

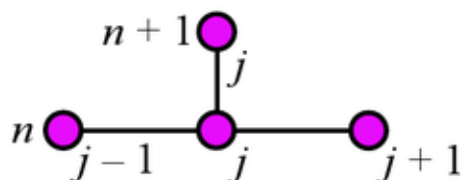
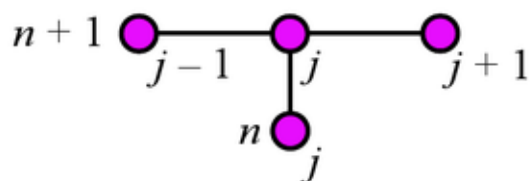
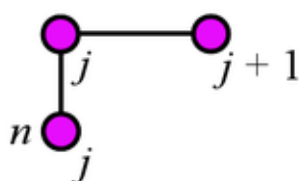


ФЕДЕРАЛЬНОЕ
АГЕНТСТВО
ПО ОБРАЗОВАНИЮ

им. Д. И. Менделеева

Э. М. Кольцова, А. С. Скичко, А. В. Женса

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ХИМИИ



Москва 2008

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева

Э. М. Кольцова, А. С. Скичко, А. В. Женса

**ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ
УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ И ХИМИИ**

Утверждено Редакционным
советом университета
в качестве учебного пособия

Москва 2008

УДК 519.62(075)
ББК 22.193
К62

Рецензенты:

Доктор химических наук, профессор
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
Е. А. Гудилин

Доктор технических наук, профессор Российского химико-технологического
университета им. Д. И. Менделеева
Е. А. Дмитриев

Кольцова Э. М.

К62 Численные методы решения уравнений математической физики и химии: учеб. пособие/ Э. М. Кольцова, А. С. Скичко, А. В. Женса. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2008. – 228 с.
ISBN 978-5-7237-0597-5

Изложены методы численного решения уравнений, описывающих процессы химической технологии, нефтехимии и биотехнологии, на основе разностных схем. Рассмотрены следующие разделы: аппроксимация дифференциальных операторов, методика построения разностных схем, устойчивость разностных схем, решение дифференциальных уравнений различных типов (уравнений в частных производных 1-го порядка, одномерных и многомерных уравнений параболического типа, уравнений эллиптического типа, обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го и 2-го порядков), решение интегро-дифференциальных уравнений, решение систем дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений. Изложены различные методы численного решения дифференциальных уравнений (решение с помощью рекуррентного соотношения, метод прогонки, метод дробных шагов и др.).

Предназначается для студентов вузов, обучающихся по направлениям 655400 "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" и 654700 "Информационные системы в химии и химической технологии".

УДК 519.62(075)
ББК 22.193

ISBN 978-5-7237-0597-5

© Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 2008
© Кольцова Э. М., Скичко А. С.,
Женса А. В., 2008

Оглавление

Введение	11
Глава 1. Предмет курса	13
1.1. Типы дифференциальных уравнений, изучаемых в курсе	13
1.2. Классификация дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка.....	14
1.3. Начальные и граничные условия.....	15
1.4. Классификация граничных условий.....	16
1.5. Примеры математических моделей, содержащих обыкновенные дифференциальные уравнения 1-го и 2-го порядков.....	17
1.6. Примеры математических моделей, содержащих дифференциальные уравнения в частных производных.....	19
1.7. Математическая модель процесса массовой кристаллизации из растворов – пример системы интегро-дифференциальных уравнений.....	21
Глава 2. Преобразование дифференциальной задачи в разностную ...	22
2.1. Метод приведения уравнений к безразмерному виду.....	22
2.2. Аппроксимация простейших дифференциальных операторов.....	25
2.2.1. Разностная аппроксимация производной первого порядка.....	25
2.2.2. Понятие порядка аппроксимации.....	27
2.2.3. Разностная аппроксимация производной второго порядка.....	28
2.3. Аппроксимация дифференциальных уравнений.....	29
2.3.1. Понятие разностной сетки.....	29
2.3.2. Понятие разностной схемы.....	31
2.3.3. Порядок аппроксимации разностной схемы.....	33
2.3.4. Аппроксимация начальных и граничных условий	34

Глава 3. Спектральный метод анализа устойчивости разностных схем.....	36
3.1. Понятия устойчивости разностных схем и сходимости решения разностной схемы к решению исходного дифференциального уравнения.....	36
3.2. Погрешность решения разностной схемы.....	37
3.3. Исследование устойчивости явной разностной схемы, аппроксимирующей дифференциальное уравнение параболического типа.....	40
3.4. Исследование устойчивости неявной разностной схемы, аппроксимирующей дифференциальное уравнение параболического типа.....	41
 Глава 4. Решение дифференциальных уравнений параболического типа.....	 43
4.1. Явная разностная схема.....	43
4.1.1. Характеристика явной разностной схемы.....	43
4.1.2. Метод решения явной разностной схемы.....	44
4.2. Неявная разностная схема.....	47
4.2.1. Характеристика неявной разностной схемы.....	47
4.2.2. Метод прогонки – метод решения неявной разностной схемы.....	48
4.3. Разностная схема Кранка–Николсона.....	55
4.3.1. Вывод разностной схемы Кранка–Николсона.....	55
4.3.2. Метод решения разностной схемы Кранка–Николсона.....	57
4.4. Разностная схема Саульева.....	58
4.4.1. Вывод разностной схемы Саульева.....	58
4.4.2. Метод решения разностной схемы Саульева.....	60
4.5. Сравнительная характеристика изученных разностных схем.....	64

Глава 5. Решение дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка.....	66
5.1. Примеры дифференциальных уравнений в частных производных 1-го порядка.....	66
5.2. Разностные схемы, аппроксимирующие дифференциальные уравнения в частных производных 1-го порядка.....	67
5.3. Явная разностная схема с аппроксимацией производной по координате правой конечной разностью.....	69
5.3.1. Исследование устойчивости.....	69
5.3.2. Метод решения.....	71
5.4. Явная разностная схема с аппроксимацией производной по координате левой конечной разностью.....	72
5.4.1. Исследование устойчивости.....	72
5.4.2. Метод решения.....	74
5.5. Неявная разностная схема с аппроксимацией производной по координате правой конечной разностью.....	75
5.5.1. Исследование устойчивости.....	75
5.5.2. Метод решения.....	77
5.6. Неявная разностная схема с аппроксимацией производной по координате левой конечной разностью.....	79
5.6.1. Исследование устойчивости.....	79
5.6.2. Метод решения.....	80
5.7. Влияние наличия искомой функции в составе свободного члена на устойчивость разностных схем.....	82
5.8. Сравнительная характеристика изученных разностных схем.....	83

Глава 6. Решение дифференциальных уравнений параболического типа, содержащих производную по координате первого порядка.....

	86
6.1. Постановка задачи.....	86
6.2. Явная разностная схема.....	87
6.2.1. Характеристика.....	87
6.2.2. Метод решения.....	89
6.3. Неявная разностная схема.....	90
6.3.1. Характеристика.....	90
6.3.2. Метод решения.....	92
6.4. Разностная схема Кранка–Николсона.....	92
6.5. Неявная разностная схема с аппроксимацией производной по координате первого порядка центральной конечной разностью...	94
6.5.1. Характеристика.....	94
6.5.2. Метод решения.....	95
6.6. Сравнительная характеристика изученных разностных схем.....	97

Глава 7. Решение двумерных дифференциальных уравнений параболического типа.....

	99
7.1. Примеры двумерных дифференциальных уравнений параболического типа.....	99
7.2. Разностная сетка для двумерных задач.....	100
7.3. Аппроксимация дифференциальных операторов.....	102
7.4. Явная разностная схема.....	103
7.4.1. Исследование устойчивости.....	103
7.4.2. Метод решения.....	105
7.5. Характеристика неявной разностной схемы.....	108
7.6. Схема расщепления.....	109

7.6.1. Методика записи уравнений схемы.....	109
7.6.2. Характеристика первой подсхемы.....	110
7.6.3. Характеристика второй подсхемы.....	112
7.6.4. Алгоритм решения.....	114
7.7. Схема переменных направлений.....	114
7.8. Схема со стабилизирующей поправкой.....	116
7.9. Схема предиктор-корректор.....	117
7.9.1. Методика записи уравнений схемы.....	117
7.9.2. Характеристика подсхем. Метод решения.....	119
7.10. Сравнительная характеристика изученных разностных схем.....	121

Глава 8. Решение двумерных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка.....

8.1. Явные разностные схемы.....	123
8.1.1. Характеристика.....	123
8.1.2. Исследование устойчивости.....	124
8.1.3. Метод решения.....	126
8.2. Неявные разностные схемы.....	128
8.2.1. Характеристика.....	128
8.2.2. Исследование устойчивости.....	129
8.2.3. Метод решения с использованием схемы расщепления.....	131
8.2.4. Метод решения с использованием схемы переменных направлений.....	133
8.2.5. Метод решения с использованием схемы предиктор-корректор.....	135
8.3. Сравнительная характеристика изученных разностных схем.....	137
8.4. Решение двумерных дифференциальных уравнений параболического типа, содержащих первые производные по координатам...	139

Глава 9. Решение трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа	143
9.1. Примеры трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа	143
9.2. Разностная сетка для трёхмерных задач	144
9.3. Аппроксимация дифференциальных операторов	146
9.4. Явная разностная схема	147
9.4.1. Исследование устойчивости	147
9.4.2. Метод решения	149
9.5. Характеристика неявной разностной схемы	150
9.6. Схема расщепления	152
9.6.1. Методика записи уравнений схемы	152
9.6.2. Характеристика первой подсхемы	153
9.6.3. Характеристика второй подсхемы	155
9.6.4. Характеристика третьей подсхемы	156
9.6.5. Алгоритм решения	157
9.7. Схема со стабилизирующей поправкой	159
9.8. Схема предиктор-корректор	160
9.8.1. Методика записи уравнений схемы	160
9.8.2. Характеристика подсхем. Метод решения	162
9.9. Сравнительная характеристика изученных разностных схем	164
9.10. Решение трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа, содержащих первые производные по координатам	166
 Глава 10. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка	 169
10.1. Анализ возможности использования метода прогонки	169
10.2. Метод установления	170

10.3. Метод установления с использованием явной разностной схемы.....	172
10.4. Метод установления с использованием неявной разностной схемы.....	174
10.5. Метод установления с использованием разностной схемы Кранка–Николсона.....	176
10.6. Обобщение изученных методов.....	177

Глава 11. Решение дифференциальных уравнений эллиптического типа.....

11.1. Примеры дифференциальных уравнений эллиптического типа..	180
11.2. Метод установления.....	181
11.3. Метод установления с использованием явной разностной схемы.....	182
11.4. Метод установления с использованием схемы расщепления.....	185
11.5. Метод установления с использованием схемы переменных направлений.....	186
11.6. Метод установления с использованием схемы предиктор-корректор.....	188
11.7. Обобщение изученных методов.....	189

Глава 12. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка.....

12.1. Явный метод Эйлера.....	193
12.2. Неявный метод Эйлера.....	194
12.3. Метод Рунге-Кутты второго порядка.....	195
12.4. Семейство методов Рунге-Кутты второго порядка.....	197
12.5. Семейство методов Рунге-Кутты m -го порядка.....	199
12.6. Решение уравнений методом Рунге-Кутты.....	201

Глава 13. Принцип замороженных коэффициентов.....	204
13.1. Уравнения с непостоянными коэффициентами при производных.....	204
13.1.1. Исследование устойчивости явных разностных схем.....	204
13.1.2. Правило записи неявных разностных схем.....	206
13.2. Уравнения с нелинейным свободным членом.....	208
Глава 14. Решение интегро-дифференциальных уравнений.....	210
14.1. Постановка задачи.....	210
14.2. Методы численного вычисления интегралов.....	211
14.3. Примеры численного решения интегро-дифференциальных уравнений.....	213
14.3.1. Решение уравнений математической модели процесса массовой кристаллизации.....	213
14.3.2. Решение уравнения, описывающего дробление включений.....	215
14.3.3. Решение уравнения, описывающего агрегацию включений.....	217
Глава 15. Решение сложных систем уравнений.....	219
15.1. Основной подход к решению сложных систем.....	219
15.2. Решение математической модели процесса массовой кристаллизации из растворов.....	220
15.3. Определение устойчивости разностных схем с помощью тестовых задач.....	223
15.3.1. Метод тестовых задач.....	223
15.3.2. Пример на построение тестовой задачи.....	225

Введение

Настоящее учебное пособие основано на материалах специального курса **"Численные методы решения уравнений математической физики и химии"**, читаемого студентам факультета кибернетики химико-технологических процессов Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева. В данном курсе изучаются методы численного решения дифференциальных уравнений на основе разностных схем.

подавляющее большинство математических моделей физико-химических и химико-технологических систем включают в себя дифференциальные уравнения, описывающие изменение важных параметров изучаемой системы (температуры, давления, концентрации и т.д.) во времени и пространстве. При решении задач математического моделирования очень часто требуется уметь решать эти уравнения. При этом лишь в единичных, наиболее простых случаях дифференциальные уравнения удаётся решить аналитически. Как правило, математические модели включают в себя сложные дифференциальные уравнения или их системы, не поддающиеся аналитическому решению. В этом случае пользуются численными методами решения дифференциальных уравнений, позволяющими найти численные значения искомого параметра при определённых значениях переменных (времени, координат).

Цель настоящего пособия – помочь читателю овладеть численными методами решения дифференциальных уравнений различного типа и их систем, научиться правильно составлять разностные схемы, проверять их сходимость к истинному решению, определять ошибку аппроксимации.

Для ознакомления с материалом излагаемого курса помимо данного учебного пособия также рекомендуются следующие книги:

1. Самарский А. А. Введение в численные методы: учеб. пособие / А. А. Самарский. – СПб.: Лань, 2005. – 288 с.

2. Самарский А. А. Теория разностных схем: учеб. пособие / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
3. Самарский А. А. Численные методы математической физики / А. А. Самарский, А. В. Гулин. – М.: Науч. мир, 2000. – 315 с.
4. Самарский А. А. Численные методы решения задач конвекции-диффузии / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич. – М.: УРСС, 2004. – 246 с.
5. Самарский А. А. Устойчивость разностных схем / А. А. Самарский, А. В. Гулин. – М.: УРСС, 2005. – 383 с.
6. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики / Г. И. Марчук. – М.: Наука, 1989. – 608 с.
7. Марчук Г. И. Методы расщепления / Г. И. Марчук. – М.: Наука, 1988. – 262 с.
8. Рябенский В. С. Введение в вычислительную математику: учеб. пособие / В. С. Рябенский. – М.: Физматлит, 2000. – 294 с.
9. Тихонов А. Н. Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М.: Изд-во МГУ, 2004. – 798 с.
10. Самарский А. А. Задачи и упражнения по численным методам / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич, Е. А. Самарская. – М.: Ком Книга, 2007. – 207 с.

Глава 1. Предмет курса

1.1. Типы дифференциальных уравнений, изучаемых в курсе

Для того чтобы правильно выбрать метод численного решения дифференциального уравнения, сначала необходимо определить, к какому типу оно относится. Принадлежность дифференциальных уравнений к тому или иному типу обычно определяют по двум критериям: наибольшему порядку производной и количеству независимых переменных (табл. 1).

Таблица 1

Типы дифференциальных уравнений

По количеству независимых переменных		По наибольшему порядку производной	
		1-го порядка	2-го порядка
Обыкновенные дифференциальные уравнения (искомая функция зависит от одной переменной – времени или координаты)	$u = f(t)$	$\frac{du}{dt} = f(t, u)$	
	$u = f(x)$	$\frac{du}{dx} = f(x, u)$	$\frac{d^2u}{dx^2} = f(x, u, u')$
Дифференциальные уравнения в частных производных (искомая функция может зависеть от двух и более переменных)	$u = f(t, x)$	$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = f(t, x, u)$	$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(t, x, u, u'_x)$
	$u = f(x, y)$	$\frac{\partial u}{\partial x} + a \frac{\partial u}{\partial y} = f(x, y, u)$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y, u, u'_x, u'_y)$
	$u = f(t, x, y, z)$	$\frac{\partial u}{\partial t} + a_x \frac{\partial u}{\partial x} + a_y \frac{\partial u}{\partial y} + a_z \frac{\partial u}{\partial z} = f(t, x, y, z, u)$	$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f(t, x, y, z, u, u'_x, u'_y, u'_z)$

При составлении таблицы были использованы обозначения, которые также будут применяться далее в ходе всего курса: u – искомая функция (концентрация, температура и т.д.); t – время (независимая переменная); x, y, z – пространственные координаты (независимые переменные); u'_i – частная производная функции u по i -й независимой переменной; a, σ – константы.

Если функция u зависит от одной пространственной координаты, то соответствующее дифференциальное уравнение называют **одномерным**, если от двух – **двумерным**, если от трёх – **трёхмерным**. Двумерные и трёхмерные дифференциальные уравнения также называют **многомерными**.

Дифференциальные уравнения 3-го и более высоких порядков в настоящем курсе не рассматриваются.

1.2. Классификация дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка

Дифференциальные уравнения в частных производных 2-го порядка не имеют единого метода численного решения. Поэтому следует рассмотреть их классификацию, позволяющую использовать единые методы для численного решения каждого из подтипов этих уравнений.

Общий вид дифференциального уравнения 2-го порядка в частных производных при условии, что искомая функция зависит от двух переменных, можно представить следующим образом:

$$a_{11} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2a_{12} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + a_{22} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y, u, u'_x, u'_y).$$

В зависимости от знака величины

$$D = a_{12}^2 - a_{11}a_{22} \quad (1.1)$$

дифференциальные уравнения в частных производных 2-го порядка относят к уравнениям:

при $D > 0$ – **гиперболического** типа,

при $D < 0$ – **эллиптического** типа,
 при $D = 0$ – **параболического** типа.

Принадлежность многомерных дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка к тому или иному типу определяют, руководствуясь следующими правилами.

1. Если в уравнении присутствуют производные 2-го порядка по всем независимым переменным и знаки перед ними одинаковые – то данное уравнение относят к уравнениям **эллиптического** типа, например:

$$\sigma_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = f(t, x, y, z, u, u'_x, u'_y, u'_z).$$

2. Если в уравнении отсутствует производная 2-го порядка хотя бы по одной из независимых переменных – то данное уравнение относят к уравнениям **параболического** типа, например:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f(t, x, y, z, u, u'_x, u'_y, u'_z).$$

1.3. Начальные и граничные условия

Для решения дифференциальных уравнений численными методами требуются дополнительные условия. Если искомая функция (концентрация, температура и т.д.) является функцией времени $u = u(t)$, то требуются **начальные условия**, характеризующие значение этой функции в момент времени, принятый за начальный:

$$u(t = 0) = u^0.$$

Если искомая функция также является функцией пространственных координат $u = u(t, x)$, то начальные условия характеризуют её распределение в пространстве в начальный момент времени:

$$u(t = 0, x) = u^0(x).$$

В последнем случае помимо начальных условий требуются ещё и **граничные условия**, характеризующие значение функции $u(t, x)$ на границе изучаемой системы с внешней средой для любого момента времени. Причём, если искомая функция является функцией нескольких пространственных координат, то необходимо задавать граничные условия по каждой из них. Количество граничных условий по каждой пространственной координате определяется порядком старшей производной функции u по этой координате в дифференциальном уравнении. Например, для решения многомерного уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a_x \frac{\partial u}{\partial x} + a_y \frac{\partial u}{\partial y} = \sigma_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f(t, x, y, z, u)$$

требуются: начальное условие, 2 граничных условия по координате x , 1 граничное условие по координате y , 2 граничных условия по координате z .

1.4. Классификация граничных условий

В различных физико-химических задачах граничные условия могут быть представлены в разном виде. Рассмотрим классификацию граничных условий на примере уравнения теплового баланса трубчатого реактора с продольным перемешиванием:

$$\rho C_T \left[\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial x} \right] = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Delta H w,$$

где w – скорость реакции; ΔH – тепловой эффект реакции; C_T , ρ , T – теплоёмкость, плотность и температура смеси в реакторе; v – линейная скорость потока; λ – коэффициент теплопроводности; x – координата по длине реактора.

Начальные условия для данного уравнения характеризуют распределение температуры по длине реактора в начальный момент времени:

$$T(t = 0, x) = T^0(x).$$

1) **Граничные условия 1-го рода** определяют температуры на границах реактора для любого момента времени:

$$T(t, x = 0) = \varphi_1(t), \quad T(t, x = l) = \varphi_2(t).$$

2) **Граничные условия 2-го рода** задают изменение температуры на границах реактора для любого момента времени:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x=0) = \varphi_1(t), \quad \frac{\partial T}{\partial x}(t, x=l) = \varphi_2(t).$$

3) **Граничные условия 3-го рода** определяют закон свободного теплообмена с окружающей средой на границах реактора для любого момента времени:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x=0) = \alpha \{T(t, x=0) - T_{cp}\},$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x=l) = \alpha \{T(t, x=l) - T_{cp}\}.$$

4) **Смешанные граничные условия** – если при постановке задачи используются граничные условия разных родов, например:

$$T(t, x=0) = \varphi_1(t),$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x=l) = \alpha \{T(t, x=l) - T_{cp}\},$$

где α – коэффициент теплоотдачи; l – длина реактора; T_{cp} – температура окружающей среды.

1.5. Примеры математических моделей, содержащих обыкновенные дифференциальные уравнения 1-го и 2-го порядков

Рассмотрим примеры математических моделей химических реакторов, в которых протекает простая необратимая реакция типа



Скорость такой реакции определяется по формуле:

$$w = kc^n,$$

где k – константа скорости химической реакции; c – концентрация вещества X.

1) Математическая модель проточного реактора идеального смешения включает материальный и тепловой балансы, соответственно, по концентрации компонента X и температуре:

$$V \frac{dc}{dt} = v_q (c_0 - c) - wV, \quad V \rho C_T \frac{dT}{dt} = v_q (\rho_0 C_{T0} T_0 - \rho C_T T) + \Delta H wV,$$

где v_q – объёмный расход поступающего раствора; ΔH – тепловой эффект реакции; V – рабочий объём реактора; C_T , ρ , T – теплоёмкость, плотность и температура смеси в реакторе; индекс (0) означает значение параметра на входе в реактор.

Таким образом, математическая модель состоит из двух обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го порядка, которые необходимо дополнить начальными условиями (задача Коши):

$$c(t=0) = c^0, \quad T(t=0) = T^0.$$

2) Математическая модель трубчатого реактора (идеального вытеснения) в стационарном режиме имеет вид:

$$v \frac{dc}{dx} = -w, \quad v \rho C_T \frac{dT}{dx} = \Delta H w,$$

где v – линейная скорость потока; x – координата по длине реактора.

Данная математическая модель также состоит из двух обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го порядка, которые необходимо дополнить граничными условиями:

$$c(x=0) = c_0, \quad T(x=0) = T_0.$$

3) Математическая модель трубчатого реактора с продольным перемешиванием в стационарном режиме имеет вид:

$$v \frac{dc}{dx} = D_L \frac{d^2 c}{dx^2} - w, \quad v \rho C_T \frac{dT}{dx} = \lambda \frac{d^2 T}{dx^2} + \Delta H w,$$

где D_L , λ – коэффициенты диффузии и теплопроводности.

Данная математическая модель состоит из двух обыкновенных дифференциальных уравнений 2-го порядка, которые необходимо дополнить граничными условиями:

$$\begin{cases} c(x=0) = c_0 \\ c(x=l) = c_l \end{cases} \quad \begin{cases} T(x=0) = T_0 \\ T(x=l) = T_l \end{cases}$$

Здесь l – длина реактора.

1.6. Примеры математических моделей, содержащих дифференциальные уравнения в частных производных

Рассмотрим ещё несколько примеров математических моделей химических реакторов, в которых протекает простая необратимая реакция типа



4) Математическая модель (материальный баланс по концентрации компонента X) трубчатого реактора в нестационарном режиме имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = -w.$$

Концентрация компонента X является функцией двух переменных:

$$c = c(t, x).$$

Данное уравнение необходимо дополнить начальным и граничным условиями:

$$c(t = 0, x) = c^0(x), \quad c(t, x = 0) = \varphi(t).$$

5) Математическая модель трубчатого реактора с продольным перемешиванием в нестационарном режиме имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - w.$$

Концентрация компонента X является функцией двух переменных:

$$c = c(t, x).$$

Определим тип данного уравнения с помощью выражения (1.1):

$$a_{11} = D_L, \quad a_{22} = 0, \quad a_{12} = 0 \quad \Rightarrow \quad D = 0 - D_L \cdot 0 = 0.$$

Следовательно, данное уравнение является уравнением параболического типа.

Его необходимо дополнить начальным и двумя граничными условиями:

$$c(t = 0, x) = c^0(x), \quad c(t, x = 0) = \varphi_1(t), \quad c(t, x = l) = \varphi_2(t).$$

6) Математическая модель трубчатого реактора с продольным и поперечным перемешиванием в нестационарном режиме имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_R \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D_R}{r} \frac{\partial c}{\partial r} - w,$$

где r – координата по радиусу реактора; D_L , D_R – коэффициенты диффузии в продольном и поперечном направлениях.

Данное уравнение является многомерным, поскольку концентрация компонента X – функция трёх переменных:

$$c = c(t, x, r).$$

Так как отсутствует производная 2-го порядка по времени, данное уравнение является уравнением параболического типа. Его необходимо дополнить начальным и граничными условиями:

$$c(t = 0, x, r) = c^0(x, r)$$

$$\begin{cases} c(t, x = 0, r) = \varphi_1(t, r) \\ c(t, x = l, r) = \varphi_2(t, r) \end{cases} \quad \begin{cases} c(t, x, r = 0) = \psi_1(t, x) \\ c(t, x, r = R) = \psi_2(t, x) \end{cases}$$

Здесь R – радиус реактора.

7) Математическая модель трубчатого реактора с продольным и поперечным перемешиванием в стационарном режиме имеет вид:

$$v \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_R \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D_R}{r} \frac{\partial c}{\partial r} - w.$$

Концентрация компонента X в данном случае – функция двух переменных:

$$c = c(x, r).$$

Определим тип данного уравнения с помощью выражения (1.1):

$$a_{11} = D_L, \quad a_{22} = D_R, \quad a_{12} = 0 \quad \Rightarrow \quad D = 0 - D_L \cdot D_R < 0.$$

Следовательно, данное уравнение является уравнением эллиптического типа.

Его необходимо дополнить граничными условиями:

$$\begin{cases} c(t, x = 0, r) = \varphi_1(t, r) \\ c(t, x = l, r) = \varphi_2(t, r) \end{cases} \quad \begin{cases} c(t, x, r = 0) = \psi_1(t, x) \\ c(t, x, r = R) = \psi_2(t, x) \end{cases}$$

1.7. Математическая модель процесса массовой кристаллизации из растворов – пример системы интегро-дифференциальных уравнений

Математические модели некоторых физико-химических процессов помимо дифференциальных уравнений содержат ещё и интегро-дифференциальные уравнения. Примером может служить математическая модель процесса массовой кристаллизации из растворов:

$$\begin{aligned}\frac{dc}{dt} &= - \int_0^R \rho_2^0 f \eta dr, \\ \rho C_T \frac{dT}{dt} &= \Delta H \int_0^R \rho_2^0 f \eta dr + K F (T - T_x), \\ \frac{\partial f}{\partial t} + \eta \frac{\partial f}{\partial r} &= 0,\end{aligned}$$

где c – концентрация кристаллизующегося компонента; ρ_2^0 – плотность кристалла; η – скорость роста кристалла; $f(r) dr$ – число кристаллов в единице объёма смеси с размером от r до $r + dr$; r – объём кристалла; R – наибольший объём кристалла; C_T , ρ , T – теплоёмкость, плотность и температура смеси в кристаллизаторе; ΔH – тепловой эффект процесса; K – коэффициент теплопередачи; F – поверхность кристаллизатора; T_x – температура хладагента.

Первые два уравнения системы (*материальный и тепловой балансы*) являются интегро-дифференциальными уравнениями, а третье (*уравнение баланса числа частиц*) – дифференциальным уравнением в частных производных 1-го порядка.

Для этой системы требуются следующие начальные и граничные условия:

$$c(t=0) = c^0, \quad T(t=0) = T^0, \quad f(t=0, r) = f^0(r), \quad f(t, r=r_0) = \varphi(t),$$

где r_0 – размер зародыша.

Глава 2. Преобразование дифференциальной задачи в разностную

2.1. Метод приведения уравнений к безразмерному виду

Безразмерные переменные и необходимость их использования

Значения параметров, получаемые с помощью методов численного решения дифференциальных уравнений, будут отличаться от их истинных значений из-за наличия ошибки аппроксимации. Поэтому алгоритмы решения уравнений математических моделей, изучаемые в данном пособии, могут оказаться непригодными, если уравнения модели содержат переменные, значения которых отличаются по порядкам. Так, погрешности при определении параметров, порядки которых велики, могут быть не значимы для них самих, но в то же время они будут сильно искажать значения параметров меньших порядков. Поэтому прежде чем перейти к созданию алгоритма для решения уравнений математической модели, необходимо привести эти уравнения к безразмерному виду, т.е. провести операцию *обезразмеривания переменных*, в результате которой все переменные математической модели будут иметь одинаковый порядок.

Рассмотрим процедуру обезразмеривания на примере математической модели процесса кристаллизации, протекающего в ёмкостном периодическом реакторе идеального смешения:

$$\frac{dc}{dt} = - \int_0^R \rho_2^0 f \eta dr, \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \eta \frac{\partial f}{\partial r} = 0, \quad (2.1)$$

где c – объёмная концентрация кристаллизующегося компонента; ρ_2^0 – плотность кристалла; η – скорость роста кристалла; $f(r) dr$ – число кристаллов в единице объёма смеси с размером (объёмом) от r до $r + dr$; R – наибольший объём кристалла.

Безразмерные переменные вводятся с помощью соотношений:

$$c' = \frac{c}{c_0}, \quad t' = \frac{t}{t_0}, \quad r' = \frac{r}{r_0}, \quad \eta' = \frac{\eta}{\eta_0}, \quad f' = \frac{f}{f_0}, \quad \rho_2'^0 = \frac{\rho_2^0}{\rho_0},$$

где переменные с индексом (0) соответствуют характерным параметрам процесса.

Как правило, могут быть известны лишь некоторые характерные параметры процесса, например, в данном случае это характерное время процесса (t_0), характерный размер кристалла (r_0) и характерная концентрация кристаллизующегося компонента в растворе (c_0). Кроме этого, обычно принимают равенство:

$$\rho_0 = c_0,$$

поскольку в модели (2.1) плотность и концентрация имеют одинаковую размерность. Однако характерную скорость роста кристаллов (η_0) и характерное значение плотности функции распределения кристаллов по размерам (f_0) непосредственно измерить невозможно. Их значения определяют из безразмерных комплексов характерных параметров согласно методике, рассмотренной ниже.

Методика определения неизвестных характерных параметров процесса

Рассмотрим методику определения неизвестных характерных параметров. Для этого выразим переменные математической модели через характерные и безразмерные значения:

$$c = c' \cdot c_0, \quad t = t' \cdot t_0, \quad r = r' \cdot r_0, \quad \eta = \eta' \cdot \eta_0, \quad f = f' \cdot f_0, \quad \rho_2^0 = \rho_2'^0 \cdot c_0.$$

Затем подставим их в исходную систему уравнений (2.1):

$$\begin{aligned} \frac{c_0}{t_0} \frac{dc'}{dt'} &= -c_0 f_0 \eta_0 r_0 \int_0^R \rho_2'^0 f' \eta' dr', \\ \frac{f_0}{t_0} \frac{\partial f'}{\partial t'} + \frac{f_0 \eta_0}{r_0} \eta' \frac{\partial f'}{\partial r'} &= 0. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Рассмотрим второе уравнение в системе (2.2), которое после несложных преобразований можно представить в виде:

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + \frac{t_0 \eta_0}{r_0} \eta' \frac{\partial f'}{\partial r'} = 0.$$

Для того чтобы полученное обезразмеренное уравнение совпало с исходным, комплекс характерных параметров, стоящий перед вторым слагаемым, необходимо приравнять единице:

$$\frac{t_0 \eta_0}{r_0} = 1.$$

Следовательно, характерное значение скорости роста кристаллов определяется по формуле:

$$\eta_0 = \frac{r_0}{t_0}. \quad (2.3)$$

Рассмотрим теперь первое уравнение в системе (2.2), которое после несложных преобразований можно привести к виду:

$$\frac{dc'}{dt'} = -t_0 f_0 \eta_0 r_0 \int_0^R \rho_2'^0 f' \eta' dr'.$$

Для того чтобы полученное обезразмеренное уравнение совпало с исходным, комплекс характерных параметров, стоящий перед интегралом в правой части уравнения, необходимо приравнять единице:

$$t_0 f_0 \eta_0 r_0 = 1.$$

Отсюда, используя соотношение (2.3), получаем характерное значение плотности функции распределения кристаллов по размерам:

$$f_0 = \frac{1}{t_0 r_0 \eta_0} = \frac{1}{t_0 r_0 \frac{r_0}{t_0}} = \frac{1}{r_0^2}. \quad (2.4)$$

Таким образом, если характерные значения скорости роста кристаллов и плотности функции распределения кристаллов по размерам соответствуют выражениям (2.3), (2.4), то оба уравнения в системе (2.2) полностью совпадают с исходными уравнениями математической модели процесса кристаллизации (2.1). Однако порядки переменных в уравнениях системы (2.1) различны (например, функция f имеет порядок $\sim 10^{20}$, а $\eta - \sim 10^{-10}$), вследствие чего расчётные

ошибки при определении функции f , не значимые для неё самой, могут привести к сильным искажениям значений η . В то же время при численном решении уравнений системы (2.2) этого не произойдёт, так как все переменные в них имеют одинаковый порядок.

2.2. Аппроксимация простейших дифференциальных операторов

2.2.1. Разностная аппроксимация производной первого порядка

В основе методов численного решения дифференциальных уравнений, изучаемых в настоящем учебном пособии, лежит преобразование дифференциальной задачи в разностную задачу, называемое **аппроксимацией**. Однако прежде, чем перейти к проблемам аппроксимации дифференциальных уравнений, рассмотрим аппроксимацию простейших дифференциальных операторов, т.е. производных первого и второго порядков.

