

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева»
(Самарский университет)

Институт информатики, математики и электроники
Факультет информатики
Кафедра технической кибернетики

Отчет по курсовой работе
Дисциплина: «Уравнения математической физики»

**Аналитическое решение краевых задач
математической физики**

Вариант №8

Студенты группы 6407	Анурин А.С. Григина В.С. Попов Д.С.
Проверил	Дегтярев А.А.

ЗАДАНИЕ К КУРСОВОЙ РАБОТЕ

Осуществить математическую постановку краевой задачи для физического процесса, описанного в предложенном варианте курсовой работы.

Используя метод разделения переменных (метод Фурье) получить решение краевой задачи в виде разложения в ряд Фурье по собственным функциям оператора Лапласа, соответствующим краевым условиям задачи.

Исследовать сходимость ряда Фурье, получить оценку остатка ряда.

Разработать компьютерную программу расчета функции-решения краевой задачи (суммирования ряда Фурье) с требуемой точностью. При расчете коэффициентов ряда использовать метод численного интегрирования, если это необходимо. Обеспечить контроль погрешности численного интегрирования. Если необходимо, то разработать специальный программный модуль для вычисления используемых собственных чисел оператора Лапласа. Обеспечить контроль погрешности вычисления собственных чисел. Компьютерная программа должна обеспечивать возможность диалогового режима ввода физических, геометрических параметров задачи, числа суммируемых элементов ряда, графическую визуализацию рассчитанного решения задачи.

Используя разработанную программу, провести экспериментальное исследование качества полученной аналитической оценки остатка ряда Фурье.

Оформить отчет о выполненной курсовой работе.

ВАРИАНТ 8

Разработать программу расчета динамики поля концентрации вещества в цилиндре на временном промежутке $0 < t \leq T$. Для численных расчетов использовать представление решения описанной задачи математической физики в виде ряда Фурье по собственным функциям оператора Лапласа, удовлетворяющим краевым условиям задачи.

В цилиндре конечной длины l находится диффундирующее вещество, концентрация частиц которого в момент времени $t = 0$ описывается функцией:

$$u|_{t=0} = \psi(x), \quad 0 \leq x \leq l,$$

где x — числовая ось, направленная вдоль оси цилиндра.

Коэффициент диффузии вещества является постоянным и равен D . Концы цилиндра закрыты полунепроницаемыми мембранами, через которые происходит диффузия вещества. Предполагается, что поток вещества через мембраны пропорционален разности концентраций вещества во внешней среде и в цилиндре, т.е.:

$$\left[\frac{\partial u}{\partial x} - H(u - u_c) \right]_{x=0} = 0,$$
$$\left[\frac{\partial u}{\partial x} + H(u - u_c) \right]_{x=l} = 0,$$

где u_c — концентрация вещества во внешней по отношению к цилиндру среде, H — мембранный коэффициент диффузии.

Боковая поверхность цилиндра является непроницаемой.

Процесс диффузии вещества сопровождается явлением размножения его частиц, причем скорость размножения в каждой точке пропорциональна их концентрации в этой точке. Коэффициент пропорциональности равен β

Концентрацию вещества считать одинаковой во всех точках поперечного сечения цилиндра в любой момент времени.

При проведении расчетов использовать значения параметров и выражение функции, указанные преподавателем:

$$l = 20\text{м},$$

$$D = 0.6\text{м}^2/\text{с},$$

$$u_c = 0\text{кг}/\text{м}^3,$$

$$H = 4\text{м}^2/\text{с},$$

$$T = 100\text{с},$$

$$\beta = 0,$$

$$\psi(x) = 0.4 \sin^2\left(\frac{\pi x}{l}\right) \text{кг}/\text{м}^3.$$

РЕФЕРАТ

Отчет по курсовой работе: 37 с., 6 рисунков, 2 таблицы, 5 источников, 3 приложения.

УРАВНЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, КРАЕВАЯ ЗАДАЧА, УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ, МЕТОД РАЗДЕЛЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ, СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА, РЯД ФУРЬЕ, ОЦЕНКА ОСТАТКА РЯДА.

Целью курсовой работы является получение решения краевой задачи диффузии для цилиндра конечной длины в виде разложения в ряд Фурье по собственным функциям оператора Лапласа и создание компьютерной программы для расчета функции-решения с заданной точностью.

Для получения аналитического решения краевой задачи использован метод разделения переменных (метод Фурье). Решение задачи получено в виде бесконечного ряда Фурье-Бесселя. Получена оценка остатка ряда.

Разработана компьютерная программа, обеспечивающая расчет и графическую визуализацию концентрации вещества в цилиндре на временном промежутке. Для контроля погрешности усечения бесконечного ряда использована оценка остатка ряда.

Приведены графические результаты численного решения задачи диффузии, а также результаты экспериментального исследования практической пригодности полученной оценки остатка ряда.

Программа написана на языке Python 3.7 в среде разработки Pycharm 2018, операционная система macOS Mojave.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	7
1 Математическая постановка задачи	8
2 Аналитическое решение краевой задачи диффузии методом разделения переменных	9
3 Расчет собственных чисел оператора Лапласа	12
4 Расчет интегральных коэффициентов ряда Фурье.....	17
5 Исследование сходимости ряда Фурье. Оценка остатка ряда	19
6 Исследование практической пригодности оценки остатка ряда с помощью вычислительных экспериментов	22
7 Сценарий использования программы.....	24
Заключение.....	27
Список использованных источников.....	28
Приложение А Код интерфейса оконного приложения	29
Приложение Б Код вычислительного модуля	33
Приложение В Код модуля символьного исчисления	35

ВВЕДЕНИЕ

Метод разделения переменных относится к классу аналитических методов решения краевых задач математической физики. Характеризуя этот метод необходимо выделить его достоинства и недостатки в сравнении с другими методами.

К достоинствам метода разделения переменных следует отнести возможность получения точного решения краевой задачи в виде ряда Фурье. Такая форма решения задачи часто и весьма успешно используется для теоретического исследования свойств этого решения. В случае достаточно быстрой сходимости ряда Фурье она может с успехом использоваться для численного моделирования физического процесса.

К числу недостатков метода следует отнести его невысокую универсальность. Этот метод весьма проблематично использовать для решения нелинейных уравнений математической физики, уравнений с переменными операторными коэффициентами, а также для решения краевых задач в областях со сложными границами.

Суть метода разделения переменных состоит в факторизации по каждой независимой переменной функции, определяющей решение уравнения математической физики. Далее осуществляется переход к так называемой задаче Штурма-Лиувилля, решение которой приводит к получению собственных функций и соответствующих им собственных чисел оператора Лапласа. Затем решение исходной задачи ищется в виде ряда Фурье по этим собственным функциям.

В настоящей работе метод разделения переменных применен для получения аналитической формы решения краевой задачи третьего вида диффузии. На основе этого результата разработан алгоритм и компьютерная программа численного моделирования процесса диффузии в цилиндре.

1 Математическая постановка задачи

Рассмотрим цилиндр конечной длины, концентрация вещества которого в точке пространства (x, y, z) в момент времени t определяется функцией $u(x, y, z, t)$.

Математическая модель будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{cases} u_t(x, t) = Du_{xx}(x, t), & 0 < x < l, \quad 0 < t \leq T; \\ u(x, 0) = \psi(x), & 0 \leq x \leq l; \\ u_x(0, t) = H(u(0, t) - u_c), & 0 < t \leq T; \\ u_x(l, t) = -H(u(l, t) - u_c), & 0 < t \leq T. \end{cases} \quad (1.1)$$

Сделаем замену $u(x, t) = v(x, t) + w(x, t)$ [1] так, чтобы граничные условия задачи (1.1) стали однородными.

$$\begin{cases} v(x, 0) + w(x, 0) = \psi(x), & 0 \leq x \leq l; \\ v_x(0, t) + w_x(0, t) = H(v(0, t) + w(0, t) - u_c), & 0 < t \leq T; \\ v_x(l, t) + w_x(l, t) = -H(v(l, t) + w(l, t) - u_c), & 0 < t \leq T. \end{cases} \quad (1.2)$$

Очевидно, мы можем взять $w(x, t) = u_c$.

