Моделирование технологических процессов

Математические модели микроуровня

Закон сохранения массы жидкости в выделенном объеме V

$$\iiint\limits_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \cdot \vec{v}) \right] dV = 0$$

С силу произвольного выбора объема V подынтегральная функция должна быть тождественна равна нулю и следует уравнение неразрывности сплошной среды:

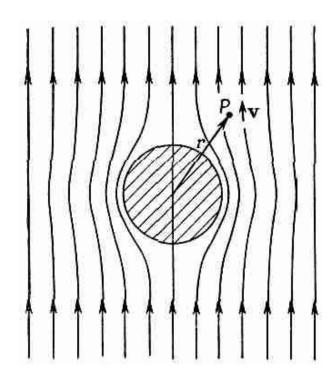
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \cdot \vec{v}) = 0$$

Для **несжимаемой жидкости** плотность является постоянной $\rho = \text{const}$:

$$div(\vec{v}(x,y,z,t)) = 0$$

Рассмотрим **установившееся течение** жидкости, для которого ее **скорость не зависит от времени**:

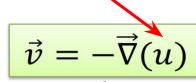
$$\vec{v} = \vec{v}(x, y, z)$$



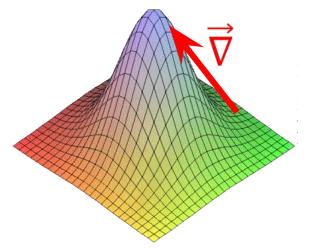
Для **безвихревое** течения жидкости, существует потенциал скоростей:

Свойства потенциала скоростей: градиент потенциала скоростей определяет скорость жидкости:

$$u=u\left(x,y,z\right)$$



$$\vec{v} = -\left(\vec{i} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + \vec{j} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} + \vec{k} \cdot \frac{\partial u}{\partial z}\right)$$



Для потенциала скоростей, справедливо уравнение **Лапласа**:

$$div(\vec{v}(x,y,z,t)) = 0$$

ИЛИ

$$div(-\vec{\nabla}(u)) = 0 \qquad \triangle u = 0$$

здесь
$$\Delta \equiv div(ec{
abla})$$

оператор Лапласа

Уравнение Лапласа возникает во многих физических задачах механики, теплопроводности, электростатики, гидравлики, квантовой физике, в частности в уравнении Шрёдингера.

Laplace, Pierre-Simon (1749–1827), французский математик, физик и астроном

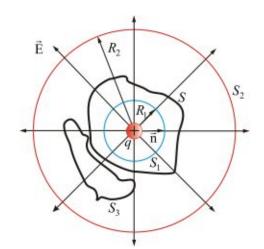


Электрическое поле в среде с диэлектрической проницаемостью характеризуется напряженностью поля $\vec{E}(x,y,z)$ и по теореме **Гаусса** для электрического поля:

Johann Carl Friedrich Gauß; 1777-1855, Гёттинген): немецкий математик, механик, физик, астроном и геодезист.

$$\iint \varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot (\vec{E}, d\vec{S}) = \iiint \rho dV$$

где ε_0 – диэлектрическая постоянная; $\rho(x,y,z)$ – объемная плотность электрических зарядов; V – некоторый объем пространства, ограниченный замкнутой поверхностью S





С помощью теоремы Остроградского-Гаусса преобразуем последнее выражение к дифференциальной форме:

$$\oint \varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot (\vec{E}, d\vec{S}) = \iiint \varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot div(\vec{E}) dV = \iiint \rho dV$$

или

$$\iiint \varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot div(\vec{E}) dV - \iiint \rho dV = 0$$

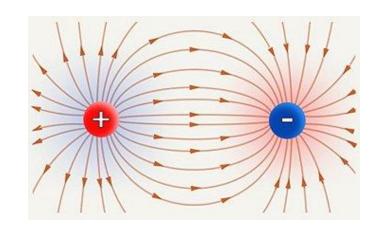
$$\iiint \left[\varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot div(\vec{E}) - \rho\right] dV = 0$$

В силу произвольного выбора объема V подынтегральная функция должна быть тождественна нулю!

$$div(\vec{E}) = \frac{\rho}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0}$$

Связь электрического поля и электростатического потенциала:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi$$



$$div(-\vec{\nabla}\varphi) = \Delta\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0}$$

здесь

$$\Delta \equiv div(\vec{\nabla})$$

оператор Лапласа

Для электростатического потенциала справедливо уравнение **Пуассона**:

$$\Delta \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0}$$

Siméon Denis Poisson (1781-1840, Франция), французский математик, механик и физик.

В декартовой системе координат:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = -\frac{\rho(x, y, z)}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0}$$

Уравнение Пуассона описывает:

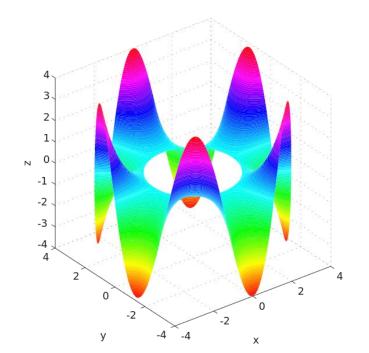
- электростатическое поле,
- стационарное поле температуры,
- поле давления,
- поле потенциала скорости в гидродинамике.

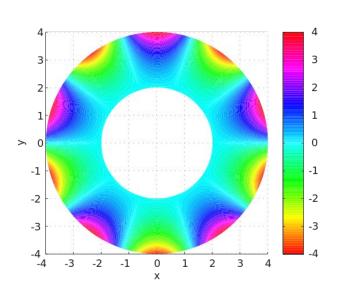


В каждой задачи, связанной с уравнениями Лапласа и Пуассона, искомое решение должно:

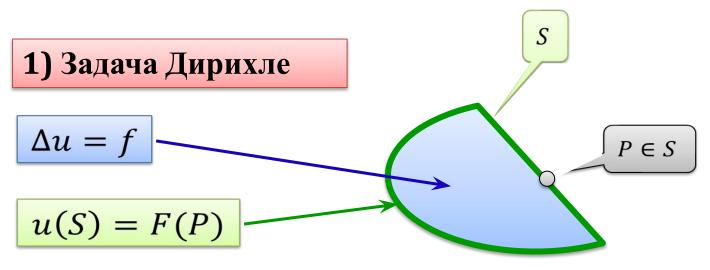
1) удовлетворять уравнению в области

2) удовлетворять некоторому дополнительному условию на границе этой области.



