equiv 0$.

Подставляя соотношение (3.41) в уравнения (3.37) и (3.38), а также учитывая определение (3.40) для $\varrho = \varrho(\zeta, \tau)$, опуская гомоздские выкладки, получим

$$S = \frac{x_0(\tau)}{2\omega(\tau)\sqrt{\tau}} \frac{1 - c(\varrho)}{c'(\varrho)}.$$

Таким образом, при $x_0(\tau) = 2\lambda\omega(\tau)\sqrt{\tau}$ функция $S = S(\varrho)$, и

$$c' = \lambda \frac{1 - c}{S}. \quad (3.42)$$

Выразим далее s из соотношения (3.41) и подставим в уравнение (3.38). Учитывая, что $\dot{\varrho} = -\varrho \dot{x}_0/x_0$, и связь между x_0 и ω , полученную ранее, найдем, что искомый автомодельный режим возможен при одновременном выполнении следующих равенств при $\tau < 1$

$$x_0 = \lambda(2r + 1)\tau^r, \quad \omega = (r + 0.5)\tau^{r-1/2}.$$

В этих условиях получим второе уравнение задачи для отыскания неизвестных функций c и S

$$S' = \frac{1}{2r\varrho} \left(S - \frac{1-c}{S} \right). \quad (3.43)$$

Условия в точке $\varrho = 0$ для уравнений (3.42) и (3.43)

$$c(0) = 0, \quad S(0) = 1 \quad (3.44)$$

определяются из граничных условий исходной задачи (3.37)–(3.39). Отдельно подчеркнем, что второе из условий (3.44) является следствием балансовых соотношений (3.37)–(3.38) и граничного условия для функции c . Таким образом, в автомодельной задаче (3.42)–(3.44) только одно из начальных условий является независимым.

В задаче также остается неизвестный параметр λ , значение которого должно определяться из условия, что $\varrho = 1$ соответствует положению границы зоны выработки. Из непрерывности концентрации c на границе раздела двух зон получим, что

$$c(1) = 1. \quad (3.45)$$

Интегрирование уравнения (3.38) по времени при условии $c \equiv 1$ показывает, что с необходимостью как функция s , так и приведенная функция истощения S частиц должны принимать нулевое значение на правом конце отрезка $0 < \varrho < 1$

интегрирования задачи

$$S(1) = 0. \quad (3.46)$$

Таким образом, анализ автомодельной задачи (3.42)–(3.46) сводится к решению двухточечной краевой задачи, где одно независимое дополнительное условие (3.45) позволяет выделить значение параметра λ , отвечающее решению с физическим смыслом при заданном значении r .

Метод пристрелки для решения автомодельной краевой задачи. Полученную задачу (3.42)–(3.46) при неизвестной функции $\lambda(r)$ для каждого значения параметра r будем решать, используя метод пристрелки. Основы метода изложены в § 1.5. При этом задаваясь некоторым пробным значением λ будем решать эквивалентную задачу Коши, стартуя из одного конца отрезка. Пробное значение уточняется до тех пор, пока граничное условие для s на другом конце отрезка интегрирования не выполнится с требуемой наперед заданной точностью.

Однако прямое применение методов численного интегрирования в рассматриваемом случае затрудняется наличием устранимой особенности на обоих концах отрезка интегрирования, при $\varrho = 0$ и 1. Для устранения особенности используется подход регулярных асимптотических разложений, который был применен при обращении алгебраического уравнения $\varphi_3(s) = const$ в § 3.3. Покажем, как можно применить этот метод для построения приближенного аналитического выражения искомых функций в окрестности конца отрезка интегрирования, в котором известны точные значения функций. Рассмотрим правый конец, $\varrho = 1$. С точностью до линейных членов разложения можно записать

$$c = 1 + c_1(1 - \varrho) + o(1 - \varrho), \quad (3.47)$$

$$S = S_1(1 - \varrho) + o(1 - \varrho), \quad (3.48)$$

где c_1 и S_1 — константы, подлежащие определению. Предположим, что разложения (3.47), (3.48) допускают дифференцирование по ϱ