Тогда после замены итоговая математическая модель будет иметь вид:

$$\begin{cases} v_t(x, t) = Dv_{xx}(x, t), & 0 < x < l, \quad 0 < t \leq T; \\ v(x, 0) = \psi(x) - u_c = \varphi(x), & 0 \leq x \leq l; \\ v_x(0, t) - Hv(0, t) = 0, & 0 < t \leq T; \\ v_x(l, t) + Hv(l, t) = 0, & 0 < t \leq T. \end{cases} \quad (1.3)$$

2 Аналитическое решение краевой задачи диффузии методом разделения переменных

Поиском аналитического решения занимался студент Гринина В.С.

Ищем решение задачи в виде ряда по собственным функциям задачи Штурма-Лиувилля [2]:

$$v(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} T_n(t) X_n(x). \quad (2.1)$$

Рассмотрим один член ряда отдельно, что нам позволяет сделать ортогональность собственных функций.

$$v_n(x, t) = T_n(t) X_n(x). \quad (2.2)$$

Тогда первое уравнение модели (1.3) примет следующий вид, если для удобства опустить индекс n :

$$T'(t) X(x) = DX''(x) T(t). \quad (2.3)$$

Разделяя переменные, получим:

$$\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{DX''(x)}{X(x)} = -\lambda^2, \quad (2.4)$$

где $\lambda^2 = \text{const}$, так как левая часть зависит только от t , а правая — только от x .

Заметим, что решение нашей задачи относительно $X(x)$ сводится к решению задачи Штурма-Лиувилля:

$$\begin{cases} DX''(x) = -\lambda^2(x); \\ X'(0) - HX(0) = 0; \\ X'(l) + HX(l) = 0. \end{cases} \quad (2.5)$$

Так как для данных краевых условий аналитическое выражение решения задачи может оказаться очень сложным, по указанию преподавателя введем дополнительное условие симметричности функции

$\psi(x)$ относительно значения $x = \frac{l}{2}$. Тогда задача будет иметь следующий вид:

$$\begin{cases} DX''(x) = -\lambda^2 X(x); \\ X'(0) - HX(0) = 0; \\ X'(\frac{l}{2}) = 0. \end{cases} \quad (2.6)$$

Из характеристического уравнения задачи получим:

$$Dk^2 + \lambda^2 = 0. \quad (2.7)$$

Найдем общий вид решения и его первой производной:

$$X(x) = C_1 \cos\left(\frac{\lambda}{\sqrt{D}}x\right) + C_2 \sin\left(\frac{\lambda}{\sqrt{D}}x\right), \quad (2.8)$$

$$X'(x) = -C_1 \frac{\lambda}{\sqrt{D}} \sin\left(\frac{\lambda}{\sqrt{D}}x\right) + C_2 \frac{\lambda}{\sqrt{D}} \cos\left(\frac{\lambda}{\sqrt{D}}x\right). \quad (2.9)$$

Подставим уравнения (2.8) и (2.9) в краевые условия и получим:

$$\begin{cases} C_2 \frac{\lambda}{\sqrt{D}} = HC_1; \\ \left(-C_1 \frac{\lambda}{\sqrt{D}} + HC_2\right) \sin\left(\frac{\lambda}{\sqrt{D}}l\right) + (C_2 + HC_1) \cos\left(\frac{\lambda}{\sqrt{D}}l\right) = 0; \\ -C_1 \frac{\lambda}{\sqrt{D}} \sin\left(\frac{\lambda}{2\sqrt{D}}l\right) + C_2 \frac{\lambda}{\sqrt{D}} \cos\left(\frac{\lambda}{2\sqrt{D}}l\right) = 0. \end{cases} \quad (2.10)$$

Решив данную систему, получим уравнение:

$$\frac{\lambda}{H\sqrt{D}} \sin\left(\frac{\lambda l}{2\sqrt{D}}\right) = \cos\left(\frac{\lambda l}{2\sqrt{D}}\right). \quad (2.11)$$

Введем две замены:

$$\alpha = \frac{\lambda l}{2\sqrt{D}}, \quad (2.12)$$

$$C = \frac{Hl}{2}. \quad (2.13)$$

Упростив уравнение (2.11), получим:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{C}{\alpha}. \quad (2.14)$$

Уравнение (2.14) не решается аналитически. Его численное решение представлено в разделе 3. Подставим в (2.8) найденные численно собственные числа α_n и получим выражение для собственных функций:

$$X_n(x) = \frac{2\alpha_n}{Hl} \cos\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right) + \sin\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right). \quad (2.15)$$

Теперь рассмотрим уравнение (2.4) относительно функции $T(t)$. Получим следующее уравнение:

$$\frac{T'(t)}{T(t)} = -\lambda^2. \quad (2.16)$$

Решим это уравнение методом разделения переменных:

$$T_n(t) = A_n e^{-\lambda^2 t}, \quad (2.17)$$

где A_n — интегральный коэффициент ряда Фурье. Нахождение этих коэффициентов представлено в разделе 4.

Итоговая формула расчета концентрации вещества после обратной замены:

$$\begin{aligned} u(x, t) &= v(x, t) + u_c = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(X_n(x) \cdot T_n(t) \right) + u_c = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(A_n e^{-\lambda^2 t} \cdot \left(\frac{2\alpha_n}{Hl} \cos\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right) + \sin\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right) \right) \right) + u_c. \end{aligned} \quad (2.18)$$

3 Расчет собственных чисел оператора Лапласа

Расчетом собственных чисел оператора Лапласа занимался студент Гринина В.С.

Из исходной краевой задачи методом разделения переменных было получено, что собственные числа удовлетворяют уравнению (2.14), которое является трансцендентным.

Рисунок 1 иллюстрирует уравнение (2.14).

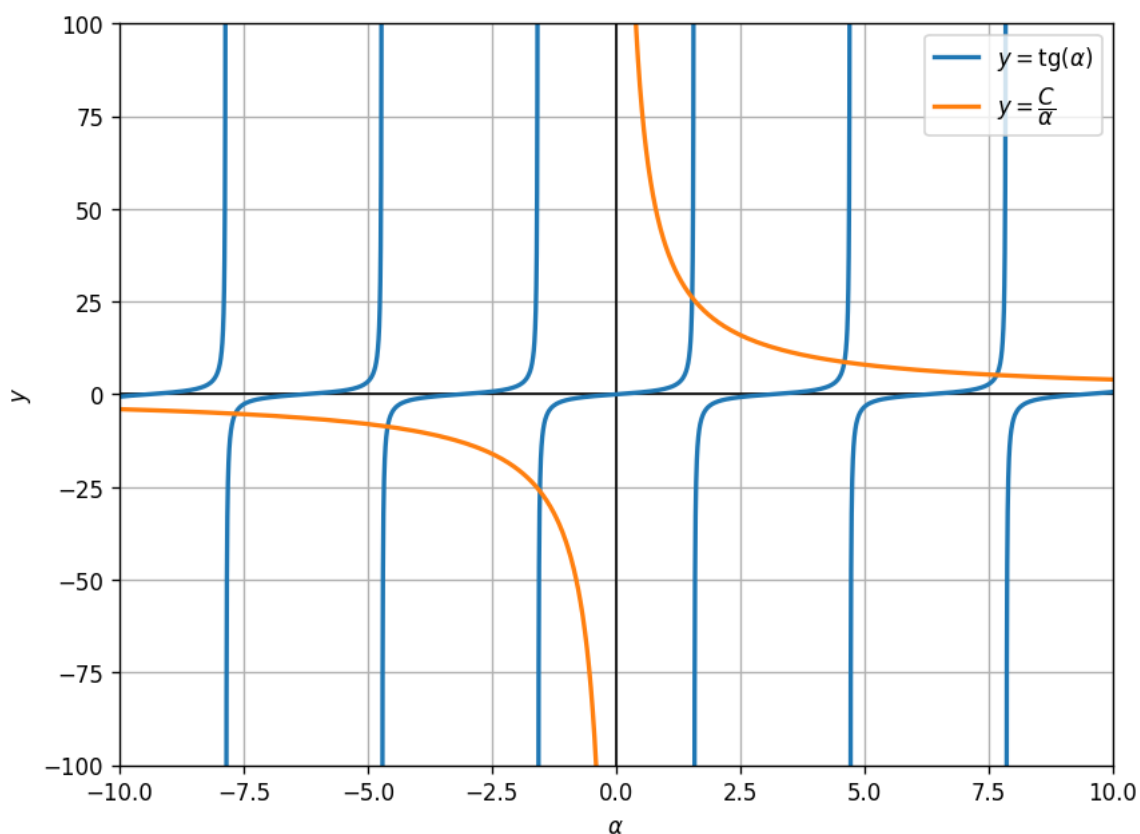


Рисунок 1 — Решения уравнения (2.14)