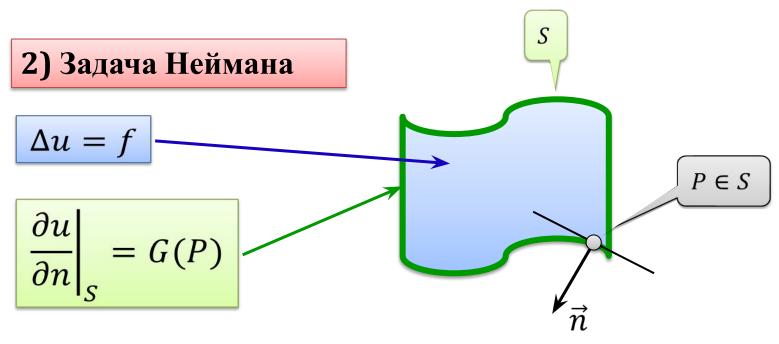


В зависимости от вида граничных условий различают следующие виды граничных задач:



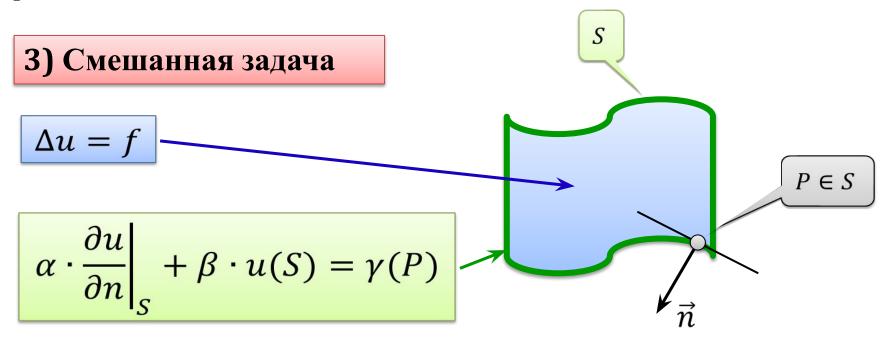
здесь S – поверхность ограничивающая область решений; $P \in S$ – точка принадлежащая границе области S.

В зависимости от вида граничных условий различают следующие виды граничных задач:



здесь S – поверхность ограничивающая область решений; $P \in S$ – точка принадлежащая границе области S; \vec{n} - вектор нормали к поверхности области в точке P

В зависимости от вида граничных условий различают следующие виды граничных задач:

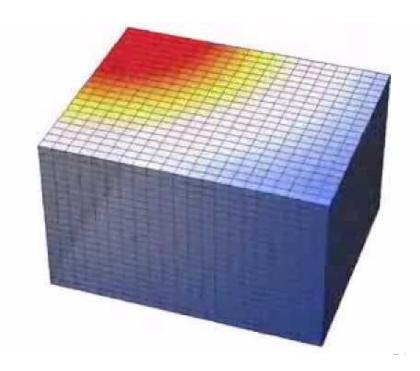


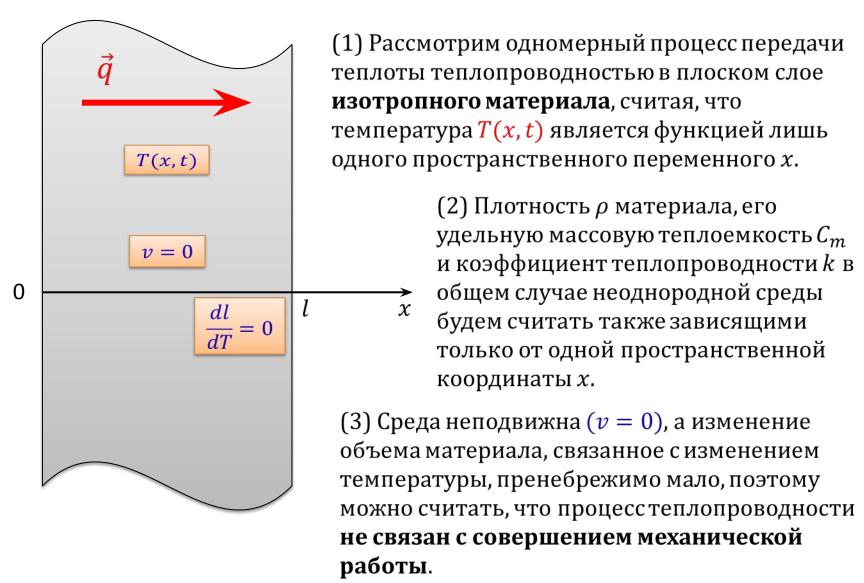
здесь S – поверхность ограничивающая область решений; $P \in S$ – точка принадлежащая границе области S; \vec{n} - вектор нормали к поверхности области в точке P

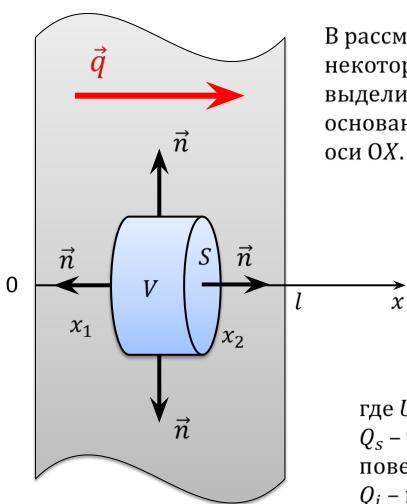
Процесс передачи теплоты от более нагретых частей тела к менее нагретым связан с изменением температуры Т в различных частях рассматриваемой области пространства.



Поэтому описание процесса теплопереноса в макроскопической теории в общем случае сводится к определению нестационарного температурного поля в рассматриваемой области пространства.







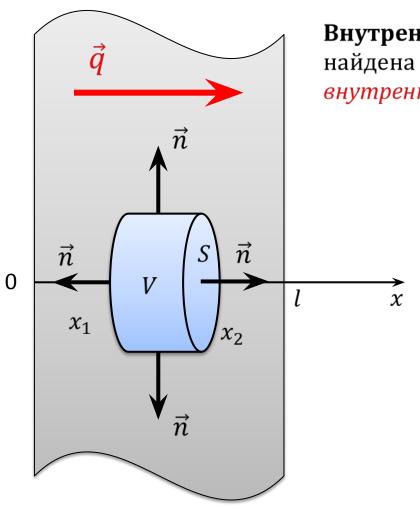
В рассматриваемом слое материала в качестве некоторой термодинамической системы выделим объем *V* в виде **цилиндра** с площадью основания *S* и осью, параллельной координатной оси *OX*.

$$V = S \cdot (x_2 - x_1)$$

Из **первого закона термодинамики** для выделенного объема V следует:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = Q_s + Q_i$$

где U – внутренняя энергия системы; Q_S – тепловой поток через всю замкнутую поверхность выделенного цилиндра; Q_i – количество тепла выделяемого в объеме цилиндра вследствие внутреннего тепловыделения и поглощения.