Рассмотрим функцию одной переменной $u = u(x)$, для которой задан интервал изменения $x \in [a, b]$. Разобьём интервал $[a, b]$ на n равных частей (рис. 2.1).

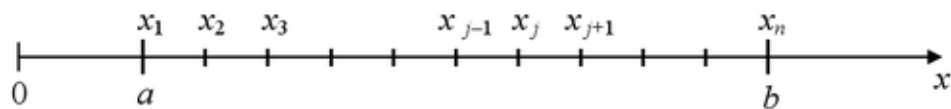


Рис. 2.1. Разбиение интервала изменения переменной x

Введём следующие обозначения:

j – порядковый номер точки деления;

$u(x_j) = u_j$ – значение функции $u(x)$ в точке x_j ;

$x_{j+1} - x_j = \Delta x = h$ – величина интервала между точками.

Введём понятие **нормы функции** $u(x_j)$ с помощью соотношения:

$$\|u\| = \left[h \sum_{j=1}^n u_j^2 \right]^{1/2}.$$

Норма функции $u(x_j)$ обладает следующими свойствами:

1. $\|u\| \geq 0$;
2. $\|cu\| = |c| \cdot \|u\|$, $c - \text{const}$;
3. $\|u + v\| = \|u\| + \|v\|$.

Рассмотрим производную функции $u(x)$ в точке x_j :

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_j}.$$

Аппроксимация этой производной может быть введена с помощью следующих разностных операторов:

- с помощью **правой конечной разности**

$$\lambda_x^+ u = \frac{u_{j+1} - u_j}{h}; \quad (2.5)$$

- с помощью **левой конечной разности**

$$\lambda_x^- u = \frac{u_j - u_{j-1}}{h}; \quad (2.6)$$

- с помощью **центральной конечной разности**

$$\lambda_x^0 u = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h}. \quad (2.7)$$

Кроме того, разностную аппроксимацию производной первого порядка можно задать в виде линейной комбинации выражений (2.5) и (2.6):

$$\lambda_x^\sigma u = \sigma \frac{u_{j+1} - u_j}{h} + (1 - \sigma) \frac{u_j - u_{j-1}}{h}, \quad (2.8)$$

где $0 \leq \sigma \leq 1$.

Видно, что при $\sigma = 0$ выражение (2.8) становится левой конечной разностью, при $\sigma = 1$ – правой конечной разностью, при $\sigma = 1/2$ – центральной конечной разностью.

2.2.2. Понятие порядка аппроксимации

Выясним, с какой точностью конечные разности (2.5), (2.6), (2.7) аппроксимируют значение производной функции $u(x)$ в точке x_j . Для этого разложим значения u_{j+1} , u_{j-1} в ряд Тейлора относительно точки x_j :

$$u_{j+1} = u_j + u'_j h + u''_j \frac{h^2}{2!} + u'''_j \frac{h^3}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^4}{4!} + \dots, \quad (2.9)$$

$$u_{j-1} = u_j - u'_j h + u''_j \frac{h^2}{2!} - u'''_j \frac{h^3}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^4}{4!} - \dots \quad (2.10)$$

Подставляя выражение (2.9) в правую конечную разность (2.5), получаем:

$$\lambda_x^+ u = \frac{u_{j+1} - u_j}{h} = u'_j + u''_j \frac{h}{2!} + u'''_j \frac{h^2}{3!} + u^{IV}_j \frac{h^3}{4!} + \dots \quad (2.11)$$

Первое слагаемое в правой части выражения (2.11) является производной функции $u(x)$ в точке x_j , а все остальные составляют так называемую **ошибку аппроксимации**, показывающую насколько значение производной функции $u(x)$ в точке x_j , определяемое с помощью разностного оператора, аппроксимирующего эту производную, отличается от её истинного значения.

Так как производные любых порядков функции $u(x)$ ограничены в точках интервала $[a, b]$, при $h \rightarrow 0$ наиболее существенный вклад в ошибку аппроксимации вносит слагаемое, в котором порядок h наименьший. На основании этого говорят, что рассматриваемая конечная разность имеет **порядок аппроксимации** по h , соответствующий этой наименьшей степени h в выражении для ошибки аппроксимации.

Таким образом, понятие "**порядок аппроксимации**" характеризует точность, с которой разностный оператор аппроксимирует производную функции $u(x)$ в точке x_j : чем выше порядок аппроксимации, тем точнее аппроксимация и, соответственно, меньше её ошибка.

В случае правой конечной разности наибольший вклад в ошибку аппроксимации вносит второе слагаемое в правой части выражения (2.11) и, следова-

тельно, *правая конечная разность имеет первый порядок аппроксимации*, что записывается в виде:

$$\lambda_x^+ u = u'_j + O(h).$$

Подставляя выражение (2.10) в левую конечную разность (2.6), получаем:

$$\lambda_x^- u = \frac{u_j - u_{j-1}}{h} = u'_j - u''_j \frac{h}{2!} + u'''_j \frac{h^2}{3!} - u^{IV}_j \frac{h^3}{4!} + \dots = u'_j + O(h).$$

Таким образом, *левая конечная разность также имеет первый порядок аппроксимации*.

Подставляя выражения (2.9), (2.10) в центральную конечную разность (2.7), получаем:

$$\lambda_x^0 u = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} = u'_j + u'''_j \frac{h^2}{3!} + \dots = u'_j + O(h^2).$$

Видно, что *центральная конечная разность имеет второй порядок аппроксимации* и, следовательно, значение производной функции $u(x)$ в точке x_j , полученное при использовании центральной конечной разности, будет ближе к истинному значению, чем при использовании правой или левой конечных разностей.

2.2.3. Разностная аппроксимация производной второго порядка

Рассмотрим вторую производную функции $u(x)$ в точке x_j :

$$\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{x_j}.$$

Поскольку первая производная функции $u(x)$ является некоторой функцией $w(x)$ от той же независимой переменной x , что и сама функция $u(x)$, тогда вторую производную функции $u(x)$ можно представить как первую производную функции $w(x)$:

$$\frac{du}{dx} = w(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2u}{dx^2} = \frac{dw}{dx}.$$

Аппроксимируя производную функции $w(x)$ в точке x_j правой конечной разностью (2.5), получаем:

$$\left. \frac{dw}{dx} \right|_{x_j} \rightarrow \frac{w_{j+1} - w_j}{h} = \frac{\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_{j+1}} - \left. \frac{du}{dx} \right|_{x_j}}{h}.$$

Используя для аппроксимации производной функции $u(x)$ левую конечную разность (2.6), **разностный оператор для аппроксимации второй производной** функции $u(x)$ в точке x_j можно представить в следующем виде:

$$\left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x_j} \rightarrow \lambda_{xx}u = \frac{\frac{u_{j+1} - u_j}{h} - \frac{u_j - u_{j-1}}{h}}{h} = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2}. \quad (2.12)$$

Определим порядок аппроксимации полученного разностного оператора. Подставляя соотношения (2.9), (2.10) в (2.12), получаем:

$$\lambda_{xx}u = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = \frac{2u_j'' \frac{h^2}{2!} + 2u_j^{IV} \frac{h^4}{4!}}{h^2} = u_j'' + u_j^{IV} \frac{h^2}{12} = u_j'' + O(h^2).$$

Таким образом, разностный оператор (2.12), аппроксимирующий вторую производную функции $u(x)$ в точке x_j , имеет второй порядок аппроксимации.

2.3. Аппроксимация дифференциальных уравнений

2.3.1. Понятие разностной сетки

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, t, x). \quad (2.13)$$

Здесь u — функция двух независимых переменных:

$$u = u(t, x),$$

для которых задан интервал их изменения:

$$t \in [0; t_k], \quad x \in [a; b].$$

Введём двумерную систему координат, отложив по оси абсцисс независимую переменную x , а по оси ординат – независимую переменную t , и отметим на осях заданные интервалы изменения переменных x и t . Разобьём интервал $[a; b]$ на некоторое количество равных частей и проведём из каждой точки деления прямую, перпендикулярную оси x . Выполним те же действия для интервала изменения другой независимой переменной. Тогда построенные прямые составят так называемую **разностную сетку** (рис. 2.2). Точки пересечения проведённых прямых будем называть **узлами разностной сетки**, причём каждый из них будет соответствовать некоторым значениям независимых переменных x и t из заданных интервалов.

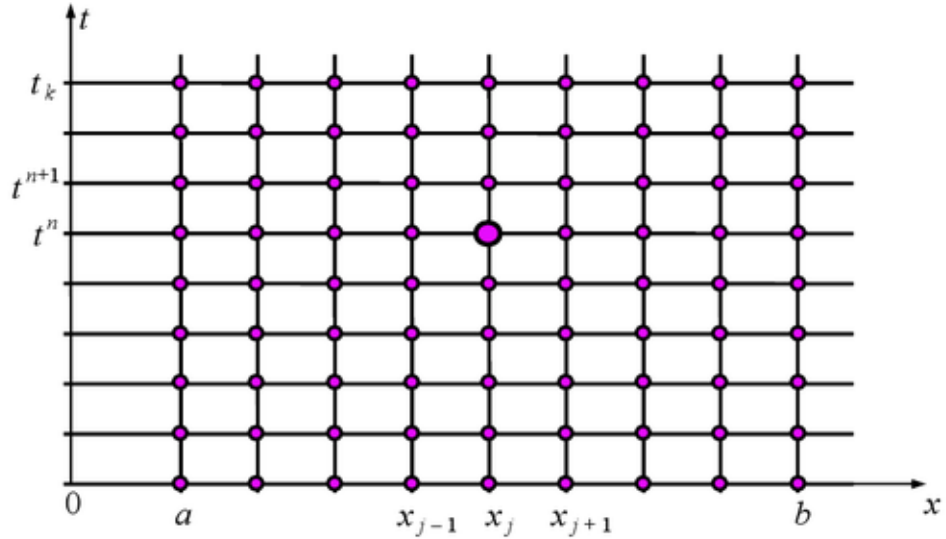


Рис. 2.2. Разностная сетка для функции двух независимых переменных
(для одномерной нестационарной задачи)

Введём следующие обозначения:

j – порядковый номер точки деления по оси x ;

n – порядковый номер точки деления по оси t ;

$x_{j+1} - x_j = \Delta x = h$ – величина интервала между точками по оси x ;

$t^{n+1} - t^n = \Delta t$ – величина интервала между точками по оси t ;

$u(t^n, x_j) = u_j^n$ – значение функции $u(t, x)$, соответствующее точкам t^n, x_j .

Введём нумерацию точек разностной сетки по каждой из осей следующим образом:

по оси x – $j = 1, 2, 3, \dots, N$;

по оси t – $n = 0, 1, 2, \dots, M$.

2.3.2. Понятие разностной схемы

Рассмотрим производные в уравнении (2.13) в точке (t^n, x_j) на разностной сетке.

Для аппроксимации производной функции $u(t, x)$ по времени будем использовать правую конечную разность, стабилизируя при этом значение независимой переменной x в точке с порядковым номером j :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t^n, x_j} \rightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}.$$

Для аппроксимации второй производной функции $u(t, x)$ по координате будем использовать разностный оператор (2.12), стабилизируя при этом значение независимой переменной t в точке с порядковым номером n (или, иначе говоря, на n -м шаге):

$$\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{t^n, x_j} \rightarrow \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}.$$

Если подставить записанные конечные разности в исходное дифференциальное уравнение (2.13), получим соотношение, аппроксимирующее это диффе-

ренциальное уравнение в точке (t^n, x_j) на разностной сетке, и называемое **разностной схемой**:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(u_j^n, t^n, x_j). \quad (2.14)$$

В записанной разностной схеме (2.14) аппроксимация второй производной функции $u(t, x)$ по координате рассматривается на n -м шаге по времени, то есть относительно точки t^n , для которой рассматривается аппроксимация всего уравнения. Такая разностная схема называется **явной**.

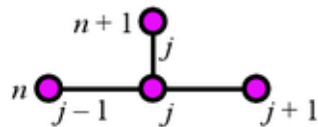
Однако аппроксимацию второй производной функции $u(t, x)$ по координате можно рассматривать и на $(n+1)$ -м шаге по времени, в точке t^{n+1} , такая разностная схема называется **неявной**:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(u_j^{n+1}, t^n, x_j). \quad (2.15)$$

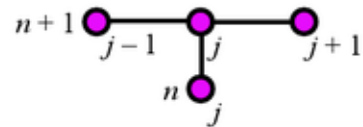
Отметим, что если в состав свободного члена входит сама функция $u(t, x)$, то её значение должно соответствовать n -му шагу по времени при составлении явной разностной схемы и $(n+1)$ -му шагу по времени при составлении неявной разностной схемы.

Схематическое изображение узлов разностной сетки, связанных уравнением разностной схемы, называют **разностным шаблоном**. Разностный шаблон может служить хорошим ориентиром при выборе метода решения разностной схемы и составлении алгоритма решения. Разностные шаблоны для разностных схем (2.14) и (2.15) имеют вид:

для явной разностной схемы



для неявной разностной схемы



В дальнейшем мы неоднократно будем сопоставлять возможности и методы решения явных и неявных разностных схем для дифференциальных уравнений различного типа.

2.3.3. Порядок аппроксимации разностной схемы

Мы ввели понятие разностной схемы путём составления её из отдельных разностных операторов. Напомним, что каждый разностный оператор имеет определённый порядок аппроксимации, характеризующий точность аппроксимации. Следовательно, разностная схема также будет иметь порядок аппроксимации, причём по каждой независимой переменной отдельно.

Определим порядок аппроксимации явной разностной схемы (2.14). Для этого запишем разложение значений u_j^{n+1} , u_{j+1}^n , u_{j-1}^n в ряд Тейлора относительно точки (t^n, x_j) на разностной сетке:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_j^n (\Delta t)^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \Big|_j^n (\Delta t)^3 + \dots, \quad (2.16)$$

$$u_{j+1}^n = u_j^n + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_j^n h + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n h^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_j^n h^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_j^n h^4 + \dots, \quad (2.17)$$

$$u_{j-1}^n = u_j^n - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_j^n h + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n h^2 - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_j^n h^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_j^n h^4 - \dots \quad (2.18)$$

Подставляя зависимости (2.16)–(2.18) в разностную схему (2.14), получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_j^n \Delta t + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \Big|_j^n (\Delta t)^2 &= \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_j^n h^2 \right) + f(u_j^n, t^n, x_j) \\ \Rightarrow \quad \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n + O(\Delta t) &= \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n + O(h^2) + f(u_j^n, t^n, x_j). \end{aligned}$$

Таким образом, явная разностная схема (2.14) аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение (2.13) с первым порядком по времени и со вторым порядком по координате, что записывается в следующем виде:

$$O(\Delta t) + O(h^2) \quad \text{или} \quad O(\Delta t, h^2).$$

Легко видеть, что и неявная разностная схема (2.15) имеет тот же порядок аппроксимации.

2.3.4. Аппроксимация начальных и граничных условий

Для решения дифференциальных уравнений численными методами требуются начальные и граничные условия. Рассмотрим, как эти условия следует представлять в разностном виде.

1. Для подавляющего большинства задач начальное условие имеет вид:

$$u(t=0, x) = \xi(x).$$

Левая часть данного выражения соответствует нижнему ряду точек на разностной сетке, поэтому с учётом введённой ранее нумерации точек начальное условие в разностном виде записывается следующим образом:

$$u_j^0 = \xi(x_j),$$

причём значение x_j вычисляется согласно правилу:

$$x_1 = a, \quad x_2 = a + h, \quad x_3 = a + 2h, \quad \dots, \quad x_j = a + (j-1)h.$$

Отметим, что если $a = 0$, то

$$x_1 = 0, \quad x_2 = h, \quad x_3 = 2h, \quad \dots, \quad x_j = (j-1)h. \quad (2.19)$$

2. Граничные условия 1-го рода имеют вид:

$$u(t, x=a) = \varphi_1(t), \quad u(t, x=b) = \varphi_2(t).$$

Левая часть левого граничного условия соответствует крайнему слева ряду точек на разностной сетке; левая часть правого граничного условия – крайнему справа ряду точек. Поэтому с учётом введённой ранее нумерации точек граничные условия 1-го рода в разностном виде записываются следующим образом:

$$u_1^n = \varphi_1(t^n), \quad u_N^n = \varphi_2(t^n), \quad (2.20)$$

причём значение t^n вычисляется согласно правилу:

$$t^0 = 0, \quad t^1 = \Delta t, \quad t^2 = 2\Delta t, \quad \dots, \quad t^n = n \cdot \Delta t. \quad (2.21)$$

3. Граничные условия 2-го рода имеют вид:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x=a) = \varphi_1(t), \quad \frac{\partial u}{\partial x}(t, x=b) = \varphi_2(t).$$

Левая часть левого граничного условия в некоторой точке t^n аппроксимируется крайней слева конечной разностью на разностной сетке; левая часть правого граничного условия – крайней справа конечной разностью. Поэтому с учётом введённой ранее нумерации точек граничные условия 2-го рода в разностном виде записываются следующим образом:

$$\frac{u_2^n - u_1^n}{h} = \varphi_1(t^n), \quad \frac{u_N^n - u_{N-1}^n}{h} = \varphi_2(t^n). \quad (2.22)$$

4. Граничные условия 3-го рода можно записать в следующем обобщённом виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}(t, x=a) &= \varphi_1(t)u(t, x=a) + \psi_1(t), \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, x=b) &= \varphi_2(t)u(t, x=b) + \psi_2(t). \end{aligned}$$

Левая часть левого граничного условия в некоторой точке t^n аппроксимируется крайней слева конечной разностью на разностной сетке, а выражение в правой части соответствует крайней слева точке; левая часть правого граничного условия аппроксимируется крайней справа конечной разностью, а выражение в правой части соответствует крайней справа точке. Поэтому граничные условия 3-го рода в разностном виде записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{u_2^n - u_1^n}{h} &= \varphi_1(t^n)u_1^n + \psi_1(t^n), \\ \frac{u_N^n - u_{N-1}^n}{h} &= \varphi_2(t^n)u_N^n + \psi_2(t^n). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Глава 3. Спектральный метод анализа устойчивости разностных схем

3.1. Понятия устойчивости разностных схем и сходимости решения разностной схемы к решению исходного дифференциального уравнения

При численном решении дифференциальных уравнений неизбежно возникают ошибки, приводящие к некоторому отличию результатов численного решения от истинных значений искомой функции, причём существует два типа источников этих ошибок. Как уже отмечалось в разделе 2.2.2, одним источником ошибок является аппроксимация дифференциальных операторов, т.е. замена производных в исходных дифференциальных уравнениях конечными разностями. Другой источник ошибок связан с погрешностью вычислений. Ошибки могут возникать при неточности вычислений самой разностной схемы, начальных и граничных условий, а также в свободном члене в правой части уравнения. В зависимости от особенностей вычислительного алгоритма эти ошибки в процессе расчёта могут затухать или возрастать. Если накопления ошибок не происходит, то говорят, что разностная схема **устойчива**, если же ошибки увеличиваются, то – **неустойчива**.

Запишем дифференциальную краевую задачу в виде свёртки:

$$L u = f, \quad (3.1)$$

где L – дифференциальный оператор; u – искомая функция; f – правая часть дифференциального уравнения.

Тогда разностную схему кратко можно представить в следующем виде:

$$L_h u^{(h)} = f^{(h)}, \quad (3.2)$$

где L_h – разностный оператор, действующий на сеточную функцию $u^{(h)}$, являющуюся результатом решения разностной задачи; $f^{(h)}$ – проекция на разностную сетку непрерывной функции f .

Теорема 1. Разностная схема (3.2) с линейным оператором L_h устойчива, если при любом $f^{(h)} \in F_h$ уравнение (3.2) имеет единственное решение $u^{(h)} \in U_h$ и выполняется условие:

$$\|u^{(h)}\| \leq c \|f^{(h)}\|,$$

где c – константа; U_h – множество решений; F_h – множество правых частей.

Теорема 2. Пусть разностная схема (3.2) аппроксимирует дифференциальное уравнение (3.1) с порядком аппроксимации $O(h^k)$ и является устойчивой. Тогда решение разностной задачи (3.2) $u^{(h)}$ сходится к решению исходной дифференциальной задачи (3.1) $[u]_h$ и имеет место неравенство:

$$\|[u]_h - u^{(h)}\| \leq M h^k,$$

где M – константа; $[u]_h$ – решение уравнения (3.1) в узлах сетки.

Таким образом, *сходимость решения разностной схемы к решению исходного уравнения* имеет место только при выполнении двух требований:

- 1) разностная схема должна аппроксимировать исходное уравнение;
- 2) разностная схема должна быть устойчива.

3.2. Погрешность решения разностной схемы

В настоящем учебном пособии изучается два метода, позволяющих исследовать устойчивость разностных схем. Первый из них называется **гармоническим** или **спектральным** методом анализа разностных схем. Второй – **метод тестовых задач** – будет описан в конце курса.

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа, свободный член которого не включает искомую функцию $u(t, x)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(t, x). \quad (3.3)$$

Запишем для него явную разностную схему:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (3.4)$$

Погрешность решения разностной схемы (3.4) в точке (t^n, x_j) можно представить с помощью соотношения:

$$z_j^n = u_j^n - [u(t^n, x_j)].$$

Здесь u_j^n – решение разностной схемы (3.4) в точке (t^n, x_j) ; $[u(t^n, x_j)]$ – истинное решение исходного дифференциального уравнения (3.3) в точке (t^n, x_j) . Выражая из данного соотношения u_j^n и подставляя в разностную схему (3.4), получаем:

$$\begin{aligned} \frac{z_j^{n+1} - z_j^n}{\Delta t} + \frac{[u(t^{n+1}, x_j)] - [u(t^n, x_j)]}{\Delta t} &= \sigma \frac{z_{j+1}^n - 2z_j^n + z_{j-1}^n}{h^2} + \\ &+ \sigma \frac{[u(t^n, x_{j+1})] - 2[u(t^n, x_j)] + [u(t^n, x_{j-1})]}{h^2} + f(t^n, x_j). \end{aligned}$$

В разделе 2.3.3 было доказано, что разностная схема (3.4) имеет порядок аппроксимации:

$$O(\Delta t) + O(h^2).$$

Следовательно, имеет место следующее равенство:

$$\begin{aligned} \frac{[u(t^{n+1}, x_j)] - [u(t^n, x_j)]}{\Delta t} &= \sigma \frac{[u(t^n, x_{j+1})] - 2[u(t^n, x_j)] + [u(t^n, x_{j-1})]}{h^2} + \\ &+ f(t^n, x_j) + O(\Delta t) + O(h^2). \end{aligned}$$

С учётом данного выражения получаем разностную схему для погрешности решения:

$$\frac{z_j^{n+1} - z_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{z_{j+1}^n - 2z_j^n + z_{j-1}^n}{h^2} + O(\Delta t) + O(h^2). \quad (3.5)$$

Выразим из соотношения (3.5) величину погрешности на $(n+1)$ -м шаге по времени:

$$z_j^{n+1} = z_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} [z_{j+1}^n - 2z_j^n + z_{j-1}^n] + \Delta t [O(\Delta t) + O(h^2)].$$

Последний член в правой части полученного выражения имеет порядок малости, явно меньший Δt , что позволяет им пренебречь. Таким образом, получаем:

$$z_j^{n+1} = z_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} [z_{j+1}^n - 2z_j^n + z_{j-1}^n].$$

Представим данное выражение в операторном виде:

$$z^{n+1} = z^n + \sigma \Delta t L_h z^n = (E + \sigma \Delta t L_h) z^n = B z^n.$$

Здесь B – **оператор перехода** от n -го шага по времени к $(n+1)$ -му шагу по времени; z^n – вектор погрешностей; E – единичный оператор:

$$B = E + \sigma \Delta t L_h, \quad L_h z^n = \frac{z_{j+1}^n - 2z_j^n + z_{j-1}^n}{h^2}, \quad z^n = \begin{pmatrix} z_1^n \\ z_2^n \\ \dots \\ z_N^n \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$

Для того чтобы разностная схема (3.4), аппроксимирующая дифференциальное уравнение (3.3), была устойчива, необходимо (согласно определению устойчивости разностных схем), чтобы норма погрешности на $(n+1)$ -м шаге по времени не превосходила нормы погрешности на n -м шаге по времени, то есть:

$$\|z^{n+1}\| \leq \|z^n\|. \quad (3.6)$$

Погрешность решения разностной схемы в точке (t^n, x_j) можно представить в виде комплексного выражения (гармоники):

$$z_j^n = \lambda^n e^{i\alpha_j}, \quad (3.7)$$

где λ – собственное число оператора перехода B ; i – мнимая единица.

Теорема. Для того, чтобы разностная схема была устойчива (т.е. для выполнения условия (3.6)), необходимо, чтобы все собственные числа оператора перехода B удовлетворяли условию:

$$|\lambda| \leq 1. \quad (3.8)$$

Это условие является **необходимым условием устойчивости** разностных схем.

3.3. Исследование устойчивости явной разностной схемы, аппроксимирующей дифференциальное уравнение параболического типа

Сравнивая явную разностную схему (3.4), аппроксимирующую дифференциальное уравнение параболического типа (3.3), с разностной схемой для погрешности её решения (3.5), легко видеть, что разностная схема для погрешности решения (3.5) по структуре совпадает с явной разностной схемой для однородного уравнения параболического типа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \rightarrow \quad \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}.$$

Это означает, что наличие свободного члена в правой части дифференциального уравнения не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, аппроксимирующей это уравнение, при условии, что свободный член не включает искомую функцию $u(t, x)$. Таким образом, для доказательства устойчивости разностной схемы (3.4) отбрасываем свободный член и представляем решение разностной схемы в виде гармоник (3.7):

$$u_j^n = \lambda^n e^{i\alpha j}.$$

Подставляя данное выражение в разностную схему, получаем:

$$\frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} = \sigma \frac{\lambda^n e^{i\alpha(j+1)} - 2\lambda^n e^{i\alpha j} + \lambda^n e^{i\alpha(j-1)}}{h^2}.$$

Упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h^2}.$$

Преобразуем комплексные числа из экспоненциальной формы в тригонометрическую:

$$e^{\pm i\alpha} = \cos \alpha \pm i \sin \alpha \quad \Rightarrow \quad \frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \frac{2 \cos \alpha - 2}{h^2}. \quad (3.9)$$

Используя тригонометрические тождества

$$\cos \alpha = \cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2} = 1 - 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}, \quad (3.10)$$

получаем формулу, из которой затем выражаем λ :

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \frac{-4 \sin^2 \frac{\alpha}{2}}{h^2} \Rightarrow \lambda = 1 - \frac{4\sigma \Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}.$$

С учётом необходимого условия устойчивости разностных схем (3.8) имеем:

$$|\lambda| \leq 1 \Rightarrow -1 \leq 1 - \frac{4\sigma \Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \leq 1.$$

В полученном двойном неравенстве правое условие выполняется автоматически (если $\sigma > 0$). Поэтому рассмотрим более подробно левое условие:

$$1 - \frac{4\sigma \Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \geq -1 \Rightarrow \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \leq \frac{1}{2\sigma}. \quad (3.11)$$

Задавая для $\sin^2 \frac{\alpha}{2}$ максимально возможное значение, равное 1, перейдём к более строгому условию, справедливому для любого α :

$$\frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \leq \frac{\Delta t}{h^2} \Rightarrow \frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2\sigma}. \quad (3.12)$$

Выражение (3.12) является условием устойчивости явной разностной схемы, аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение параболического типа (3.3). Такие разностные схемы, устойчивость которых зависит от какого-либо условия, ограничивающего выбор интервала деления на разностной сетке, называют **условно устойчивыми**.

3.4. Исследование устойчивости неявной разностной схемы, аппроксимирующей дифференциальное уравнение параболического типа

Рассмотрим неявную разностную схему, аппроксимирующую дифференциальное уравнение (3.3):

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j).$$

Можно доказать, что разностная схема для погрешности решения в этом случае (как и в случае явной разностной схемы), по структуре совпадает с неявной разностной схемой для однородного уравнения параболического типа. Поэтому для исследования устойчивости неявной разностной схемы отбрасываем свободный член и представляем решение в виде гармоники (3.7) (по аналогии с тем, как это было сделано для явной разностной схемы):

$$u_j^n = \lambda^n e^{i\alpha j} \Rightarrow \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} = \sigma \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha(j+1)} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)}}{h^2}.$$

Упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \lambda \frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h^2}.$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем формулу, из которой затем выражаем λ :

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \lambda \frac{-4 \sin^2 \frac{\alpha}{2}}{h^2} \Rightarrow \lambda = \frac{1}{1 + 4 \frac{\sigma \Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}} \leq 1.$$

Легко видеть, что необходимое условие устойчивости разностных схем (3.8) в данном случае выполняется при любых значениях Δt и h . Такие разностные схемы, устойчивость которых не зависит от выбора интервала деления на разностной сетке, называют **абсолютно устойчивыми**.

Глава 4. Решение дифференциальных уравнений параболического типа

4.1. Явная разностная схема

4.1.1. Характеристика явной разностной схемы

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа с начальными и граничными условиями:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, t, x); \quad u(t=0, x) = \xi(x); \quad \begin{cases} u(t, x=a) = \varphi_1(t); \\ u(t, x=b) = \varphi_2(t). \end{cases} \quad (4.1)$$

Запишем для уравнения (4.1) явную разностную схему:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(u_j^n, t^n, x_j). \quad (4.2)$$

Запишем аппроксимацию начального и граничных условий:

$$u_j^0 = \xi(x_j); \quad u_1^{n+1} = \varphi_1(t^{n+1}); \quad u_N^{n+1} = \varphi_2(t^{n+1}). \quad (4.3)$$

Аппроксимация граничных условий (4.3) записана на $(n+1)$ -м шаге по времени для удобства последующего изложения метода и алгоритма решения явной разностной схемы (4.2).

В разделе 2.3.3 было доказано, что разностная схема (4.2) имеет порядок аппроксимации:

$$O(\Delta t, h^2).$$

В разделе 3.3 было получено условие устойчивости данной разностной схемы, накладывающее ограничение на выбор интервала деления при создании разностной сетки (или, иначе говоря, ограничение на выбор расчётного шага по одной из независимых переменных):

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2\sigma}.$$

Отметим, что это, безусловно, является недостатком явной разностной схемы (4.2). В то же время она имеет достаточно простой метод решения.

4.1.2. Метод решения явной разностной схемы

Выразим из разностной схемы (4.2) величину u_j^{n+1} :

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + f(u_j^n, t^n, x_j) \Delta t. \quad (4.4)$$

Значения u_j^0 для любого j могут быть определены с помощью аппроксимации начального условия (4.3). Если задать $n = 0$, то, пользуясь выражением (4.4), можно определить значения u_j^1 , $j = 2, \dots, N-1$. Значения u_1^1, u_N^1 определяются с помощью аппроксимации граничных условий (4.3). Далее, задаём $n = 1$ и из выражения (4.4) определяем u_j^2 , $j = 2, \dots, N-1$, а значения u_1^2, u_N^2 — опять же с помощью аппроксимации граничных условий (4.3) и т. д. Таким образом, соотношение (4.4) позволяет рассчитать все значения искомой функции $u(t, x)$ в узлах разностной сетки, кроме значений, задаваемых с помощью начального и граничных условий. Описанную методику решения явной разностной схемы наглядно характеризует её разностный шаблон (рис. 4.1), на котором n -й шаг по времени следует считать известным, а $(n+1)$ -й шаг по времени — искомым.

Соотношения типа (4.4), позволяющие рассчитывать значения искомой функции в узлах разностной сетки через известные значения в других (как правило, соседних) узлах разностной сетки, называют **рекуррентными соотношениями**.

Обратим внимание, что если вместо граничных условий 1-го рода (4.1) будут заданы граничные условия 2-го или 3-го рода, то расчёт значений u_1^{n+1}, u_N^{n+1} несколько усложняется.

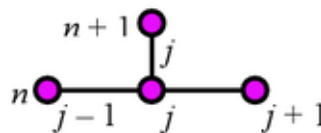


Рис. 4.1. Разностный шаблон явной разностной схемы, аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение параболического типа

Рассмотрим граничные условия 2-го рода:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x=a) = \varphi_1(t), \quad \frac{\partial u}{\partial x}(t, x=b) = \varphi_2(t).$$

Запишем их аппроксимацию:

$$\frac{u_2^{n+1} - u_1^{n+1}}{h} = \varphi_1(t^{n+1}), \quad \frac{u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1}}{h} = \varphi_2(t^{n+1}).$$

Выразим значения u_1^{n+1}, u_N^{n+1} :

$$u_1^{n+1} = u_2^{n+1} - h\varphi_1(t^{n+1}), \quad u_N^{n+1} = u_{N-1}^{n+1} + h\varphi_2(t^{n+1}). \quad (4.4,a)$$

Рассмотрим граничные условия 3-го рода:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}(t, x=a) &= \varphi_1(t) u(t, x=a) + \psi_1(t), \\ \frac{\partial u}{\partial x}(t, x=b) &= \varphi_2(t) u(t, x=b) + \psi_2(t). \end{aligned}$$

Запишем их аппроксимацию:

$$\begin{aligned} \frac{u_2^{n+1} - u_1^{n+1}}{h} &= \varphi_1(t^{n+1}) u_1^{n+1} + \psi_1(t^{n+1}), \\ \frac{u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1}}{h} &= \varphi_2(t^{n+1}) u_N^{n+1} + \psi_2(t^{n+1}). \end{aligned}$$

Выразим значения u_1^{n+1}, u_N^{n+1} :

$$\begin{aligned} u_1^{n+1} &= \frac{u_2^{n+1} - h\psi_1(t^{n+1})}{1 + h\varphi_1(t^{n+1})}, \\ u_N^{n+1} &= \frac{u_{N-1}^{n+1} + h\psi_2(t^{n+1})}{1 - h\varphi_2(t^{n+1})}. \end{aligned} \quad (4.4,b)$$

На рис. 4.2 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения явной разностной схемы (4.2), аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение параболического типа (4.1).