Найдем численные решения уравнения (2.14) с помощью метода Ньютона, так как он обладает квадратичной скоростью сходимости и прост в реализации. Таким образом, сведем задачу к задаче численного нахождения корней функции:

$$f(\alpha) = \text{tg} \alpha - \frac{C}{\alpha}. \quad (3.1)$$

Ввиду разрывного характера функции, будем рассматривать интервалы, на которых она непрерывна, то есть интервалы между асимптотами функции. Очевидно, асимптоты лежат в точках:

$$\begin{aligned} f(\alpha) &= \operatorname{tg} \alpha - \frac{C}{\alpha} = \pm\infty, \\ \alpha &= 0 \vee \alpha = \frac{\pi}{2} + \pi k, \quad k \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Так как функция (3.1) является четной, будем без ограничения общности рассматривать только положительные аргументы. Для проверки условий сходимости метода Ньютона найдем первые две производные функции (3.1):

$$\begin{aligned} f(\alpha) &= \operatorname{tg} \alpha - \frac{C}{\alpha}, \\ f'(\alpha) &= \frac{1}{\cos^2(\alpha)} + \frac{C}{\alpha^2}, \\ f''(\alpha) &= \frac{2 \operatorname{tg}(\alpha)}{\cos^2(\alpha)} - \frac{2C}{\alpha^3}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Проверим условия сходимости метода Ньютона [3], если мы задаем начальное приближение $\alpha^{(0)}$ на отрезке (a, b) :

1. $f''(\alpha)$ не меняет своего знака на (a, b) . Рисунок 2 показывает, что корень уравнения $f(\alpha) = 0$ лежит строго правее корня уравнения $f''(\alpha) = 0$. Следовательно, можно подобрать такой интервал (a, b) , что корень исходного уравнения будет принадлежать этому интервалу, а вторая производная $f''(\alpha)$ не будет менять свой знак на этом же интервале. Например, таким интервалом может быть $\left(\beta, \frac{\pi}{2} + \pi k - \varepsilon \right)$, где β — решение уравнения $f(\beta) = 0$;

2. $f'(\alpha) \neq 0$. Первая производная функции существует и не равна нулю везде, где определена функция (3.1);
3. $\forall \alpha^{(0)} \in (a, b), f(\alpha^{(0)})f''(\alpha^{(0)}) > 0$. Начальное приближение $\alpha_k^{(0)}$ для поиска k -го собственного числа будем выбирать слева от k -ой асимптоты с учетом погрешности ε как $\alpha_k^{(0)} = \frac{\pi}{2} + \pi k - \varepsilon$. Такой выбор начального приближения позволяет нам всегда попадать в такой интервал (a, b) , где все условия сходимости очевидно выполняются.

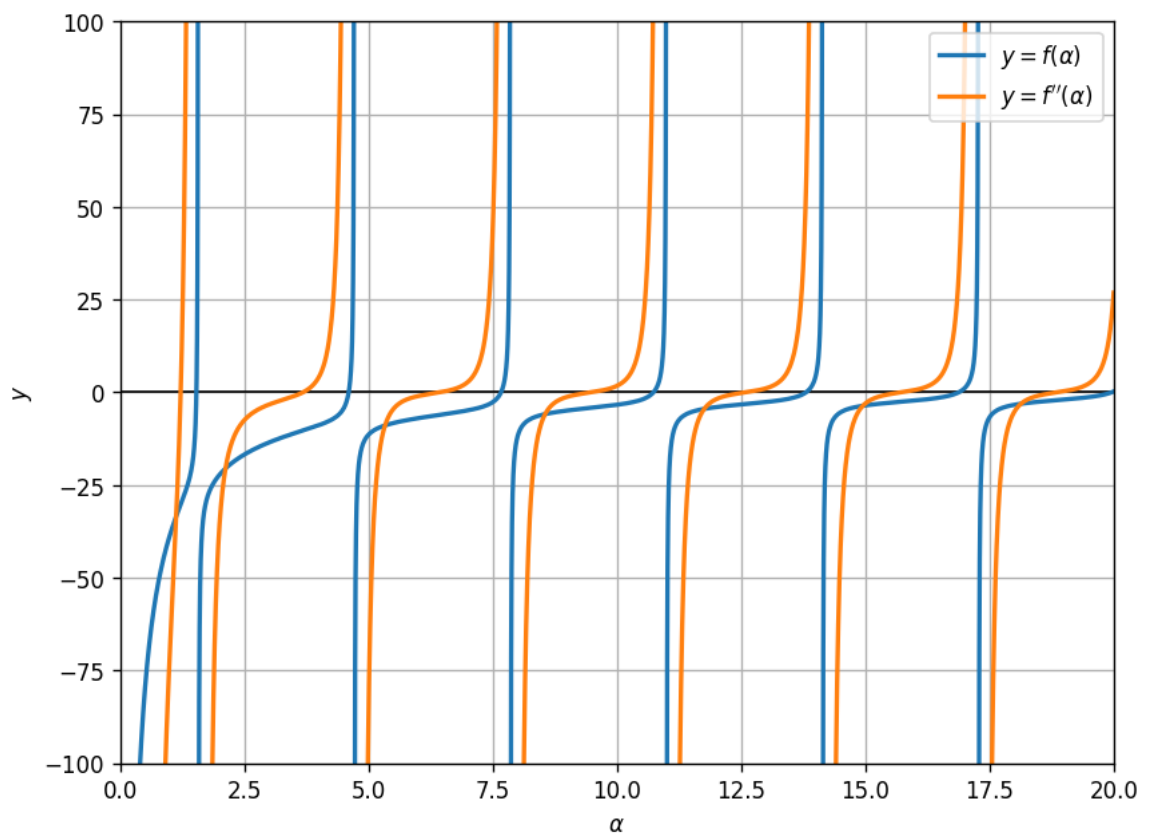


Рисунок 2 — Функция и ее вторая производная

Для уравнения (3.1) все эти условия выполняются. Решение уравнения будем искать следующим итеративным методом:

$$\alpha^{(n+1)} = \alpha^{(n)} - \frac{f(\alpha^{(n)})}{f'(\alpha^{(n)})}. \quad (3.4)$$

Рисунок 3 показывает график функции (3.1) с отмеченными корнями и асимптотами.