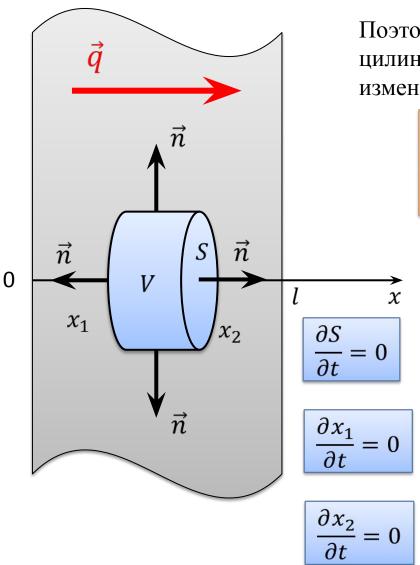


Внутренняя энергия цилиндра может быть найдена интегрированием *объемной плотности* внутренней энергии $\epsilon(x,t)$ по его объему:

$$U = \iiint \epsilon(x,t)dV$$

Изменение объемной плотности энергии может наблюдаться только вдоль оси цилиндра (ось ОХ)

$$U = S \cdot \int_{x_1}^{x_2} \epsilon(x, t) dx$$

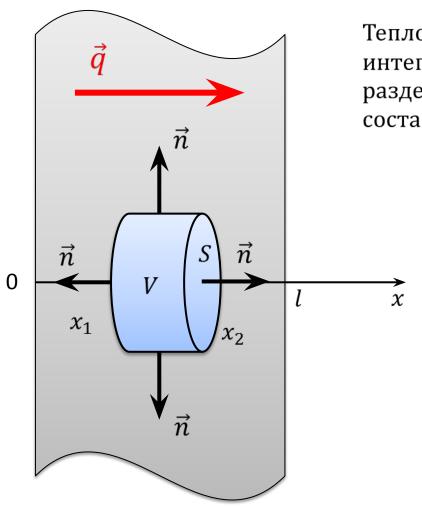


Поэтому изменение внутренней энергии цилиндра U за единицу времени (скорость изменения внутренней энергии):

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(S \cdot \int_{x_1}^{x_2} \epsilon(x, t) dx \right)$$

Тепловое расширение среды отсутствует, поэтому геометрические размеры цилиндра не изменяются с течением времени: площадь основания цилиндра S и его высота $(x_2 - x_1)$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = S \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \epsilon(x, t)}{\partial t} dx$$



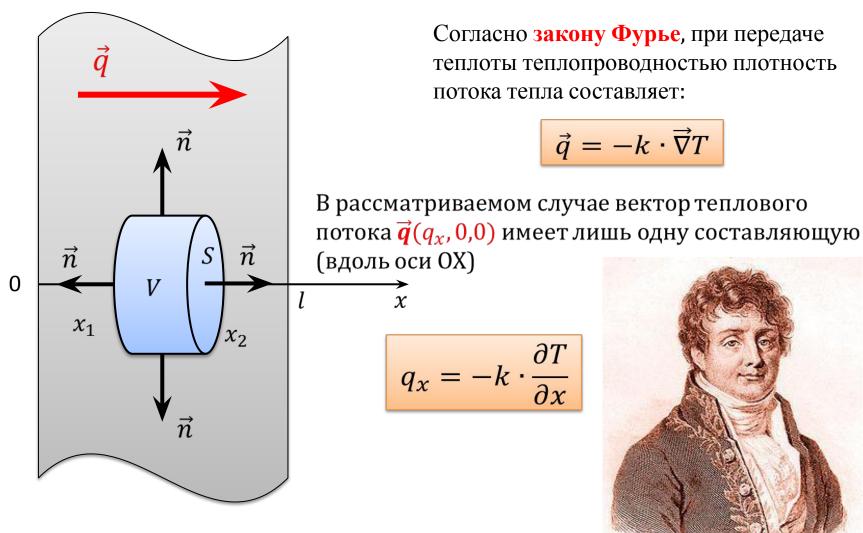
Тепловой поток Q_s можно найти с помощью интегрирования по поверхности Σ (граница раздела выделенного объема) нормальную составляющую плотности теплового потока:

$$Q_S = - \oiint (\vec{q}, d\vec{S})$$

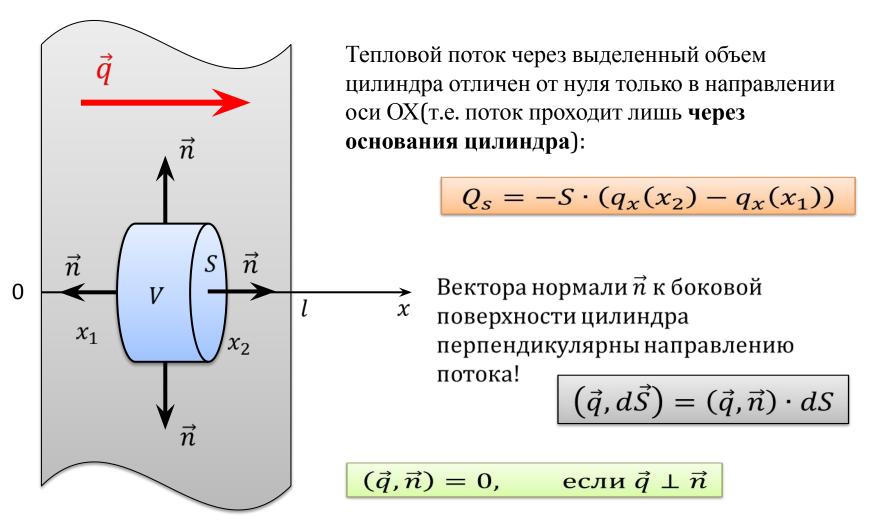
где $ec{q}$ - плотность теплового потока.