$$c' = -c_1 + o(1),$$

$$S' = -S_1 + o(1)$$

и подставим их в дифференциальные уравнения (3.42), (3.43). Учитывая, что $S(\varrho) = o(1)$, $\varrho \rightarrow 1$ с той же точностью получим равенства в окрестности $\varrho = 1$

$$-c_1 = -\lambda \frac{c_1}{S_1}, \quad (3.49)$$

$$-S_1 = \frac{1}{2r} \frac{c_1}{S_1}. \quad (3.50)$$

Отсюда $S_1 = \lambda$, $c_1 = -2r\lambda^2$. Выписывая разложения (3.47), (3.48) с учетом поправок следующего порядка, подставляя их в уравнения (3.42), (3.43) и сохраняя слагаемые порядка $o(1 - \varrho)$ приходим к следующим формулам при $\varrho \rightarrow 1$ и $r > 0$

$$S = \lambda(1 - \varrho) + \frac{\lambda}{8r}(2r - 1)(1 - \varrho)^2 + O((1 - \varrho)^3),$$

$$c = 1 - 2\lambda^2 r(1 - \varrho) + \frac{\lambda^2}{4}(2r - 1)(1 - \varrho)^2 + O((1 - \varrho)^3).$$

Использование этих соотношений позволяет в качестве начальной точки интегрирования использовать, например, $\varrho = 1 - h$. Тогда соответствующие граничные значения c и S должны вычисляться по полученным разложениям. Значение $h \approx 10^{-10}$, как правило, вполне отвечают требуемой точности расчетов. Такая процедура, а также устойчивость решения к малым возмущениям начальных условий гарантируют, что в рамках требуемой точности новая начальная

точка находится на той же траектории, что и оригинальное граничное условие.

В точке $\varrho = 0$ правая часть исследуемой краевой задачи также имеет особенность. Поэтому интегрирование должно быть остановлено в ее непосредственной окрестности $\varrho > 0$. Определяющим условием здесь является первое из уравнений (3.44). Поэтому достаточно построить лишь разложение для функции c в этой окрестности. Вновь используя подход регулярных асимптотических разложений, получим

$$c = \lambda\varrho + o(\varrho), \quad \varrho \rightarrow 0. \quad (3.51)$$

Следовательно, численное интегрирование задачи Коши должно быть остановлено в точке $\varrho = h$, а значение λ должно быть подобрано так, чтобы удовлетворить равенству (3.51) в главном члене. Процедура подбора λ при заданном r сводится в свою очередь к минимизации квадратичного функционала

$$\lambda_* = \arg \min_{\lambda} (c(h, r, \lambda) - \lambda h)^2, \quad (3.52)$$

аналогичного рассмотренному ранее уравнению (1.18) для задачи о полете снаряда. Здесь значение $c(h, r, \lambda)$ получается в ходе решения задачи Коши с начальной точкой $\varrho = 1 - h$.

Результаты расчетов. В результате решения задачи (3.42)–(3.45) определяются зависимость $\lambda(r)$, изображенная на рисунке 3.18, а также соответствующее однопараметрическое семейство функций $c(\varrho, r)$ и $S(\varrho, r)$, изображенных на рисунке 3.19. Найдены два аналитических решения задачи, представленные там же пунктирными линиями и соответствующие значениям $(r; \lambda) = \{(0; 2), (0.5; 1)\}$, которые отмечены маркерами на рисунке 3.18.

Дальнейшее исследование задачи подразумевает восстановление распределения $F(\xi)$, соответствующего построенно-