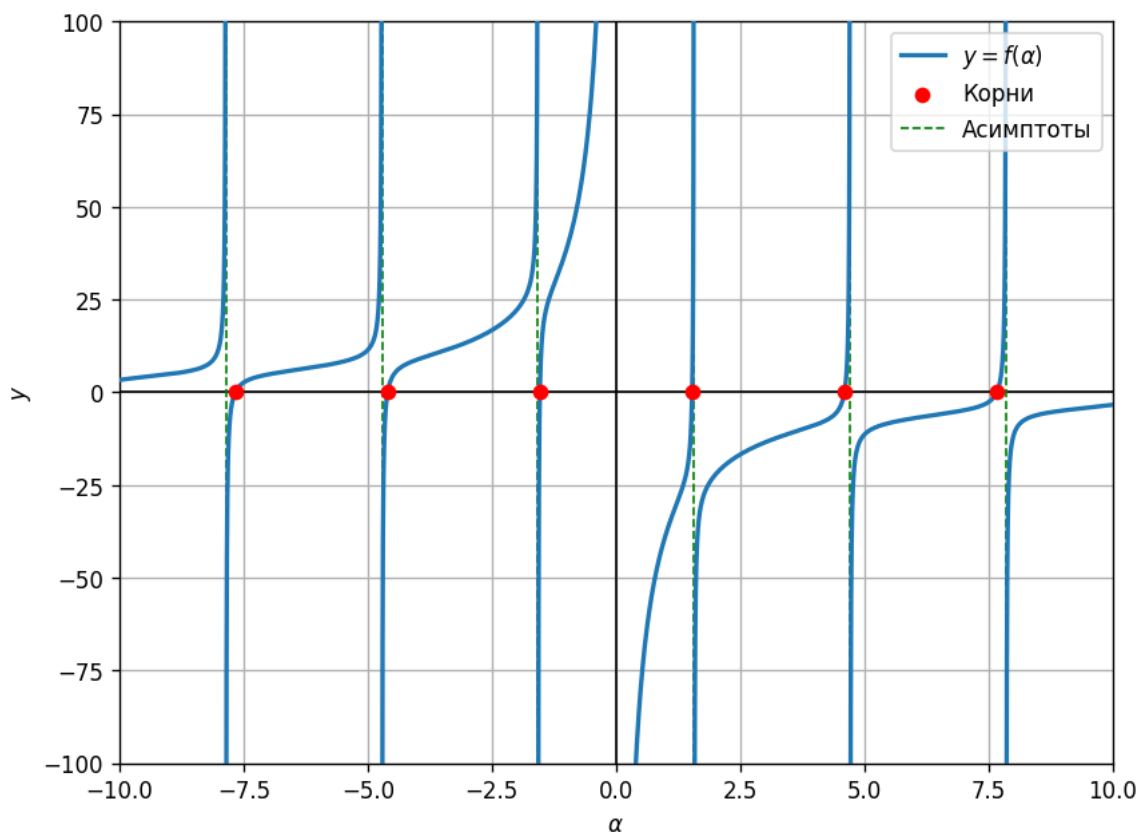


Рисунок 3 — График функции (3.1)

Таблица 1 показывает результаты использования метода Ньютона для нахождения коэффициентов α_n .

Таблица 1 — Значения корней функции (3.1)

n	α_n	n	α_n	n	α_n	n	α_n
0	1,532502	20	63,394732	40	125,971170	60	188,704439
1	4,597943	21	66,514871	41	129,105743	61	191,842711
2	7,664660	22	69,636431	42	132,240621	62	194,981085
3	10,733415	23	72,759288	43	135,375783	63	198,119557
4	13,804845	24	75,883335	44	138,511213	64	201,258123
5	16,879445	25	79,008471	45	141,646895	65	204,396778
6	19,957554	26	82,134607	46	144,782814	66	207,535518
7	23,039371	27	85,261661	47	147,918956	67	210,674341
8	26,124969	28	88,389560	48	151,055310	68	213,813242
9	29,214319	29	91,518238	49	154,191862	69	216,952218
10	32,307315	30	94,647633	50	157,328603	70	220,091266
11	35,403797	31	97,777691	51	160,465521	71	223,230384
12	38,503570	32	100,908363	52	163,602609	72	226,369568
13	41,606420	33	104,039604	53	166,739856	73	229,508816
14	44,712127	34	107,171372	54	169,877255	74	232,648125
15	47,820472	35	110,303630	55	173,014798	75	235,787493
16	50,931240	36	113,436343	56	176,152478	76	238,926919
17	54,044232	37	116,569481	57	179,290288	77	242,066398
18	57,159259	38	119,703016	58	182,428222	78	245,205931
19	60,276146	39	122,836920	59	185,566274	79	248,345514

4 Расчет интегральных коэффициентов ряда Фурье

Расчетом интегральных коэффициентов ряда Фурье занимался студент Анурин А.С.

Для множества ортогональных базисных функций $X_n(x)$ найдем норму n -ой функции как:

$$\begin{aligned} L_n &= \int_0^l X_n^2(x) dx = \\ &= \int_0^l \left(\sin^2\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right) + \frac{2\alpha_n}{Hl} \sin\left(\frac{4\alpha_n}{l}x\right) + \frac{4\alpha_n^2}{H^2 l^2} \cos^2\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right) \right) dx = \quad (4.1) \\ &= \frac{l}{2} - \frac{l \sin(4\alpha_n)}{8\alpha_n} + \frac{\sin^2(2\alpha_n)}{H} + \frac{2\alpha_n^2}{H^2 l} + \frac{\alpha_n \sin(4\alpha_n)}{2H^2 l}. \end{aligned}$$

Используя этот результат, выразим интегральный коэффициент ряда Фурье A_n через $X_n(x)$ и краевое условие:

$$\begin{aligned} A_n &= \frac{1}{L_n} \int_0^l \varphi(x) X_n(x) dx = \\ &= \frac{1}{L_n} \int_0^l \left(\frac{2}{5} \sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right) - u_c \right) \left(\frac{2\alpha_n}{Hl} \cos\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right) + \sin\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right) \right) dx. \quad (4.2) \end{aligned}$$

Взяв этот интеграл, получаем аналитическое выражение для вычисления интегрального коэффициента ряда Фурье:

$$A_n = \frac{P_n}{Q_n}, \quad (4.3)$$

где числитель равен

$$\begin{aligned} P_n &= 4Hl \left(\pi^2 Hl \cos(2\alpha_n) - \pi^2 Hl - 2\pi^2 \alpha_n \sin(2\alpha_n) + \right. \\ &\quad \left. + u_c \left(5H\alpha_n^2 l \cos(2\alpha_n) - 5H\alpha_n^2 l - 5\pi^2 Hl \cos(2\alpha_n) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 5\pi^2 Hl - 10\alpha_n^3 \sin(2\alpha_n) + 10\pi^2 \alpha_n \sin(2\alpha_n) \right) \right), \quad (4.4) \end{aligned}$$

а знаменатель, соответственно, равен

$$\begin{aligned}
Q_n = 5(\alpha_n^2 - \pi^2) & \left(4H^2\alpha_n l^2 - H^2 l^2 \sin(4\alpha_n) + \right. \\
& \left. + 4H\alpha_n l (1 - \cos(4\alpha_n)) + 4\alpha_n^2 (4\alpha_n + \sin(4\alpha_n)) \right).
\end{aligned} \tag{4.5}$$

5 Исследование сходимости ряда Фурье. Оценка остатка ряда

Сходимость ряда Фурье исследовал студент Попов Д.С.

Попробуем найти верхнюю оценку на сумму ряда (2.18). Вспомним найденное значение последовательности функций $T_n(t)$ из (2.17):

$$T_n(t) = A_n e^{-\lambda^2 t}. \quad (5.1)$$

Так как $0 < e^{-\lambda^2 t} \leq 1$ при $t \geq 0$, оценим:

$$|T_n(t)| \leq |A_n|. \quad (5.2)$$

Из уравнения (2.15):

$$X_n(x) = \frac{2\alpha_n}{Hl} \cos\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right) + \sin\left(\frac{2\alpha_n}{l}x\right). \quad (5.3)$$

Оценим $|X_n(x)|$ сверху, так как $|\cos(x)|, |\sin(x)| \leq 1$:

$$|X_n(x)| \leq \frac{2\alpha_n}{Hl}. \quad (5.4)$$

Из уравнения (4.1):

$$L_n = \frac{1}{2} - \frac{l \sin(4\alpha_n)}{8\alpha_n} + \frac{1 - \cos(4\alpha_n)}{2H} + \frac{4\alpha_n^2 + \alpha_n \sin(4\alpha_n)}{2Hl}. \quad (5.5)$$

Учитывая величину α_n при $n \geq 1$:

$$\frac{1}{2} - \frac{l \sin(4\alpha_n)}{8\alpha_n} + \frac{1 - \cos(4\alpha_n)}{2H} \geq 0, \quad \alpha_n > \frac{l}{8}, \quad n \geq 1. \quad (5.6)$$

Тогда:

$$\left| \frac{1}{L_n} \right| \leq \frac{2Hl}{4\alpha_n^2 + \alpha_n \sin(4\alpha_n)}. \quad (5.7)$$