Площадь граница раздела выделенного объема (площадь поверхности выделенного цилиндра)

$$\Sigma = 2S + \sqrt{\pi S} \cdot (x_2 - x_1)$$

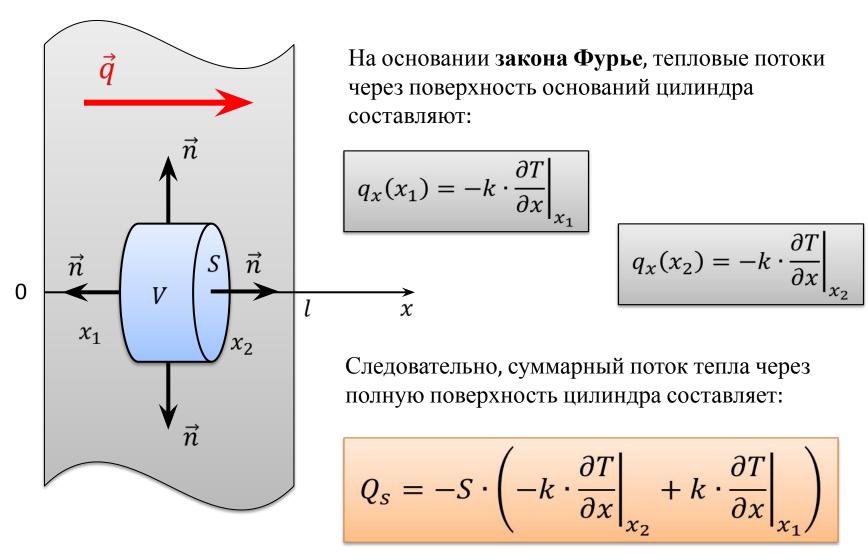


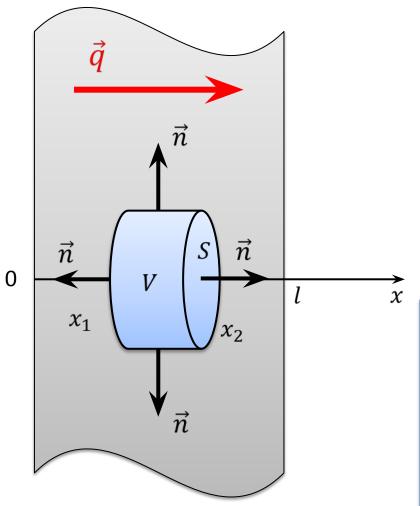
Jean Baptiste Joseph Fourier (1768-1830, Франция), французский математик и физик.



$$(\vec{q}, \vec{n}) = 1$$
, если $\vec{q} \uparrow \uparrow \vec{n}$

$$(\vec{q}, \vec{n}) = -1,$$
 если $\vec{q} \uparrow \downarrow \vec{n}$

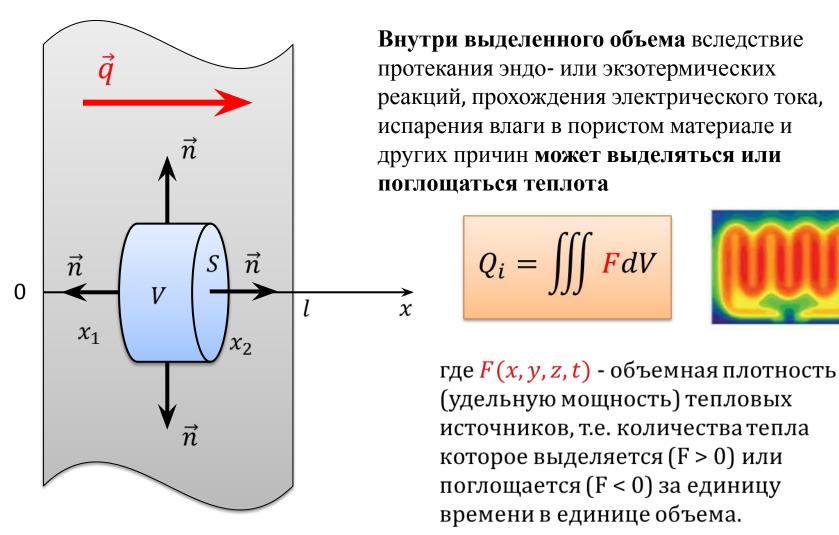


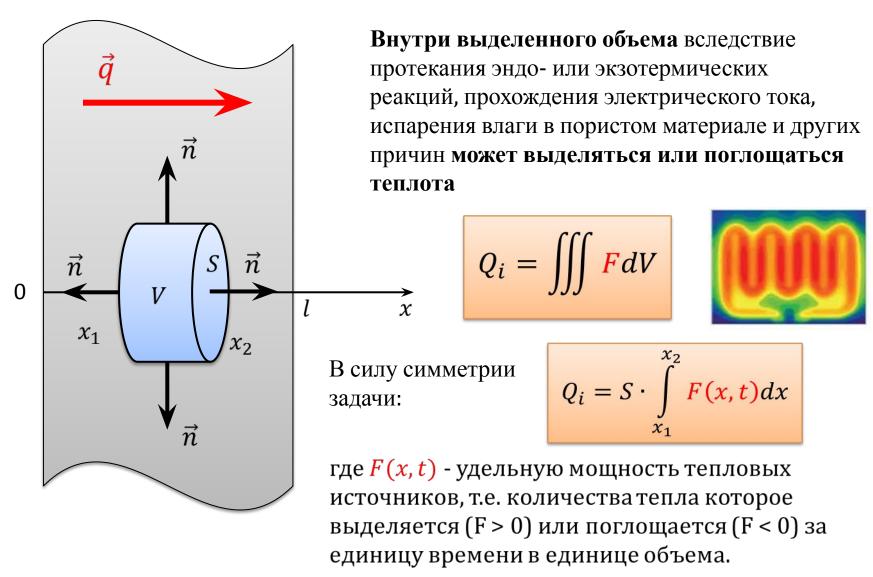


Рассмотрим тепловой поток в качестве первообразной функции

$$Q_{S} = S \cdot \int_{x_{1}}^{x_{2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx$$

Первообра́зной или примити́вной функцией данной функции f(x) называют такую F(x), производная которой (на всей области определения) равна f, то есть F'(x) = f(x). Вычисление первообразной заключается в нахождении неопределённого интеграла, а сам процесс называется интегрированием





Таким образом, из первого закона термодинамики (закон сохранения и превращения энергии) следует:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = Q_s + Q_i$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = S \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \epsilon(x, t)}{\partial t} dx$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = S \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \epsilon(x, t)}{\partial t} dx$$