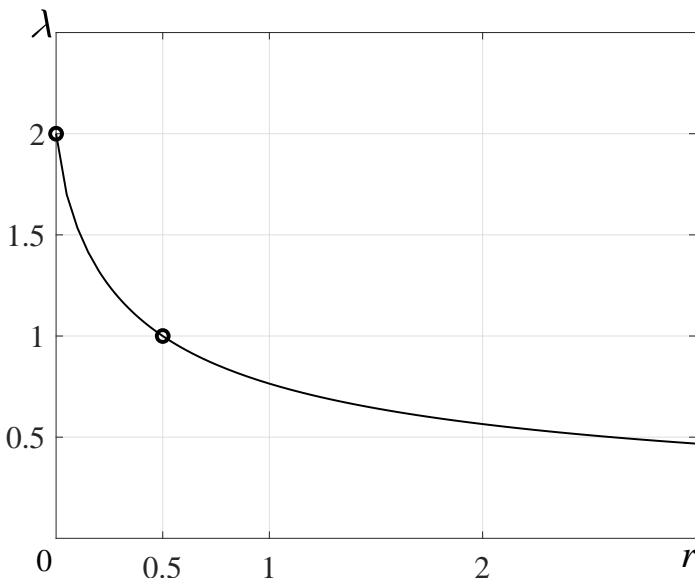


Рис. 3.18: Зависимость $\lambda(r)$. Маркеры соответствуют найденным аналитическим решениям.

му автомодельному решению (c, S) . В данной задаче функция F задается параметрически. Из определения (3.41) при $\tau = 1$ и условия полного истощения слоя, $s(\zeta, 1) \equiv 1$, к моменту $\tau = 1$ имеем зависимость ξ от параметра $\varrho_1 = \varrho|_{\tau=1} \equiv x(\zeta)/x_0(1)$ в виде

$$\xi = S(\varrho_1). \quad (3.53)$$

Для рассматриваемых стратифицированных упаковок размер ξ частиц в заданном сечении ζ аппарата определяется условием $F(\zeta) = 1 - \xi$, тогда из соотношения (3.40) получим

$$x(\xi) = \int_{\xi}^{\xi_{\max}} \frac{f(\xi)}{\xi} d\xi = \varrho_1 x_0(1), \quad \xi_{\min} \leq \xi \leq \xi_{\max}.$$

Дифференцируя последнее равенство и учитывая (3.53), най-

дем

$$-f(\xi)d\xi = x_0(1)S(\varrho_1)d\varrho_1.$$

Интегрированием последнего соотношения восстанавливается искомая функция распределения F как функция автомодельной переменной

$$F(\varrho_1) = 1 - \int_{\xi(\varrho_1)}^{\xi_{\max}} f(\xi)d\xi = 1 - \lambda(2r + 1) \int_0^{\varrho_1} S(\varrho)d\varrho. \quad (3.54)$$

Таким образом, соотношения (3.53)–(3.54) при каждом $r \geq 0$ определяют навеску плоских частиц, для которой возможна полная экстракция целевых соединений за единичное время в

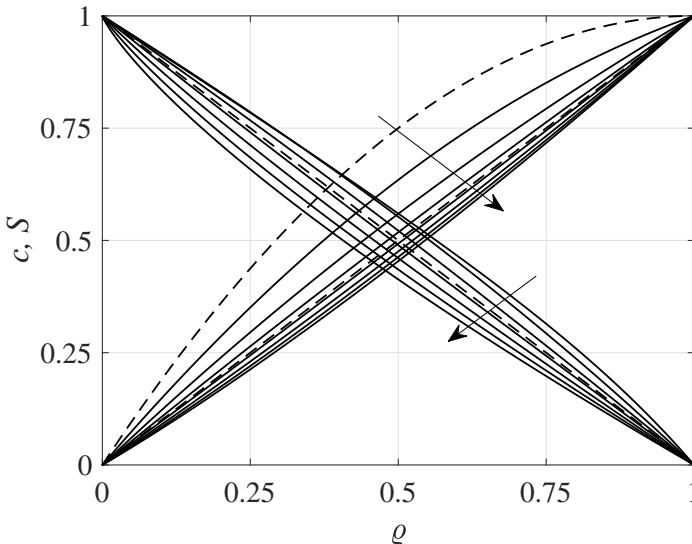


Рис. 3.19: Сплошные линии: семейство решений $c(\varrho, r)$ и $S(\varrho, r)$. Пунктирные линии: $c = \varrho$, $c = 1 - (1 - \varrho)^2$ и $S = 1 - \varrho$. Стрелками (для сплошных линий) указано направление роста r на отрезке $[0.1; 0.5]$ с постоянным шагом 0.1.