Учитывая, что из (2.14):

$$\begin{aligned} \sin(\alpha_n) &= \frac{Hl \cos(\alpha_n)}{\alpha_n}, \\ \cos^2(\alpha_n) &\leq 1, \end{aligned} \quad (5.8)$$

и используя тригонометрические тождества:

$$\begin{aligned}\sin(2x) &= 2\sin(x)\cos(x), \\ \cos(2x) &= 2\cos^2(x) - 1,\end{aligned}\tag{5.9}$$

воспользуемся тождествами (5.8) и (5.9) и распишем $\sin(4\alpha_n)$:

$$\begin{aligned}\sin(4\alpha_n) &= 2\sin(2\alpha_n)\cos(2\alpha_n) = \\ &= 4\sin(\alpha_n)\cos(\alpha_n)\cos(2\alpha_n) = \\ &= \frac{4Hl}{\alpha_n}\cos^2(\alpha_n)(2\cos^2(\alpha_n) - 1).\end{aligned}\tag{5.10}$$

Оценим получившееся выражение сверху:

$$\frac{4Hl}{\alpha_n}\cos^2(\alpha_n)(2\cos^2(\alpha_n) - 1) \leq \frac{4Hl}{\alpha_n},\tag{5.11}$$

то есть:

$$\left| \frac{1}{L_n} \right| \leq \frac{H^2 l}{2\alpha_n^2 + 2Hl}.\tag{5.12}$$

Пользуясь (5.8):

$$\begin{aligned}|\sum -a| &= |\sum a|, \\ \cos(2\alpha_n) &\leq 1, \\ \sin(2\alpha_n) &\leq \frac{2Hl}{\alpha_n},\end{aligned}\tag{5.13}$$

оценим:

$$|L_n A_n| \leq \frac{4\pi^2}{5\alpha_n(\alpha_n^2 - \pi^2)}.\tag{5.14}$$

Отсюда получается, что:

$$\begin{aligned}
\left| \frac{1}{L_n} A_n X_n \right| &\leq \frac{H^2 l}{2\alpha_n^2 + 2Hl} \frac{2\alpha_n}{Hl} \frac{4\pi^2 l}{5\alpha_n(\alpha_n^2 - \pi^2)} \leq \\
&\leq \frac{H^2 l}{\alpha_n^2 + Hl} \frac{2\alpha_n}{Hl} \frac{2\pi^2 l}{\alpha_n(\alpha_n^2 - \pi^2)} \leq \\
&\leq \frac{4\pi^2 H}{5} \frac{1}{(\alpha_n^2 + Hl)(\alpha_n^2 - \pi^2)}.
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Так как в пределе $\lambda_n - \lambda_{n-1} = \pi$, мы можем оценить $\pi n - \pi \leq \alpha_n \leq \pi n$ и:

$$\left| \frac{1}{L_n} X_n A_n \right| \leq \frac{4\pi^2 H}{5} \frac{1}{\left(2(\pi n - \pi)^2 + Hl\right)\left((\pi n - \pi)^2 - \pi^2\right)}. \tag{5.16}$$

Подставив исходные значения H и l , оценим:

$$\left| \frac{1}{L_n} X_n A_n \right| \leq \frac{16}{5} \frac{1}{(n-2)n(\pi^2(n-1)^2 + 40)}. \tag{5.17}$$

В итоге получаем:

$$\begin{aligned}
\left| \sum_{n=N+1}^{\infty} T_n(t) X_n(x) \right| &\leq \int_{N+1}^{\infty} \frac{16}{5} \frac{dn}{(n-2)n(\pi^2(n-1)^2 + 40)} \leq \\
&\leq \frac{40 \ln\left(\frac{N+1}{N}\right) - 2\sqrt{10}\pi \left(\pi - 2 \operatorname{arctg}\left(\frac{N}{2\sqrt{10}}\right) \right)}{25(40 + \pi^2)}.
\end{aligned} \tag{5.18}$$

6 Исследование практической пригодности оценки остатка ряда с помощью вычислительных экспериментов

Исследованием практической пригодности оценки ряда занимался студент Анурин А.С.

Получив оценку ряда, проведем исследование ее качества, сравнив теоретически предсказанное количество членов ряда (2.18) N_T , необходимое для достижения необходимой точности ε , с практически найденным количеством членов N_p . Так как оценка ряда не зависит от координат x и t , нам придется посчитать ее только один раз. Напротив, практическое количество членов мы посчитаем в нескольких точках диапазона $0 \leq x \leq l$, $0 \leq t \leq T$. Таблица 2 показывает найденные значения.

Таблица 2 — Количество членов в различных оценках остатка ряда

ε	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}
N_T	1	7	85	848	8476	84753
$N_p, x = 10, t = 10^1$	1	2	2	3	3	4
$N_p, x = 5, t = 10^1$	1	2	2	3	3	4
$N_p, x = 0, t = 10^1$	1	1	2	2	3	3
$N_p, x = 10, t = 10^0$	1	2	4	6	7	9
$N_p, x = 5, t = 10^0$	1	2	3	5	7	9
$N_p, x = 0, t = 10^0$	1	1	3	5	7	9
$N_p, x = 10, t = 10^{-1}$	1	2	4	8	13	19
$N_p, x = 5, t = 10^{-1}$	1	2	3	5	7	7
$N_p, x = 0, t = 10^{-1}$	1	2	5	10	16	22
$N_p, x = 10, t = 10^{-2}$	1	2	4	9	16	27
$N_p, x = 5, t = 10^{-2}$	1	2	3	5	7	25
$N_p, x = 0, t = 10^{-2}$	1	2	6	15	28	44

Из таблицы 2 видно, что медленнее всего ряд сходится в точках, расположенных на концах цилиндра, в моменты времени близкие к начальному. Возможно, это связано с маленькими значениями

концентрации в этих точках и, соответственно, медленными темпами диффузии.

В целом, теоретическая оценка оказалась мало эффективна на практике из-за своего быстрого роста, так как в среднем она растет обратно пропорционально желаемой точности ε . Однако она всё равно позволяет судить о сходимости самого ряда.

7 Сценарий использования программы

Реализацией программного решения занимался студент Анурин А.С.

В данной работе активно использовались программные инструменты на основе языка программирования Python 3. С помощью библиотеки символьного исчисления SymPy [4] был верифицирован процесс нахождения аналитического решения задачи, собственных чисел и интегральных коэффициентов ряда Фурье (т.е. все выкладки разделов 2, 3 и 4 гарантировано верны). С помощью библиотеки Matplotlib [5] были созданы графики и иллюстрации. Была реализована программа численного моделирования процесса диффузии вещества в цилиндре с полунепроницаемыми мембранами.

Также было создано оконное приложение, которое интегрируется с системой символьного исчисления. Приложение производит поиск собственных чисел α_n и коэффициентов интегрального разложения A_n для нахождения суммы ряда и последующей визуализации. Программное решение позволяет рассчитать поле концентрации вещества в цилиндре в любой момент времени для любого разумного набора входных параметров.

