# Numerično reševanje parcialnih diferencialnih enačb

V kemiji oziroma kemijske inženirstvu velikokrat dobimo za kakšno količino parcialno diferencialno enačbo, ki jo moramo rešiti, da dobimo krajevno odvisnost neke količine od časa (na primer spreminjanje temperature na nekem prostoru v odvisnosti od časa ali pa spreminjanje koncentracije neke snovi v odvisnosti od časa pri difuziji). Pri reševanju parcialnih diferencialnih enačb nas tu ne zanima splošna rešitev, temveč točno določena z znanimi začetnimi vrednostmi. Rešitev parcialnih diferencialnih enačb pa je tabelirana funkcija za različne čase. Parcialne diferencialne enačbe imamo lahko različnih vrst. Pomembne v kemiji so difuzijska enačba oziroma paraboličen tip, ki ima obliko

$$\frac{\partial u(\vec{r},t)}{\partial t} = D\nabla^2 u(\vec{r},t)$$

valovna enačba ali hiperboličen tip, ki se zapiše kot

$$\frac{\partial^2 u(\vec{r},t)}{\partial t^2} = c^2\nabla^2 u(\vec{r},t)$$

ter Laplaceova enačba ali eliptični tip, ki je v obliki

$$\nabla^2 u(\vec{r},t) = 0$$

Obstaja več metod za numerično reševanje teh enačb kot so

- diferenčna metoda
- metoda končnih elementov
- metoda končnih volumnov

Najpreprostejša za uporabo je diferenčna metoda.

**DIFUZIJSKA ENAČBA**

Prevajanje toplote oziroma difuzija v eni dimenziji poteka po difuzijski enačbi, ki ima obliko

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

Spremenljivka $u$ nam predstavlja temperaturo oziroma koncentracijo. Časovni in krajevni prostor razdelimo na točke

$$x_i = x_0 + ih$$
$$t_j = t_0 + jk$$

$h$ je korak v koordinati $x$ in $k$ v času. Odvode lahko sedaj zapišemo z diferencami

$$\frac{\partial u(x_i,t_j)}{\partial t} = \frac{u\left(x_i,t_{j+1}\right) - u(x_i,t_j)}{k}$$
$$\frac{\partial^2 u(x_i,t_j)}{\partial x^2} = \frac{u\left(x_{i+1},t_j\right) + u\left(x_{i-1},t_j\right) - 2u(x_i,t_j)}{h^2}$$

in parcialno diferencialno enačbo kot

$$\frac{u\left(x_i,t_{j+1}\right) - u(x_i,t_j)}{k} = D\frac{u\left(x_{i+1},t_j\right) + u\left(x_{i-1},t_j\right) - 2u(x_i,t_j)}{h^2}$$

Vrednosti pri naslednjem koraku v času dobimo z

$$u\left(x_i,t_{j+1}\right) = ru\left(x_{i+1},t_j\right) + ru\left(x_{i-1},t_j\right) + (1-2r)u(x_i,t_j)$$

kjer je $r = \frac{Dk}{h^2}$. Ta eksplicitna shema je stabilna, če je $r$ manjši od $1/2$. Pri reševanju problema vedno poznamo začetni pogoj ($u(x_i, t_0)$) ter robni pogoj ($u(x_0, t_j)$, $u(x_N, t_j)$, upoštevali smo, da ima koordinata $x$ $N$ delilnih intervalov. Optimalen $r$ je enak $1/6$.

**VALOVNA ENAČBA**

Valovanje na struni poteka po valovni enačbi, ki ima obliko

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

Spremenljivka $u$ nam predstavlja odmik strune iz mirovne lege. Časovni in krajevni prostor razdelimo na točke

$$x_i = x_0 + ih$$
$$t_j = t_0 + jk$$

$h$ je korak v koordinati $x$ in $k$ v času. Odvode lahko sedaj zapišemo z diferencami

$$\frac{\partial^2 u(x_i,t_j)}{\partial t^2} = \frac{u(x_i, t_{j+1}) + u(x_i, t_{j-1}) - 2u(x_i, t_j)}{k^2}$$
$$\frac{\partial^2 u(x_i,t_j)}{\partial x^2} = \frac{u(x_{i+1}, t_j) + u(x_{i-1}, t_j) - 2u(x_i, t_j)}{h^2}$$

in parcialno diferencialno enačbo kot

$$\frac{u(x_i, t_{j+1}) + u(x_i, t_{j-1}) - 2u(x_i, t_j)}{k^2} = c^2 \frac{u(x_{i+1}, t_j) + u(x_{i-1}, t_j) - 2u(x_i, t_j)}{h^2}$$

Vrednosti pri naslednjem koraku v času dobimo z odmikoma dveh predhodnih časov

$$u(x_i, t_{j+1}) = ru(x_{i+1}, t_j) + ru(x_{i-1}, t_j) + 2(1-r)u(x_i, t_j) - u(x_i, t_{j-1})$$

kjer je $r = \frac{c^2k^2}{h^2}$. Ta eksplicitna shema je stabilna, če je $r$ manjši od 1. Pri reševanju problema vedno poznamo začetni odmik strune ($u(x_i, t_0)$) in njeno hitrost ($u'(x_i, t_0)$) ter robni pogoj ($u(x_0, t_j)$, $u(x_N, t_j)$, upoštevali smo, da ima koordinata $x$ $N$ delilnih intervalov.