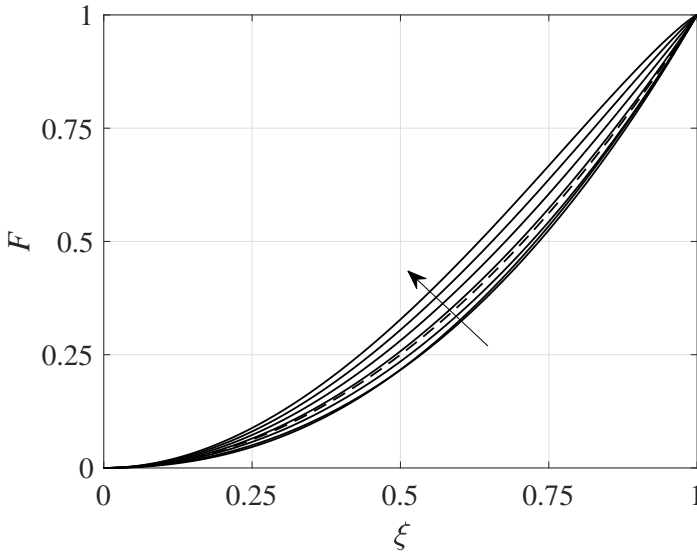


Рис. 3.20: Функции распределения $F(\xi)$ плоских частиц по размерам. Пунктирная линия $F(\xi) = \xi^2$ соответствует найденным аналитическим решениям при $r = 0$ и 0.5 . Стрелка (для сплошных линий) указывает направление роста r на отрезке $[0.1; 1]$ с постоянным шагом 0.15 .

автомодельном режиме при соответствующей степенной зависимости расхода растворителя от времени, $\omega \sim \tau^{r-1/2}$. Функции F , отвечающие значениям $r = [0.1; 1]$, изображены на рисунке 3.20.

Решение задачи в пакете прикладных программ MatLab. Как следует из предыдущих рассуждений, в основе решения краевых задач¹ методом пристрелки лежит минимизация некоторого функционала, например, заданного уравне-

¹ Неоднозначность понятия «краевая задача» обсуждается в § 1.5.

нием (3.52) или (1.18). Он характеризует отклонение текущей интегральной кривой от искомой в одной из ее точек. В рассматриваемых задачах это граница отрезка интегрирования, противоположная к начальной точке. В силу предположения об устойчивости задачи Коши к возмущению начальных данных и единственности решения близость двух интегральных кривых в одной точке означает их близость в той же метрике и при всех остальных значениях независимого аргумента в пределах отрезка интегрирования.

На примере автомодельной краевой задачи (3.42)–(3.44) определение ее решения с некоторой наперед заданной точностью означает отыскание такого значения λ_* , при котором квадрат разности $c(h, r, \lambda) - \lambda h$ принимает минимальное значение, см. уравнение (3.52). В данном случае оно известно и равно нулю. Задача решается при значении $h = 10^{-10}$. Оно определяет наибольшую возможную точность полученного решения. Этот же уровень точности принимается и при вызове стандартных алгоритмов минимизации функционала, реализованных в пакете MatLab.

Приведем реализацию основной функции

```
function [lambda]=Lambda(r)
h = 1e-10;
options = optimset('TolFun', 1E-10, 'TolX', 1E-10);
[lambda, fval] = fminbnd(@(x) J(x, r, h), 0.45, 2,
    options);
end

function result = J(lambda, r, h)
t1 = 1-h;
t2 = h;
eps = 1e-6;
options = odeset('Events', @MyEvents, ...
    'RelTol',eps, 'AbsTol', eps);
A = lambda;
```

```

B = 2*r*lambda^2;
[~, Y] = ode45(@(t,y) rigid(t,y, r, lambda), ...
[t1 t2], [1-B*h A*h], options);

result = abs(Y(end,1) - lambda*h);
end

function [value, isterminal, direction] = MyEvents(t,y)
value = y(1);      % Detect height = 0
isterminal = 1;   % Stop the integration
direction = 0;    % Negative direction only
end