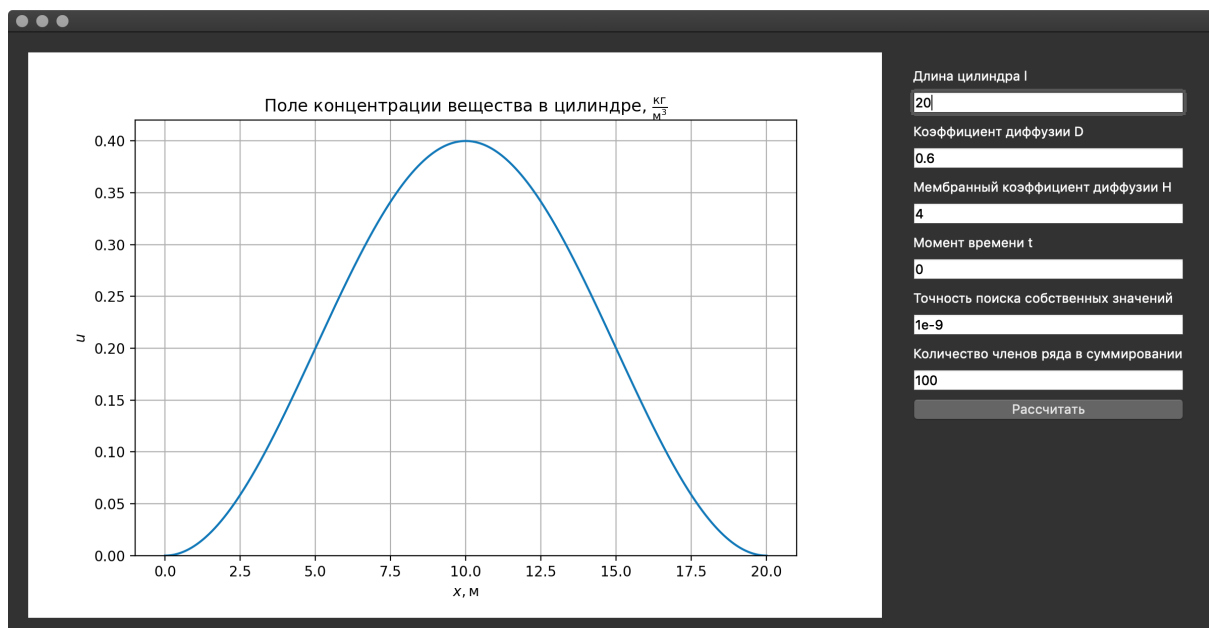


Рисунок 4 — Интерфейс оконного приложения

Рисунок 4 иллюстрирует оконное приложение. Видно, что концентрация в нулевой момент времени совпадает с начальным условием из (1.3). Программа позволяет пользователю ввести желаемые начальные параметры и получить график поля концентрации вещества. Можно заметить, что входной параметр u_c не может отличаться от нуля, так как иначе либо концентрация вещества вне цилиндра отрицательна, что не физично, либо концентрация вещества в цилиндре в координатах $(0,0)$ отрицательна, что тоже невозможно. Присутствует обработчик ошибок на случай, если пользователь введет некорректные данные. Рисунок 5 иллюстрирует такую ситуацию.

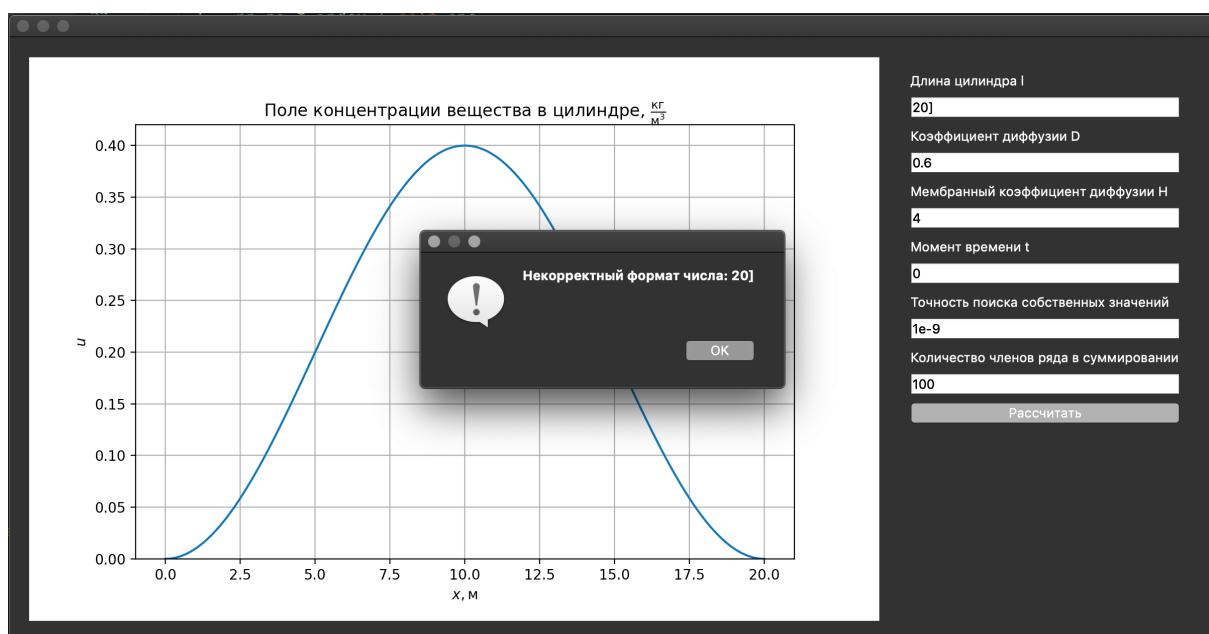


Рисунок 5 — Ввод некорректного значения

В частности, программа позволяет рассмотреть интересный частный случай, когда коэффициент диффузии D относительно велик по сравнению с мембранным коэффициентом диффузии H . В такой ситуации вещество должно практически равномерно распределиться по длине цилиндра, лишь в небольшой степени диффундируя через стенки. Рисунок 6 иллюстрирует такой частный случай.

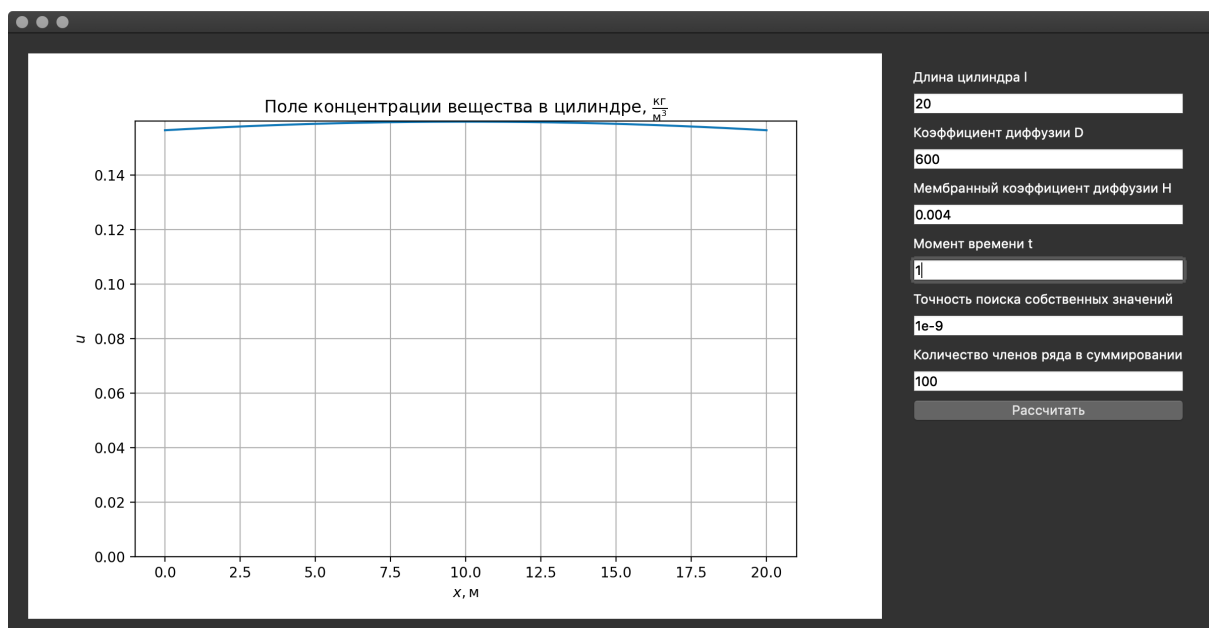


Рисунок 6 — Иллюстрация частного случая

Использование векторных оптимизаций в реализации программы позволяет достичь высокой степени быстродействия, сохраняя точность. При задании стандартных входных данных программа вычисляет значения функции $u(x, t)$ с точностью до $\varepsilon = 10^{-7}$, затрачивая не более 800нс на одну сумму ряда. Весь программный код приложения приведен в приложениях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения работы была осуществлена постановка краевой задачи математической физики. Было получено разложение решения задачи в ряд Фурье по последовательности ортогональных базисных функций. Аналитическое выражение собственных чисел и коэффициентов ряда оказалось невозможным, однако они были найдены приближенно численными методами.