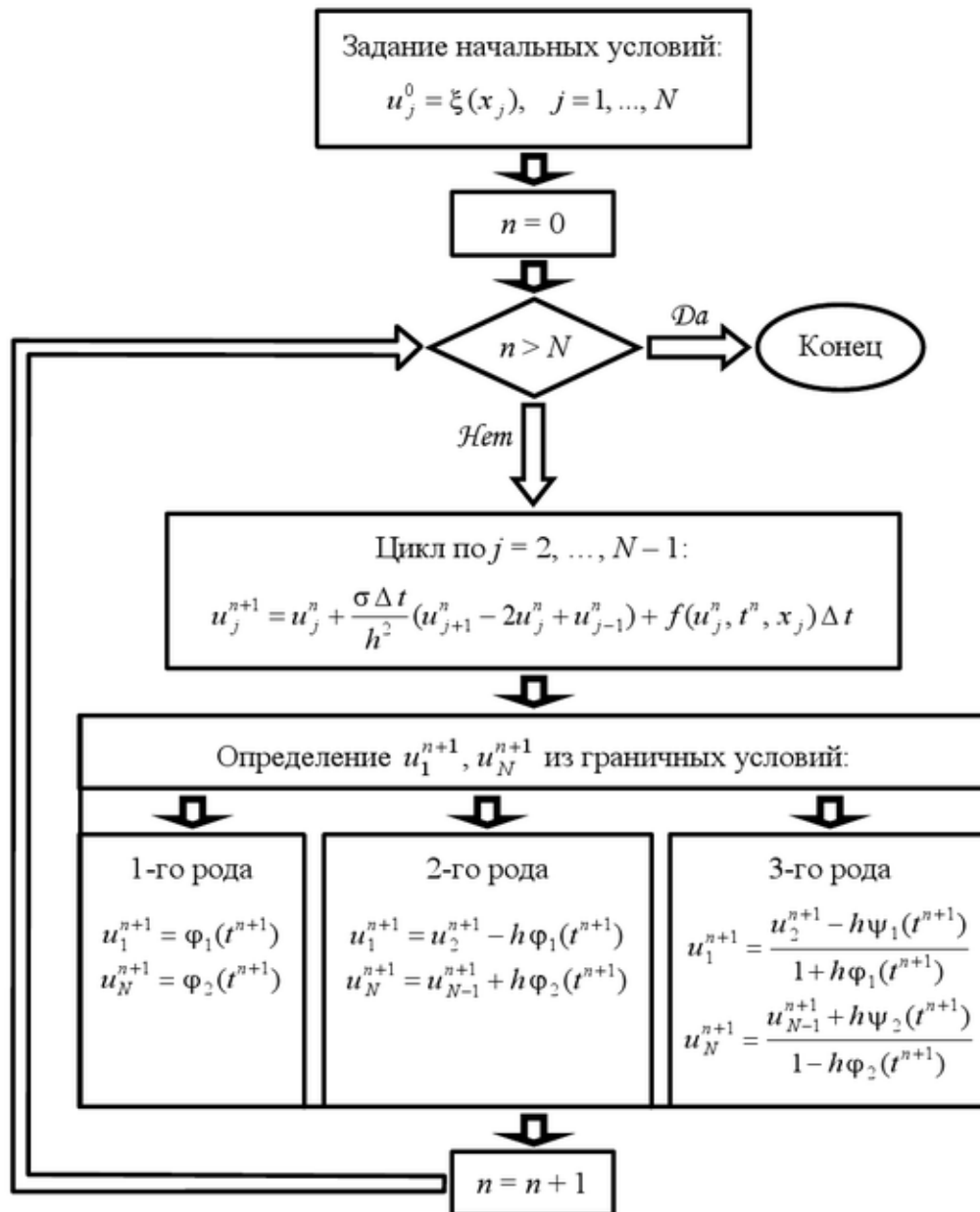


Рис. 4.2. Блок-схема решения явной разностной схемы, аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение параболического типа

4.2. Неявная разностная схема

4.2.1. Характеристика неявной разностной схемы

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа с начальными и граничными условиями:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, t, x); \quad u(t=0, x) = \xi(x); \quad \begin{cases} u(t, x=a) = \varphi_1(t); \\ u(t, x=b) = \varphi_2(t). \end{cases} \quad (4.5)$$

Запишем для уравнения (4.5) неявную разностную схему:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (4.6)$$

Запишем аппроксимацию начального и граничных условий:

$$u_j^0 = \xi(x_j); \quad u_1^{n+1} = \varphi_1(t^{n+1}); \quad u_N^{n+1} = \varphi_2(t^{n+1}). \quad (4.7)$$

Аппроксимация граничных условий (4.7) записана на $(n+1)$ -м шаге по времени для удобства последующего изложения метода и алгоритма решения неявной разностной схемы (4.6).

В разделе 2.3.3 было отмечено, что разностная схема (4.6) имеет такой же порядок аппроксимации, как и соответствующая ей явная разностная схема (4.2), а именно:

$$O(\Delta t, h^2).$$

В разделе 3.4 было доказано, что неявная разностная схема (4.6) абсолютно устойчива, т.е. вне зависимости от выбора интервала деления на разностной сетке (или, иначе говоря, выбора расчётного шага по независимым переменным) погрешность решения неявной разностной схемы в процессе вычислений возрастать не будет. Отметим, что это, безусловно, является достоинством неявной разностной схемы (4.6) по сравнению с явной разностной схемой (4.2), которая устойчива только при выполнении условия (3.12). В то же время явная разностная схема имеет достаточно простой метод решения, а метод решения неявной разностной схемы (4.6), называемый **методом прогонки**, более сложен.

4.2.2. Метод прогонки – метод решения неявной разностной схемы

Прежде чем перейти к изложению метода прогонки, необходимо вывести ряд соотношений, используемых этим методом. Преобразуем неявную разностную схему (4.6), группируя в левой части члены, содержащие значение функции $u(t, x)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени, а в правой части – все остальные члены:

$$-\frac{\sigma \Delta t}{h^2} u_{j+1}^{n+1} + \left(1 + 2 \frac{\sigma \Delta t}{h^2}\right) u_j^{n+1} - \frac{\sigma \Delta t}{h^2} u_{j-1}^{n+1} = u_j^n + \Delta t f(t^n, x_j). \quad (4.8)$$

Введём следующие обозначения:

$$\begin{aligned} a_j &= -\frac{\sigma \Delta t}{h^2}; & b_j &= 1 + 2 \frac{\sigma \Delta t}{h^2}; \\ c_j &= -\frac{\sigma \Delta t}{h^2}; & \xi_j^n &= u_j^n + \Delta t f(t^n, x_j). \end{aligned} \quad (4.9)$$

С учётом обозначений (4.9) равенство (4.8) будет иметь вид:

$$a_j u_{j+1}^{n+1} + b_j u_j^{n+1} + c_j u_{j-1}^{n+1} = \xi_j^n. \quad (4.10)$$

Данное преобразование часто называют *преобразованием неявной разностной схемы к виду, удобному для использования метода прогонки*.

Вывод прогоночных коэффициентов

Разностный шаблон (рис. 4.3), характеризующий неявную разностную схему (4.6), свидетельствует о том, что данная разностная схема содержит три неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени. Это обстоятельство затрудняет вывод рекуррентного соотношения, позволяющего последовательно рассчитать значения искомой функции $u(t, x)$ в каждом из узлов разностной сетки (подобно тому, как это было сделано в случае явной разностной схемы).

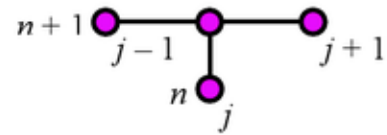


Рис. 4.3. Разностный шаблон неявной разностной схемы, аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение параболического типа

Следовательно, для реализации неявной разностной схемы (4.6) требуется ввести некоторое дополнительное условие, связывающее значения функции $u(t, x)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени. Представим это дополнительное условие в виде линейной зависимости

$$u_j^{n+1} = \alpha_j u_{j+1}^{n+1} + \beta_j, \quad (4.11)$$

справедливой для любого значения $j = 1, \dots, N - 1$.

Соотношение (4.11) называют **рекуррентным прогоночным соотношением**, а коэффициенты α_j, β_j – **прогоночными коэффициентами**.

Рассмотрим методику определения прогоночных коэффициентов. Для этого перепишем соотношение (4.11) в виде:

$$u_{j-1}^{n+1} = \alpha_{j-1} u_j^{n+1} + \beta_{j-1}.$$

Подставим данное выражение в (4.10) и выразим u_j^{n+1} :

$$\begin{aligned} a_j u_{j+1}^{n+1} + b_j u_j^{n+1} + c_j \alpha_{j-1} u_j^{n+1} + c_j \beta_{j-1} &= \xi_j^n \Rightarrow \\ \Rightarrow u_j^{n+1} &= -\frac{a_j}{b_j + c_j \alpha_{j-1}} u_{j+1}^{n+1} + \frac{\xi_j^n - c_j \beta_{j-1}}{b_j + c_j \alpha_{j-1}}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Сравнивая выражения (4.11) и (4.12), получаем:

$$\alpha_j = -\frac{a_j}{b_j + c_j \alpha_{j-1}}, \quad \beta_j = \frac{\xi_j^n - c_j \beta_{j-1}}{b_j + c_j \alpha_{j-1}}. \quad (4.13)$$

Выражения (4.13) позволяют рассчитать значения прогоночных коэффициентов на j -м шаге по координате x , если известны их значения на $(j - 1)$ -м шаге по координате x (а также коэффициенты в выражении (4.10), определение которых не должно вызывать затруднений). Следовательно, для того, чтобы определить значения прогоночных коэффициентов на любом шаге по координате x , необходимо знать их значения на 1-м шаге, т.е. α_1, β_1 .

Определение прогоночных коэффициентов на 1-м шаге по координате

Для определения прогоночных коэффициентов на 1-м шаге по координате x , т.е. α_1, β_1 , используют рекуррентное прогоночное соотношение (4.11), записанное для $j = 1$:

$$u_1^{n+1} = \alpha_1 u_2^{n+1} + \beta_1, \quad (4.14)$$

и левое граничное условие (4.7):

$$u_1^{n+1} = \varphi_1(t^{n+1}).$$

Сравнивая эти два соотношения, получаем:

$$\alpha_1 = 0, \quad \beta_1 = \varphi_1(t^{n+1}).$$

Обратим внимание, что вместо граничных условий 1-го рода (4.5) могут быть заданы граничные условия 2-го или 3-го рода; методика определения α_1, β_1 при этом не изменится, хотя сами формулы для расчёта α_1, β_1 будут другими.

Пусть задано левое граничное условие 2-го рода:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x = a) = \varphi_1(t).$$

Запишем его аппроксимацию и выразим значение u_1^{n+1} :

$$\frac{u_2^{n+1} - u_1^{n+1}}{h} = \varphi_1(t^{n+1}) \Rightarrow u_1^{n+1} = u_2^{n+1} - h\varphi_1(t^{n+1}).$$

Сравнивая данное выражение с соотношением (4.14), получаем:

$$\alpha_1 = 1, \quad \beta_1 = -h\varphi_1(t^{n+1}).$$

Пусть задано левое граничное условие 3-го рода:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x = a) = \varphi_1(t)u(t, x = a) + \psi_1(t).$$

Запишем его аппроксимацию и выразим значение u_1^{n+1} :

$$\frac{u_2^{n+1} - u_1^{n+1}}{h} = \varphi_1(t^{n+1})u_1^{n+1} + \psi_1(t^{n+1}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow u_1^{n+1} = \frac{u_2^{n+1} - h\psi_1(t^{n+1})}{1 + h\varphi_1(t^{n+1})} = \frac{u_2^{n+1}}{1 + h\varphi_1(t^{n+1})} - \frac{h\psi_1(t^{n+1})}{1 + h\varphi_1(t^{n+1})}.$$

Сравнивая данное выражение с соотношением (4.14), получаем:

$$\alpha_1 = \frac{1}{1 + h\varphi_1(t^{n+1})}, \quad \beta_1 = -\frac{h\psi_1(t^{n+1})}{1 + h\varphi_1(t^{n+1})}.$$

Определение решения на правой границе

Итак, используя левое граничное условие и соотношения (4.13), можно определить значения прогоночных коэффициентов на любом шаге по координате x . Однако рекуррентное прогоночное соотношение (4.11) позволит рассчитать значение функции $u(t, x)$ в точке u_j^{n+1} , если будет известно значение функции $u(t, x)$ в точке u_{j+1}^{n+1} , т.е. в соседней справа точке на разностной сетке. Следовательно, необходимо знать значение функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени в крайней справа точке, которое можно определить из правого граничного условия (4.7):

$$u_N^{n+1} = \varphi_2(t^{n+1}).$$

Однако вместо граничных условий 1-го рода (4.5) могут быть заданы граничные условия 2-го или 3-го рода. Для расчёта решения на правой границе в этом случае используют рекуррентное прогоночное соотношение (4.11), записанное для $j = N-1$:

$$u_{N-1}^{n+1} = \alpha_{N-1} u_N^{n+1} + \beta_{N-1}. \quad (4.15)$$

Пусть задано правое граничное условие 2-го рода:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x = b) = \varphi_2(t).$$

Запишем его аппроксимацию:

$$\frac{u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1}}{h} = \varphi_2(t^{n+1}).$$

Подставляя соотношение (4.15) в данное равенство и выражая u_N^{n+1} , получаем:

$$u_N^{n+1} = \frac{h\varphi_2(t^{n+1}) + \beta_{N-1}}{1 - \alpha_{N-1}}.$$

Пусть задано правое граничное условие 3-го рода:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x = b) = \varphi_2(t)u(t, x = b) + \psi_2(t).$$

Запишем его аппроксимацию:

$$\frac{u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1}}{h} = \varphi_2(t^{n+1})u_N^{n+1} + \psi_2(t^{n+1}).$$

Подставляя соотношение (4.15) в данное равенство и выражая u_N^{n+1} , получаем:

$$u_N^{n+1} = \frac{h\psi_2(t^{n+1}) + \beta_{N-1}}{1 - \alpha_{N-1} - h\varphi_2(t^{n+1})}.$$

Достаточное условие сходимости метода прогонки

Неявная разностная схема (4.6) является абсолютно устойчивой. Однако это ещё не гарантирует сходимость её метода решения (т.е. метода прогонки) к решению исходной дифференциальной задачи.

Теорема. Достаточным условием сходимости метода прогонки к решению исходной дифференциальной задачи является выполнение неравенства:

$$|a_j| + |c_j| < |b_j|, \quad (4.16)$$

где a_j, b_j, c_j – коэффициенты из уравнения (4.10).

Легко видеть, что для разностной схемы (4.6) достаточное условие сходимости прогонки выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = 2 \frac{\sigma \Delta t}{h^2} < 1 + 2 \frac{\sigma \Delta t}{h^2} = |b_j|.$$

Алгоритм метода прогонки

Суммируя вышеизложенное, проследим последовательность действий, которую подразумевает **метод прогонки** при расчёте значений функции $u(t, x)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени:

- 1) с помощью левого граничного условия определяются значения прогоночных коэффициентов на 1-м шаге по координате x , т.е. α_1, β_1 ;
- 2) по формулам (4.13) определяются значения прогоночных коэффициентов для $j = 2, \dots, N - 1$;
- 3) с помощью правого граничного условия определяется значение u_N^{n+1} ;
- 4) с помощью рекуррентного прогоночного соотношения (4.11) определяются значения функции $u(t, x)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени для $j = N - 1, \dots, 1$.

Обратим внимание, что определение прогоночных коэффициентов осуществляется за счёт цикла по j , в котором значения j увеличиваются (что соответствует перемещению слева направо на разностной сетке), в то время как при определении значений функции $u(t, x)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени организуется цикл по j , в котором значения j уменьшаются (что соответствует перемещению справа налево на разностной сетке). Именно благодаря этим двум циклам (в первом из которых j совершает пробег слева направо, а во втором – справа налево), данный метод решения неявной разностной схемы и получил название **метода прогонки**.

На рис. 4.4 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) метода прогонки – метода решения неявной разностной схемы (4.6), аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение параболического типа (4.5).

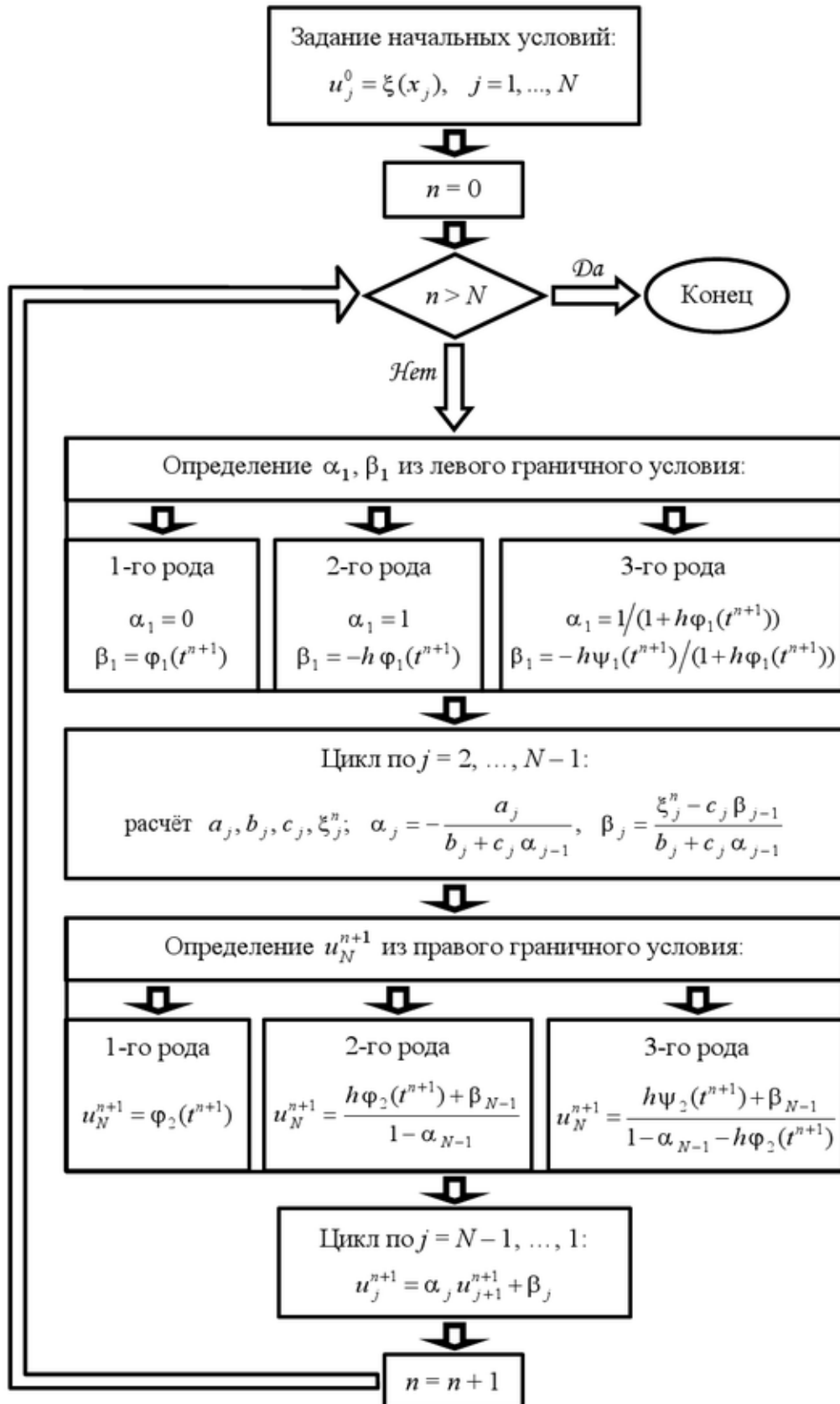


Рис. 4.4. Блок-схема метода прогонки

4.3. Разностная схема Кранка–Николсона

4.3.1. Вывод разностной схемы Кранка–Николсона

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа с начальными и граничными условиями:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(t, x), \quad u(t=0, x) = \xi(x); \quad \begin{cases} u(t, x=a) = \varphi_1(t); \\ u(t, x=b) = \varphi_2(t). \end{cases} \quad (4.17)$$

Запишем для уравнения (4.17) разностную схему, представляя вторую производную функции $u(t, x)$ по координате x в виде суммы двух слагаемых

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

и аппроксимируя первое слагаемое на n -м шаге по времени, а второе – на $(n+1)$ -м шаге по времени:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (4.18)$$

Данная разностная схема называется **разностной схемой Кранка–Николсона** в честь авторов, создавших её.

Деление производной $\partial^2 u / \partial x^2$ пополам с аппроксимацией одной половины на n -м шаге по времени, а другой – на $(n+1)$ -м шаге, указывает на то, что аппроксимацию этой производной в целом следует рассматривать на шаге по времени $(n+1/2)$. В то же время конечная разность, аппроксимирующая производную по времени, по отношению к точке $(n+1/2)$ является центральной конечной разностью, имеющей второй порядок аппроксимации (см. раздел 2.2.2). Следовательно, разностная схема Кранка–Николсона аппроксимирует уравнение (4.17) со вторым порядком и по времени, и по координате:

$$O(\Delta t^2) + O(h^2) \quad \text{или} \quad O(\Delta t^2, h^2).$$

Таким образом, порядок аппроксимации разностной схемы Кранка–Николсона выше, чем порядок аппроксимации явной и неявной разностных схем; т.е. ре-

зультаты, получаемые при использовании разностной схемы Кранка–Николсона, будут более точными.

Исследуем устойчивость разностной схемы Кранка–Николсона (4.18) с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f(t^n, x_j)$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представим решение в виде гармоники (3.7):

$$u_j^n = \lambda^n e^{i\alpha j} \Rightarrow \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \frac{\lambda^n e^{i\alpha(j+1)} - 2\lambda^n e^{i\alpha j} + \lambda^n e^{i\alpha(j-1)}}{h^2} + \\ + \frac{\sigma}{2} \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha(j+1)} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)}}{h^2}.$$

Упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h^2} + \frac{\sigma \lambda}{2} \frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h^2}.$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем формулу

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = -\frac{\sigma}{2h^2} 4\sin^2 \frac{\alpha}{2} - \frac{\sigma \lambda}{2h^2} 4\sin^2 \frac{\alpha}{2},$$

из которой выражаем λ :

$$\lambda = \frac{1 - \frac{2\sigma \Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}}{1 + \frac{2\sigma \Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}}.$$

Видно, что в полученном выражении числитель по абсолютному значению меньше знаменателя (при $\sigma > 0$). Следовательно, необходимое условие устойчивости разностных схем (3.8) в данном случае выполняется при любых значениях Δt и h , то есть разностная схема Кранка–Николсона (4.18) является абсолютно устойчивой.

4.3.2. Метод решения разностной схемы Кранка–Николсона

Разностный шаблон (рис. 4.5), характеризующий разностную схему Кранка–Николсона (4.18), свидетельствует о том, что она содержит три неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени. Следовательно, для

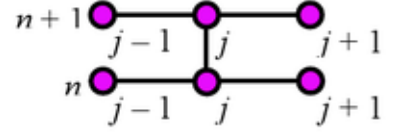


Рис. 4.5. Разностный шаблон схемы Кранка–Николсона

решения данной разностной схемы необходимо использовать метод прогонки. Методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе, а также общий вид алгоритма решения в данном случае будут такими же, как и для неявной разностной схемы (4.6). Однако достаточное условие сходимости прогонки (4.16) требует проверки.

Приведём выражение (4.18) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$\begin{aligned} & -\frac{\sigma \Delta t}{2h^2} u_{j+1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\sigma \Delta t}{h^2}\right) u_j^{n+1} - \frac{\sigma \Delta t}{2h^2} u_{j-1}^{n+1} = \\ & = u_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{2h^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + f(t^n, x_j) \Delta t. \end{aligned}$$

Следовательно, коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$a_j = c_j = -\frac{\sigma \Delta t}{2h^2}, \quad b_j = 1 + \frac{\sigma \Delta t}{h^2},$$

$$\xi_j^n = u_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{2h^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + f(t^n, x_j) \Delta t.$$

Легко видеть, что для разностной схемы (4.18) достаточное условие сходимости прогонки выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = \frac{\sigma \Delta t}{h^2} < 1 + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} = |b_j|.$$

4.4. Разностная схема Саульева

4.4.1. Вывод разностной схемы Саульева

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа с начальными и граничными условиями:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(t, x), \quad u(t=0, x) = \xi(x); \quad \begin{cases} u(t, x=a) = \varphi_1(t); \\ u(t, x=b) = \varphi_2(t). \end{cases} \quad (4.19)$$

Представим разностный оператор (2.12), аппроксимирующий производную $\partial^2 u / \partial x^2$, в следующем виде:

$$\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{x_j} \rightarrow \lambda_{xx} u = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = \frac{\frac{u_{j+1} - u_j}{h} - \frac{u_j - u_{j-1}}{h}}{h}. \quad (4.20)$$

Аппроксимируя первую дробь числителя в выражении (4.20) на n -м шаге по времени, а вторую дробь и свободный член в уравнении (4.19) – на $(n+1)$ -м шаге по времени, получим соотношение:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{\frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h} - \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h}}{h} + f(t^{n+1}, x_j)$$

или, упрощая,

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - (u_j^n + u_j^{n+1}) + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^{n+1}, x_j). \quad (4.21)$$

Соотношение (4.21) не аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение (4.19). Поэтому рассмотрим следующий шаг по времени на разностной сетке:

$$u_j^{n+1} \rightarrow u_j^{n+2}.$$

Аппроксимируя на этот раз первую дробь числителя в выражении (4.20) на $(n+2)$ -м шаге по времени, а вторую дробь и свободный член в уравнении (4.19) – на $(n+1)$ -м шаге по времени, получим соотношение:

$$\frac{u_j^{n+2} - u_j^{n+1}}{\Delta t} = \sigma \frac{\frac{u_{j+1}^{n+2} - u_j^{n+2}}{h} - \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h}}{h} + f(t^{n+1}, x_j)$$

или, упрощая,

$$\frac{u_j^{n+2} - u_j^{n+1}}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+2} - (u_j^{n+2} + u_j^{n+1}) + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^{n+1}, x_j). \quad (4.22)$$

Соотношение (4.22) также не аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение (4.19). Однако в совокупности выражения (4.21) и (4.22) составляют разностную схему, называемую в честь её автора, **разностной схемой Саульева**. Сами выражения (4.21) и (4.22) называют **первой и второй степенями** разностной схемы Саульева, соответственно.

Характеристика разностной схемы Саульева

Рассмотрим сумму соотношений (4.21) и (4.22), делённую пополам:

$$\frac{u_j^{n+2} - u_j^n}{2\Delta t} = \sigma \frac{\frac{u_{j+1}^{n+2} + u_{j+1}^n}{2} - \left(\frac{u_j^{n+2} + u_j^n}{2} + u_j^{n+1} \right) + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^{n+1}, x_j). \quad (4.23)$$

Разложим значения u_j^{n+2} , u_j^n в ряд Тейлора относительно точки (t^{n+1}, x_j) :

$$\begin{aligned} u_j^{n+2} &= u_j^{n+1} + \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^{n+1} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_j^{n+1} (\Delta t)^2 + \dots, \\ u_j^n &= u_j^{n+1} - \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^{n+1} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_j^{n+1} (\Delta t)^2 + \dots \end{aligned}$$

Исходя из этих соотношений, среднее арифметическое значений u_j^{n+2} , u_j^n , используемое в (4.23), можно аппроксимировать значением u_j^{n+1} со вторым порядком аппроксимации по времени:

$$\frac{u_j^n + u_j^{n+2}}{2} = u_j^{n+1} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_j^{n+1} (\Delta t)^2 = u_j^{n+1} + O(\Delta t^2).$$

Подставляя данную формулу в (4.23), получаем:

$$\frac{u_j^{n+2} - u_j^n}{2\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{O(\Delta t^2)}{h^2} + f(t^{n+1}, x_j). \quad (4.24)$$

Разностный оператор, стоящий в левой части выражения (4.24), по отношению к точке (t^{n+1}, x_j) , т.е. к точке, для которой записана правая часть этого же выражения, является центральной конечной разностью, имеющей второй порядок аппроксимации (см. раздел 2.2.2). Следовательно, разностная схема Саульева аппроксимирует уравнение (4.19) со вторым порядком и по времени, и по координате:

$$O(\Delta t^2) + O(h^2) \quad \text{или} \quad O(\Delta t^2, h^2).$$

Однако второе слагаемое в правой части выражения (4.24) вносит дополнительный вклад в ошибку аппроксимации. Поэтому реально точность результатов, получаемых при использовании разностной схемы Саульева, будет зависеть от выбора величин шагов по времени и координате x , а точнее от порядка отношения $\Delta t/h$. При $\Delta t \sim h^2$ погрешность, вносимая вторым слагаемым в правой части выражения (4.24), будет сопоставима с погрешностью, вносимой аппроксимацией производных. Если же $\Delta t \sim h$, то точных результатов мы не получим.

Завершая анализ погрешности, создаваемой разностной схемой Саульева, и переходя к рассмотрению метода её решения, следует отметить, что данная разностная схема является абсолютно устойчивой (примем этот факт без доказательства), однако её аппроксимация сама накладывает ограничение на выбор интервала деления на разностной сетке.

4.4.2. Метод решения разностной схемы Саульева

Разностный шаблон (рис. 4.6), характеризующий первую ступень разностной схемы Саульева, свидетельствует о том, что выражение (4.21) содержит две неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени

u_j^{n+1}, u_{j-1}^{n+1} . То есть для определения величины u_j^{n+1} необходимо знать значение функции $u(t, x)$ в соседней слева точке на разностной сетке. Определяя u_1^{n+1} из левого граничного условия (4.19) и выражая u_j^{n+1} из соотношения (4.21):

$$u_j^{n+1} = \frac{u_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} u_{j+1}^n - \frac{\sigma \Delta t}{h^2} u_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} u_{j-1}^{n+1} + \Delta t f(t^{n+1}, x_j)}{1 + \frac{\sigma \Delta t}{h^2}}, \quad (4.25)$$

можно последовательно рассчитать значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени $u_j^{n+1}, j = 2, \dots, N-1$. Если вместо граничных условий 1-го рода (4.19) будут заданы граничные условия 2-го или 3-го рода, то для определения величины u_1^{n+1} необходимо решить систему двух уравнений: разностной аппроксимации левого граничного условия на $(n+1)$ -м шаге по времени и рекуррентного соотношения (4.25) при $j = 2$. Значение u_N^{n+1} определяется из правого граничного условия.

Разностный шаблон (рис. 4.7), характеризующий вторую степень разностной схемы Саульева, свидетельствует о том, что выражение (4.22) содержит две неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n+2)$ -м шаге по времени u_j^{n+2}, u_{j+1}^{n+2} . То есть для определения величины u_j^{n+2} необходимо знать значение функции $u(t, x)$ в соседней справа точке на разностной сетке. Определяя u_N^{n+2} из правого граничного условия (4.19) и выражая u_j^{n+2} из соотношения (4.22):

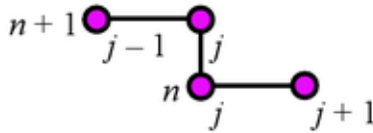


Рис. 4.6. Разностный шаблон первой степени схемы Саульева

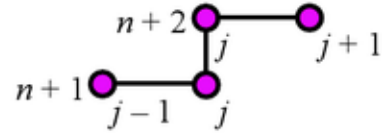


Рис. 4.7. Разностный шаблон второй степени схемы Саульева

$$u_j^{n+2} = \frac{u_j^{n+1} + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} u_{j+1}^{n+2} - \frac{\sigma \Delta t}{h^2} u_j^{n+1} + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} u_{j-1}^{n+1} + \Delta t f(t^{n+1}, x_j)}{1 + \frac{\sigma \Delta t}{h^2}}, \quad (4.26)$$

можно последовательно рассчитать значения функции $u(t, x)$ на $(n+2)$ -м шаге по времени u_j^{n+2} , $j = N-1, \dots, 2$. В случае, если заданы граничные условия 2-го или 3-го рода, для определения величины u_N^{n+2} необходимо решить систему двух уравнений: разностной аппроксимации правого граничного условия на $(n+2)$ -м шаге по времени и рекуррентного соотношения (4.26) при $j = N-1$. Значение u_1^{n+2} определяется из левого граничного условия.

Таким образом, метод решения разностной схемы Саульева существенно проще метода решения неявной разностной схемы и разностной схемы Кранка–Николсона (т.е. метода прогонки). Однако следует обратить внимание, что поскольку выражения (4.21) и (4.22) по отдельности не аппроксимируют исходное дифференциальное уравнение (4.19), оценка погрешности значений функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени не представляется возможной. Близость к истинным значениям может быть гарантирована только для значений функции $u(t, x)$ на $(n+2)$ -м шаге по времени, поэтому заданный временной интервал должен быть изначально разделён на *чётное* число частей (шагов).

На рис. 4.8 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения разностной схемы Саульева (4.21), (4.22), аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение параболического типа (4.19).