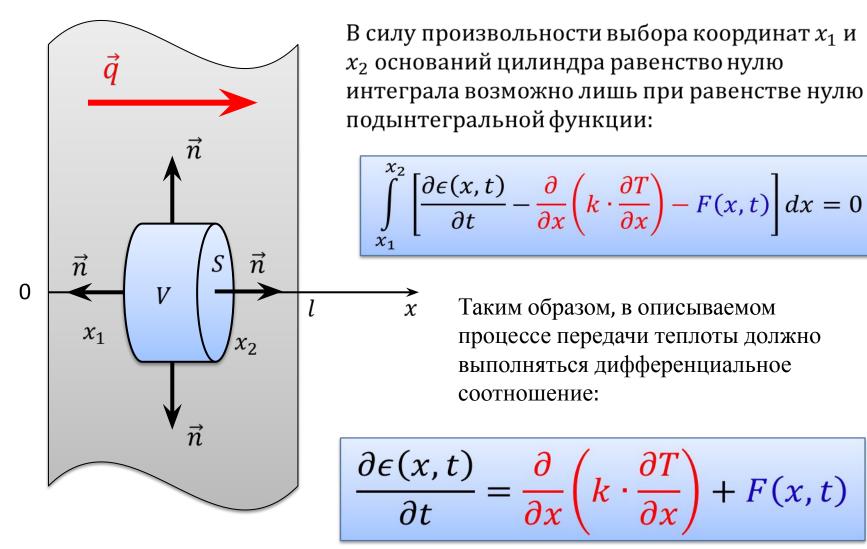
$$Q_S = S \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx$$

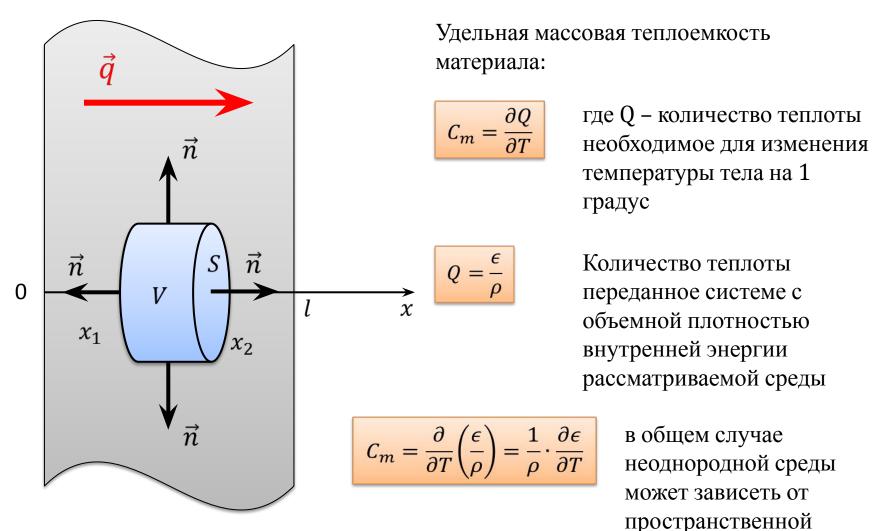
$$Q_i = S \cdot \int_{x_1}^{x_2} F(x, t) dx$$

$$Q_i = S \cdot \int_{x_1}^{x_2} F(x, t) dx$$

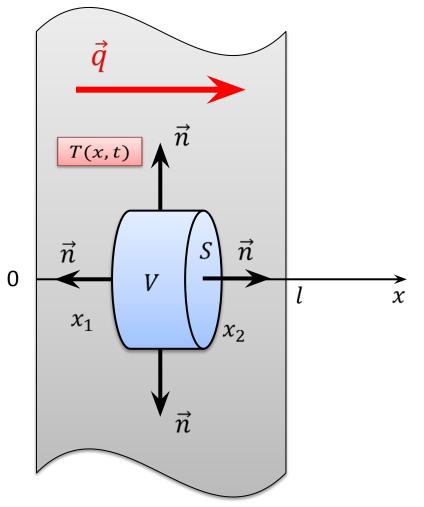
Подстановка полученных выше соотношений дает:

$$S \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \epsilon(x, t)}{\partial t} dx = S \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx + S \cdot \int_{x_1}^{x_2} F(x, t) dx$$





координаты

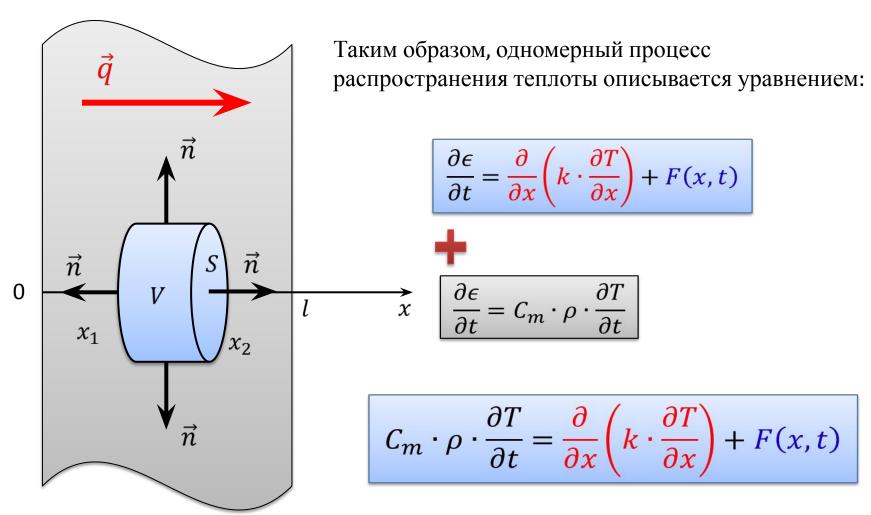


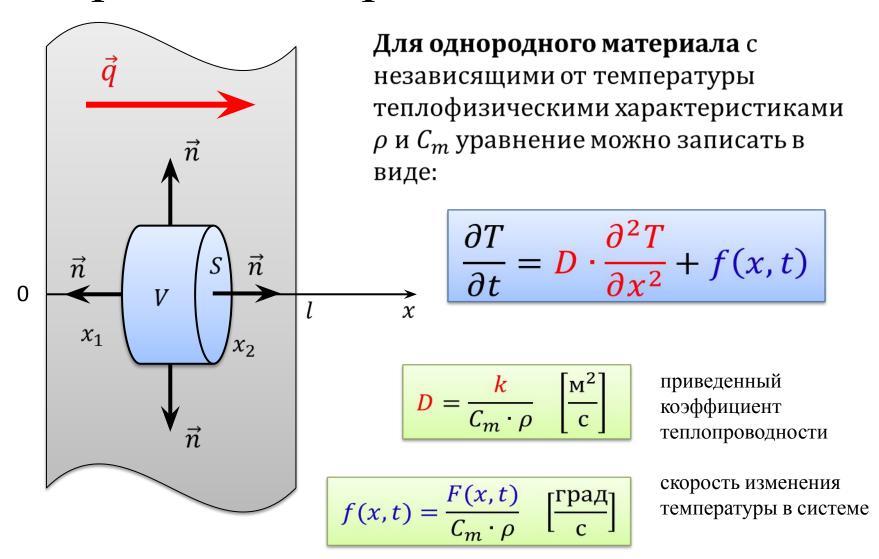
Установим связь между изменением удельной внутренней энергии и изменением температуры:

$$\partial \epsilon = C_m \cdot \rho \cdot \partial T$$

Изменение удельной внутренней энергии рассматриваемого объекта (цилиндра) за единицу времени связано с изменением температуры T(x,t) объекта:

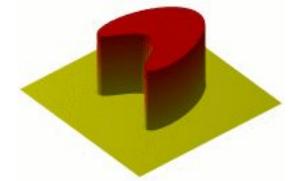
$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} = C_m \cdot \rho \cdot \frac{\partial T}{\partial t}$$





Полученное уравнение является дифференциальными уравнением в частных производных параболического типа

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t)$$



Эти уравнения лежат в основе математических моделей, описывающих:

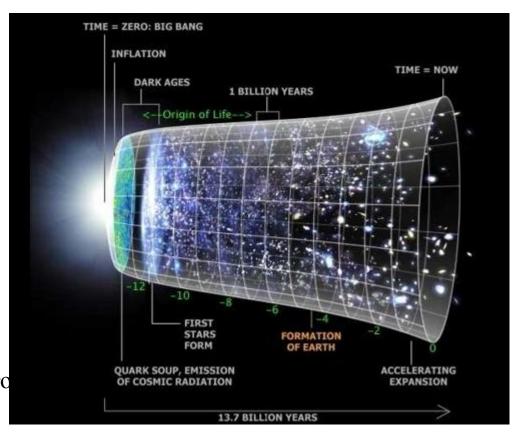
- процесс передачи теплоты в неоднородных и однородных телах;
- диффузионный процесс переноса массы и диффузия частиц (например, нейтронов) в веществе;
- процессы конвекции;
- процессы движения жидкостей и газов.



Уравнения параболического типа. Начальные и граничные условия

Чтобы с помощью уравнения параболического типа можно было описать эволюцию, необходимо знать распределение температуры в начальный момент времени, т.е. задать начальное условие.

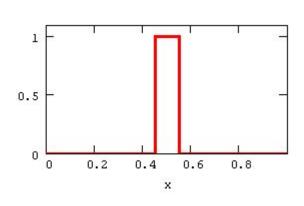
Для рассматриваемого одномерного процесса начальное условие задается в виде известной зависимости температуры в начальный момент времени t = 0:

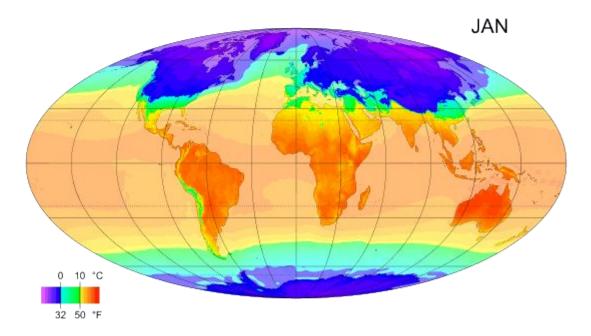


Уравнения параболического типа. Начальное условие

Для рассматриваемого одномерного процесса переноса тепла **начальное условие** задается в виде известной зависимости температуры в начальный момент времени t = 0:

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



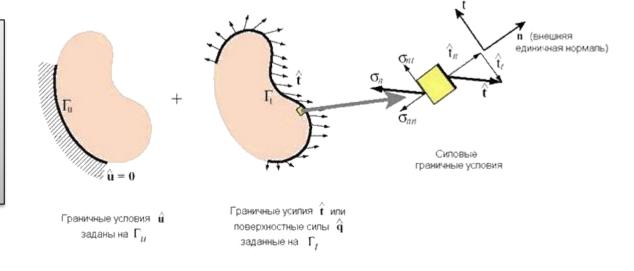


Уравнения параболического типа. Граничные условия

Кроме того, требуется знать тепловой режим на поверхности тела, т.е. задать **граничные условия** во всех точках поверхности тела в любой момент времени.

В одномерном процессе соответствующие граничные условия задаются на граничных поверхностях слоя x=0 и x=l

Граничные условия в задачах теплопроводности могут быть заданы различными способами.



Уравнения параболического типа. Граничные условия

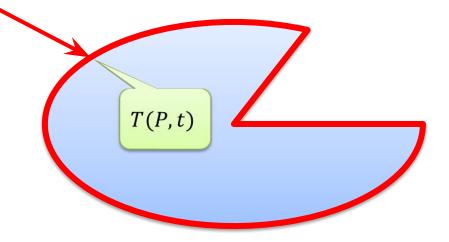
1) Граничное условие **первого рода**, когда в каждой точке поверхности тела задают температуру

$$T(P,t) = \Psi(P,t)$$

Здесь

S – поверхность ограничивающая область решений;

Р – точка принадлежащая границе области S



2) Граничное условие **второго рода**, когда на поверхности тела задается тепловой поток:

$$(\vec{q}, \vec{n}) = \Theta(P, t)$$

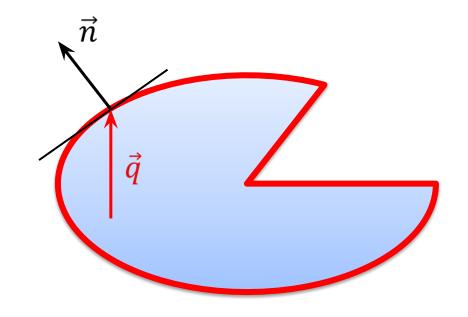
Здесь

 \vec{q} – вектор плотности теплового потока;

 \vec{n} - вектор нормали к поверхности области в точке P; P – точка принадлежащая

границе области *S*.

S – поверхность ограничивающая область решений.



3) Граничное условие **третьего рода** описывает тепловой режим на поверхности тела, соответствующий **конвективному теплообмену** по закону Ньютона с окружающей внешней средой, имеющей температуру $T^*(P,t)$:

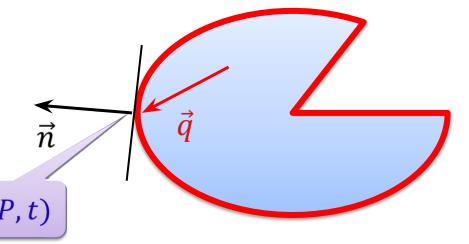
$$(\vec{q}, \vec{n}) = \alpha \cdot (T(P, t) - T^*(P, t))$$

 α – коэффициент теплообмена (теплоотдачи)

 \vec{q} – вектор плотности теплового потока;

 \vec{n} - вектор нормали к поверхности области в точке P;

Р – точка принадлежащая границе области тела.