Была установлена сходимость ряда и найдена аналитическая оценка остатка ряда. Был произведен анализ соответствия этой оценки численным результатам.

Был реализован программный комплекс для символьного исчисления решения задачи и численного поиска собственных чисел и коэффициентов ряда. Также было создано оконное приложение, способное визуализировать поле концентрации вещества в цилиндре для различных наборов входных параметров. Пользователю предоставляется возможность вводить желаемые входные параметры, после чего проводится проверка этих параметров на корректность и расчет поля концентрации по всей длине цилиндра.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1 Владимиров В.С. Уравнения математической физики: учебник для вузов [Текст] / Владимиров В.С., Жаринов В.В. – М.: Физико-математическая литература, 2000. – 399 с.

2 Тихонов А.Н. Уравнения математической физики: учебное пособие для университетов [Текст] / Тихонов А.Н., Самарский А.А. – М.: Наука, 1972. – 736 с.

3 Бахвалов Н.С. Численные методы: учебное пособие для физ.-мат. специальностей вузов [Текст] / Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Н.М. – М.: Бином. Лаб. знаний, 2007. – 636 с.

4 SymPy: a Python library for symbolic mathematics. [Электронный ресурс] – 2018. – URL: <https://docs.sympy.org/latest/index.html> (дата обращения: 22.12.2018).

5 Matplotlib: a plotting library for the Python programming language [Электронный ресурс] – 2018. – URL: <https://matplotlib.org/> (дата обращения: 22.12.2018).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

КОД ИНТЕРФЕЙСА ОКОННОГО ПРИЛОЖЕНИЯ

```
import sys

from PyQt5.QtWidgets import QApplication, QGridLayout, QGroupBox, QLabel,
QLineEdit, QMessageBox, QPushButton, \
    QSizePolicy, QVBoxLayout, QWidget
from matplotlib.backends.backend_qt5agg import FigureCanvasQTAgg as
FigureCanvas
from matplotlib.figure import Figure

import solver

class App(QWidget):

    def __init__(self):
        super().__init__()

        self.solver = solver.Solver()

        self.grid = QGridLayout()
        self.setLayout(self.grid)

        self.resize(1200, 600)

        self.plot = PlotCanvas(width=10, height=4)
        self.grid.addWidget(self.plot, 1, 1, 1, 1)

        param_box = QGroupBox()

        param_vbox = QVBoxLayout()

        param_vbox.addWidget(QLabel('Длина цилиндра l'))
        self.l_field = QLineEdit('20')
        self.l_field.setStyleSheet("color: black;")
        param_vbox.addWidget(self.l_field)

        param_vbox.addWidget(QLabel('Коэффициент диффузии D'))
        self.D_field = QLineEdit('0.6')
        self.D_field.setStyleSheet("color: black;")
        param_vbox.addWidget(self.D_field)

        param_vbox.addWidget(QLabel('Мембранный коэффициент диффузии H'))
        self.H_field = QLineEdit('4')
        self.H_field.setStyleSheet("color: black;")
        param_vbox.addWidget(self.H_field)

        param_vbox.addWidget(QLabel('Момент времени t'))
        self.t_field = QLineEdit('0')
        self.t_field.setStyleSheet("color: black;")
        param_vbox.addWidget(self.t_field)

        param_vbox.addWidget(QLabel('Точность поиска собственных значений'))
        self.eps_field = QLineEdit('1e-9')
        self.eps_field.setStyleSheet("color: black;")
```

```

param_vbox.addWidget(self.eps_field)

param_vbox.addWidget(QLabel('Количество членов ряда в суммировании'))
self.sum_count_field = QLineEdit('100')
self.sum_count_field.setStyleSheet("color: black;")
param_vbox.addWidget(self.sum_count_field)

calc_button = QPushButton('Рассчитать')
calc_button.pressed.connect(self.calc)
param_vbox.addWidget(calc_button)

param_vbox.addStretch(1)
param_box.setLayout(param_vbox)

self.grid.addWidget(param_box, 1, 2, 1, 1)

self.calc()

def show_error(self, text):
    msg = QMessageBox()
    msg.setIcon(QMessageBox.Information)

    msg.setText(text)
    msg.setWindowTitle("Ошибка расчетов")
    msg.setStandardButtons(QMessageBox.Ok)

    msg.exec_()

def calc(self):
    try:
        l_str = self.l_field.text()
        l_val = float(l_str)
    except Exception as e:
        self.show_error(f'Некорректный формат числа: {l_str}')
        return

    try:
        D_str = self.D_field.text()
        D_val = float(D_str)
    except Exception as e:
        self.show_error(f'Некорректный формат числа: {D_str}')
        return

    try:
        H_str = self.H_field.text()
        H_val = float(H_str)
    except Exception as e:
        self.show_error(f'Некорректный формат числа: {H_str}')
        return

    try:
        t_str = self.t_field.text()
        t_val = float(t_str)
    except Exception as e:
        self.show_error(f'Некорректный формат числа: {t_str}')
        return

    try:

```

```

        eps_str = self.eps_field.text()
        eps_val = float(eps_str)
    except Exception as e:
        self.show_error(f'Некорректный формат числа: {eps_str}')
        return

    try:
        sum_count_str = self.sum_count_field.text()
        sum_count_val = int(sum_count_str)
    except Exception as e:
        self.show_error(f'Некорректный формат числа: {sum_count_str}')
        return

    if not (
        1e-3 <= l_val <= 1e+3 and
        1e-3 <= D_val <= 1e+3 and
        1e-3 <= H_val <= 1e+3 and
        0 <= t_val <= 1e+3 and
        1e-20 <= eps_val <= 1e+3 and
        1 <= sum_count_val <= 1e+3
    ):
        self.show_error(f'Некорректные входные данные')
        return

    self.solver.set_params(l_val, D_val, H_val, t_val, eps_val,
sum_count_val)

    plot_x, plot_y = self.solver.calc()

    self.plot.plot(plot_x, plot_y)

class PlotCanvas(FigureCanvas):
    def __init__(self, parent=None, width=4, height=4, dpi=100):
        fig = Figure(figsize=(width, height), dpi=dpi)
        self.axes = fig.add_subplot(111)

        FigureCanvas.__init__(self, fig)
        self.setParent(parent)

        FigureCanvas.setSizePolicy(self, QSizePolicy.Expanding,
QSizePolicy.Expanding)
        FigureCanvas.updateGeometry(self)

    def plot(self, plot_x, plot_y):
        self.axes.clear()

        self.axes.plot(plot_x, plot_y)
        self.axes.set_xlabel('$x, \mathrm{M}$')
        self.axes.set_ylabel('$u$')
        self.axes.set_title('Поле концентрации вещества в цилиндре,
$\frac{\mathrm{kr}}{\mathrm{M}^3}$')

        self.axes.set_ylim(0, None)

        self.axes.grid(True)
        self.draw()

```

```
if __name__ == '__main__':  
    app = QApplication(sys.argv)  
    ex = App()  
    ex.show()  
    sys.exit(app.exec_())
```