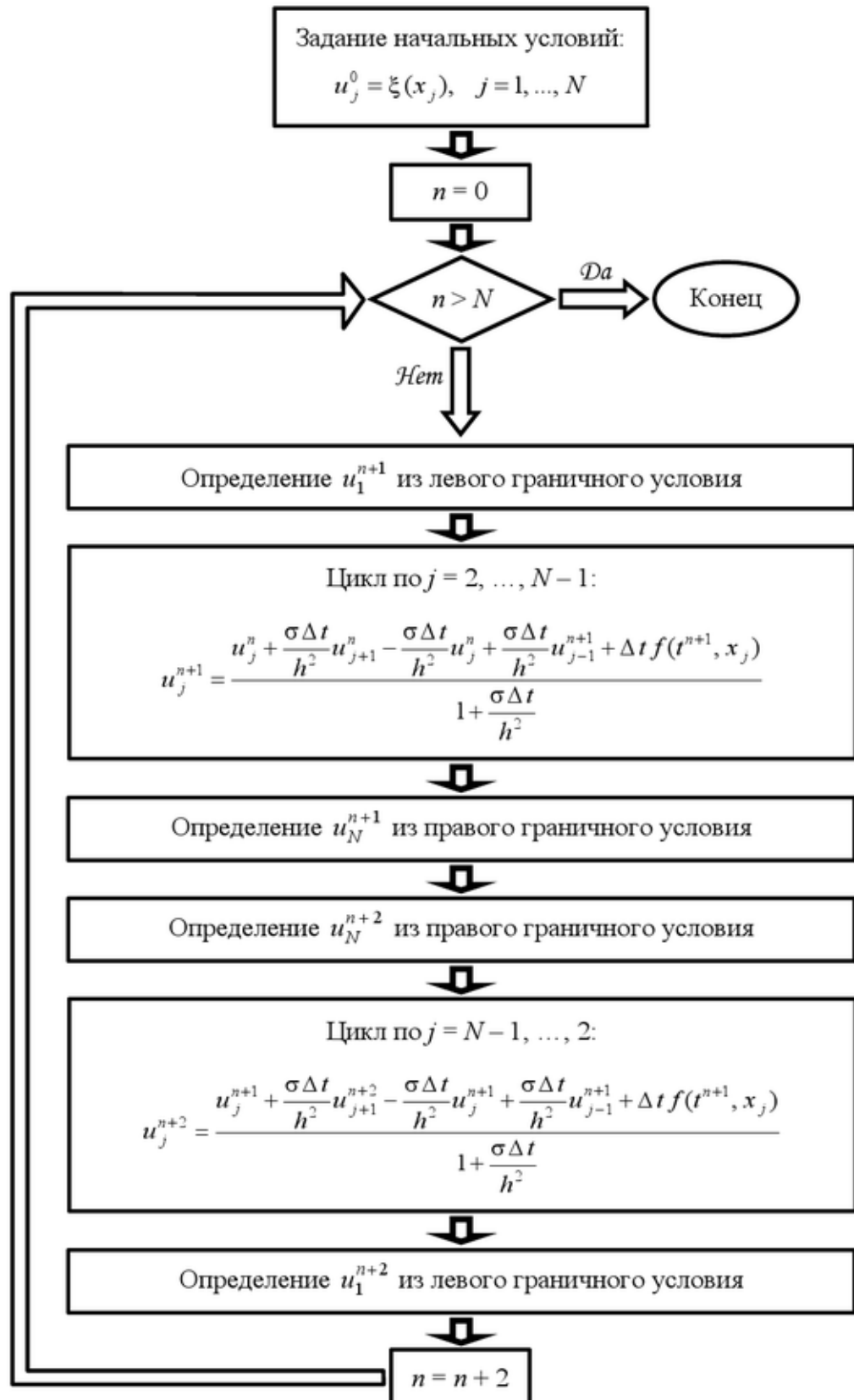


Рис. 4.8. Блок-схема решения разностной схемы Саульева

4.5. Сравнительная характеристика изученных разностных схем

В заключение приведём сравнительную характеристику разностных схем, аппроксимирующих одномерное дифференциальное уравнение параболического типа:

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

1. Явная разностная схема

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(t^n, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h^2)$.
- Условно устойчива $\Delta t \leq \frac{h^2}{2\sigma}$.
- Решается с помощью рекуррентного соотношения (4.4).

2. Неявная разностная схема

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается методом прогонки.

3. Разностная схема Кранка–Николсона

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается методом прогонки.

4. Разностная схема Саульева

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - (u_j^n + u_j^{n+1}) + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^{n+1}, x_j);$$

$$\frac{u_j^{n+2} - u_j^{n+1}}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+2} - (u_j^{n+2} + u_j^{n+1}) + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^{n+1}, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h^2)$ при $\Delta t \sim h^2$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается с помощью рекуррентных соотношений (4.25) и (4.26).

Глава 5. Решение дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка

5.1. Примеры дифференциальных уравнений в частных производных 1-го порядка

В разделе 1.6 мы рассматривали нестационарную математическую модель трубчатого реактора (идеального вытеснения), в котором протекает простая необратимая реакция. Баланс по концентрации исходного реагента для нестационарного режима имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = -k c, \quad c(t=0, x) = c^0(x), \quad c(t, x=0) = \varphi(t),$$

где k – константа скорости химической реакции; c – концентрация исходного реагента; v – линейная скорость потока; x – координата по длине реактора.

Данное уравнение является одномерным дифференциальным уравнением в частных производных 1-го порядка (табл. 1).

Рассмотрим другой пример. Математическая модель процессов массовой кристаллизации включает уравнение баланса числа частиц, имеющее вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \eta \frac{\partial f}{\partial l} = 0, \quad f(t=0, l) = 0, \quad f(t, l=l_3) = \frac{i}{\eta},$$

где f – функция плотности распределения кристаллов по размерам; η – скорость роста кристалла; l – размер кристалла; i – скорость образования зародышей; l_3 – размер зародыша.

Данное уравнение также является одномерным дифференциальным уравнением в частных производных 1-го порядка.

Таким образом, дифференциальные уравнения в частных производных 1-го порядка часто встречаются в математических моделях физико-химических и химико-технологических процессов, что обуславливает необходимость знания методик численного решения этих уравнений. Для простоты дальнейшего изложения мы будем рассматривать одномерные дифференциальные уравнения в частных производных 1-го порядка в следующем общем виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = f(t, x), \quad (5.1)$$

причём параметр v может быть как положительным, так и отрицательным, но не равным нулю (поскольку при $v = 0$ уравнение (5.1) будет уже являться обыкновенным дифференциальным уравнением 1-го порядка; методы решения этих уравнений будут рассмотрены в главе 12).

Уравнение (5.1) следует дополнить начальным и граничным условиями:

$$u(t=0, x) = \xi(x); \quad u(t, x=a) = \varphi(t).$$

Каким должно быть данное граничное условие – левым или правым, мы сможем выяснить, только зная методику численного решения уравнения (5.1). Также отметим, что при постановке дифференциальной задачи порядок уравнений, описывающих граничные условия, должен быть ниже порядка самого дифференциального уравнения. Поэтому при описании методов численного решения уравнения (5.1) мы будем рассматривать только граничные условия 1-го рода.

5.2. Разностные схемы, аппроксимирующие дифференциальные уравнения в частных производных 1-го порядка

Для дифференциального уравнения (5.1) введём разностную сетку и рассмотрим аппроксимацию производных в точке (t^n, x_j) . Для аппроксимации производной по времени обычно используется правая конечная разность (со стабилизацией значения независимой переменной x в точке с порядковым номером j):

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t^n, x_j} \rightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}.$$

Для аппроксимации производной по координате x может быть использована как правая конечная разность, так и левая конечная разность; причём стабилизация значения независимой переменной t может быть как на n -м шаге по вре-

мени (т.е. в точке t^n), так и на $(n+1)$ -м шаге по времени (т.е. в точке t^{n+1}). Данный выбор позволяет записать для уравнения (5.1) четыре разностные схемы:

1) явная разностная схема с аппроксимацией производной по координате правой конечной разностью

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h} = f(t^n, x_j); \quad (5.2)$$

2) явная разностная схема с аппроксимацией производной по координате левой конечной разностью

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = f(t^n, x_j); \quad (5.3)$$

3) неявная разностная схема с аппроксимацией производной по координате правой конечной разностью

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1}}{h} = f(t^n, x_j); \quad (5.4)$$

4) неявная разностная схема с аппроксимацией производной по координате левой конечной разностью

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} = f(t^n, x_j). \quad (5.5)$$

Учитывая порядок аппроксимации разностных операторов, из которых составлены разностные схемы (5.2)–(5.5), легко видеть, что каждая из них имеет первый порядок аппроксимации и по времени, и по координате:

$$O(\Delta t, h).$$

Чтобы выяснить, какие из разностных схем (5.2)–(5.5) лучше всего подходят для численного решения уравнения (5.1), необходимо провести исследование их устойчивости и сравнить методы их решения.

5.3. Явная разностная схема с аппроксимацией производной по координате правой конечной разностью

5.3.1. Исследование устойчивости

Исследуем устойчивость разностной схемы (5.2) с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f(t^n, x_j)$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоник (3.7):

$$u_j^n = \lambda^n e^{i\alpha j} \Rightarrow \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} + v \frac{\lambda^n e^{i\alpha(j+1)} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{h} = 0.$$

Упрощаем данное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$, и выражаем λ :

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v \frac{e^{i\alpha} - 1}{h} = 0 \Rightarrow \lambda = 1 + v \frac{\Delta t}{h} - v \frac{\Delta t}{h} e^{i\alpha}.$$

Комплексный вид полученного выражения свидетельствует о том, что необходимое условие устойчивости разностных схем (3.8) также следует рассматривать в применении к комплексным числам. То есть, неравенство

$$|\lambda| \leq 1 \quad (5.6)$$

означает, что для того чтобы разностная схема была устойчива, необходимо чтобы собственные числа оператора перехода были расположены внутри или на границе круга радиусом 1, центр которого находится в начале координат комплексной плоскости (рис. 5.1).

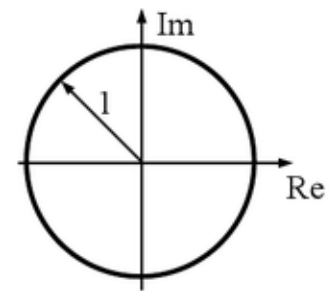


Рис. 5.1. Графическая интерпретация условия устойчивости (5.6)

1) Рассмотрим случай $v < 0$. Введём следующее обозначение:

$$r = -v \frac{\Delta t}{h} > 0 \Rightarrow \lambda = 1 - r + r e^{i\alpha}.$$

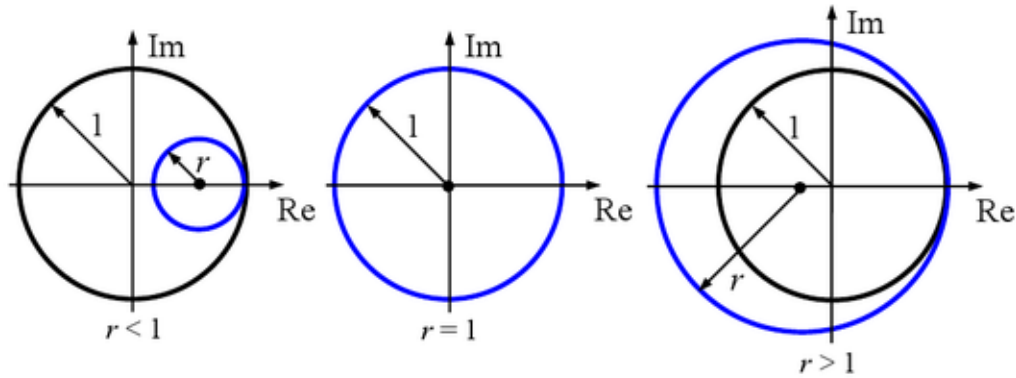


Рис. 5.2. Исследование устойчивости разностной схемы (5.2) при $v < 0$
и разностной схемы (5.3) при $v > 0$

Полученное выражение свидетельствует о том, что собственные числа оператора перехода расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1 - r; 0)$ и радиусом:

$$|re^{i\alpha}| = |r \cos \alpha + ir \sin \alpha| = \sqrt{r^2 \cos^2 \alpha + r^2 \sin^2 \alpha} = r.$$

Сравнивая расположение этой окружности на комплексной плоскости с условием (5.6), получаем три различных варианта (рис. 5.2). Видно, что окружность, соответствующая собственным числам оператора перехода, при $r < 1$ находится внутри круга, соответствующего условию (5.6); при $r > 1$ – вне этого круга; а при $r = 1$ совпадает с его границей. Таким образом, при отрицательном значении параметра v явная разностная схема (5.2) будет устойчива при выполнении следующего условия:

$$r = -v \frac{\Delta t}{h} \leq 1.$$

2) Рассмотрим случай $v > 0$. Введём следующее обозначение:

$$q = v \frac{\Delta t}{h} > 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = 1 + q - qe^{i\alpha}.$$

Полученное выражение свидетельствует о том, что собственные числа оператора перехода расположены на комплексной плоскости на окружности с центром

в точке $(1+q, 0)$ и радиусом q . Данная окружность находится вне круга, соответствующего условию (5.6) при любом значении q (рис. 5.3). Таким образом, при положительном значении параметра v явная разностная схема (5.2) будет неустойчива.

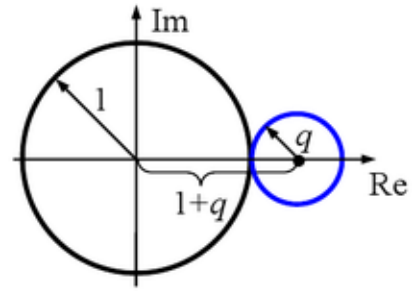


Рис. 5.3. Исследование устойчивости разностной схемы (5.2) при $v > 0$ и разностной схемы (5.3) при $v < 0$

Обобщая полученные результаты, сделаем вывод, что явная разностная схема с аппроксимацией производной $\partial u / \partial x$ правой конечной разностью (5.2) является *условно устойчивой*; условие устойчивости имеет вид:

$$-1 \leq v \frac{\Delta t}{h} < 0.$$

5.3.2. Метод решения

Рассмотрим метод решения разностной схемы (5.2). Разностный шаблон (рис. 5.4), характеризующий данную разностную схему, свидетельствует о том, что она содержит одну неизвестную величину – значение функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени. Выражая эту величину из разностной схемы, получаем рекуррентное соотношение

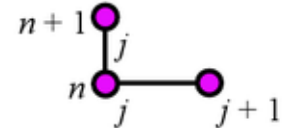


Рис. 5.4. Разностный шаблон разностной схемы (5.2)

$$u_j^{n+1} = u_j^n + v \frac{\Delta t}{h} (u_j^n - u_{j+1}^n) + \Delta t f(t^n, x_j),$$

позволяющее рассчитать все значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени (при известных значениях функции $u(t, x)$ на n -м шаге), кроме значения на правой границе, для определения которого, очевидно, требуется *правое граничное условие*:

$$u_N^{n+1} = \varphi_2(t^{n+1}).$$

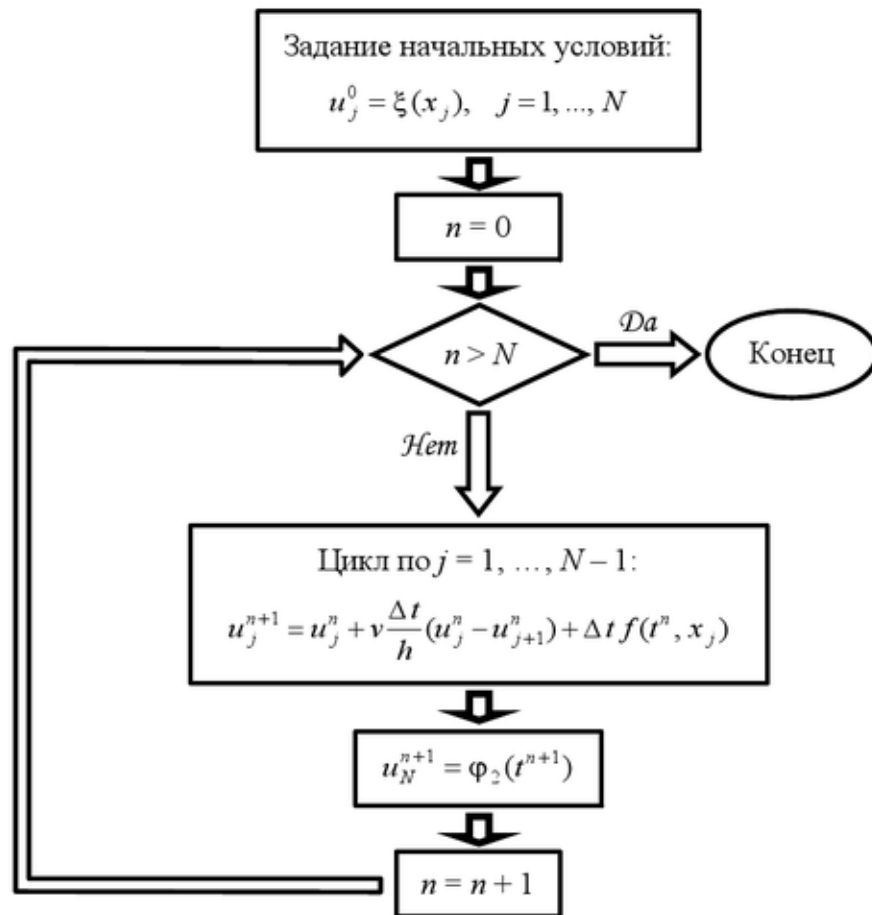


Рис. 5.5. Блок-схема решения разностной схемы (5.2)

На рис. 5.5 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения явной разностной схемы с аппроксимацией производной по координате правой конечной разностью (5.2).

5.4. Явная разностная схема с аппроксимацией производной по координате левой конечной разностью

5.4.1. Исследование устойчивости

Исследуем устойчивость разностной схемы (5.3) с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f(t^n, x_j)$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоник (3.7):

$$u_j^n = \lambda^n e^{i\alpha j} \Rightarrow \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} + v \frac{\lambda^n e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha(j-1)}}{h} = 0.$$

Упрощаем данное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$, и выражаем λ :

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v \frac{1 - e^{-i\alpha}}{h} = 0 \Rightarrow \lambda = 1 - v \frac{\Delta t}{h} + v \frac{\Delta t}{h} e^{-i\alpha}.$$

Комплексный вид полученного выражения свидетельствует о том, что для устойчивости разностной схемы (5.3) согласно условию (5.6) требуется, чтобы собственные числа оператора перехода были расположены внутри или на границе круга радиусом 1, центр которого находится в начале координат комплексной плоскости (рис. 5.1).

1) Рассмотрим случай $v < 0$. Введём следующее обозначение:

$$q = -v \frac{\Delta t}{h} > 0 \Rightarrow \lambda = 1 + q - q e^{-i\alpha}.$$

Полученное выражение свидетельствует о том, что собственные числа оператора перехода расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1 + q, 0)$ и радиусом:

$$|q e^{-i\alpha}| = |q \cos \alpha - i q \sin \alpha| = \sqrt{q^2 \cos^2 \alpha + q^2 \sin^2 \alpha} = q.$$

Данная окружность находится вне круга, соответствующего условию (5.6) при любом значении q (рис. 5.3). Таким образом, при отрицательном значении параметра v явная разностная схема (5.3) будет неустойчива.

2) Рассмотрим случай $v > 0$. Введём следующее обозначение:

$$r = v \frac{\Delta t}{h} > 0 \Rightarrow \lambda = 1 - r + r e^{-i\alpha}.$$

Полученное выражение свидетельствует о том, что собственные числа оператора перехода расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1 - r, 0)$ и радиусом r . Сравнивая расположение этой окружности на комплексной плоскости с условием (5.6), получаем три различных варианта

(рис. 5.2). Видно, что окружность, соответствующая собственным числам оператора перехода, при $r < 1$ находится внутри круга, соответствующего условию (5.6); при $r > 1$ – вне этого круга; а при $r = 1$ совпадает с его границей. Таким образом, при положительном значении параметра v явная разностная схема (5.3) будет устойчива при выполнении следующего условия:

$$r = v \frac{\Delta t}{h} \leq 1.$$

Обобщая полученные результаты, сделаем вывод, что явная разностная схема с аппроксимацией производной $\partial u / \partial x$ левой конечной разностью (5.3) является *условно устойчивой*; условие устойчивости имеет вид:

$$0 < v \frac{\Delta t}{h} \leq 1.$$

5.4.2. Метод решения

Рассмотрим метод решения разностной схемы (5.3). Разностный шаблон (рис. 5.6), характеризующий данную разностную схему, свидетельствует о том, что она содержит одну неизвестную величину – значение функции $u(t, x)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени. Выражая эту величину из разностной схемы, получаем рекуррентное соотношение

$$u_j^{n+1} = u_j^n + v \frac{\Delta t}{h} (u_{j-1}^n - u_j^n) + \Delta t f(t^n, x_j),$$

позволяющее рассчитать все значения функции $u(t, x)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени (при известных значениях функции $u(t, x)$ на n -м шаге), кроме значения на левой границе, для определения которого, очевидно, требуется *левое граничное условие*:

$$u_1^{n+1} = \varphi_1(t^{n+1}).$$

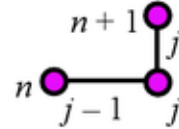


Рис. 5.6. Разностный шаблон разностной схемы (5.3)

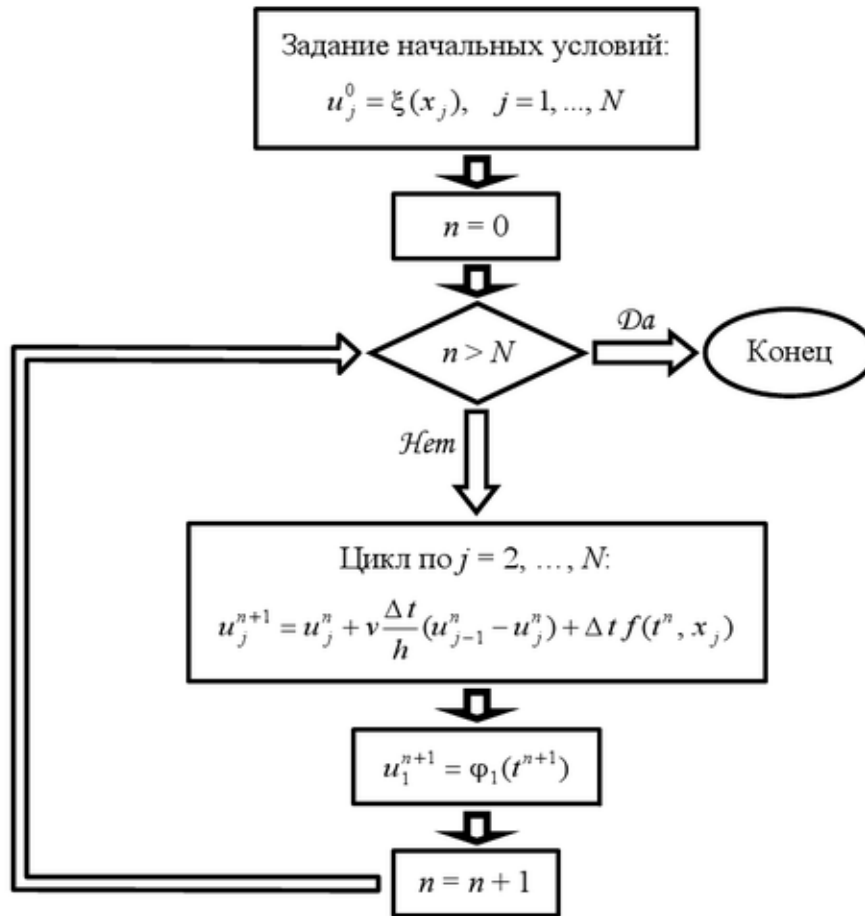


Рис. 5.7. Блок-схема решения разностной схемы (5.3)

На рис. 5.7 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения явной разностной схемы с аппроксимацией производной по координате левой конечной разностью (5.3).

5.5. Неявная разностная схема с аппроксимацией производной по координате правой конечной разностью

5.5.1. Исследование устойчивости

Исследуем устойчивость разностной схемы (5.4) с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f(t^n, x_j)$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоники (3.7):

$$u_j^n = \lambda^n e^{i\alpha j} \Rightarrow \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha(j+1)} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} + v \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha(j+1)} - \lambda^{n+1} e^{i\alpha j}}{h} = 0.$$

Упрощаем данное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$, и выражаем величину, обратную λ :

$$\begin{aligned} \frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v \frac{\lambda e^{i\alpha} - \lambda}{h} = 0 &\Rightarrow \lambda \left(1 - v \frac{\Delta t}{h} + v \frac{\Delta t}{h} e^{i\alpha} \right) = 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 1 - v \frac{\Delta t}{h} + v \frac{\Delta t}{h} e^{i\alpha}. \end{aligned}$$

При этом необходимое условие устойчивости разностных схем (5.6) также преобразуем к виду:

$$|\lambda| \leq 1 \Rightarrow \left| \frac{1}{\lambda} \right| \geq 1. \quad (5.7)$$

Неравенство (5.7) в применении к комплексным числам означает, что для устойчивости разностной схемы (5.4) требуется, чтобы величины, обратные собственным числам оператора перехода, были расположены вне или на границе круга радиусом 1, центр которого находится в начале координат комплексной плоскости (рис. 5.8).

Рассмотрим только случай $v < 0$ (чтобы сравнить с соответствующей явной разностной схемой (5.2), которая при $v < 0$ обладает условной устойчивостью). Введём следующее обозначение:

$$r = -v \frac{\Delta t}{h} > 0 \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 1 + r - r e^{i\alpha}.$$

Полученное выражение свидетельствует о том, что величины, обратные собственным числам оператора перехода, расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1 + r, 0)$ и радиусом:

$$|r e^{i\alpha}| = |r \cos \alpha + i r \sin \alpha| = \sqrt{r^2 \cos^2 \alpha + r^2 \sin^2 \alpha} = r.$$

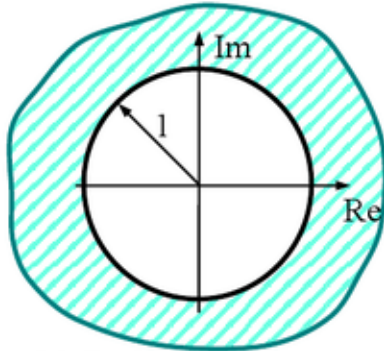


Рис. 5.8. Графическая интерпретация условия устойчивости (5.7)

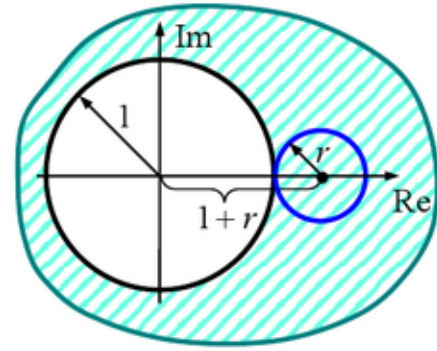


Рис. 5.9. Исследование устойчивости разностной схемы (5.4) при $v < 0$ и разностной схемы (5.5) при $v > 0$

Данная окружность находится вне круга, соответствующего условию (5.7) при любом значении r (рис. 5.9). Таким образом, при отрицательном значении параметра v неявная разностная схема (5.4) будет абсолютно устойчива.

5.5.2. Метод решения

Рассмотрим метод решения разностной схемы (5.4). Разностный шаблон (рис. 5.10), характеризующий данную разностную схему, свидетельствует о том, что она содержит две неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге

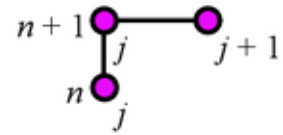


Рис. 5.10. Разностный шаблон разностной схемы (5.4)

по времени u_j^{n+1}, u_{j+1}^{n+1} . То есть, для определения величины u_j^{n+1} необходимо знать значение функции $u(t, x)$ в соседней справа точке на разностной сетке.

Выражая u_j^{n+1} из разностной схемы (5.4), получаем рекуррентное соотношение

$$u_j^{n+1} = \frac{u_j^n + v \frac{\Delta t}{h} u_{j+1}^{n+1} + \Delta t f(t^n, x_j)}{1 + v \frac{\Delta t}{h}}, \quad (5.8)$$

позволяющее последовательно рассчитать все значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени $u_j^{n+1}, j = N-1, \dots, 1$, если известна величина u_N^{n+1} , которую можно определить из *правого граничного условия*:

$$u_N^{n+1} = \varphi_2(t^{n+1}).$$

Таким образом, неявная разностная схема (5.4) по сложности метода решения не уступает соответствующей явной разностной схеме (5.2), а в отношении устойчивости имеет очевидное преимущество. Основываясь на этом, мы рекомендуем для численного решения дифференциального уравнения в частных производных 1-го порядка (5.1) при отрицательном значении параметра v именно неявную разностную схему с аппроксимацией производной по координате правой конечной разностью (5.4).

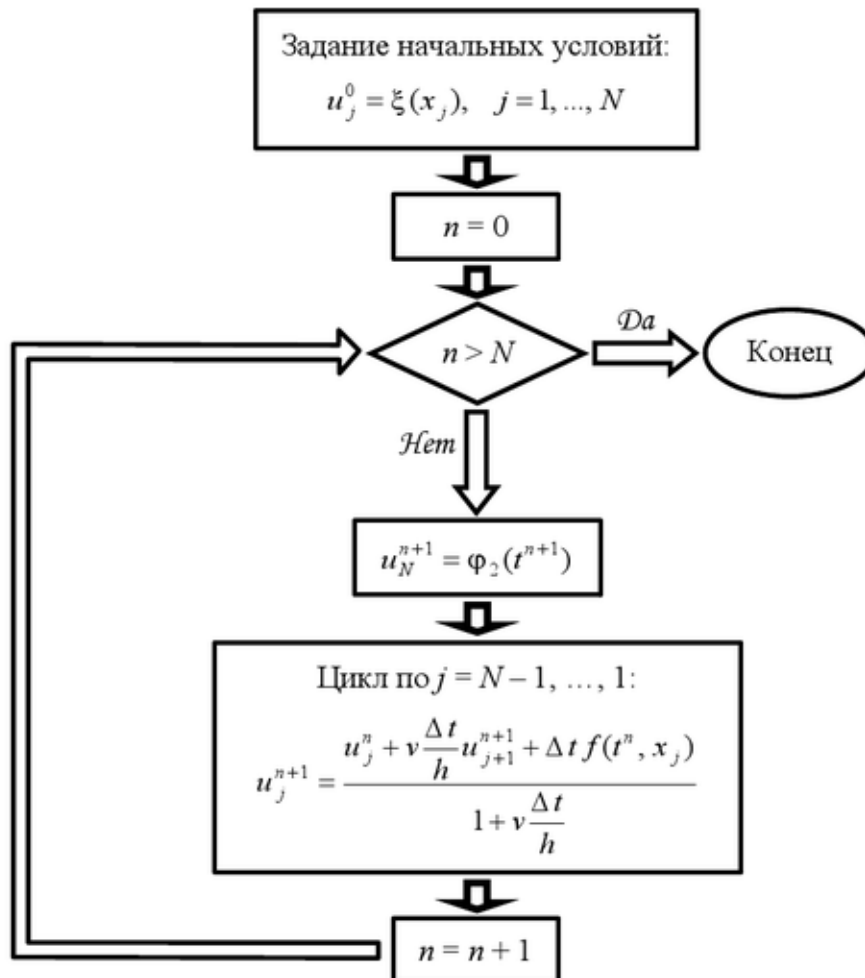


Рис. 5.11. Блок-схема решения разностной схемы (5.4)

На рис. 5.11 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения разностной схемы (5.4). Ещё раз отметим, что данную разностную схему целесообразно использовать только при $v < 0$, так как в этом случае она обладает абсолютной устойчивостью.

5.6. Неявная разностная схема с аппроксимацией производной по координате левой конечной разностью

5.6.1. Исследование устойчивости

Исследуем устойчивость разностной схемы (5.5) с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f(t^n, x_j)$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоник (3.7):

$$u_j^n = \lambda^n e^{i\alpha j} \Rightarrow \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} + v \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)}}{h} = 0.$$

Упрощаем данное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$, и выражаем величину, обратную λ :

$$\begin{aligned} \frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v \frac{\lambda - \lambda e^{-i\alpha}}{h} = 0 &\Rightarrow \lambda \left(1 + v \frac{\Delta t}{h} - v \frac{\Delta t}{h} e^{-i\alpha} \right) = 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 1 + v \frac{\Delta t}{h} - v \frac{\Delta t}{h} e^{-i\alpha}. \end{aligned}$$

Комплексный вид полученного выражения свидетельствует о том, что для устойчивости разностной схемы (5.5) согласно условию (5.7) требуется, чтобы величины, обратные собственным числам оператора перехода, были расположены вне или на границе круга радиусом 1, центр которого находится в начале координат комплексной плоскости (рис. 5.8).

Рассмотрим только случай $v > 0$ (чтобы сравнить с соответствующей явной разностной схемой (5.3), которая при $v > 0$ обладает условной устойчивостью). Введём следующее обозначение:

$$r = v \frac{\Delta t}{h} > 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\lambda} = 1 + r - r e^{-i\alpha}.$$

Полученное выражение свидетельствует о том, что величины, обратные собственным числам оператора перехода, расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1+r, 0)$ и радиусом r . Данная окружность находится вне круга, соответствующего условию (5.7) при любом значении r (рис. 5.9). Таким образом, при положительном значении параметра v неявная разностная схема (5.5) будет абсолютно устойчива.

5.6.2. Метод решения

Рассмотрим метод решения разностной схемы (5.5). Разностный шаблон (рис. 5.12), характеризующий данную разностную схему, свидетельствует о том, что она содержит две неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге

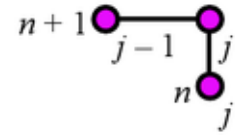


Рис. 5.12. Разностный шаблон разностной схемы (5.5)

по времени u_j^{n+1}, u_{j-1}^{n+1} . То есть, для определения величины u_j^{n+1} необходимо знать значение функции $u(t, x)$ в соседней слева точке на разностной сетке.

Выражая u_j^{n+1} из разностной схемы (5.5), получаем рекуррентное соотношение

$$u_j^{n+1} = \frac{u_j^n + v \frac{\Delta t}{h} u_{j-1}^{n+1} + \Delta t f(t^n, x_j)}{1 + v \frac{\Delta t}{h}}, \quad (5.9)$$

позволяющее последовательно рассчитать все значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени u_j^{n+1} , $j = 2, \dots, N$, если известна величина u_1^{n+1} , которую можно определить из *левого граничного условия*:

$$u_1^{n+1} = \varphi_1(t^{n+1}).$$

Таким образом, неявная разностная схема (5.5) по сложности метода решения не уступает соответствующей явной разностной схеме (5.3), а в отношении ус-

тойчивости имеет очевидное преимущество. Основываясь на этом, мы рекомендуем для численного решения дифференциального уравнения в частных производных 1-го порядка (5.1) при положительном значении параметра v именно неявную разностную схему с аппроксимацией производной по координате левой конечной разностью (5.5).

На рис. 5.13 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения разностной схемы (5.5). Ещё раз отметим, что данную разностную схему целесообразно использовать только при $v > 0$, так как в этом случае она обладает абсолютной устойчивостью.