```

Основная функция $\text{Lambda}(r)$ выполняет пристрелку траектории по параметру λ при заданном значении r . Для этого вызывается встроенная функция `fminbnd` пакета `MatLab`. Она находит минимум некоторого функционала. Правило его вычисления для заданного набора значений x параметров функционала передается указателем на функцию первым аргументом

```
@(x) J(x, r, h)
```

В данном случае это функция J . Ее первый (скалярный) аргумент содержит один элемент, который имеет смысл параметра λ . В качестве двух других входных параметров подставляются текущие значения r и h . Таким образом, функционал, заданный своим указателем, вычисляется при фиксированных значениях r и h как функция своего первого аргумента x . Последний, в зависимости от рассматриваемой задачи, может быть вектором.

Очевидно, что вычисление функционала предполагает решение связанной задачи Коши. Здесь интегрирование ведется либо до точки $\varrho \rightarrow 0$, либо до момента наступления условия $c = 0$. Последнее описывается функцией-событием `MyEvents`.

Как только искомая пара $(r; \lambda)$ найдена, возможно вычисление не только соответствующих автомодельных функций

$c(\varrho)$ и $S(\varrho)$, но и объемного распределения частиц по размерам, $F(\xi)$. Алгоритм вычисления последней описан в § 3.4. Далее приведен программную реализацию ее вычисления на языке MatLab

```
F = 1 - cumtrapz(rho, S)/trapz(rho, S);  
  
figure(3)  
plot(S, F, 'Color', 'black')
```

Здесь используются два новых оператора языка MatLab. Функция `cumtrapz` выполняет численное интегрирование сеточной функции S , заданной в своих узлах разбиения ϱ . Значение накапливается при перемещении между отрезками разбиения, и все промежуточные значения сохраняются. Таким образом, функция возвращает массив чисел той же размерности, что и два ее аргумента-массива. Функция `trapz` согласно физическому смыслу определенного интеграла возвращает площадь под графиком сеточной функции, одно число.

Рекомендуемая литература

1. Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. — М., Мир, 1990.
2. Глазырина Л.Л., Карчевский М.М. Введение в численные методы. — Казань, КГУ, 2012.
3. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. — М.: Наука, 1971.
4. Тихонов А.Н., Васильева А.Б., Свешников А.Г. Дифференциальные уравнения. — 2-е изд. — М.: Наука, 1985.
5. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. — М.: Наука, 1989.
6. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). — М.: Наука, 1975.
7. Штеттер Х. Анализ методов дискретизации для обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: Мир, 1978.
8. Калиткин Н.Н. Численные методы. — М.: Наука, 1978.
9. Reed B.C. The single-mass gravitational slingshot // *European Journal of Physics*. — 2014. — Vol. 35. — Pp. 045009.
10. Borchers P.H., McCauley G.P. The gravitational three body problem: optimizing the slingshot // *European Journal of Physics*. — 1994. — Vol. 15. — Pp. 162–169.

11. Dykla J.J., Cacioppo R., Gangopadhyaya A. Gravitational slingshot // *American Journal of Physics*. — 2004. — Vol. 72. — Pp. 619–621.
12. Баренблатт Г.И. Подобие, автомодельность, промежуточная ассимптотика. — М.: Гидрометеиздат, 1978.
13. Егоров А.Г., Мазо А.Б., Максудов Р.Н. Экстракция полидисперсного зернистого слоя молотых семян масличных культур сверхкритическим диоксидом углерода // *Теоретические основы химической технологии*. — 2010. — Т. 44, № 5. — С. 498–506.
14. Егоров А.Г., Саламатин А.А., Максудов Р.Н. Прямые и обратные задачи сверхкритической экстракции из полидисперсного зернистого слоя растительного материала // *Теоретические основы химической технологии*. — 2014. — Т. 48, № 1. — С. 43–51.
15. Salamatin A.A., Egorov A.G. Optimization of supercritical fluid extraction: polydisperse packed beds and variable flow rates // *Journal of Supercritical Fluids*. — 2015. — Vol. 105. — Pp. 35–43.