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

КОД ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДУЛЯ

```
import datetime
import pickle

import numpy as np

class Solver:
    def __init__(self):
        self.l = None
        self.D = None
        self.H = None
        self.t = None

        self.eps = 1e-9
        self.sum_count = 100

        self.alphas = np.zeros(0)

    def find_root(self, index):
        C = self.H * self.l / 2

        l = np.pi * index + self.eps
        r = np.pi * index + np.pi / 2 - self.eps

        while True:
            m = (l + r) / 2
            val = np.tan(m) - C / m

            if abs(val) < self.eps or abs(r - l) < self.eps:
                return m

            if val > 0:
                r = m
            else:
                l = m

    def set_params(self, l, D, H, t, eps, sum_count):
        self.l = l
        self.D = D
        self.H = H
        self.t = t
        self.eps = eps
        self.sum_count = sum_count

        self.alphas = np.array([self.find_root(i) for i in
                                range(self.sum_count)])

    def calc(self):
        plot_x = np.linspace(0, self.l, 1000)

        start_dt = datetime.datetime.utcnow()

        plot_y = np.array([self.calc_single(x) for x in plot_x])
```

```

end_dt = datetime.datetime.utcnow()

print((end_dt - start_dt) / 1000)

return plot_x, plot_y

# noinspection PyTypeChecker
def calc_single(self, x: float) -> float:
    if self.l is None:
        raise ValueError('Not initialized')

    # @formatter:off
    return np.sum(
        (
            -4 * np.pi ** 2 * (
                self.H * self.l * np.sin(2 * self.alphas * x / self.l)
                + 2 * self.alphas * np.cos(2 * self.alphas * x / self.l)
            ) * (
                -self.H * self.l * np.cos(2 * self.alphas)
                + self.H * self.l
                + 2 * self.alphas * np.sin(2 * self.alphas)
            ) * np.exp(
                -4 * self.D * self.alphas ** 2 * self.t / self.l ** 2
            ) / (
                5 * (
                    self.alphas ** 2
                    - np.pi ** 2
                ) * (
                    4 * self.H ** 2 * self.alphas * self.l ** 2
                    - self.H ** 2 * self.l ** 2 * np.sin(4 * self.alphas)
                    - 4 * self.H * self.alphas * self.l * (np.cos(4 * self.alphas)
- 1)
                    + 4 * self.alphas ** 2 * (
                        4 * self.alphas
                        + np.sin(4 * self.alphas)
                    )
                )
            )
        )
    )
    # @formatter:on

with open('float_roots.pickle', 'rb') as file:
    float_roots = pickle.load(file)

def u_elem(x, t, alpha_n):
    return -4 * np.pi ** 2 * (alpha_n * np.cos(alpha_n * x / 10) + 40 *
np.sin(alpha_n * x / 10)) * (
        alpha_n * np.sin(2 * alpha_n) - 40 * np.cos(2 * alpha_n) + 40) *
np.exp(-3 * alpha_n ** 2 * t / 500) / (
        5 * (alpha_n ** 2 - np.pi ** 2) * (alpha_n ** 2 * (4 * alpha_n
+ np.sin(4 * alpha_n)) - 80 * alpha_n * (
            np.cos(4 * alpha_n) - 1) + 6400 * alpha_n - 1600 * np.sin(4 *
alpha_n)))

def u(x, t):
    return np.sum(u_elem(x, t, float_roots))

```

ПРИЛОЖЕНИЕ В

КОД МОДУЛЯ СИМВОЛЬНОГО ИСЧИСЛЕНИЯ

In [1]: `%pylab inline`

Populating the interactive namespace from numpy and matplotlib

```
In [2]: import pandas
import sympy as Ω
import matplotlib.pyplot as plt
import math
import pylab as p
import numpy as np
import decimal as d
from scipy.misc import derivative
import pickle
from tqdm import tqdm_notebook as tqdm
```

In [3]: `Ω.init_printing()`

```
In [4]: l_val = Ω.Integer(20)
D_val = Ω.Integer(6) / 10
H_val = Ω.Integer(4)
T_val = Ω.Integer(100)
```

```
In [5]: l, D, H, T, alpha_n, N = Ω.symbols('l D H T alpha_n N')
pi = Ω.pi
```

```
In [6]: x, t = Ω.symbols('x t')
```

```
In [7]: lambda_n = alpha_n * 2 * Ω.sqrt(D) / l
```

```
In [8]: with open('roots.pickle', 'rb') as file:
roots = pickle.load(file)
```

```
In [9]: alphas = roots
for alpha_val in alphas:
    y = (Ω.tan(alpha_val) - H * l / 2 / alpha_val).evalf(subs={
        H: H_val,
        l: l_val
    })
    assert y < 1e-9
print('roots ok')
```

roots ok

```
In [10]: phi = Ω.sin(pi * x / l) ** 2 * 4 / 10
phi
```

Out[10]:
$$\frac{2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{l}\right)}{5}$$

```
In [11]: X_n = 2 * alpha_n / H / l * Omega.cos(2 * alpha_n / l * x) \
          + Omega.sin(2 * alpha_n / l * x)
          X_n
```

Out[11]:
$$\sin\left(\frac{2\alpha_n x}{l}\right) + \frac{2\alpha_n \cos\left(\frac{2\alpha_n x}{l}\right)}{Hl}$$

```
In [12]: norm = Omega.integrate(X_n * X_n, (x, 0, l))
          norm = norm.as_expr_set_pairs()[0][0]
          norm = norm.simplify()
          norm
```

Out[12]:
$$\frac{l}{2} - \frac{l \sin(4\alpha_n)}{8\alpha_n} + \frac{\sin^2(2\alpha_n)}{H} + \frac{2\alpha_n^2}{H^2 l} + \frac{\alpha_n \sin(4\alpha_n)}{2H^2 l}$$

```
In [13]: A_n = Omega.integrate(X_n * phi, (x, 0, l))
          A_n = A_n.as_expr_set_pairs()[-1][0] / norm
          A_n = A_n.simplify()
          A_n
```

Out[13]:
$$-\frac{4\pi^2 Hl (-Hl \cos(2\alpha_n) + Hl + 2\alpha_n \sin(2\alpha_n))}{5(\alpha_n^2 - \pi^2)(4H^2\alpha_n l^2 - H^2 l^2 \sin(4\alpha_n) + 8H\alpha_n l \sin^2(2\alpha_n) + 4\alpha_n^2(4\alpha_n + \sin(4\alpha_n)))}$$

```
In [14]: T_n = A_n * Omega.exp(-lambda_n**2 * t)
          T_n = T_n.simplify()
          T_n
```

Out[14]:
$$-\frac{4\pi^2 Hl (-Hl \cos(2\alpha_n) + Hl + 2\alpha_n \sin(2\alpha_n)) e^{-\frac{4D\alpha_n^2 t}{l^2}}}{5(\alpha_n^2 - \pi^2)(4H^2\alpha_n l^2 - H^2 l^2 \sin(4\alpha_n) + 8H\alpha_n l \sin^2(2\alpha_n) + 4\alpha_n^2(4\alpha_n + \sin(4\alpha_n)))}$$

```
In [15]: u_elem = (T_n * X_n).subs({
          H: H_val,
          l: l_val,
          D: D_val,
          }).simplify()
```

```
In [16]: u_elem
```

Out[16]:
$$-\frac{4\pi^2 \left(\alpha_n \cos\left(\frac{\alpha_n x}{10}\right) + 40 \sin\left(\frac{\alpha_n x}{10}\right)\right) (\alpha_n \sin(2\alpha_n) - 40 \cos(2\alpha_n) + 40) e^{-\frac{3\alpha_n^2 t}{500}}}{5(\alpha_n^2 - \pi^2)(\alpha_n^2(4\alpha_n + \sin(4\alpha_n)) + 160\alpha_n \sin^2(2\alpha_n) + 6400\alpha_n - 1600 \sin(4\alpha_n))}$$

```
In [17]: u = sum([
    u_elem.subs({
        alpha_n: alpha_val,
    })
    for alpha_val in tqdm(alphas)
])
```

100% 101/101 [00:01<00:00, 99.99it/s]

```
In [18]: (T_n * X_n).subs({
    H: H_val,
    l: l_val,
    D: D_val,
}).simplify()
```

```
Out[18]:
```

$$-\frac{4\pi^2 \left(\alpha_n \cos\left(\frac{\alpha_n x}{10}\right) + 40 \sin\left(\frac{\alpha_n x}{10}\right) \right) (\alpha_n \sin(2\alpha_n) - 40 \cos(2\alpha_n) + 40) e^{-\frac{3\alpha_n^2 t}{500}}}{5 (\alpha_n^2 - \pi^2) (\alpha_n^2 (4\alpha_n + \sin(4\alpha_n)) + 160\alpha_n \sin^2(2\alpha_n) + 6400\alpha_n - 1600 \sin(4\alpha_n))}$$

```
In [19]: f_u = Omega.lambdify((x, t), u)
f_u(0, 0)
```

```
Out[19]: 5.266645799609216e-07
```

```
In [23]: x = linspace(0, float(l_val), 1000)
y = [f_u(i, 0) for i in x]

plot(x, y)
title('Концентрация в момент t=0')
grid(True)
xlabel('x')
ylabel('u')
None
```