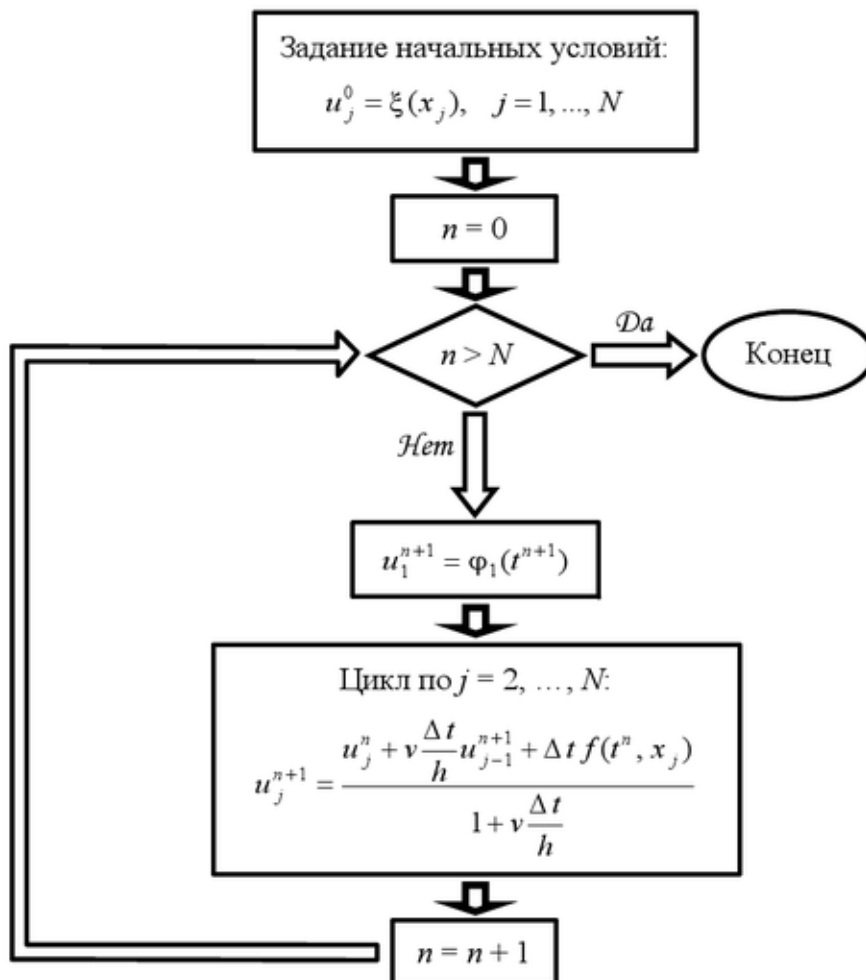


Рис. 5.13. Блок-схема решения разностной схемы (5.5)

5.7. Влияние наличия искомой функции в составе свободного члена на устойчивость разностных схем

Математические модели химических реакторов могут содержать дифференциальные уравнения типа (5.1), свободный член которых включает искомую функцию $u(t, x)$ следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = -ku + f(t, x), \quad k \geq 0. \quad (5.10)$$

Следует знать, как это влияет на устойчивость разностных схем (5.4), (5.5).

Разностная схема (5.4) абсолютно устойчива при $v < 0$. Для уравнения (5.10) она преобразуется к виду:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1}}{h} = -ku_j^{n+1} + f(t^n, x_j). \quad (5.11)$$

Величины, обратные собственным числам оператора перехода, для разностной схемы (5.11) будут определяться соотношением:

$$\frac{1}{\lambda} = 1 + k\Delta t - v \frac{\Delta t}{h} + v \frac{\Delta t}{h} e^{i\alpha} = 1 + k\Delta t + r - r e^{i\alpha}; \quad r = -v \frac{\Delta t}{h} > 0.$$

Следовательно, их расположение на комплексной плоскости будет соответствовать окружности с центром в точке $(1 + k\Delta t + r, 0)$ и радиусом r . Данная окружность находится вне круга, соответствующего условию устойчивости (5.7) при любом значении r (рис. 5.14). Таким образом, при $v < 0$ наличие функции $u(t, x)$ в свободном члене уравнения (5.10) не влияет на абсолютную устойчивость неявной разностной схемы с аппроксимацией производной $\partial u / \partial x$ правой конечной разностью.

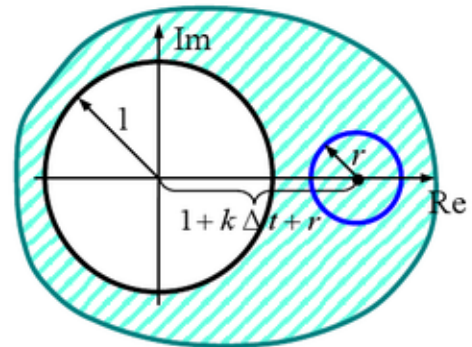


Рис. 5.14. Исследование устойчивости разностной схемы (5.11) при $v < 0$

Аналогично можно доказать, что при $v > 0$ разностная схема (5.5), имеющая для уравнения (5.10) следующий вид:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} = -k u_j^{n+1} + f(t^n, x_j),$$

сохранит абсолютную устойчивость.

5.8. Сравнительная характеристика изученных разностных схем

В заключение приведём сравнительную характеристику рекомендуемых для использования разностных схем, аппроксимирующих одномерное дифференциальное уравнение в частных производных 1-го порядка:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = f(t, x), \quad x \in [0, 1], \quad t \in [0, 1].$$

1. Неявная разностная схема с аппроксимацией производной $\partial u / \partial x$ правой конечной разностью

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1}}{h} = f(t^n, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h)$.
- Абсолютно устойчива при $v < 0$.
- Решается с помощью рекуррентного соотношения:

$$u_j^{n+1} = \frac{u_j^n + v \frac{\Delta t}{h} u_{j+1}^{n+1} + \Delta t f(t^n, x_j)}{1 + v \frac{\Delta t}{h}}.$$

- Для решения требуется задание правого граничного условия по координате x :

$$u(t, x = 1) = \psi(t).$$

2. Неявная разностная схема с аппроксимацией производной $\partial u / \partial x$ левой конечной разностью

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} = f(t^n, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h)$.
- Абсолютно устойчива при $v > 0$.
- Решается с помощью рекуррентного соотношения:

$$u_j^{n+1} = \frac{u_j^n + v \frac{\Delta t}{h} u_{j-1}^{n+1} + \Delta t f(t^n, x_j)}{1 + v \frac{\Delta t}{h}}.$$

- Для решения требуется задание левого граничного условия по координате x :

$$u(t, x = 0) = \varphi(t).$$

Таким образом, определяющим фактором при выборе разностной схемы для аппроксимации одномерного дифференциального уравнения в частных производных 1-го порядка является знак параметра v .

Сформулируем **правило выбора конечной разности** для аппроксимации производной первого порядка по координате в зависимости от знака стоящего перед ней параметра v : для того, чтобы разностная схема была устойчива (условно устойчива в случае явной разностной схемы и абсолютно устойчива в случае неявной разностной схемы) при положительном v для аппроксимации первой производной по координате следует использовать левую конечную разность, при отрицательном v – правую конечную разность. Кроме этого, для решения разностной схемы при положительном v потребуется левое граничное условие, при отрицательном v – правое граничное условие.

Отметим, что данное правило применимо только в случае, если производная первого порядка по координате находится в левой части дифференциального уравнения (т.е., если дифференциальное уравнение представлено в виде (5.1),

для которого проводились все исследования). Если же первая производная по координате находится в правой части дифференциального уравнения, то её необходимо перенести в левую и только затем применять правило выбора конечной разности.

Глава 6. Решение дифференциальных уравнений параболического типа, содержащих производную по координате первого порядка

6.1. Постановка задачи

В разделе 1.6 мы рассматривали математическую модель трубчатого реактора с продольным перемешиванием, в котором протекает простая необратимая реакция. Баланс по концентрации исходного реагента для нестационарного режима имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - k c,$$

где c – концентрация исходного реагента; v – линейная скорость потока; k – константа скорости химической реакции; x – координата по длине реактора; D_L – коэффициент диффузии.

Данное уравнение относится к дифференциальным уравнениям параболического типа. Однако оно отличается от уже изученных нами уравнений параболического типа наличием первой производной по координате. Рассмотрим влияние этой производной на характеристики и методику решения разностных схем, аппроксимирующих одномерное дифференциальное уравнение параболического типа.

Для простоты дальнейшего изложения мы будем рассматривать одномерные дифференциальные уравнения параболического типа, содержащие производную по координате первого порядка, в следующем общем виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(t, x); \quad v > 0, \sigma > 0. \quad (6.1)$$

Значение параметра v в общем случае может быть положительным или отрицательным. Напомним, что согласно правилу выбора конечной разности для аппроксимации производной первого порядка по координате при положительном v следует использовать левую конечную разность, при отрицательном v – пра-

вую конечную разность. Поэтому рассмотрим только случай $\nu > 0$ (случай $\nu < 0$ будет аналогичным при аппроксимации производной $\partial u / \partial x$ левой конечной разностью). Также отдельно рассмотрим случай аппроксимации первой производной по координате центральной конечной разностью.

Уравнение (6.1) следует дополнить начальным и граничными условиями (для определённости будем рассматривать граничные условия 1-го рода):

$$u(t=0, x) = \xi(x), \quad u(t, x=0) = \varphi_1(t), \quad u(t, x=l) = \varphi_2(t).$$

6.2. Явная разностная схема

6.2.1. Характеристика

Явная разностная схема для уравнения (6.1) имеет вид:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (6.2)$$

Исследуем её устойчивость с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f(t^n, x_j)$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоники (3.7):

$$\frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} + \nu \frac{\lambda^n e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha(j-1)}}{h} = \sigma \frac{\lambda^n e^{i\alpha(j+1)} - 2\lambda^n e^{i\alpha j} + \lambda^n e^{i\alpha(j-1)}}{h^2}.$$

Упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + \nu \frac{1 - e^{-i\alpha}}{h} = \sigma \frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h^2}.$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем формулу

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + \nu \frac{1 - e^{-i\alpha}}{h} = -\frac{\sigma}{h^2} 4 \sin^2 \frac{\alpha}{2},$$

из которой выражаем λ :

$$\lambda = 1 - \nu \frac{\Delta t}{h} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} + \nu \frac{\Delta t}{h} e^{-i\alpha}.$$

Комплексный вид полученного выражения свидетельствует о том, что для устойчивости разностной схемы (6.2) согласно необходимому условию устойчивости разностных схем (3.8) требуется, чтобы собственные числа оператора перехода были расположены внутри или на границе круга радиусом 1, центр которого находится в начале координат комплексной плоскости (рис. 5.1).

Введём следующие обозначения:

$$r = v \frac{\Delta t}{h} > 0, \quad q = v \frac{\Delta t}{h} + 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} > 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = 1 - q + r e^{-i\alpha}.$$

Следовательно, собственные числа оператора перехода расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1 - q; 0)$ и радиусом r (рис. 6.1). Данная окружность не выходит за границы круга, соответствующего условию устойчивости (3.8), только при выполнении неравенства:

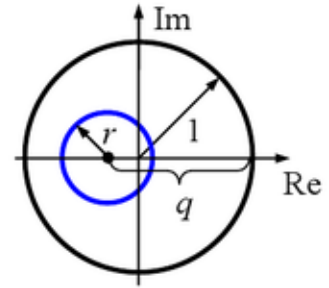


Рис. 6.1. Исследование устойчивости разностной схемы (6.2)

$$|1 - q| + r \leq 1 \quad \Rightarrow \quad r - 1 \leq 1 - q \leq 1 - r.$$

Так как $r \leq q$, правое условие выполняется автоматически. Рассмотрим более подробно левое условие:

$$v \frac{\Delta t}{h} - 1 \leq 1 - v \frac{\Delta t}{h} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \quad \Rightarrow \quad v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \leq 1.$$

Задавая для $\sin^2 \frac{\alpha}{2}$ максимально возможное значение, равное 1, перейдём к более строгому условию, справедливому для любого α :

$$v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \leq 1. \quad (6.3)$$

Выражение (6.3) является условием устойчивости явной разностной схемы (6.2), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (6.1).

Для определения порядка аппроксимации явной разностной схемы (6.2) подставим в неё выражения (2.16)–(2.18), описывающие разложение значений u_j^{n+1} , u_{j+1}^n , u_{j-1}^n в ряд Тейлора относительно точки (t^n, x_j) на разностной сетке:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_j^n \Delta t - v \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_j^n + \frac{v}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n h &= \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n + \frac{\sigma}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_j^n h^2 + f(t^n, x_j) \\ \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n + O(\Delta t) - v \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_j^n + O(h) &= \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^n + O(h^2) + f(t^n, x_j). \end{aligned}$$

Так как ошибка $O(h)$ является более грубой, чем $O(h^2)$:

$$O(h) > O(h^2),$$

явная разностная схема (6.2) аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение (6.1) с первым порядком и по времени, и по координате:

$$O(\Delta t) + O(h) \quad \text{или} \quad O(\Delta t, h).$$

6.2.2. Метод решения

Разностный шаблон (рис. 6.2), характеризующий явную разностную схему (6.2), свидетельствует о том, что она содержит одну неизвестную величину – значение функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени. Выражая эту величину из разностной схемы, получаем рекуррентное соотношение

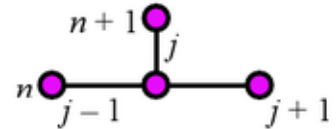


Рис. 6.2. Разностный шаблон разностной схемы (6.2)

$$u_j^{n+1} = u_j^n + v \frac{\Delta t}{h} (u_{j-1}^n - u_j^n) + \sigma \frac{\Delta t}{h^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \Delta t f(t^n, x_j), \quad (6.4)$$

позволяющее рассчитать все значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени (при известных значениях функции $u(t, x)$ на n -м шаге), кроме значений u_1^{n+1} , u_N^{n+1} , определяемых с помощью граничных условий. Если заданы граничные условия 1-го рода, то значения u_1^{n+1} , u_N^{n+1} определяются непосредственно из их разностной аппроксимации; если 2-го или 3-го рода, то – с помощью соот-

ношений (4.4,a) и (4.4,b). Таким образом, алгоритм решения явной разностной схемы (6.2) аналогичен алгоритму решения явной разностной схемы (4.2), аппроксимирующей дифференциальное уравнение параболического типа, не содержащее производную по координате первого порядка $\partial u / \partial x$ (рис. 4.2).

6.3. Неявная разностная схема

6.3.1. Характеристика

Неявная разностная схема для уравнения (6.1) имеет вид:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (6.5)$$

Учитывая порядок аппроксимации разностных операторов, составляющих данную разностную схему, легко видеть, что она, как и явная разностная схема (6.2), аппроксимирует дифференциальное уравнение (6.1) с первым порядком и по времени, и по координате:

$$O(\Delta t, h).$$

Исследуем устойчивость неявной разностной схемы (6.5) с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f(t^n, x_j)$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоники (3.7):

$$\begin{aligned} \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} + v \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} - \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)}}{h} = \\ = \sigma \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha(j+1)} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)}}{h^2}. \end{aligned}$$

Упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v \frac{\lambda - \lambda e^{-i\alpha}}{h} = \sigma \frac{\lambda e^{i\alpha} - 2\lambda + \lambda e^{-i\alpha}}{h^2}.$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем

$$\frac{\lambda-1}{\Delta t} + v \frac{\lambda - \lambda e^{-i\alpha}}{h} = -\lambda \frac{\sigma}{h^2} 4 \sin^2 \frac{\alpha}{2}.$$

Группируя члены, содержащие λ , в левой части уравнения, выразим величину, обратную λ :

$$\begin{aligned} \lambda \left(1 + v \frac{\Delta t}{h} + 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} - v \frac{\Delta t}{h} e^{-i\alpha} \right) &= 1 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{1}{\lambda} &= 1 + v \frac{\Delta t}{h} + 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} - v \frac{\Delta t}{h} e^{-i\alpha}. \end{aligned}$$

При этом необходимое условие устойчивости разностных схем (3.8) также преобразуем к виду:

$$|\lambda| \leq 1 \Rightarrow \left| \frac{1}{\lambda} \right| \geq 1. \quad (6.6)$$

Комплексный вид полученного выражения свидетельствует о том, что для устойчивости разностной схемы (6.5) согласно условию (6.6) требуется, чтобы величины, обратные собственным числам оператора перехода, были расположены вне или на границе круга радиусом 1, центр которого находится в начале координат комплексной плоскости (рис. 5.8).

Введём следующие обозначения:

$$r = v \frac{\Delta t}{h} > 0, \quad q = v \frac{\Delta t}{h} + 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} > 0 \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 1 + q - r e^{-i\alpha}.$$

Следовательно, величины, обратные собственным числам оператора перехода, расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1+q, 0)$ и радиусом r (рис. 6.3). Так как $(1+q) > r$, данная окружность находится вне круга, соответствующего условию устойчивости, при любом значении r . Это означает, что неявная разностная схема (6.5) абсолютно устойчива.

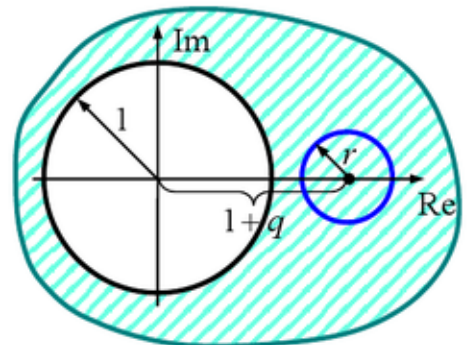


Рис. 6.3. Исследование устойчивости разностной схемы (6.5)

6.3.2. Метод решения

Разностный шаблон (рис. 6.4), характеризующий неявную разностную схему (6.5), свидетельствует о том, что она содержит три неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени. Следовательно, для решения данной разностной схемы необходимо использовать метод прогонки.

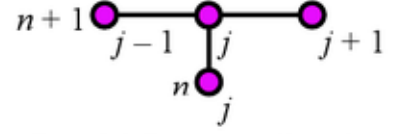


Рис. 6.4. Разностный шаблон разностной схемы (6.5)

Приведём разностную схему (6.5) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$-\sigma \frac{\Delta t}{h^2} u_{j+1}^{n+1} + \left(1 + v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2}\right) u_j^{n+1} - \left(v \frac{\Delta t}{h} + \sigma \frac{\Delta t}{h^2}\right) u_{j-1}^{n+1} = u_j^n + \Delta t f(t^n, x_j).$$

Следовательно, коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$\begin{aligned} a_j &= -\sigma \frac{\Delta t}{h^2}, & b_j &= 1 + v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2}, \\ c_j &= -v \frac{\Delta t}{h} - \sigma \frac{\Delta t}{h^2}, & \xi_j^n &= u_j^n + \Delta t f(t^n, x_j). \end{aligned}$$

Легко видеть, что для разностной схемы (6.5) достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} < 1 + v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} = |b_j|.$$

Алгоритм решения, а также методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2.

6.4. Разностная схема Кранка–Николсона

При описании методов решения дифференциальных уравнений параболического типа, не содержащих первую производную по координате $\partial u / \partial x$, рассматривалась разностная схема Кранка–Николсона, обладающая абсолютной

устойчивостью и вторым порядком аппроксимации по времени (в отличие от явной и неявной разностных схем). Запишем разностную схему Кранка–Николсона для уравнения (6.1):

$$\begin{aligned} & \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{\nu}{2} \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} + \frac{\nu}{2} \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \\ & = \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(t^n, x_j). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Обратим внимание, что для сохранения второго порядка аппроксимации по времени производную $\partial u / \partial x$ необходимо представить также, как и производную второго порядка, т.е. в виде суммы двух слагаемых, одно из которых аппроксимировано на $(n+1)$ -м шаге по времени, а другое – на n -м шаге по времени.

Разностная схема (6.7) является абсолютно устойчивой (доказательство в силу сложности не приводится) и имеет порядок аппроксимации:

$$O(\Delta t^2, h).$$

Разностный шаблон (рис. 6.5), характеризующий разностную схему (6.7), свидетельствует о том, что она содержит три неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени. Следовательно, для её решения необходимо использовать метод прогонки.

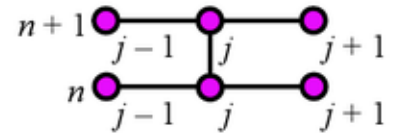


Рис. 6.5. Разностный шаблон разностной схемы (6.7)

Приведём разностную схему (6.7) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$\begin{aligned} & -\sigma \frac{\Delta t}{2h^2} u_{j+1}^{n+1} + \left(1 + \nu \frac{\Delta t}{2h} + \sigma \frac{\Delta t}{h^2}\right) u_j^{n+1} - \left(\nu \frac{\Delta t}{2h} + \sigma \frac{\Delta t}{2h^2}\right) u_{j-1}^{n+1} = \\ & = u_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{2h^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) - \nu \frac{\Delta t}{2h} (u_j^n - u_{j-1}^n) + \Delta t f(t^n, x_j). \end{aligned}$$

Следовательно, коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$a_j = -\sigma \frac{\Delta t}{2h^2}, \quad b_j = 1 + v \frac{\Delta t}{2h} + \sigma \frac{\Delta t}{h^2}, \quad c_j = -v \frac{\Delta t}{2h} - \sigma \frac{\Delta t}{2h^2},$$

$$\xi_j^n = u_j^n + \frac{\sigma \Delta t}{2h^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) - v \frac{\Delta t}{2h}(u_j^n - u_{j-1}^n) + \Delta t f(t^n, x_j).$$

Легко видеть, что для разностной схемы (6.7) достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = v \frac{\Delta t}{2h} + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} < 1 + v \frac{\Delta t}{2h} + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} = |b_j|.$$

Алгоритм решения, а также методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2.

6.5. Неявная разностная схема с аппроксимацией производной по координате первого порядка центральной конечной разностью

6.5.1. Характеристика

Неявная разностная схема для уравнения (6.1) при аппроксимации производной $\partial u / \partial x$ центральной конечной разностью имеет вид:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (6.8)$$

Учитывая порядок аппроксимации разностных операторов, составляющих данную разностную схему, легко видеть, что она аппроксимирует дифференциальное уравнение (6.1) с первым порядком по времени, и со вторым – по координате:

$$O(\Delta t, h^2).$$

Исследуем устойчивость разностной схемы (6.8) с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f(t^n, x_j)$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоник (3.7):

$$\begin{aligned} & \frac{\lambda^{n+1}e^{i\alpha j} - \lambda^n e^{i\alpha j}}{\Delta t} + v \frac{\lambda^{n+1}e^{i\alpha(j+1)} - \lambda^{n+1}e^{i\alpha(j-1)}}{2h} = \\ & = \sigma \frac{\lambda^{n+1}e^{i\alpha(j+1)} - 2\lambda^{n+1}e^{i\alpha j} + \lambda^{n+1}e^{i\alpha(j-1)}}{h^2}. \end{aligned}$$

Упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v \frac{\lambda e^{i\alpha} - \lambda e^{-i\alpha}}{2h} = \sigma \frac{\lambda e^{i\alpha} - 2\lambda + \lambda e^{-i\alpha}}{h^2}.$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v\lambda \frac{2i\sin\alpha}{2h} = -\lambda \frac{\sigma}{h^2} 4\sin^2 \frac{\alpha}{2}.$$

Группируя члены, содержащие λ , в левой части уравнения, выразим величину, обратную λ :

$$\begin{aligned} & \lambda \left(1 + 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} + v \frac{\Delta t}{h} i \sin \alpha \right) = 1 \Rightarrow \\ & \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 1 + 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} + v \frac{\Delta t}{h} i \sin \alpha. \end{aligned}$$

Определим модуль полученного комплексного числа:

$$\left| \frac{1}{\lambda} \right| = \sqrt{\left(1 + 4\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right)^2 + \left(v \frac{\Delta t}{h} \sin \alpha \right)^2} \geq 1 \Rightarrow |\lambda| \leq 1.$$

Таким образом, собственные числа оператора перехода удовлетворяют условию устойчивости разностных схем (3.8). Следовательно, неявная разностная схема с аппроксимацией производной $\partial u / \partial x$ центральной конечной разностью (6.8) абсолютно устойчива, причём вне зависимости от знака параметра v .

6.5.2. Метод решения

Разностный шаблон (рис. 6.6), характеризующий разностную схему (6.8), свидетельствует о том, что она содержит три неизвестные величины – значения функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м

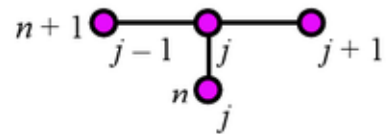


Рис. 6.6. Разностный шаблон разностной схемы (6.8)

шаге по времени. Следовательно, для решения данной разностной схемы необходимо использовать метод прогонки.

Приведём разностную схему (6.8) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$\left(v \frac{\Delta t}{2h} - \sigma \frac{\Delta t}{h^2}\right) u_{j+1}^{n+1} + \left(1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2}\right) u_j^{n+1} - \left(v \frac{\Delta t}{2h} + \sigma \frac{\Delta t}{h^2}\right) u_{j-1}^{n+1} = u_j^n + \Delta t f(t^n, x_j).$$

Следовательно, коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$\begin{aligned} a_j &= v \frac{\Delta t}{2h} - \sigma \frac{\Delta t}{h^2}, & b_j &= 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2}, \\ c_j &= -v \frac{\Delta t}{2h} - \sigma \frac{\Delta t}{h^2}, & \xi_j^n &= u_j^n + \Delta t f(t^n, x_j). \end{aligned}$$

Легко видеть, что для случая

$$\left|v\right| \frac{\Delta t}{2h} \leq \sigma \frac{\Delta t}{h^2} \quad \Leftrightarrow \quad h \leq \frac{2\sigma}{|v|} \quad (6.9)$$

достаточное условие сходимости прогонки (4.16) для разностной схемы (6.8) выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = \sigma \frac{\Delta t}{h^2} - \left|v\right| \frac{\Delta t}{2h} + \sigma \frac{\Delta t}{h^2} + \left|v\right| \frac{\Delta t}{2h} = 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} < 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} = |b_j|.$$

Если же

$$\left|v\right| \frac{\Delta t}{2h} > \sigma \frac{\Delta t}{h^2} \quad \Leftrightarrow \quad h > \frac{2\sigma}{|v|},$$

то достаточное условие сходимости прогонки (4.16) для разностной схемы (6.8) выполняется только в случае справедливости неравенства:

$$\begin{aligned} |a_j| + |c_j| &= \left|v\right| \frac{\Delta t}{2h} - \sigma \frac{\Delta t}{h^2} + \sigma \frac{\Delta t}{h^2} + \left|v\right| \frac{\Delta t}{2h} = \left|v\right| \frac{\Delta t}{h} < 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} = |b_j| \Rightarrow \\ &\Rightarrow \quad \left|v\right| \frac{\Delta t}{h} < 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Таким образом, если величина шага по координате удовлетворяет условию (6.9), то ограничений на шаг по времени нет; если же величина шага по координате не удовлетворяет условию (6.9), то при выборе шага по времени необходимо учитывать условие (6.10). Отметим, что если условие (6.9) позволяет задать приемлемую величину шага по координате ($h = 0,1$), то разностная схема (6.8) становится более предпочтительной по сравнению с разностной схемой (6.5) в силу большего порядка аппроксимации по координате.

Алгоритм решения, а также методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2.

6.6. Сравнительная характеристика изученных разностных схем

В заключение приведём сравнительную характеристику разностных схем, аппроксимирующих одномерное дифференциальное уравнение параболического типа, содержащее первую производную по координате:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(t, x); \quad v > 0, \sigma > 0.$$

1. Явная разностная схема

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(t^n, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h)$.
- Условно устойчива $v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} \leq 1$.
- Решается с помощью рекуррентного соотношения (6.4).

2. Неявная разностная схема

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается методом прогонки.

3. Разностная схема Кранка–Николсона

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{v}{2} \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} + \frac{v}{2} \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \\ = \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(t^n, x_j). \end{aligned}$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается методом прогонки.

Напомним, что в случае $v < 0$ для аппроксимации производной $\partial u / \partial x$ следует использовать правую конечную разность.

Вне зависимости от знака параметра v (или в случае, когда v является знакопеременной величиной) может быть также использована неявная разностная схема с аппроксимацией производной $\partial u / \partial x$ центральной конечной разностью

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается методом прогонки, сходящейся при выполнении одного из условий: (6.9) или (6.10).

Глава 7. Решение двумерных дифференциальных уравнений параболического типа

7.1. Примеры двумерных дифференциальных уравнений параболического типа

В разделе 1.6 мы рассматривали математическую модель трубчатого реактора с продольным и поперечным перемешиванием, в котором протекает простая необратимая реакция. Баланс по концентрации исходного реагента для нестационарного режима имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_R \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D_R}{r} \frac{\partial c}{\partial r} - k c,$$

где k – константа скорости химической реакции; c – концентрация исходного реагента; v – линейная скорость потока; x – координата по длине реактора; r – координата по радиусу реактора; D_L, D_R – коэффициенты диффузии в продольном и поперечном направлениях.

Данное уравнение является двумерным дифференциальным уравнением параболического типа. Его двумерность обусловлена тем, что концентрация компонента X – функция трёх переменных, две из которых являются пространственными координатами:

$$c = c(t, x, r).$$

Другим примером двумерного дифференциального уравнения параболического типа является уравнение теплопроводности для нестационарного двумерного температурного поля:

$$\rho C_T \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + q,$$

где T – температура; x, y – пространственные координаты; C_T, ρ, λ – теплоёмкость, плотность и теплопроводность материала; q – внутренний источник (сток) теплоты.

Уравнение вихря скорости, являющееся преобразованием уравнения Навье–Стокса, – ещё один пример двумерного дифференциального уравнения параболического типа:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + v^x \frac{\partial \xi}{\partial x} + v^y \frac{\partial \xi}{\partial y} = \gamma \left(\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} \right).$$

Очевидно, в математических моделях физико-химических и химико-технологических процессов встречаются не только одномерные, но и двумерные дифференциальные уравнения, для численного решения которых требуется особый подход. В настоящей главе рассмотрим двумерные дифференциальные уравнения параболического типа, не содержащие производных по координатам первого порядка. Следующая глава будет посвящена двумерным дифференциальным уравнениям в частных производных 1-го порядка и двумерным дифференциальным уравнениям параболического типа, содержащим первые производные по координатам.

7.2. Разностная сетка для двумерных задач

Запишем двумерное дифференциальное уравнение параболического типа, не содержащее первых производных по координатам x и y , в следующем общем виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(t, x, y); \quad \sigma > 0. \quad (7.1)$$

Уравнение (7.1) должно быть дополнено начальным и двумя граничными условиями по каждой из пространственных координат (для определённости будем рассматривать граничные условия 1-го рода):

$$\begin{aligned} u(t=0, x, y) &= \xi(x, y); \\ \begin{cases} u(t, x=a, y) = \varphi_1(t, y), \\ u(t, x=b, y) = \varphi_2(t, y); \end{cases} & \quad \begin{cases} u(t, x, y=c) = \psi_1(t, x), \\ u(t, x, y=d) = \psi_2(t, x). \end{cases} \end{aligned}$$

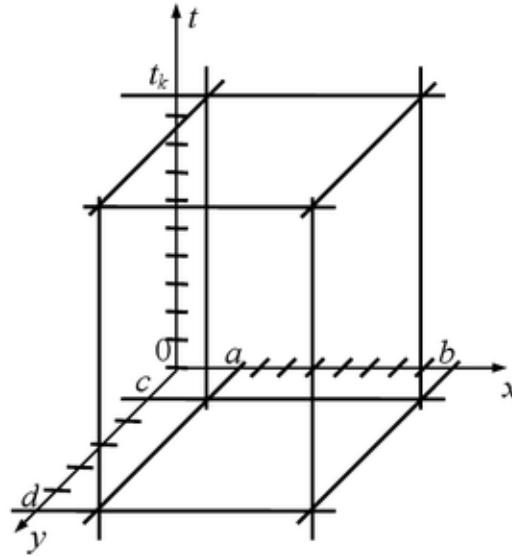


Рис. 7.1. Разностная сетка для функции, зависящей от трёх независимых переменных

Пусть для независимых переменных заданы интервалы их изменения:

$$t \in [0, t_k], \quad x \in [a, b], \quad y \in [c, d].$$

Разбивая каждый из этих интервалов на некоторое количество равных частей (по аналогии с тем, как это было сделано в разделе 2.3.1 для случая двух независимых переменных), получим **разностную сетку**, которая в данном случае будет трёхмерной (рис. 7.1). Введём следующие обозначения:

n – порядковый номер точки деления по оси t ,

j – порядковый номер точки деления по оси x ,

k – порядковый номер точки деления по оси y ,

$t^{n+1} - t^n = \Delta t$ – величина интервала между точками по оси t ,

$x_{j+1} - x_j = \Delta x = h_x$ – величина интервала между точками по оси x ,

$y_{k+1} - y_k = \Delta y = h_y$ – величина интервала между точками по оси y ,

$u(t^n, x_j, y_k) = u_{j,k}^n$ – значение функции $u(t, x, y)$, соответствующее точкам

t^n, x_j, y_k ;

$f(t^n, x_j, y_k) = f_{j,k}^n$ – значение функции $f(t, x, y)$, соответствующее точкам

кам t^n, x_j, y_k .