4) При описании температурных полей в многослойных структурах и оболочках на поверхности контакта двух тел используют **граничные** условия сопряжения (идеальный тепловой контакт):

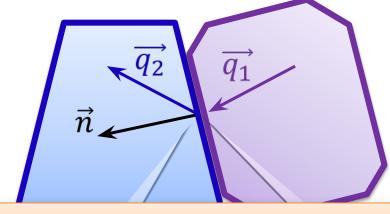
$$\begin{cases} T_1(P,t) = T_2(P,t) \\ (\vec{q}_1, \vec{n}) + (\vec{q}_2, \vec{n}) = 0 \end{cases}$$

 $\overrightarrow{q_1}$ – вектор плотности теплового потока в 1-ой среде;

 $\overrightarrow{q_2}$ – вектор плотности теплового потока во 2-ой среде;

 \vec{n} - вектор нормали к поверхн области в точке P;

Р – точка принадлежащая гра раздела двух тел.



Для идеального теплового контакта эти условия означают равенство температур и тепловых потоков на контактной поверхности

5) Граничные условия для **неидеального теплового контакта**, т.е. когда теплообмен между частями тела затруднен и происходит по закону конвекционного теплообмена (закон Ньютона):

$$\begin{cases} (\vec{q}_1, \vec{n}) = \alpha \cdot (T_1(P, t) - T_2(P, t)) \\ (\vec{q}_1, \vec{n}) + (\vec{q}_2, \vec{n}) = 0 \end{cases}$$

Для неидеального теплового контакта, т.е. когда теплообмен между частями тела затруднен **температуры** на поверхности частей системы **не равны** между собой $T_1(P,t) \neq T_2(P,t)$, хотя имеет место **равенство тепловых потоков** $|\overrightarrow{q_1}| = |\overrightarrow{q_2}|$. Возникающая разность температур определяет теплообмен между частями системы по механизму закона Ньютона.

6) **Нелинейное граничное условие** формулируется в случае если основным **механизмом теплообмена** поверхности тела с окружающей средой **является излучение**, то по закону Стефана - Больцмана:

$$(\vec{q}, \vec{n}) = \chi_0 \cdot \sigma \cdot T^4(P, t)$$

 χ_0 – степень черноты материала, которая в общем случае зависит от температуры;

 σ – постоянная Стефана – Больцмана;

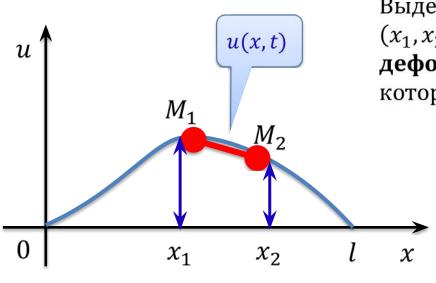
 $ec{q}$ – вектор плотности теплового потока;

 \vec{n} - вектор нормали к поверхности области в точке P;

Р – точка принадлежащая границе области раздела двух тел.

T(P,t)

Рассмотрим процесс колебаний тонкой упругой нити (струны), которая может свободно изгибаться.



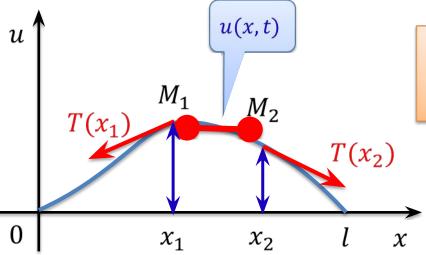
Выделим произвольный участок струны (x_1, x_2) , который при колебаниях струны **деформируется** в участок (M_1, M_2) , длина дуги которого в момент времени t составляет:

$$S_{(M_1, M_2)} = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2} \, dx$$

Рассмотрим только малые поперечные колебания струны, считая, что перемещение частиц струны происходит в одной плоскости и все точки струны движутся перпендикулярно оси ОХ.

Из предположения о малости колебаний следует, что длина выделенного участка струны $S_{(M_1,M_2)}$ в любой момент времени:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \ll 1$$



$$S_{(M_1,M_2)} = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2} \, dx \approx (x_2 - x_1)$$

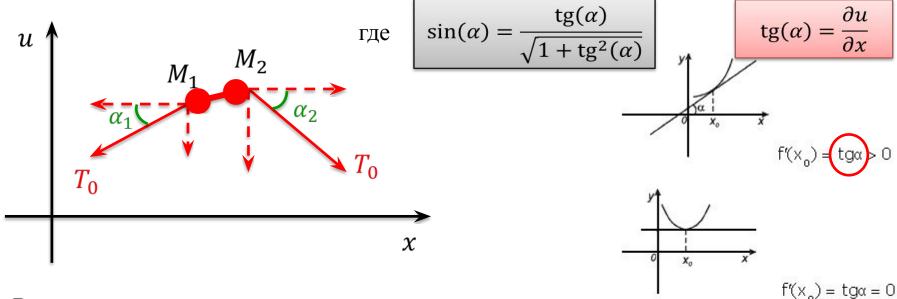
Это означает, что в процессе малых колебаний удлинением участков струны можно пренебречь. В этом случае, согласно закону Гука, натяжение $T(x) = T_0 = const$ в

натяжение $T(x) = T_0 = const$ в каждой точке струны (x) не будет изменяться.

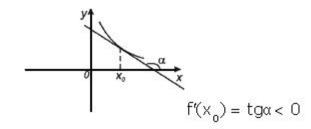
Robert Hooke (1635-1703, Англия)

естествоиспытатель, учёный-энциклопедист, один из отцов физики, в особенности экспериментальной.

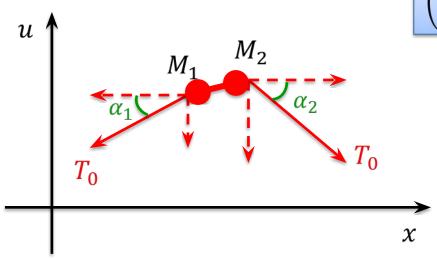
Для поперечных колебаний струны сумма проекций на ось OU сил натяжения T, действующих на концах участка струны (M_1, M_2) : $T_0 \cdot \sin(\alpha_2) - T_0 \cdot \sin(\alpha_1)$

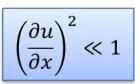


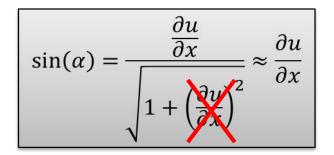
Воспользуемся геометрическим смыслом производной – «Производная в точке x равна угловому коэффициенту касательной к графику функции y = f(x) в этой точке»



Из предположения о малости колебаний следует:







 $T_0 \cdot \sin(\alpha_2) - T_0 \cdot \sin(\alpha_1) \approx$

Таким образом, сумма проекций сил натяжения на выделенный участок струны:

$$\left| T_0 \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_2} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_1} \right) = T_0 \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx$$

Первообра́зной или примити́вной функцией данной функции f(x) называют такую F(x), производная которой (на всей области определения) равна f(x), то есть F'(x) = f(x).

Закон динамики поступательного движения (закон Ньютона), который для механической системы:

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}$$

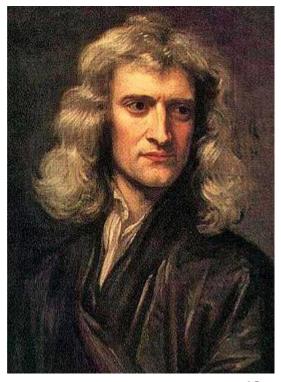
здесь

 \vec{P} - импульс системы, равный сумме импульсов всех ее частиц; \vec{F} - результирующая внешняя сила.

В качестве такой механической системы рассмотрим выделенный участок струны (M_1, M_2) Учитывая, что движение этой системы происходит в направлении, перпендикулярном оси ОХ, запишем **закон Ньютона** в проекции на ось ОU:

$$\frac{dP}{dt} = F$$

Sir Isaac Newton (1643-1727, Англия). Физик, математик, механик и астроном, один из создателей классической физики.



Проекция импульса выделенного участка струны (M_1, M_2) :

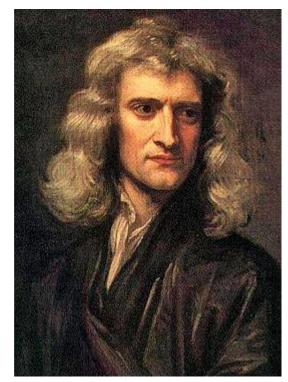
$$P = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x) \frac{\partial u}{\partial t} dx$$

 $\rho(x)$ - линейная плотность распределения массы в струне, которая в общем случае изменяется вдоль струны.

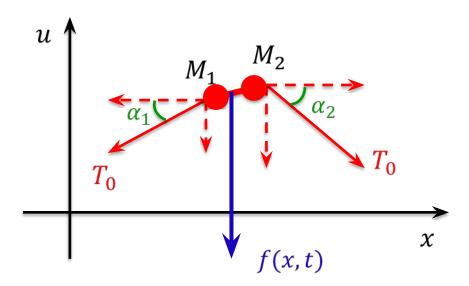
Следовательно, скорость изменения импульса выделенного участка струны (M_1, M_2) :

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\int_{x_1}^{x_2} \rho(x) \frac{\partial u}{\partial t} dx \right) = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} dx$$

Sir Isaac Newton (1643-1727, Англия). Физик, математик, механик и астроном, один из создателей классической физики.



Проекция внешних сил состоит из двух слагаемых: одно из них учитывает действие сил натяжения на концах выделенного участка струны T, а другое - суммарную вынуждающую силу F_0 , действующую на частицы этого участка.

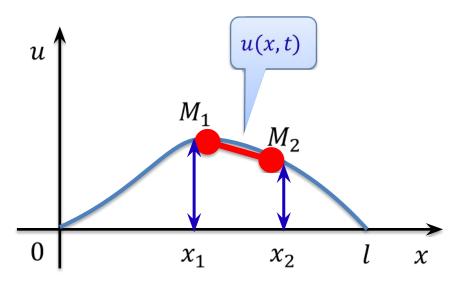


$$F_0 = \int_{x_1}^{x_2} f(x, t) dx$$

Таким образом, **второй закон Ньютона** для участка струны
запишется в виде интегрального
соотношения:

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho(x) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} dx = T_0 \cdot \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x, t) dx$$

В силу произвольности выбора отрезка (x_1, x_2) из уравнения следует, что в любой точке струны в любой момент времени t подынтегральное выражение должно обращаться в нуль, т.е.

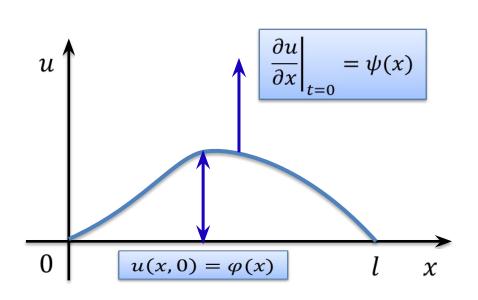


$$\rho(x)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = T_0 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t)$$

Полученное соотношение представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка относительно искомой функции u(x,t).

Оно описывает процесс малых поперечных колебаний струны, и его называют неоднородным одномерным волновым уравнением, или уравнением плоских волн.

Уравнения гиперболического типа. Задача Коши



$$\rho(x)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = T_0 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t)$$

Причинами, вызывающими колебания струны, могут являться начальные отклонения струны от равновесного положения или сообщенный струне начальный импульс, обусловливающий некоторое распределение скоростей частиц струны.

Поэтому необходимо задать начальные условия:

$$\begin{cases} u(x,0) = \varphi(x) \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{t=0} = \psi(x) \end{cases}$$

Методы решения уравнений в частных производных. Метод Фурье

Метод разделения переменных, или метод Фурье, является одним из основных методов решения задач математической физики в ограниченных областях.

Идея метода Фурье основана на линейности и однородности уравнения и граничных условий. В этом случае справедлив принцип суперпозиции для любых частных решений u_1 и u_2 уравнения, удовлетворяющих начальным и граничным условиям, т.е. функция.

 $u = C_1 \cdot u_1 + C_2 \cdot u_2$

также удовлетворяет уравнению и граничным условиям Jean Baptiste Joseph Fourier (1768-1830, Франция), французский математик и физик.



Методы решения уравнений в частных производных. Метод Фурье

Нетривиальное решение уравнения ищется в виде произведения функций, например:

$$u(x,y) = X(x) \cdot Y(y)$$

ИЛИ

$$u(x,t) = X(x) \cdot T(t)$$

ИЛИ

$$u(x, y, z) = X(x) \cdot Y(t) \cdot Z(z)$$

Jean Baptiste Joseph Fourier (1768-1830, Франция), французский математик и физик.