Введём нумерацию точек разностной сетки по каждой из осей следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{по оси } t - & \quad n = 0, 1, 2, \dots, M; \\ \text{по оси } x - & \quad j = 1, 2, 3, \dots, N_x; \\ \text{по оси } y - & \quad k = 1, 2, 3, \dots, N_y. \end{aligned}$$

Тогда значения переменных t , x и y в точках разностной сетки будут определяться согласно следующему правилу:

$$\begin{aligned} t^0 = 0, \quad t^1 = \Delta t, \quad t^2 = 2\Delta t, \quad \dots, \quad t^n = n \cdot \Delta t; \\ x_1 = a, \quad x_2 = a + h_x, \quad x_3 = a + 2h_x, \quad \dots, \quad x_j = a + (j-1)h_x; \\ y_1 = c, \quad y_2 = c + h_y, \quad y_3 = c + 2h_y, \quad \dots, \quad y_k = c + (k-1)h_y. \end{aligned}$$

7.3. Аппроксимация дифференциальных операторов

Используя введенные обозначения, запишем аппроксимацию дифференциальных операторов, составляющих уравнение (7.1), в точке (t^n, x_j, y_k) . Для аппроксимации производной по времени обычно используется правая конечная разность (со стабилизацией значения независимой переменной x в точке с порядковым номером j , а значения независимой переменной y в точке с порядковым номером k):

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t^n, x_j, y_k} \rightarrow \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t}.$$

Для аппроксимации второй производной по координате x будем использовать разностный оператор (2.12) (со стабилизацией значения независимой переменной y в точке с порядковым номером k , а значения независимой переменной t в точке с порядковым номером n):

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{t^n, x_j, y_k} \rightarrow \lambda_{xx} u_{j,k}^n = \frac{u_{j+1,k}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j-1,k}^n}{h_x^2}.$$

Для аппроксимации второй производной по координате y также будем использовать разностный оператор (2.12) (со стабилизацией значения независимой пе-

ременной x в точке с порядковым номером j , а значения независимой переменной t в точке с порядковым номером n):

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{t^n, x_j, y_k} \rightarrow \lambda_{yy} u_{j,k}^n = \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2}.$$

Подставляя записанные разностные операторы в дифференциальное уравнение (7.1), получаем явную разностную схему, аппроксимирующую уравнение (7.1) в точке (t^n, x_j, y_k) :

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \left(\frac{u_{j+1,k}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j-1,k}^n}{h_x^2} + \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2} \right) + f_{j,k}^n. \quad (7.2)$$

Рассматривая аппроксимацию обеих производных второго порядка на $(n+1)$ -м шаге по времени, получаем неявную разностную схему:

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \left(\frac{u_{j+1,k}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j-1,k}^{n+1}}{h_x^2} + \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2} \right) + f_{j,k}^n. \quad (7.3)$$

Учитывая порядок аппроксимации разностных операторов, использованных при составлении разностных схем (7.2), (7.3), легко видеть, что они имеют первый порядок аппроксимации по времени и второй – по каждой из координат:

$$O(\Delta t, h_x^2, h_y^2).$$

7.4. Явная разностная схема

7.4.1. Исследование устойчивости

Исследуем устойчивость явной разностной схемы (7.2), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (7.1), с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f_{j,k}^n$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоник:

$$u_{j,k}^n = \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}, \quad \alpha \in [0, 2\pi], \quad \beta \in [0, 2\pi];$$

$$\frac{\lambda^{n+1}e^{i\alpha j}e^{i\beta k} - \lambda^n e^{i\alpha j}e^{i\beta k}}{\Delta t} = \sigma \frac{\lambda^n e^{i\alpha(j+1)}e^{i\beta k} - 2\lambda^n e^{i\alpha j}e^{i\beta k} + \lambda^n e^{i\alpha(j-1)}e^{i\beta k}}{h_x^2} +$$

$$+ \sigma \frac{\lambda^n e^{i\alpha j}e^{i\beta(k+1)} - 2\lambda^n e^{i\alpha j}e^{i\beta k} + \lambda^n e^{i\alpha j}e^{i\beta(k-1)}}{h_y^2}.$$

Далее упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j}e^{i\beta k}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \left(\frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h_x^2} + \frac{e^{i\beta} - 2 + e^{-i\beta}}{h_y^2} \right).$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем формулу

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = -\frac{\sigma}{h_x^2} 4\sin^2 \frac{\alpha}{2} - \frac{\sigma}{h_y^2} 4\sin^2 \frac{\beta}{2},$$

из которой выражаем λ :

$$\lambda = 1 - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2}.$$

С учётом необходимого условия устойчивости разностных схем (3.8) имеем:

$$|\lambda| \leq 1 \quad \Rightarrow \quad -1 \leq 1 - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2} \leq 1.$$

В полученном двойном неравенстве правое условие выполняется автоматически. Поэтому рассмотрим более подробно левое условие:

$$1 - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2} \geq -1 \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} + \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2} \leq \frac{1}{2\sigma}.$$

Задавая для $\sin^2 \frac{\alpha}{2}$, $\sin^2 \frac{\beta}{2}$ максимально возможное значение, равное 1, перей-

дём к более строгому условию, справедливому для любых α и β :

$$\frac{\Delta t}{h_x^2} + \frac{\Delta t}{h_y^2} \leq \frac{1}{2\sigma} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta t \leq \frac{1}{\frac{2\sigma}{h_x^2} + \frac{2\sigma}{h_y^2}}. \quad (7.4)$$

Выражение (7.4) является условием устойчивости явной разностной схемы (7.2), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (7.1). Если интервалы между точками по осям x и y на разностной сетке задать равными

$$h_x = h_y = h,$$

выражение (7.4) примет более простой вид:

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{4\sigma}.$$

Сравнивая данное выражение с соотношением (3.12) (являющимся условием устойчивости явной разностной схемы (3.4), аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение параболического типа (3.3)) можно сделать вывод, что увеличение размерности системы на порядок приводит к уменьшению в два раза максимально возможного значения Δt , при котором явная разностная схема будет устойчива.

7.4.2. Метод решения

Разностный шаблон (рис. 7.2), характеризующий явную разностную схему (7.2), свидетельствует о том, что она содержит одну неизвестную величину – значение функции $u(t, x, y)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени. Выражая эту величину из разностной схемы, получаем рекуррентное соотношение

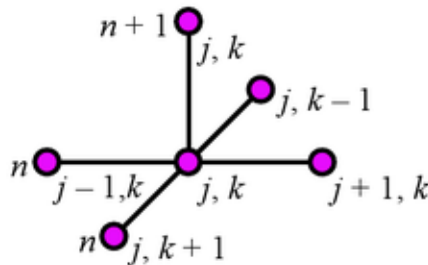


Рис. 7.2. Разностный шаблон явной разностной схемы, аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа

$$\begin{aligned}
u_{j,k}^{n+1} = & u_{j,k}^n + \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} (u_{j+1,k}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j-1,k}^n) + \\
& + \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} (u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n) + \Delta t f_{j,k}^n,
\end{aligned} \tag{7.5}$$

позволяющее рассчитать все значения функции $u(t, x, y)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени (при известных значениях функции $u(t, x, y)$ на n -м шаге), кроме значений $u_{1,k}^{n+1}, u_{N_x,k}^{n+1}, u_{j,1}^{n+1}, u_{j,N_y}^{n+1}$, определяемых с помощью граничных условий. Если заданы граничные условия 1-го рода, то эти значения определяются непосредственно из разностной аппроксимации граничных условий:

$$\begin{cases} u_{1,k}^{n+1} = \Phi_1(t^{n+1}, y_k) \\ u_{N_x,k}^{n+1} = \Phi_2(t^{n+1}, y_k) \end{cases} \quad \begin{cases} u_{j,1}^{n+1} = \Psi_1(t^{n+1}, x_j) \\ u_{j,N_y}^{n+1} = \Psi_2(t^{n+1}, x_j) \end{cases}$$

Если заданы граничные условия 2-го или 3-го рода, то значения $u_{1,k}^{n+1}, u_{N_x,k}^{n+1}, u_{j,1}^{n+1}, u_{j,N_y}^{n+1}$ можно определить, выразив их из разностной аппроксимации граничных условий.

Используя обозначение, принятое для разностного оператора (2.12)

$$\lambda_{xx} u_{j,k}^n = \frac{u_{j+1,k}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j-1,k}^n}{h_x^2}, \quad \lambda_{yy} u_{j,k}^n = \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2}, \tag{7.6}$$

запишем рекуррентное соотношение (7.5) в более компактном виде:

$$u_{j,k}^{n+1} = u_{j,k}^n + \sigma \Delta t \lambda_{xx} u_{j,k}^n + \sigma \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k}^n + \Delta t f_{j,k}^n.$$

На рис. 7.3 приведён алгоритм решения (в виде блок-схемы) явной разностной схемы (7.2), аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа (7.1).

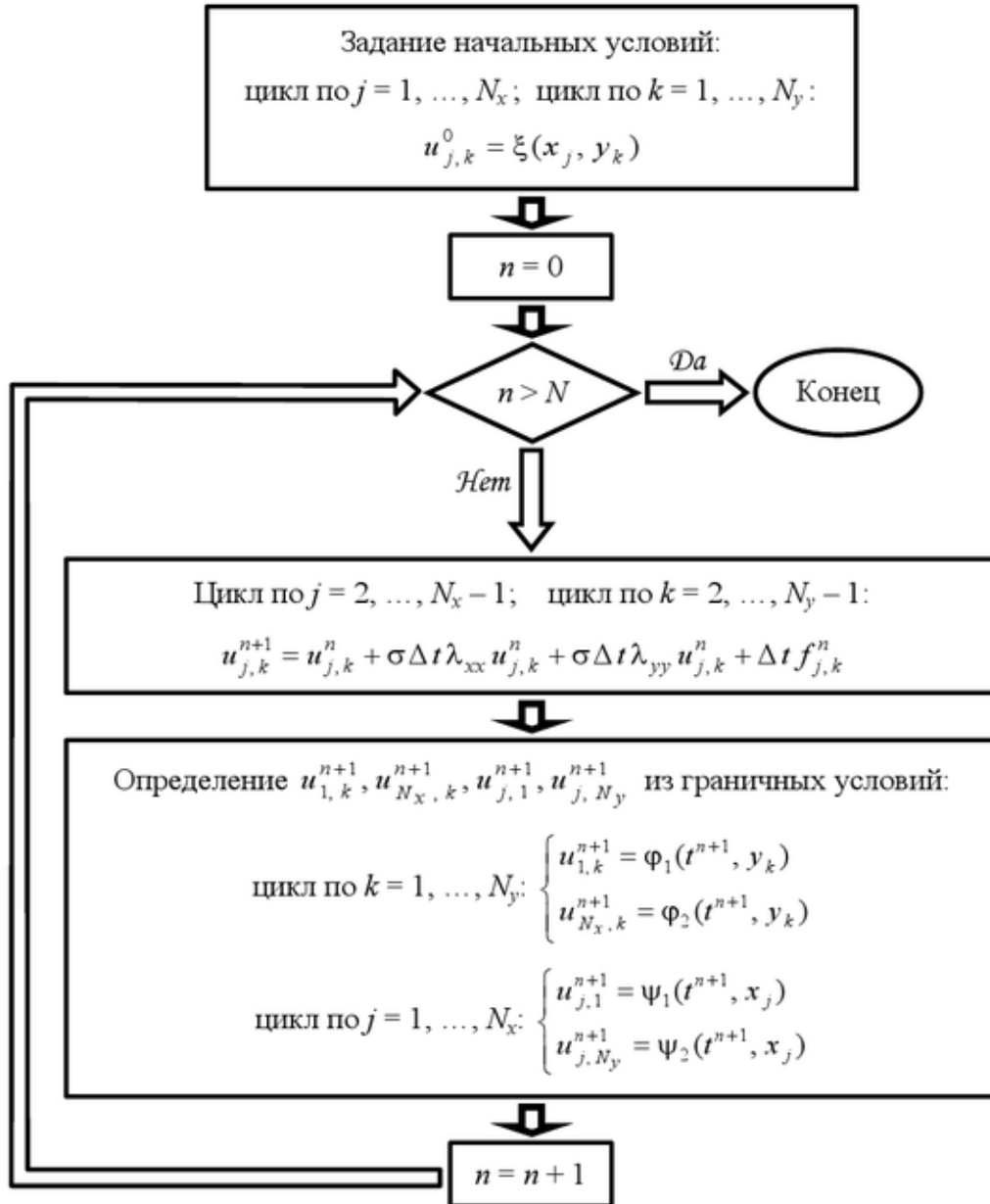


Рис. 7.3. Блок-схема решения явной разностной схемы, аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа

7.5. Характеристика неявной разностной схемы

Исследуем устойчивость неявной разностной схемы (7.3), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (7.1), с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f_{j,k}^n$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоник:

$$u_{j,k}^n = \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}, \quad \alpha \in [0, 2\pi], \quad \beta \in [0, 2\pi];$$

$$\frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} - \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}}{\Delta t} = \sigma \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha(j+1)} e^{i\beta k} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)} e^{i\beta k}}{h_x^2} +$$

$$+ \sigma \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta(k+1)} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta(k-1)}}{h_y^2}.$$

Упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \lambda \left(\frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h_x^2} + \frac{e^{i\beta} - 2 + e^{-i\beta}}{h_y^2} \right).$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем формулу

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = -\lambda \frac{\sigma}{h_x^2} 4 \sin^2 \frac{\alpha}{2} - \lambda \frac{\sigma}{h_y^2} 4 \sin^2 \frac{\beta}{2},$$

из которой выражаем λ :

$$\lambda = \frac{1}{1 + 4\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} + 4\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2}}.$$

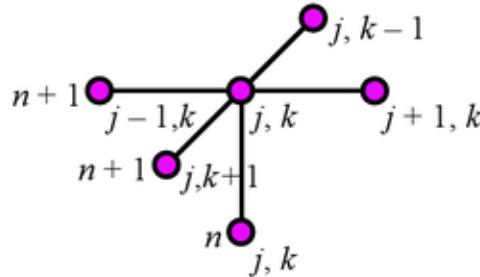


Рис. 7.4. Разностный шаблон неявной разностной схемы, аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа

Видно, что собственные числа оператора перехода удовлетворяют необходимому условию устойчивости разностных схем (3.8) при любых значениях $\Delta t, h_x, h_y$; следовательно, неявная разностная схема (7.3) является абсолютно устойчивой.

Разностный шаблон (рис. 7.4), характеризующий неявную разностную схему (7.3), свидетельствует о том, что она содержит пять неизвестных величин – значений функции $u(t, x, y)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени. Это означает, что разностная схема (7.3) без дополнительных преобразований неразрешима.

7.6. Схема расщепления

7.6.1. Методика записи уравнений схемы

Рассмотрим метод разрешения неявной разностной схемы (7.3), называемый **методом дробных шагов**. Данный метод позволяет представить неявную разностную схему (7.3) в виде двух подсхем, каждая из которых может быть решена с помощью метода прогонки.

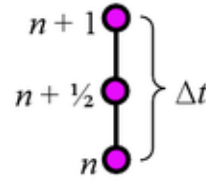


Рис. 7.5. Деление интервала Δt для записи схемы расщепления

Разобьём пополам интервал Δt между точками t^n и t^{n+1} на разностной сетке и обозначим полученную промежуточную точку как $t^{n+1/2}$ (рис. 7.5).

Запишем на первом полушаге интервала Δt неявную разностную схему, которая будет учитывать только производную второго порядка по координате x (назовём её **первой подсхемой**):

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + f_{j,k}^n. \quad (7.7)$$

Запишем на втором полушаге интервала Δt неявную разностную схему, которая будет учитывать только производную второго порядка по координате y (назовём её **второй подсхемой**):

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2}. \quad (7.8)$$

Складывая подсхемы (7.7) и (7.8), получаем соотношение, отличающееся от неявной разностной схемы (7.3) только тем, что вторая производная по координате x аппроксимирована в нём не на $(n+1)$ -м шаге по времени, а на шаге $(n+1/2)$:

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2} + f_{j,k}^n.$$

Таким образом, дифференциальное уравнение (7.1) может быть аппроксимировано с помощью последовательного разрешения двух подсхем (7.7), (7.8), называемых в совокупности **схемой расщепления**. Соотношение, являющееся суммой подсхем (7.7), (7.8), показывает, что схема расщепления имеет такой же порядок аппроксимации, как и неявная разностная схема (7.3):

$$O(\Delta t, h_x^2, h_y^2).$$

Отметим, что свободный член уравнения (7.1) может быть учтён не в первой подсхеме схемы расщепления (7.7), (7.8), а во второй; его вид при этом не изменится.

7.6.2. Характеристика первой подсхемы

Первая подсхема (7.7) схемы расщепления, являясь аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения параболического типа, обладает всеми свойствами последней: она абсолютно устойчива, решается с помощью метода прогонки.

Приведём подсхему (7.7) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$-\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} u_{j+1,k}^{n+1/2} + \left(1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}\right) u_{j,k}^{n+1/2} - \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} u_{j-1,k}^{n+1/2} = u_{j,k}^n + \Delta t f_{j,k}^n.$$

Следовательно, коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$a_j = c_j = -\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad b_j = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k}^n = u_{j,k}^n + \Delta t f_{j,k}^n.$$

Легко видеть, что для первой подсхемы (7.7) схемы расщепления достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} < 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} = |b_j|.$$

Рекуррентное прогоночное соотношение для первой подсхемы (7.7) имеет вид:

$$u_{j,k}^{n+1/2} = \alpha_j u_{j+1,k}^{n+1/2} + \beta_j. \quad (7.9)$$

Прогоночные коэффициенты определяются согласно соотношениям (4.13):

$$\alpha_j = -\frac{a_j}{b_j + c_j \alpha_{j-1}}, \quad \beta_j = \frac{\xi_{j,k}^n - c_j \beta_{j-1}}{b_j + c_j \alpha_{j-1}}. \quad (7.10)$$

Для определения значений прогоночных коэффициентов на 1-м шаге, т.е. α_1, β_1 , и решения на правой границе используются граничные условия по координате x . Методики определения, а также последовательность вычислений (метод прогонки) аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2. Отличие состоит лишь в том, что соотношения (7.9) и (7.10) включают переменную k , поэтому необходимо задать внешний цикл по этой переменной:

$$k = 2, \dots, N_y - 1;$$

следовательно, при решении первой подсхемы (7.7) (т.е. на первом полушаге интервала Δt) метод прогонки будет использован $N_y - 2$ раза.

Результатом решения первой подсхемы (7.7) схемы расщепления являются значения функции $u(t, x, y)$ на шаге по времени $(n + 1/2)$, необходимые для решения второй подсхемы (7.8). Однако следует отметить, что поскольку каждая из подсхем (7.7), (7.8) по отдельности не аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение (7.1) (аппроксимация достигается только в результате последовательного решения обеих подсхем), оценка погрешности значений функ-

ции $u(t, x, y)$ на шаге по времени $(n + 1/2)$ не представляется возможной. Близость к истинным значениям может быть гарантирована только для значений функции $u(t, x, y)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени.

7.6.3. Характеристика второй подсхемы

Вторая подсхема (7.8) схемы расщепления, являясь аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения параболического типа, обладает всеми свойствами последней: она абсолютно устойчива, решается с помощью метода прогонки.

Приведём подсхему (7.8) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$-\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} u_{j,k+1}^{n+1} + \left(1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}\right) u_{j,k}^{n+1} - \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} u_{j,k-1}^{n+1} = u_{j,k}^{n+1/2}.$$

Следовательно, коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/2} = u_{j,k}^{n+1/2}.$$

Легко видеть, что для второй подсхемы (7.8) схемы расщепления достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|\tilde{a}_k| + |\tilde{c}_k| = 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} < 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} = |\tilde{b}_k|.$$

Рекуррентное прогоночное соотношение для второй подсхемы (7.8) имеет вид:

$$u_{j,k}^{n+1} = \tilde{\alpha}_k u_{j,k+1}^{n+1} + \tilde{\beta}_k. \quad (7.11)$$

Прогоночные коэффициенты определяются согласно соотношениям (4.13):

$$\tilde{\alpha}_k = -\frac{\tilde{a}_k}{\tilde{b}_k + \tilde{c}_k \tilde{\alpha}_{k-1}}, \quad \tilde{\beta}_k = \frac{\tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/2} - \tilde{c}_k \tilde{\beta}_{k-1}}{\tilde{b}_k + \tilde{c}_k \tilde{\alpha}_{k-1}}. \quad (7.12)$$

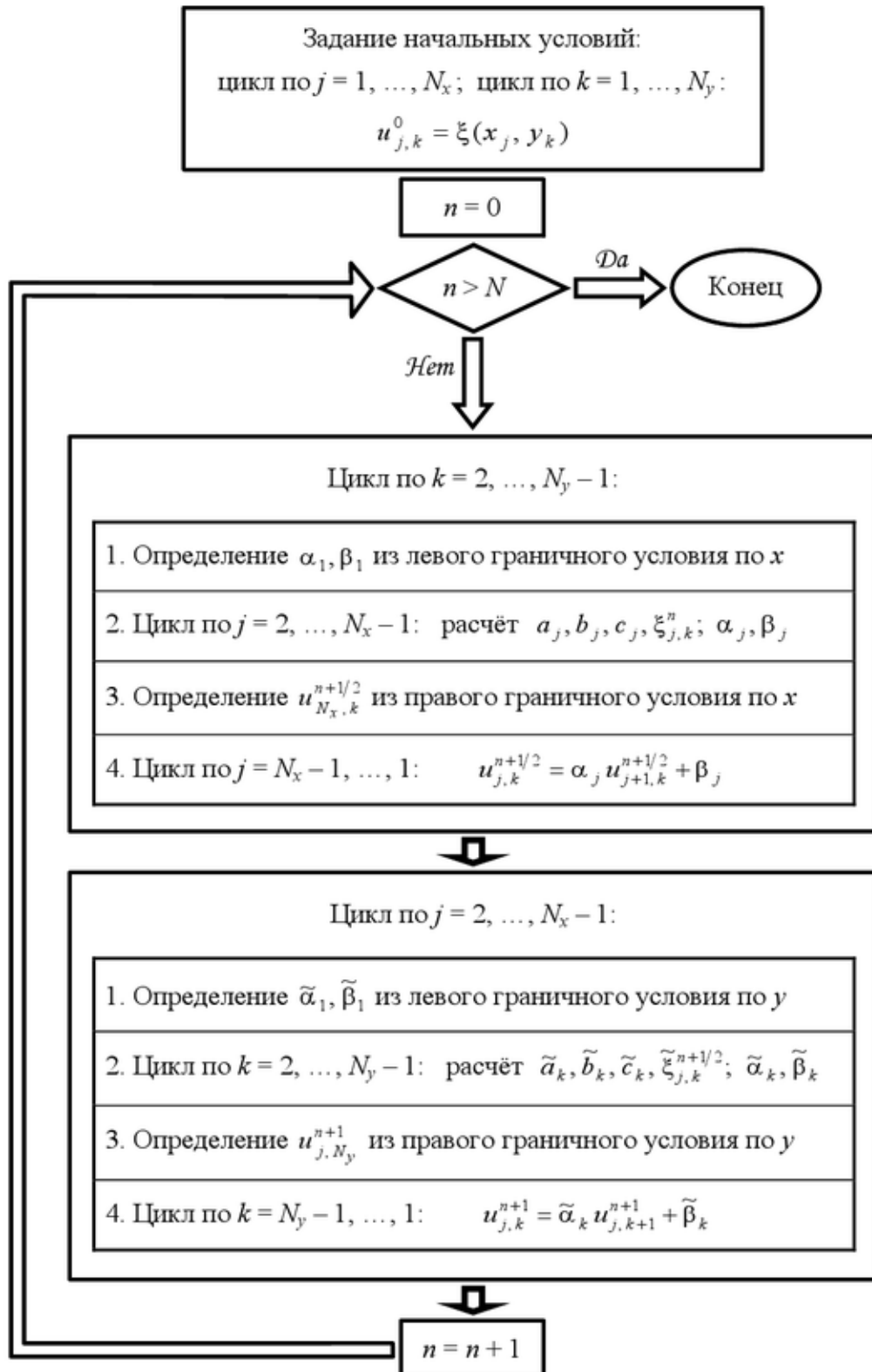


Рис. 7.6. Блок-схема решения схемы расщепления (7.7)–(7.8), аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа

Для определения значений прогоночных коэффициентов на 1-м шаге, т.е. $\tilde{\alpha}_1, \tilde{\beta}_1$, и решения на правой границе используются граничные условия по координате y . Методики определения, а также последовательность вычислений (метод прогонки) аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2. Отличие состоит лишь в том, что соотношения (7.11) и (7.12) включают переменную j , поэтому необходимо задать внешний цикл по этой переменной:

$$j = 2, \dots, N_x - 1;$$

следовательно, при решении второй подсхемы (7.8) (т.е. на втором полушаге интервала Δt) метод прогонки будет использован $N_x - 2$ раза.

Результатом решения второй подсхемы (7.8) схемы расщепления являются значения функции $u(t, x, y)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени.

7.6.4. Алгоритм решения

На рис. 7.6 приведён алгоритм решения (в виде блок-схемы) схемы расщепления (7.7), (7.8), являющейся наиболее простым способом интерпретации неявной разностной схемы (7.3), аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа (7.1).

7.7. Схема переменных направлений

Рассмотрим способ интерпретации неявной разностной схемы (7.3), позволяющий добиться повышения порядка аппроксимации по времени, – **схему переменных направлений**:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} &= \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2}, \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} &= \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + \\ &+ \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2} + f_{j,k}^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Первая подсхема в схеме переменных направлений (7.13) аппроксимирует производную по времени на первом полушаге интервала Δt и является неявной по координате x и явной по координате y . Вторая подсхема аппроксимирует производную по времени на втором полушаге интервала Δt и является неявной по координате y и явной по координате x . Каждая из подсхем (как и в случае схемы расщепления (7.7), (7.8)) является абсолютно устойчивой и решается с помощью метода прогонки.

Обратим внимание на две особенности, которые необходимо учитывать при записи схемы переменных направлений (7.13): 1) коэффициенты перед разностными операторами, аппроксимирующими производные $\partial^2 u / \partial x^2$ и $\partial^2 u / \partial y^2$, должны быть поделены пополам; 2) свободный член записывается во второй подсхеме и аппроксимируется на шаге $(n + 1/2)$.

Складывая обе подсхемы и учитывая обозначения (7.6), получаем:

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\sigma}{2} (\lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1} + \lambda_{yy} u_{j,k}^n) + f_{j,k}^{n+1/2}.$$

Видно, что правая часть данного соотношения аппроксимирована относительно точки $t^{n+1/2}$. Это означает, что разностный оператор в левой части является центральной конечной разностью, которая имеет второй порядок аппроксимации (см. раздел 2.2.2). Таким образом, схема переменных направлений (7.13), имея порядок аппроксимации

$$O(\Delta t^2, h_x^2, h_y^2),$$

является более точной по сравнению со схемой расщепления (7.7), (7.8).

Алгоритм решения схемы переменных направлений (7.13) аналогичен алгоритму решения схемы расщепления (7.7), (7.8). Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы

$$a_j = c_j = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_x^2}, \quad b_j = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k}^n = u_{j,k}^n + \frac{\sigma}{2} \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k}^n;$$

- для второй подсхемы

$$\begin{aligned}\tilde{a}_k = \tilde{c}_k &= -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \\ \tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/2} &= u_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\sigma}{2} \Delta t \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \Delta t f_{j,k}^{n+1/2}.\end{aligned}$$

Легко видеть, что для обеих подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется.

7.8. Схема со стабилизирующей поправкой

Ещё одним способом интерпретации неявной разностной схемы (7.3), аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа (7.1), является **схема со стабилизирующей поправкой**, рекомендуемая для использования в случае, если существует особенность поведения (например, осцилляции) искомой функции $u(t, x, y)$ в одном из пространственных направлений (в данном случае по координате y):

$$\begin{aligned}\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} &= \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + \\ &+ \sigma \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2} + f_{j,k}^n, \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} &= \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2} - \sigma \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2}.\end{aligned}\tag{7.14}$$

Первая подсхема в схеме со стабилизирующей поправкой (7.14) аппроксимирует производную по времени на первом полушаге интервала Δt и является неявной по координате x и явной по координате y . Вторая подсхема аппроксимирует производную по времени на втором полушаге интервала Δt , является неявной по координате y и учитывает поправку по этой координате. Каждая из подсхем (как и в случае схемы расщепления (7.7), (7.8)) является абсолютно устойчивой и решается с помощью метода прогонки.

Складывая обе подсхемы и принимая во внимание обозначения (7.6), получаем:

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1} + f_{j,k}^n.$$

Данное соотношение показывает, что схема со стабилизирующей поправкой (7.14) имеет, как и неявная разностная схема (7.3), первый порядок аппроксимации по времени и второй – по каждой из координат:

$$O(\Delta t, h_x^2, h_y^2).$$

Алгоритм решения схемы со стабилизирующей поправкой (7.14) аналогичен алгоритму решения схемы расщепления (7.7), (7.8). Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы

$$a_j = c_j = -\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad b_j = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k}^n = u_{j,k}^n + \sigma \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k}^n + \Delta t f_{j,k}^n;$$

- для второй подсхемы

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/2} = u_{j,k}^{n+1/2} - \sigma \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k}^n.$$

Легко видеть, что для обеих подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется.

7.9. Схема предиктор-корректор

7.9.1. Методика записи уравнений схемы

Рассмотрим ещё одну интерпретацию неявной разностной схемы (7.3), позволяющую (как и в случае схемы переменных направлений) добиться повышения порядка аппроксимации по времени, – **схему предиктор-корректор**.

Данная схема требует особого способа расщепления интервала Δt (рис. 7.7): интервал Δt между точками t^n и t^{n+1} на разностной сетке делится пополам (полученная промежуточная точка обозначена как $t^{n+1/2}$); интервал $\Delta t/2$ меж-

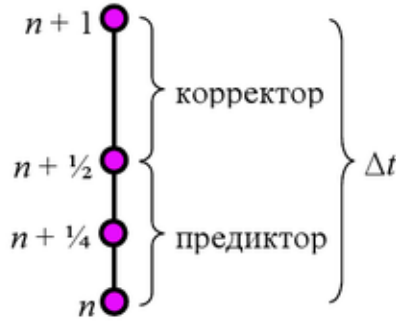


Рис. 7.7. Деление интервала Δt для записи схемы предиктор-корректор

ду точками t^n и $t^{n+1/2}$ снова делится пополам (полученная промежуточная точка обозначена как $t^{n+1/4}$).

На первом полушаге интервала $\Delta t/2$ записывается неявная разностная схема, в которой учитывается только производная второго порядка по координате x :

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j,k}^n}{\Delta t/2} = \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/4} - 2u_{j,k}^{n+1/4} + u_{j-1,k}^{n+1/4}}{h_x^2}. \quad (7.15)$$

На втором полушаге интервала $\Delta t/2$ записывается неявная разностная схема, в которой учитывается только производная второго порядка по координате y :

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^{n+1/4}}{\Delta t/2} = \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j,k-1}^{n+1/2}}{h_y^2}. \quad (7.16)$$

Результатом последовательного решения подсхем (7.15), (7.16), называемых в совокупности **предиктором**, являются значения функции $u(t, x, y)$ на шаге по времени $(n + 1/2)$. Для завершения расчётов на всём интервале Δt используется поправочное разностное соотношение, называемое **корректором**:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = & \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + \\ & + \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j,k-1}^{n+1/2}}{h_y^2} + f_{j,k}^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Таким образом, схема предиктор-корректор в случае двумерных задач состоит из трёх подсхем.

7.9.2. Характеристика подсхем. Метод решения

Каждая из подсхем, составляющих предиктор (7.15), (7.16), является абсолютно устойчивой и решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы предиктора (7.15)

$$a_j = c_j = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_x^2}, \quad b_j = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k}^n = u_{j,k}^n;$$

- для второй подсхемы предиктора (7.16)

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/4} = u_{j,k}^{n+1/4}.$$

Легко видеть, что для обеих подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется.

Правая часть корректора (7.17) аппроксимирована относительно точки $t^{n+1/2}$. Это означает, что разностный оператор в левой части является центральной конечной разностью, имеющей второй порядок аппроксимации (см. раздел 2.2.2). Следовательно, роль корректора (7.17) в схеме предиктор-корректор (7.15)–(7.17) заключается в повышении порядка аппроксимации схемы по времени:

$$O(\Delta t^2, h_x^2, h_y^2),$$

что делает её более точной по сравнению со схемой расщепления (7.7), (7.8).

Для решения корректора (7.17) используется рекуррентное соотношение, которое с учётом обозначений (7.6) имеет вид:

$$u_{j,k}^{n+1} = u_{j,k}^n + \sigma \Delta t \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \sigma \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2} + \Delta t f_{j,k}^{n+1/2}. \quad (7.18)$$

Итак, роль предиктора (7.15), (7.16) в схеме предиктор-корректор (7.15)–(7.17) заключается в обеспечении абсолютной устойчивости всей схемы; роль корректора (7.17) – в повышении порядка аппроксимации схемы по времени.

На рис. 7.8 приведён алгоритм решения (в виде блок-схемы) схемы предиктор-корректор (7.15)–(7.17), являющейся наиболее сложной интерпретацией неявной разностной схемы (7.3), аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа (7.1).

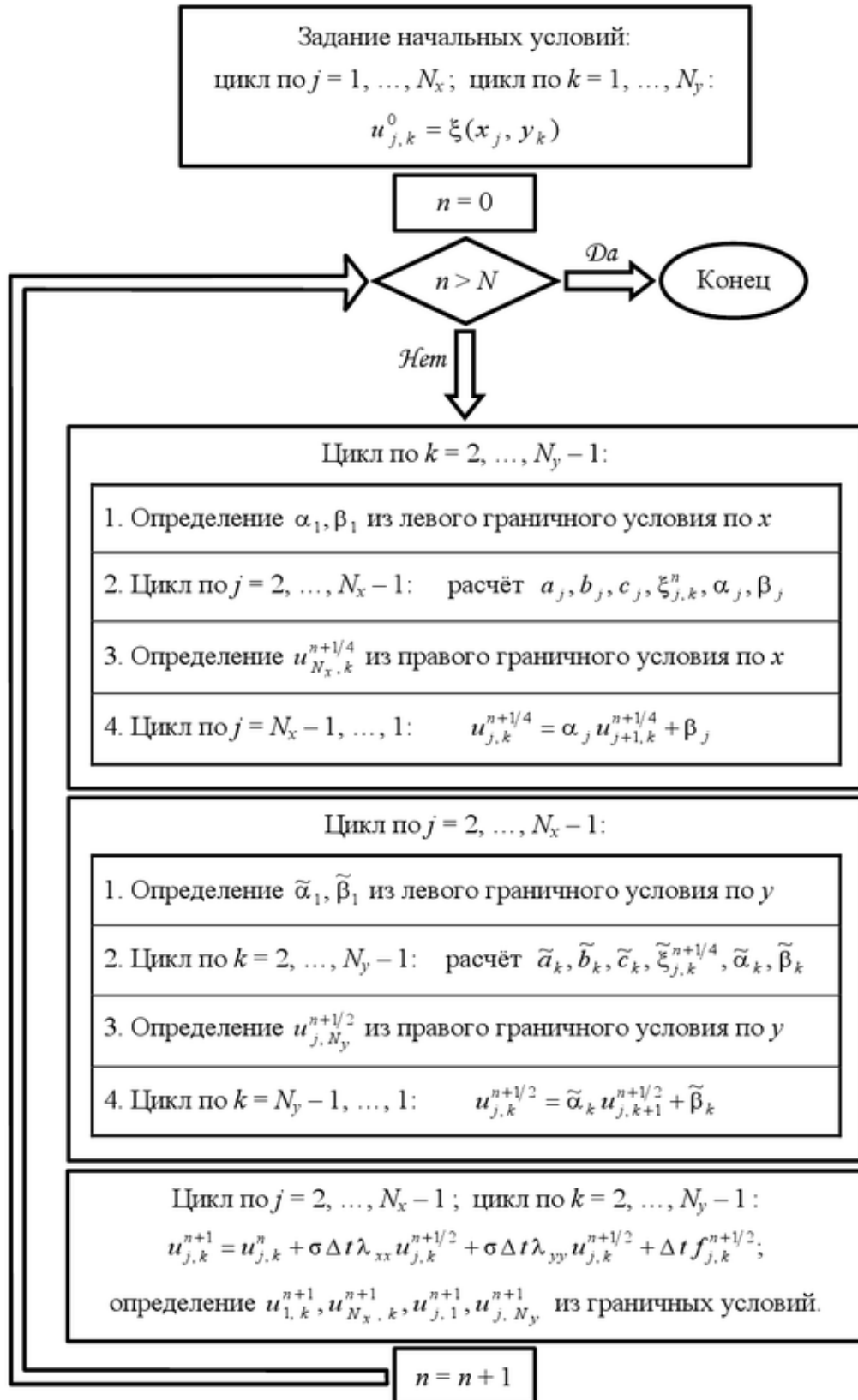


Рис. 7.8. Блок-схема решения схемы предиктор-корректор (7.15)–(7.17)

7. 10. Сравнительная характеристика изученных разностных схем

В заключение приведём сравнительную характеристику разностных схем, аппроксимирующих двумерное дифференциальное уравнение параболического типа, не содержащее первых производных по координатам x и y :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(t, x, y); \quad \sigma > 0.$$

При записи разностных схем использованы обозначения (7.6).

1. Явная разностная схема

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^n + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^n + f_{j,k}^n.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x^2, h_y^2)$.
- Условно устойчива $\Delta t \leq \left(\frac{2\sigma}{h_x^2} + \frac{2\sigma}{h_y^2} \right)^{-1}$.
- Решается с помощью рекуррентного соотношения (7.5).

2. Схема расщепления

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + f_{j,k}^n,$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} = \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1}.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x^2, h_y^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая подсхема решается с помощью метода прогонки.

3. Схема переменных направлений

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\sigma}{2} \lambda_{yy} u_{j,k}^n,$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\sigma}{2} \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1} + f_{j,k}^{n+1/2}.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h_x^2, h_y^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая подсхема решается с помощью метода прогонки.

4. Схема со стабилизирующей поправкой

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^n + f_{j,k}^n,$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} = \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1} - \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^n.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x^2, h_y^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая подсхема решается с помощью метода прогонки.

5. Схема предиктор-корректор

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j,k}^n}{\Delta t/2} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/4}, \quad \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^{n+1/4}}{\Delta t/2} = \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2},$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2} + f_{j,k}^{n+1/2}.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h_x^2, h_y^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая из подсхем предиктора решается с помощью метода прогонки; корректор (третья подсхема) – с помощью рекуррентного соотношения (7.18).

Глава 8. Решение двумерных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка

8.1. Явные разностные схемы

8.1.1. Характеристика

Запишем двумерное дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка в следующем общем виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v_1 \frac{\partial u}{\partial x} + v_2 \frac{\partial u}{\partial y} = f(t, x, y); \quad t \in [0, t_k], x \in [a, b], y \in [c, d]; \quad (8.1)$$

причём параметры v_1 и v_2 могут быть как положительными, так и отрицательными.

В разделе 5.8 было сформулировано правило выбора конечной разности для аппроксимации первой производной по координате, согласно которому при положительном значении параметра v , стоящего перед этой производной, следует использовать левую конечную разность, при отрицательном v – правую конечную разность (правило применимо только в случае, если рассматриваемая производная находится в левой части дифференциального уравнения). Кроме этого, для решения разностной схемы при положительном v потребуется левое граничное условие, при отрицательном v – правое граничное условие.

Применение правила выбора конечной разности к двумерным дифференциальным уравнениям в частных производных первого порядка позволяет записать для уравнения (8.1), учитывая различные варианты знаков v_1 и v_2 , четыре явные разностные схемы, которые с учётом обозначений, введённых в разделе 7.2, имеют вид:

$$1. v_1 > 0, v_2 > 0: \quad \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^n - u_{j-1,k}^n}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n}{h_y} = f_{jk}^n; \quad (8.2)$$

$$2. v_1 > 0, v_2 < 0: \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^n - u_{j-1,k}^n}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k+1}^n - u_{j,k}^n}{h_y} = f_{jk}^n; \quad (8.3)$$

$$3. v_1 < 0, v_2 > 0: \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j+1,k}^n - u_{j,k}^n}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n}{h_y} = f_{jk}^n; \quad (8.4)$$

$$4. v_1 < 0, v_2 < 0: \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j+1,k}^n - u_{j,k}^n}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k+1}^n - u_{j,k}^n}{h_y} = f_{jk}^n. \quad (8.5)$$

Учитывая порядок аппроксимации разностных операторов, из которых составлены разностные схемы (8.2)–(8.5), легко видеть, что каждая из них имеет первый порядок аппроксимации и по времени, и по каждой из координат:

$$O(\Delta t, h_x, h_y).$$

Для решения разностных схем (8.2)–(8.5) требуется правильно задать начальное и граничные условия (так как при постановке дифференциальной задачи порядок уравнений, описывающих граничные условия, должен быть ниже порядка самого дифференциального уравнения, при описании методов численного решения уравнения (8.1) мы будем рассматривать только граничные условия 1-го рода):

1. $v_1 > 0, v_2 > 0: u(t=0, x, y) = \xi(x, y), u(t, x=a, y) = \varphi(t, y), u(t, x, y=c) = \psi(t, x);$
2. $v_1 > 0, v_2 < 0: u(t=0, x, y) = \xi(x, y), u(t, x=a, y) = \varphi(t, y), u(t, x, y=d) = \psi(t, x);$
3. $v_1 < 0, v_2 > 0: u(t=0, x, y) = \xi(x, y), u(t, x=b, y) = \varphi(t, y), u(t, x, y=c) = \psi(t, x);$
4. $v_1 < 0, v_2 < 0: u(t=0, x, y) = \xi(x, y), u(t, x=b, y) = \varphi(t, y), u(t, x, y=d) = \psi(t, x).$

8.1.2. Исследование устойчивости

Исследуем устойчивость явной разностной схемы (8.2), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (8.1), с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f_{j,k}^n$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоник:

$$\begin{aligned}
u_{j,k}^n &= \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}, \quad \alpha \in [0, 2\pi], \beta \in [0, 2\pi]; \\
\frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} - \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}}{\Delta t} &+ v_1 \frac{\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} - \lambda^n e^{i\alpha(j-1)} e^{i\beta k}}{h_x} + \\
&+ v_2 \frac{\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} - \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta(k-1)}}{h_y} = 0.
\end{aligned}$$

Упрощаем данное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}$, и выражаем λ :

$$\begin{aligned}
\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v_1 \frac{1 - e^{-i\alpha}}{h_x} + v_2 \frac{1 - e^{-i\beta}}{h_y} &= 0 \quad \Rightarrow \\
\Rightarrow \quad \lambda &= 1 - v_1 \frac{\Delta t}{h_x} - v_2 \frac{\Delta t}{h_y} + v_1 \frac{\Delta t}{h_x} e^{-i\alpha} + v_2 \frac{\Delta t}{h_y} e^{-i\beta}.
\end{aligned}$$

Напомним, что если собственные числа оператора перехода имеют комплексный вид, то согласно необходимому условию устойчивости разностных схем (3.8) требуется, чтобы они были расположены внутри или на границе круга радиусом 1, центр которого находится в начале координат комплексной плоскости (рис. 5.1).

Введём следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
r_1 = v_1 \frac{\Delta t}{h_x} > 0, \quad r_2 = v_2 \frac{\Delta t}{h_y} > 0, \quad r_1 + r_2 = r \quad \Rightarrow \\
\Rightarrow \quad \lambda &= 1 - r + r_1 e^{-i\alpha} + r_2 e^{-i\beta}.
\end{aligned}$$

Данное выражение трудно анализировать, поскольку оно содержит две переменные величины — α и β . Рассмотрим наиболее простой случай, когда $\alpha = \beta$:

$$\lambda = 1 - r + r e^{-i\alpha}.$$

Полученное выражение свидетельствует о том, что собственные числа оператора перехода расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1 - r, 0)$ и радиусом:

$$|r e^{i\alpha}| = \sqrt{r^2 \cos^2 \alpha + r^2 \sin^2 \alpha} = r.$$

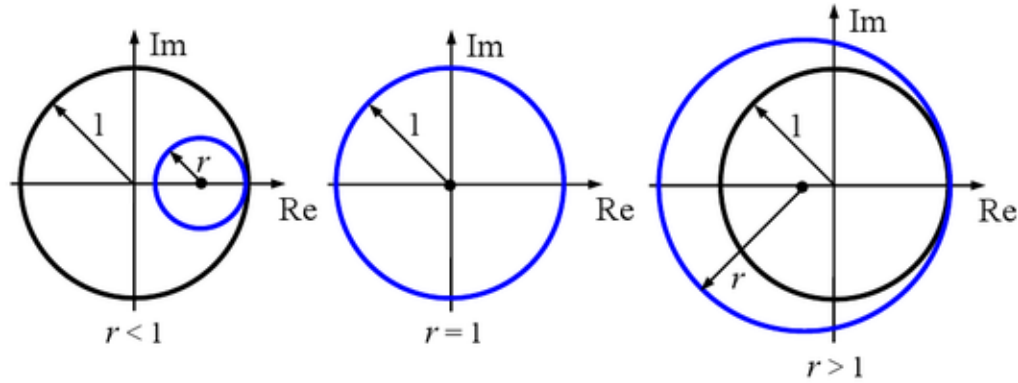


Рис. 8.1. Исследование устойчивости разностной схемы (8.2)

Сравнивая расположение этой окружности на комплексной плоскости с условием (3.8), получаем три различных варианта (рис. 8.1). Видно, что окружность, соответствующая собственным числам оператора перехода, при $r < 1$ находится внутри круга, соответствующего условию (3.8); при $r > 1$ – вне этого круга; а при $r = 1$ совпадает с его границей. Таким образом, явная разностная схема (8.2) будет устойчива при выполнении следующего условия:

$$r = r_1 + r_2 = v_1 \frac{\Delta t}{h_x} + v_2 \frac{\Delta t}{h_y} \leq 1. \quad (8.6)$$

Исследование устойчивости разностных схем (8.3)–(8.5) проводится по аналогичной методике и позволяет в итоге получить обобщённое условие устойчивости для всех четырёх явных разностных схем (8.2)–(8.5), аппроксимирующих дифференциальное уравнение (8.1):

$$\left| v_1 \right| \frac{\Delta t}{h_x} + \left| v_2 \right| \frac{\Delta t}{h_y} \leq 1.$$

8.1.3. Метод решения

Разностный шаблон (рис. 8.2), характеризующий явную разностную схему (8.2), свидетельствует о том, что она содержит одну неизвестную величину – значение функции $u(t, x, y)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени. Выражая эту величину из разностной схемы, получаем рекуррентное соотношение

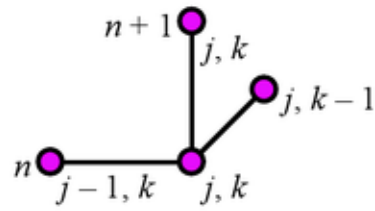


Рис. 8.2. Разностный шаблон разностной схемы (8.2)

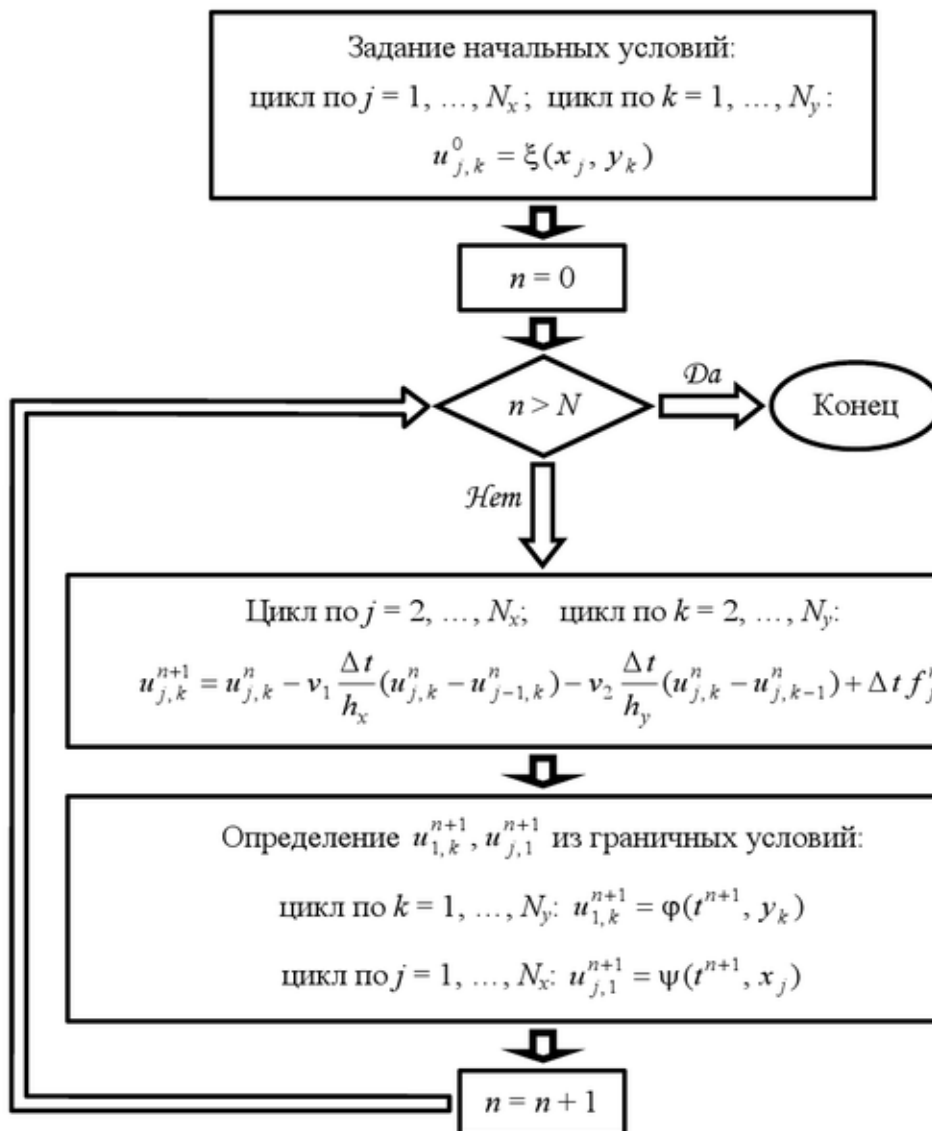


Рис. 8.3. Блок-схема решения разностной схемы (8.2)

$$u_{j,k}^{n+1} = u_{j,k}^n - v_1 \frac{\Delta t}{h_x} (u_{j,k}^n - u_{j-1,k}^n) - v_2 \frac{\Delta t}{h_y} (u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n) + \Delta t f_{jk}^n, \quad (8.7)$$

позволяющее рассчитать все значения функции $u(t, x, y)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени (при известных значениях функции $u(t, x, y)$ на n -м шаге), кроме значений $u_{1,k}^{n+1}$, $u_{j,1}^{n+1}$, определяемых с помощью граничных условий:

$$u_{1,k}^{n+1} = \varphi(t^{n+1}, y_k), \quad u_{j,1}^{n+1} = \psi(t^{n+1}, x_j).$$

На рис. 8.3 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения явной разностной схемы (8.2), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (8.1). Методика и алгоритм решения разностных схем (8.3)–(8.5) аналогичны.

8.2. Неявные разностные схемы

8.2.1. Характеристика

Применение правила выбора конечной разности для аппроксимации первой производной по координате к двумерным дифференциальным уравнениям в частных производных первого порядка позволяет записать для уравнения (8.1), учитывая различные варианты знаков v_1 и v_2 , четыре неявные разностные схемы, которые с учётом обозначений, введённых в разделе 7.2, имеют вид:

$$1. v_1 > 0, v_2 > 0: \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j-1,k}^{n+1}}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} = f_{jk}^n; \quad (8.8)$$

$$2. v_1 > 0, v_2 < 0: \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j-1,k}^{n+1}}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1}}{h_y} = f_{jk}^n; \quad (8.9)$$

$$3. v_1 < 0, v_2 > 0: \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j+1,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1}}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} = f_{jk}^n; \quad (8.10)$$

$$4. v_1 < 0, v_2 < 0: \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j+1,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1}}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1}}{h_y} = f_{jk}^n. \quad (8.11)$$

Учитывая порядок аппроксимации разностных операторов, из которых составлены разностные схемы (8.8)–(8.11), легко видеть, что каждая из них имеет первый порядок аппроксимации и по времени, и по каждой из координат:

$$O(\Delta t, h_x, h_y).$$

Для решения разностных схем (8.8)–(8.11) требуется правильно задать начальное и граничные условия:

$$t \in [0, t_k], \quad x \in [a, b], \quad y \in [c, d];$$

1. $v_1 > 0, v_2 > 0: u(t=0, x, y) = \xi(x, y), u(t, x=a, y) = \varphi(t, y), u(t, x, y=c) = \psi(t, x);$
2. $v_1 > 0, v_2 < 0: u(t=0, x, y) = \xi(x, y), u(t, x=a, y) = \varphi(t, y), u(t, x, y=d) = \psi(t, x);$
3. $v_1 < 0, v_2 > 0: u(t=0, x, y) = \xi(x, y), u(t, x=b, y) = \varphi(t, y), u(t, x, y=c) = \psi(t, x);$
4. $v_1 < 0, v_2 < 0: u(t=0, x, y) = \xi(x, y), u(t, x=b, y) = \varphi(t, y), u(t, x, y=d) = \psi(t, x).$

8.2.2. Исследование устойчивости

Исследуем устойчивость неявной разностной схемы (8.8), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (8.1), с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f_{j,k}^n$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоники:

$$\begin{aligned} u_{j,k}^n &= \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}, \quad \alpha \in [0, 2\pi], \quad \beta \in [0, 2\pi]; \\ \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} - \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}}{\Delta t} &+ v_1 \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} - \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)} e^{i\beta k}}{h_x} + \\ &+ v_2 \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} - \lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta(k-1)}}{h_y} = 0. \end{aligned}$$

Упрощаем данное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + v_1 \frac{\lambda - \lambda e^{-i\alpha}}{h_x} + v_2 \frac{\lambda - \lambda e^{-i\beta}}{h_y} = 0.$$

Группируя члены, содержащие λ , в левой части уравнения, выразим величину, обратную λ :

$$\lambda \left(1 + v_1 \frac{\Delta t}{h_x} + v_2 \frac{\Delta t}{h_y} - v_1 \frac{\Delta t}{h_x} e^{-i\alpha} - v_2 \frac{\Delta t}{h_y} e^{-i\beta} \right) = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 1 + v_1 \frac{\Delta t}{h_x} + v_2 \frac{\Delta t}{h_y} - v_1 \frac{\Delta t}{h_x} e^{-i\alpha} - v_2 \frac{\Delta t}{h_y} e^{-i\beta}.$$

Напомним, что если величины, обратные собственным числам оператора перехода, имеют комплексный вид, то согласно необходимому условию устойчивости разностных схем (3.8), записанному в виде (5.7), требуется, чтобы они были расположены вне или на границе круга радиусом 1, центр которого находится в начале координат комплексной плоскости (рис. 5.10).

Введём следующие обозначения:

$$r_1 = v_1 \frac{\Delta t}{h_x} > 0, \quad r_2 = v_2 \frac{\Delta t}{h_y} > 0, \quad r_1 + r_2 = r \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 1 + r - r_1 e^{-i\alpha} - r_2 e^{-i\beta}.$$

Данное выражение трудно анализировать, поскольку оно содержит две переменные величины – α и β . Рассмотрим наиболее простой случай, когда $\alpha = \beta$:

$$\frac{1}{\lambda} = 1 + r - r e^{-i\alpha}.$$

Полученное выражение свидетельствует о том, что величины, обратные собственным числам оператора перехода, расположены на комплексной плоскости на окружности с центром в точке $(1+r; 0)$ и радиусом r . Данная окружность находится вне круга, соответствующего условию (5.7) при любом значении r (рис. 8.4). Таким образом, неявная разностная схема (8.8) абсолютно устойчива.

Проведя исследование устойчивости неявных разностных схем (8.9)–(8.11) по аналогичной методике, можно доказать, что каждая из них также является абсолютно устойчивой.

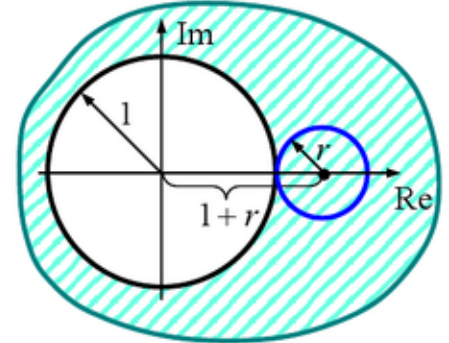


Рис. 8.4. Исследование устойчивости разностной схемы (8.8)

8.2.3. Метод решения с использованием схемы расщепления

Для решения неявных разностных схем (8.8)–(8.11), аппроксимирующих дифференциальное уравнение (8.1), используется метод дробных шагов, подробно рассмотренный нами в разделе 7.6. Суть метода дробных шагов заключается в расщеплении интервала Δt пополам (рис. 8.5), что позволяет представить неявную разностную схему в виде двух подсхем, каждая из которых имеет более простой метод решения. Рассмотрим методику решения неявных разностных схем (8.8)–(8.11) на примере разностной схемы (8.8).

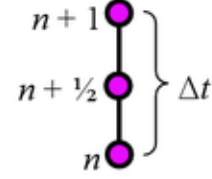


Рис. 8.5. Деление интервала Δt для записи схемы расщепления

Преобразуем с помощью метода дробных шагов неявную разностную схему (8.8) в схему расщепления:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} &= f_{jk}^n; \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} &= 0. \end{aligned} \quad (8.12)$$

В первой подсхеме производная по времени аппроксимирована на первом полушаге интервала Δt , во второй – на втором полушаге интервала Δt . Первая подсхема является неявной по координате x , вторая подсхема – неявной по координате y . Складывая обе подсхемы, получаем соотношение, отличающееся от разностной схемы (8.8) только тем, что производная $\partial u / \partial x$ аппроксимирована в нём не на $(n + 1)$ -м шаге по времени, а на шаге $(n + 1/2)$:

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} = f_{jk}^n.$$

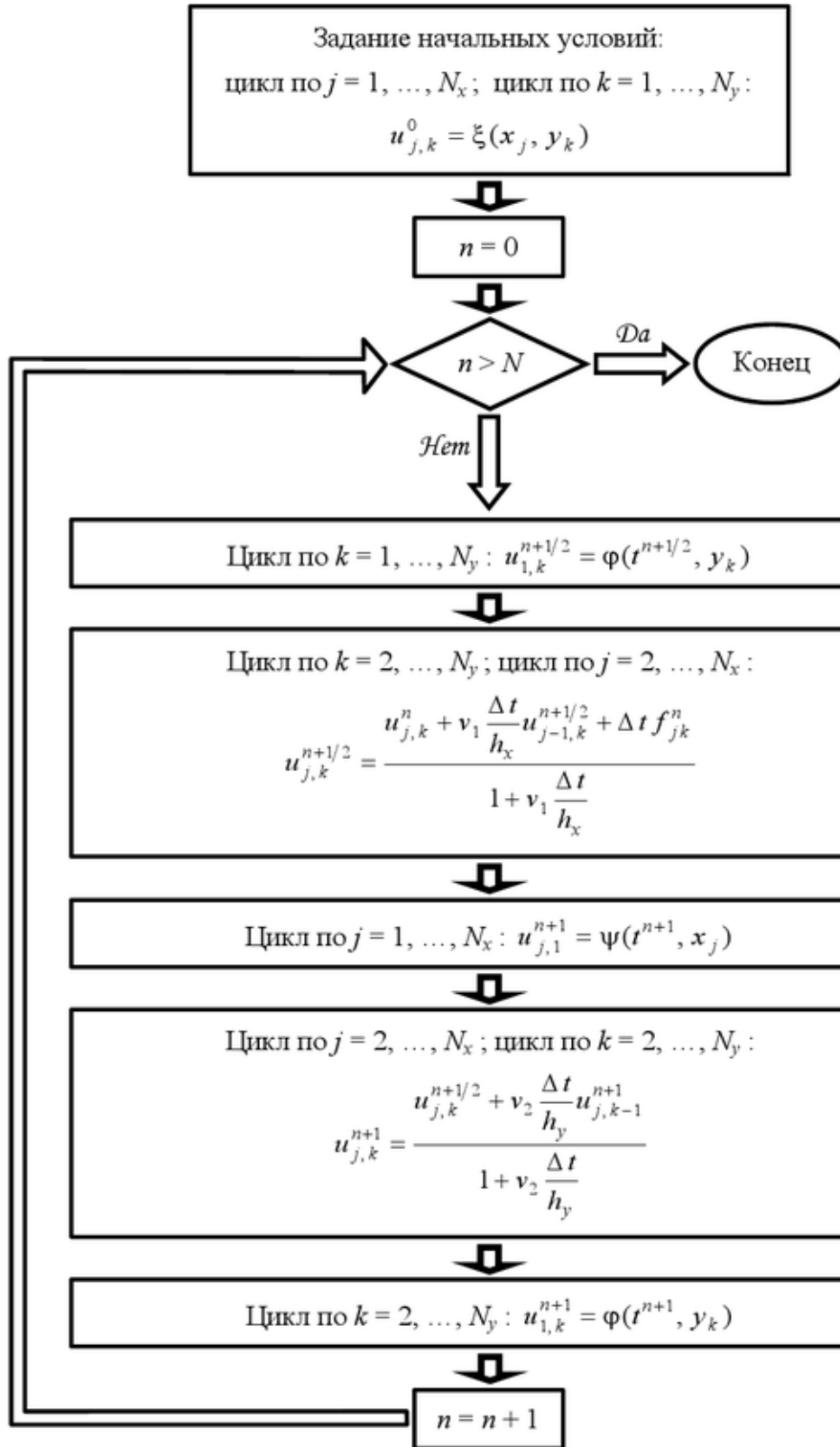


Рис. 8.6. Блок-схема решения схемы расщепления (8.12)

Данное соотношение показывает, что схема расщепления (8.12) имеет, как и неявная разностная схема (8.8), первый порядок аппроксимации и по времени, и по каждой из координат:

$$O(\Delta t, h_x, h_y).$$

Каждая из подсхем схемы расщепления (8.12), являясь аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения в частных производных первого порядка, абсолютно устойчива и решается с помощью соответствующего рекуррентного соотношения:

$$u_{j,k}^{n+1/2} = \frac{u_{j,k}^n + v_1 \frac{\Delta t}{h_x} u_{j-1,k}^{n+1/2} + \Delta t f_{jk}^n}{1 + v_1 \frac{\Delta t}{h_x}}; \quad u_{j,k}^{n+1} = \frac{u_{j,k}^{n+1/2} + v_2 \frac{\Delta t}{h_y} u_{j,k-1}^{n+1/2}}{1 + v_2 \frac{\Delta t}{h_y}}. \quad (8.13)$$

Для реализации рекуррентных соотношений (8.13) требуется знать значения $u_{1,k}^{n+1/2}, u_{j,1}^{n+1}$, определяемые с помощью граничных условий:

$$u_{1,k}^{n+1/2} = \varphi(t^{n+1/2}, y_k), \quad u_{j,1}^{n+1} = \psi(t^{n+1}, x_j).$$

На рис. 8.6 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения схемы расщепления (8.12), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (8.1).

8.2.4. Метод решения с использованием схемы переменных направлений

Преобразуем с помощью метода дробных шагов неявную разностную схему (8.8) в схему переменных направлений:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + \frac{v_1}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{v_2}{2} \frac{u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n}{h_y} &= 0; \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} + \frac{v_1}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{v_2}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} &= f_{jk}^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (8.14)$$

В первой подсхеме производная по времени аппроксимирована на первом полушаге интервала Δt , во второй – на втором полушаге интервала Δt . Первая подсхема в схеме переменных направлений (8.14) является неявной по коорди-

нате x и явной по координате y . Вторая подсхема – неявной по координате y и явной по координате x . Складывая обе подсхемы, получаем:

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{v_2}{2} \left(\frac{u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n}{h_y} + \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} \right) = f_{jk}^{n+1/2}.$$

Видно, что данное соотношение аппроксимирует уравнение (8.1) относительно точки $t^{n+1/2}$. Следовательно, разностный оператор, аппроксимирующий производную по времени, является центральной конечной разностью, которая имеет второй порядок аппроксимации (см. раздел 2.2.2). Таким образом, схема переменных направлений (8.14), имея порядок аппроксимации

$$O(\Delta t^2, h_x, h_y),$$

является более точной по сравнению со схемой расщепления (8.12).

Каждая из подсхем схемы переменных направлений (8.14) является абсолютно устойчивой и решается с помощью соответствующего рекуррентного соотношения:

$$\begin{aligned} u_{j,k}^{n+1/2} &= \frac{u_{j,k}^n + v_1 \frac{\Delta t}{2h_x} u_{j-1,k}^{n+1/2} - v_2 \frac{\Delta t}{2h_y} (u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n)}{1 + v_1 \frac{\Delta t}{2h_x}}; \\ u_{j,k}^{n+1} &= \frac{u_{j,k}^{n+1/2} + v_2 \frac{\Delta t}{2h_y} u_{j,k-1}^{n+1} - v_1 \frac{\Delta t}{2h_x} (u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}) + \Delta t f_{jk}^{n+1/2}}{1 + v_2 \frac{\Delta t}{2h_y}}. \end{aligned} \quad (8.15)$$

Алгоритм решения схемы переменных направлений (8.14) аналогичен алгоритму решения схемы расщепления (8.12).

8.2.5. Метод решения с использованием схемы предиктор-корректор

Преобразуем с помощью метода дробных шагов неявную разностную схему (8.8) в схему предиктор-корректор:

$$\begin{aligned}
 \frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j,k}^n}{\Delta t/2} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j-1,k}^{n+1/4}}{h_x} &= 0; \\
 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^{n+1/4}}{\Delta t/2} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k-1}^{n+1/2}}{h_y} &= 0; \\
 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k-1}^{n+1/2}}{h_y} &= f_{jk}^{n+1/2}.
 \end{aligned} \tag{8.16}$$

Первые две подсхемы в схеме предиктор-корректор (8.16) составляют предиктор. Первая подсхема в составе предиктора аппроксимирует производную по времени на первой четверти интервала Δt и является неявной по координате x . Вторая подсхема аппроксимирует производную по времени на второй четверти интервала Δt и является неявной по координате y . Обе подсхемы абсолютно устойчивы.

Третья подсхема в схеме предиктор-корректор (8.16) является корректором. Поскольку корректор аппроксимирует уравнение (8.1) относительно точки $t^{n+1/2}$, разностный оператор, аппроксимирующий производную $\partial u / \partial t$, является центральной конечной разностью, имеющей второй порядок аппроксимации. Таким образом, схема предиктор-корректор (8.16), имея порядок аппроксимации

$$O(\Delta t^2, h_x, h_y),$$

является более точной по сравнению со схемой расщепления (8.12).

Каждая из подсхем в схеме предиктор-корректор (8.16) решается с помощью соответствующего рекуррентного соотношения:

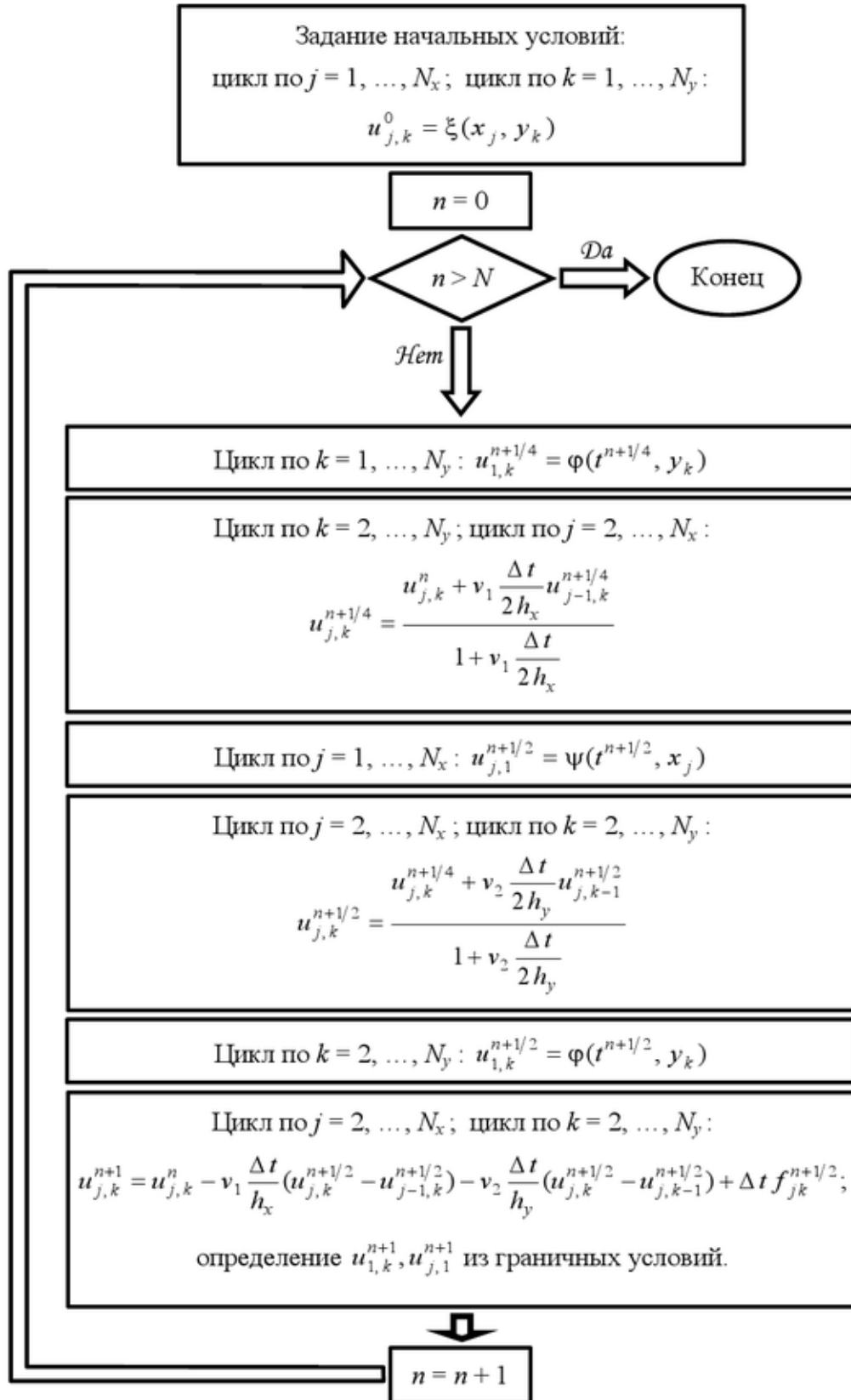


Рис. 8.7. Блок-схема решения схемы предиктор-корректор (8.16)

$$\begin{aligned}
u_{j,k}^{n+1/4} &= \frac{u_{j,k}^n + v_1 \frac{\Delta t}{2h_x} u_{j-1,k}^{n+1/4}}{1 + v_1 \frac{\Delta t}{2h_x}}; \\
u_{j,k}^{n+1/2} &= \frac{u_{j,k}^{n+1/4} + v_2 \frac{\Delta t}{2h_y} u_{j,k-1}^{n+1/4}}{1 + v_2 \frac{\Delta t}{2h_y}};
\end{aligned} \tag{8.17}$$

$$u_{j,k}^{n+1} = u_{j,k}^n - v_1 \frac{\Delta t}{h_x} (u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}) - v_2 \frac{\Delta t}{h_y} (u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k-1}^{n+1/2}) + \Delta t f_{jk}^{n+1/2}.$$

На рис. 8.7 приведён алгоритм (в виде блок-схемы) решения схемы предиктор-корректор (8.16), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (8.1).

8.3. Сравнительная характеристика изученных разностных схем

Приведём сравнительную характеристику разностных схем, аппроксимирующих двумерное дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v_1 \frac{\partial u}{\partial x} + v_2 \frac{\partial u}{\partial y} = f(t, x, y).$$

Для определённости рассмотрим случай $v_1 > 0$, $v_2 > 0$.

1. Явная разностная схема

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^n - u_{j-1,k}^n}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n}{h_y} = f_{jk}^n.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x, h_y)$.
- Условно устойчива $v_1 \frac{\Delta t}{h_x} + v_2 \frac{\Delta t}{h_y} \leq 1$.
- Решается с помощью рекуррентного соотношения (8.7).

2. Схема расщепления

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} = f_{jk}^n;$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} = 0.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x, h_y)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается с помощью рекуррентных соотношений (8.13).

3. Схема переменных направлений

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + \frac{v_1}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{v_2}{2} \frac{u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n}{h_y} = 0;$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} + \frac{v_1}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{v_2}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} = f_{jk}^{n+1/2}.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h_x, h_y)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается с помощью рекуррентных соотношений (8.15).

4. Схема предиктор-корректор

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j,k}^n}{\Delta t/2} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j-1,k}^{n+1/4}}{h_x} = 0;$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^{n+1/4}}{\Delta t/2} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k-1}^{n+1/2}}{h_y} = 0;$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k-1}^{n+1/2}}{h_y} = f_{jk}^{n+1/2}.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h_x, h_y)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается с помощью рекуррентных соотношений (8.17).

Напомним, что в случае $v_1 < 0$ для аппроксимации производной $\partial u / \partial x$ следует использовать правую конечную разность и для реализации расчётного алгоритма задать правое граничное условие по x ; в случае $v_2 < 0$ для аппроксимации производной $\partial u / \partial y$ следует использовать правую конечную разность и для реализации расчётного алгоритма задать правое граничное условие по y . Поэтому в случае $v_1 < 0$ и(или) $v_2 < 0$ вид рекуррентных соотношений изменится и для их расчёта потребуется задать циклы в расчётных алгоритмах следующим образом:

$$\text{по } x - \quad j = N_x - 1, \dots, 1;$$

$$\text{по } y - \quad k = N_y - 1, \dots, 1.$$

Порядок аппроксимации и устойчивость перечисленных разностных схем при этом останутся такими же.

8.4. Решение двумерных дифференциальных уравнений параболического типа, содержащих первые производные по координатам

В разделе 1.6 мы рассматривали математическую модель трубчатого реактора с продольным и поперечным перемешиванием, в котором протекает простая необратимая реакция. Баланс по концентрации исходного реагента для нестационарного режима имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_R \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D_R}{r} \frac{\partial c}{\partial r} - k c,$$

где c – концентрация исходного реагента; r – координата по радиусу реактора; x – координата по длине реактора; k – константа скорости химической реакции; v – линейная скорость потока; D_L , D_R – коэффициенты диффузии в продольном и поперечном направлениях.

Данное уравнение относится к двумерным дифференциальным уравнениям параболического типа. В то же время оно содержит производные первого порядка по координатам x и r . Методы численного решения подобных уравнений

аналогичны методам, рассмотренным нами в главе 7. Однако эта аналогия будет выполняться только при правильном выборе конечных разностей для аппроксимации производных $\partial c/\partial x$ и $\partial c/\partial r$.

В качестве примера рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v_1 \frac{\partial u}{\partial x} + v_2 \frac{\partial u}{\partial y} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(t, x, y), \quad v_1 > 0, v_2 < 0, \sigma > 0,$$

для которого запишем схему расщепления, соблюдая правило выбора конечных разностей для аппроксимации производных $\partial u/\partial x$ и $\partial u/\partial y$:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} &= \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + f_{j,k}^n, \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} + v_2 \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1}}{h_y} &= \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2}. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Каждая из подсхем является абсолютно устойчивой и решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы

$$\begin{aligned} a_j &= -\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad b_j = 1 + v_1 \frac{\Delta t}{h_x} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \\ c_j &= -v_1 \frac{\Delta t}{h_x} - \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k}^n = u_{j,k}^n + \Delta t f_{j,k}^n; \end{aligned}$$

- для второй подсхемы

$$\begin{aligned} \tilde{a}_k &= v_2 \frac{\Delta t}{h_y} - \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 - v_2 \frac{\Delta t}{h_y} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \\ \tilde{c}_k &= -\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/2} = u_{j,k}^{n+1/2}. \end{aligned}$$

Легко видеть, что для обеих подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется. Алгоритм решения разностной схемы (8.18) такой же, как и при отсутствии производных $\partial u/\partial x$ и $\partial u/\partial y$ в исходном дифференциальном уравнении (см. раздел 7.6.3).

Рассмотрим двумерное дифференциальное уравнение параболического типа, в котором отсутствует производная второго порядка по одной из координат:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v_1 \frac{\partial u}{\partial x} + v_2 \frac{\partial u}{\partial y} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(t, x, y); \quad v_1 > 0, v_2 > 0, \sigma > 0. \quad (8.19)$$

Схема расщепления для уравнения (8.19) имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} &= f_{j,k}^n, \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} + v_2 \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} &= \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2}. \end{aligned} \quad (8.20)$$

Первая подсхема в схеме (8.20) является аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения в частных производных первого порядка; она абсолютно устойчива и решается с помощью рекуррентного соотношения:

$$u_{j,k}^{n+1/2} = \frac{u_{j,k}^n + v_1 \frac{\Delta t}{h_x} u_{j-1,k}^{n+1/2} + \Delta t f_{j,k}^n}{1 + v_1 \frac{\Delta t}{h_x}}.$$

Вторая подсхема в схеме (8.20) является аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения параболического типа; она также абсолютно устойчива, но решается с помощью метода прогонки. Данное обстоятельство должно быть учтено при составлении алгоритма решения схемы расщепления (8.20), аппроксимирующей уравнение (8.19).

Запишем для уравнения (8.19) схему переменных направлений:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + \frac{v_1}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{v_2}{2} \frac{u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n}{h_y} &= \\ &= \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} + \frac{v_1}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{v_2}{2} \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y} = \\ = \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2} + f_{j,k}^{n+1/2}. \end{aligned}$$

Обратим внимание на то обстоятельство, что отсутствие в уравнении (8.19) второй производной по координате x не оказывает влияния на методику аппроксимации второй производной по координате y .

Как и в случае схемы расщепления (8.20), обе подсхемы абсолютно устойчивы; первая подсхема решается с помощью рекуррентного соотношения:

$$u_{j,k}^{n+1/2} = \frac{u_{j,k}^n + \frac{v_1}{2} \frac{\Delta t}{h_x} u_{j-1,k}^{n+1/2} - \frac{v_2}{2} \frac{\Delta t}{h_y} (u_{j,k}^n - u_{j,k-1}^n) + \frac{\sigma}{2} \frac{\Delta t}{h_y^2} (u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n)}{1 + \frac{v_1}{2} \frac{\Delta t}{h_x}},$$

вторая подсхема — с помощью метода прогонки.

Глава 9. Решение трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа

9.1. Примеры трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа

В математических моделях физико-химических и химико-технологических процессов могут встречаться не только одномерные и двумерные дифференциальные уравнения, но и трёхмерные. В качестве примера рассмотрим уравнение теплопроводности для нестационарного трёхмерного температурного поля:

$$\rho C_T \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + q,$$

где T – температура; x, y, z – пространственные координаты; C_T, ρ, λ – теплоёмкость, плотность и теплопроводность материала; q – внутренний источник (сток) теплоты.

Данное уравнение является трёхмерным дифференциальным уравнением параболического типа. Его трёхмерность обусловлена тем, что температура T – функция четырёх переменных, три из которых являются пространственными координатами:

$$T = T(t, x, y, z).$$

Уравнение вихря скорости, являющееся преобразованием уравнения Навье–Стокса, – ещё один пример трёхмерного дифференциального уравнения параболического типа:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + v^x \frac{\partial \xi}{\partial x} + v^y \frac{\partial \xi}{\partial y} + v^z \frac{\partial \xi}{\partial z} = \gamma \left(\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} \right).$$

Методы численного решения трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа во многом схожи с методами численного решения двумерных дифференциальных уравнений параболического типа. Однако между ними имеются отличия, обусловленные более высокой размерностью разностной сетки, что оказывает влияние и на условие устойчивости явной разностной схемы,

и на методику расщепления шага по времени при использовании метода дробных шагов, и на увеличение сложности расчётных алгоритмов. Как и в случае двумерных задач, рассмотрим сначала методы численного решения трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа, не содержащих производных по координатам первого порядка; обобщённый подход к решению трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа, которые могут содержать первые производные по координатам, представлен в конце главы.

9.2. Разностная сетка для трёхмерных задач

Запишем трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа, не содержащее первых производных по координатам x , y и z , в следующем общем виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + f(t, x, y, z); \quad \sigma > 0. \quad (9.1)$$

Уравнение (9.1) должно быть дополнено начальным и двумя граничными условиями по каждой из пространственных координат (для определённости будем рассматривать граничные условия 1-го рода):

$$\begin{aligned} u(t=0, x, y, z) &= \xi(x, y, z); & \begin{cases} u(t, x=a, y, z) = \varphi_1(t, y, z), \\ u(t, x=b, y, z) = \varphi_2(t, y, z); \end{cases} \\ \begin{cases} u(t, x, y=c, z) = \psi_1(t, x, z), \\ u(t, x, y=d, z) = \psi_2(t, x, z); \end{cases} & \begin{cases} u(t, x, y, z=p) = \zeta_1(t, x, y), \\ u(t, x, y, z=q) = \zeta_2(t, x, y). \end{cases} \end{aligned}$$

Пусть для независимых переменных заданы следующие интервалы их изменения:

$$t \in [0, t_k], \quad x \in [a, b], \quad y \in [c, d], \quad z \in [p, q].$$

Разбивая каждый из этих интервалов на некоторое количество равных частей (по аналогии с тем, как это было сделано в разделе 2.3.1 для случая двух неза-

висимых переменных), получим **разностную сетку**, которая в данном случае будет четырёхмерной. Введём следующие обозначения:

n – порядковый номер точки деления по оси t ,

j – порядковый номер точки деления по оси x ,

k – порядковый номер точки деления по оси y ,

m – порядковый номер точки деления по оси z ,

$t^{n+1} - t^n = \Delta t$ – величина интервала между точками по оси t ,

$x_{j+1} - x_j = \Delta x = h_x$ – величина интервала между точками по оси x ,

$y_{k+1} - y_k = \Delta y = h_y$ – величина интервала между точками по оси y ,

$z_{m+1} - z_m = \Delta z = h_z$ – величина интервала между точками по оси z ,

$u(t^n, x_j, y_k, z_m) = u_{j,k,m}^n$ – значение функции $u(t, x, y, z)$, соответствующее

точкам t^n, x_j, y_k, z_m ;

$f(t^n, x_j, y_k, z_m) = f_{j,k,m}^n$ – значение функции $f(t, x, y, z)$, соответствующее

точкам t^n, x_j, y_k, z_m .

Введём нумерацию точек разностной сетки по каждой из осей следующим образом:

по оси t – $n = 0, 1, 2, \dots, M$;

по оси x – $j = 1, 2, 3, \dots, N_x$;

по оси y – $k = 1, 2, 3, \dots, N_y$;

по оси z – $m = 1, 2, 3, \dots, N_z$.

Тогда значения переменных t, x, y и z в точках разностной сетки будут определяться согласно следующему правилу:

$$\begin{aligned} t^0 &= 0, & t^1 &= \Delta t, & t^2 &= 2\Delta t, & \dots, & t^n &= n \cdot \Delta t; \\ x_1 &= a, & x_2 &= a + h_x, & x_3 &= a + 2h_x, & \dots, & x_j &= a + (j-1)h_x; \\ y_1 &= c, & y_2 &= c + h_y, & y_3 &= c + 2h_y, & \dots, & y_k &= c + (k-1)h_y; \\ z_1 &= p, & y_2 &= p + h_z, & y_3 &= p + 2h_z, & \dots, & y_k &= p + (m-1)h_z. \end{aligned}$$

9.3. Аппроксимация дифференциальных операторов

Используя введённые обозначения, запишем аппроксимацию дифференциальных операторов, составляющих уравнение (9.1), в точке t^n, x_j, y_k, z_m . Для аппроксимации производной по времени обычно используется правая конечная разность (со стабилизацией значений независимых переменных x, y и z в точках с порядковыми номерами j, k и m , соответственно):

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t^n, x_j, y_k, z_m} \rightarrow \frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t}.$$

Для аппроксимации производных второго порядка будем использовать разностный оператор (2.12) (со стабилизацией значения независимой переменной t в точке с порядковым номером n):

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{t^n, x_j, y_k, z_m} &\rightarrow \lambda_{xx} u_{j,k,m}^n = \frac{u_{j+1,k,m}^n - 2u_{j,k,m}^n + u_{j-1,k,m}^n}{h_x^2}, \\ \left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{t^n, x_j, y_k, z_m} &\rightarrow \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n = \frac{u_{j,k+1,m}^n - 2u_{j,k,m}^n + u_{j,k-1,m}^n}{h_y^2}, \\ \left. \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right|_{t^n, x_j, y_k, z_m} &\rightarrow \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n = \frac{u_{j,k,m+1}^n - 2u_{j,k,m}^n + u_{j,k,m-1}^n}{h_z^2}. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Подставляя записанные разностные операторы в дифференциальное уравнение (9.1), получаем явную разностную схему, аппроксимирующую уравнение (9.1) в точке (t^n, x_j, y_k, z_m) :

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \left(\lambda_{xx} u_{j,k,m}^n + \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n + \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n \right) + f_{j,k,m}^n. \quad (9.3)$$

Рассматривая аппроксимацию производных второго порядка на $(n+1)$ -м шаге по времени, получаем неявную разностную схему:

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \left(\lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1} + \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+1} + \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1} \right) + f_{j,k,m}^n. \quad (9.4)$$

Учитывая порядок аппроксимации разностных операторов, использованных при составлении разностных схем (9.3), (9.4), легко видеть, что они имеют первый порядок аппроксимации по времени и второй – по каждой из координат:

$$O(\Delta t, h_x^2, h_y^2, h_z^2).$$

9.4. Явная разностная схема

9.4.1. Исследование устойчивости

Исследуем устойчивость явной разностной схемы (9.3), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (9.1), с помощью спектрального метода. Для этого отбрасываем член $f_{j,k,m}^n$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоники:

$$u_{j,k,m}^n = \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m}, \quad \alpha \in [0, 2\pi], \beta \in [0, 2\pi], \gamma \in [0, 2\pi];$$

$$\begin{aligned} & \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} - \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m}}{\Delta t} = \\ &= \sigma \frac{\lambda^n e^{i\alpha(j+1)} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} - 2\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} + \lambda^n e^{i\alpha(j-1)} e^{i\beta k} e^{i\gamma m}}{h_x^2} + \\ &+ \sigma \frac{\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta(k+1)} e^{i\gamma m} - 2\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} + \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta(k-1)} e^{i\gamma m}}{h_y^2} + \\ &+ \sigma \frac{\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma(m+1)} - 2\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} + \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma(m-1)}}{h_z^2}. \end{aligned}$$

Далее упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \left(\frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h_x^2} + \frac{e^{i\beta} - 2 + e^{-i\beta}}{h_y^2} + \frac{e^{i\gamma} - 2 + e^{-i\gamma}}{h_z^2} \right).$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем формулу

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = -\frac{\sigma}{h_x^2} 4 \sin^2 \frac{\alpha}{2} - \frac{\sigma}{h_y^2} 4 \sin^2 \frac{\beta}{2} - \frac{\sigma}{h_z^2} 4 \sin^2 \frac{\gamma}{2},$$

из которой выражаем λ :

$$\lambda = 1 - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2} \sin^2 \frac{\gamma}{2}.$$

С учётом необходимого условия устойчивости разностных схем (3.8) имеем:

$$|\lambda| \leq 1 \Rightarrow -1 \leq 1 - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2} \sin^2 \frac{\gamma}{2} \leq 1.$$

В полученном двойном неравенстве правое условие выполняется автоматически. Поэтому рассмотрим более подробно левое условие:

$$\begin{aligned} 1 - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2} - 4\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2} \sin^2 \frac{\gamma}{2} &\geq -1 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} + \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2} + \frac{\Delta t}{h_z^2} \sin^2 \frac{\gamma}{2} &\leq \frac{1}{2\sigma}. \end{aligned}$$

Задавая для $\sin^2 \frac{\alpha}{2}$, $\sin^2 \frac{\beta}{2}$, $\sin^2 \frac{\gamma}{2}$ максимально возможное значение, равное 1,

перейдём к более строгому условию, справедливому для любых α , β и γ :

$$\frac{\Delta t}{h_x^2} + \frac{\Delta t}{h_y^2} + \frac{\Delta t}{h_z^2} \leq \frac{1}{2\sigma} \Rightarrow \Delta t \leq \frac{1}{\frac{2\sigma}{h_x^2} + \frac{2\sigma}{h_y^2} + \frac{2\sigma}{h_z^2}}. \quad (9.5)$$

Выражение (9.5) является условием устойчивости явной разностной схемы (9.3), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (9.1). Если интервалы между точками по осям x , y и z на разностной сетке задать равными

$$h_x = h_y = h_z = h,$$

Таблица 2

**Зависимость условия устойчивости явной разностной схемы,
аппроксимирующей дифференциальное уравнение
параболического типа, от размерности задачи**

Размерность пространства	1	2	3	N
Условие устойчивости	$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2\sigma}$	$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{4\sigma}$	$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{6\sigma}$	$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2N\sigma}$

выражение (9.5) примет более простой вид:

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{6\sigma}.$$

Сравнивая условия устойчивости явных разностных схем, аппроксимирующих одномерное, двумерное и трёхмерное дифференциальные уравнения параболического типа, можно получить условие устойчивости явной разностной схемы, аппроксимирующей N -мерное дифференциальное уравнение параболического типа (табл. 2).

9.4.2. Метод решения

Явная разностная схема (9.3) содержит одну неизвестную величину – значение функции $u(t, x, y, z)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени. Выражая эту величину из разностной схемы, получаем рекуррентное соотношение

$$u_{j,k,m}^{n+1} = u_{j,k,m}^n + \sigma \Delta t (\lambda_{xx} u_{j,k,m}^n + \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n + \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n) + \Delta t f_{j,k,m}^n, \quad (9.6)$$

позволяющее рассчитать все значения функции $u(t, x, y, z)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени (при известных значениях на n -м шаге), кроме значений $u_{1,k,m}^{n+1}$, $u_{N_x,k,m}^{n+1}$, $u_{j,1,m}^{n+1}$, $u_{j,N_y,m}^{n+1}$, $u_{j,k,1}^{n+1}$, u_{j,k,N_z}^{n+1} , определяемых с помощью граничных условий. Если заданы граничные условия 1-го рода, то эти значения определяются непосредственно из разностной аппроксимации граничных условий:

$$\begin{cases} u_{1,k,m}^{n+1} = \Phi_1(t^{n+1}, y_k, z_m) \\ u_{N_x,k,m}^{n+1} = \Phi_2(t^{n+1}, y_k, z_m) \end{cases} \quad \begin{cases} u_{j,1,m}^{n+1} = \Psi_1(t^{n+1}, x_j, z_m) \\ u_{j,N_y,m}^{n+1} = \Psi_2(t^{n+1}, x_j, z_m) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_{j,k,1}^{n+1} = \zeta_1(t^{n+1}, x_j, y_k) \\ u_{j,k,N_z}^{n+1} = \zeta_2(t^{n+1}, x_j, y_k) \end{cases}$$

Если заданы граничные условия 2-го или 3-го рода, то искомые значения можно определить, выразив их из разностной аппроксимации граничных условий.

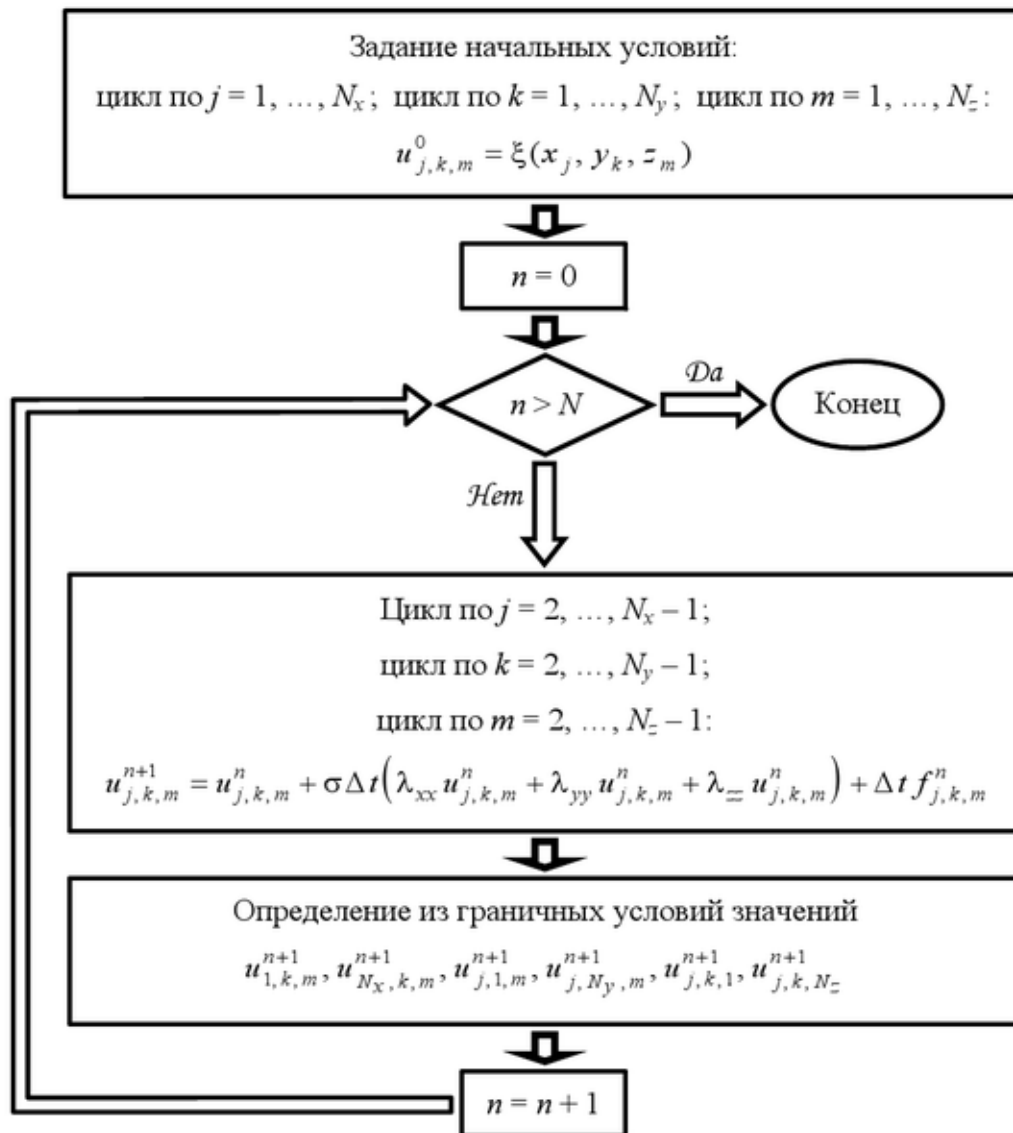


Рис. 9.1. Блок-схема решения явной разностной схемы, аппроксимирующей трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа

На рис. 9.1 приведён алгоритм решения (в виде блок-схемы) явной разностной схемы (9.3), аппроксимирующей трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа (9.1).

9.5. Характеристика неявной разностной схемы

Исследуем устойчивость неявной разностной схемы (9.4), аппроксимирующей дифференциальное уравнение (9.1), с помощью спектрального метода. Для

этого отбрасываем член $f_{j,k,m}^n$, наличие которого не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представляем решение в виде гармоник:

$$\begin{aligned}
 u_{j,k,m}^n &= \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m}, \quad \alpha \in [0, 2\pi], \beta \in [0, 2\pi], \gamma \in [0, 2\pi]; \\
 &\frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} - \lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m}}{\Delta t} = \\
 &= \sigma \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha(j+1)} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)} e^{i\beta k} e^{i\gamma m}}{h_x^2} + \\
 &+ \sigma \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta(k+1)} e^{i\gamma m} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta(k-1)} e^{i\gamma m}}{h_y^2} + \\
 &+ \sigma \frac{\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma(m+1)} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma(m-1)}}{h_z^2}.
 \end{aligned}$$

Далее упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на $\lambda^n e^{i\alpha j} e^{i\beta k} e^{i\gamma m}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \sigma \lambda \left(\frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{h_x^2} + \frac{e^{i\beta} - 2 + e^{-i\beta}}{h_y^2} + \frac{e^{i\gamma} - 2 + e^{-i\gamma}}{h_z^2} \right).$$

Используя зависимости (3.9), (3.10), получаем формулу

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = -\lambda \frac{\sigma}{h_x^2} 4 \sin^2 \frac{\alpha}{2} - \lambda \frac{\sigma}{h_y^2} 4 \sin^2 \frac{\beta}{2} - \lambda \frac{\sigma}{h_z^2} 4 \sin^2 \frac{\gamma}{2},$$

из которой выражаем λ :

$$\lambda = \frac{1}{1 + 4\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} + 4\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} \sin^2 \frac{\beta}{2} + 4\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2} \sin^2 \frac{\gamma}{2}}.$$

Собственные числа оператора перехода удовлетворяют необходимому условию устойчивости разностных схем (3.8) при любых значениях $\Delta t, h_x, h_y, h_z$; следовательно, неявная разностная схема (9.4) является абсолютно устойчивой.

Неявная разностная схема (9.4) содержит семь неизвестных величин – значений функции $u(t, x, y, z)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени. Это означает, что без дополнительных преобразований она неразрешима.

9.6. Схема расщепления

9.6.1. Методика записи уравнений схемы

Для разрешения неявной разностной схемы (9.4), аппроксимирующей уравнение (9.1), используется **метод дробных шагов**, уже рассматривавшийся нами в главе 7 при изучении методов решения двумерных дифференциальных уравнений параболического типа. Преобразуем с помощью метода дробных шагов неявную разностную схему (9.4) в схему расщепления.

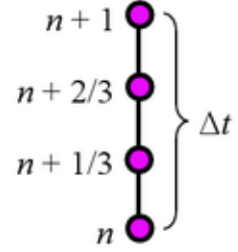


Рис. 9.2. Деление интервала Δt для записи схемы расщепления

В случае трёхмерных задач интервал Δt между точками t^n и t^{n+1} на разностной сетке делится на три равные части; полученные промежуточные точки обозначим как $t^{n+1/3}$ и $t^{n+2/3}$ (рис. 9.2).

На первой трети интервала Δt записывается **первая подсхема**, являющаяся неявной разностной схемой, в которой учитывается только производная второго порядка по координате x :

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1,k,m}^{n+1/3} - 2u_{j,k,m}^{n+1/3} + u_{j-1,k,m}^{n+1/3}}{h_x^2} + f_{j,k,m}^n. \quad (9.7)$$

На второй трети интервала Δt записывается **вторая подсхема**, являющаяся неявной разностной схемой, в которой учитывается только производная второго порядка по координате y :

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j,k+1,m}^{n+2/3} - 2u_{j,k,m}^{n+2/3} + u_{j,k-1,m}^{n+2/3}}{h_y^2}. \quad (9.8)$$

На последней трети интервала Δt записывается **третья подсхема**, являющаяся неявной разностной схемой, в которой учитывается только производная второго порядка по координате z :

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^{n+2/3}}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j,k,m+1}^{n+1} - 2u_{j,k,m}^{n+1} + u_{j,k,m-1}^{n+1}}{h_z^2}. \quad (9.9)$$

Таким образом, схема расщепления для трёхмерного дифференциального уравнения (9.1) состоит из трёх подсхем (9.7)–(9.9). Складывая подсхемы (9.7)–(9.9), получаем соотношение, отличающееся от неявной разностной схемы (9.4) только тем, что производные $\partial^2 u / \partial x^2$ и $\partial^2 u / \partial y^2$ аппроксимированы в нём не на $(n+1)$ -м шаге по времени, а в точках $(n+1/3)$ и $(n+2/3)$, соответственно:

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \left(\lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/3} + \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+2/3} + \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1} \right) + f_{j,k,m}^n.$$

Данное соотношение показывает, что схема расщепления (9.7)–(9.9) имеет такой же порядок аппроксимации, как и неявная разностная схема (9.4):

$$O(\Delta t, h_x^2, h_y^2, h_z^2).$$

Отметим, что свободный член уравнения (9.1) может быть учтён не в первой подсхеме схемы расщепления (9.7)–(9.9), а во второй или в третьей; его вид при этом не изменится.

9.6.2. Характеристика первой подсхемы

Первая подсхема (9.7) схемы расщепления, являясь аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения параболического типа, обладает всеми свойствами последней: она абсолютно устойчива, решается с помощью метода прогонки.

Приведём подсхему (9.7) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$-\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} u_{j+1,k,m}^{n+1/3} + \left(1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} \right) u_{j,k,m}^{n+1/3} - \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} u_{j-1,k,m}^{n+1/3} = u_{j,k,m}^n + \Delta t f_{j,k,m}^n.$$

Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$a_j = c_j = -\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad b_j = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k}^n = u_{j,k,m}^n + \Delta t f_{j,k,m}^n.$$

Легко видеть, что для первой подсхемы (9.7) схемы расщепления достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} < 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2} = |b_j|.$$

Рекуррентное прогоночное соотношение для первой подсхемы (9.7) имеет вид:

$$u_{j,k,m}^{n+1/3} = \alpha_j u_{j+1,k,m}^{n+1/3} + \beta_j. \quad (9.10)$$

Прогоночные коэффициенты определяются согласно соотношениям (4.13):

$$\alpha_j = -\frac{a_j}{b_j + c_j \alpha_{j-1}}, \quad \beta_j = \frac{\xi_{j,k,m}^n - c_j \beta_{j-1}}{b_j + c_j \alpha_{j-1}}. \quad (9.11)$$

Для определения значений прогоночных коэффициентов на 1-м шаге, т.е. α_1, β_1 , и решения на правой границе используются граничные условия по координате x . Методики определения, а также последовательность вычислений (метод прогонки) аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2. Отличие состоит лишь в том, что соотношения (9.10) и (9.11) включают переменные k и m , поэтому необходимо задать внешние циклы по этим переменным:

$$k = 2, \dots, N_y - 1;$$

$$m = 2, \dots, N_z - 1;$$

следовательно, при решении первой подсхемы (9.7) (т.е. на первой трети интервала Δt) метод прогонки будет использован $(N_y - 2)(N_z - 2)$ раза.

Результатом решения первой подсхемы (9.7) схемы расщепления являются значения функции $u(t, x, y, z)$ на шаге по времени $(n + 1/3)$, необходимые для решения второй подсхемы (9.8). Однако следует отметить, что поскольку каждая из подсхем (9.7)–(9.9) по отдельности не аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение (9.1) (аппроксимация достигается только в результате последовательного решения всех трёх подсхем), оценка погрешности значений функции $u(t, x, y, z)$ на шаге по времени $(n + 1/3)$ не представляется возможной. Близость к истинным значениям может быть гарантирована только для значений функции $u(t, x, y, z)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени.

9.6.3. Характеристика второй подсхемы

Вторая подсхема (9.8) схемы расщепления, являясь аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения параболического типа, обладает всеми свойствами последней: она абсолютно устойчива, решается с помощью метода прогонки.

Приведём подсхему (9.8) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$-\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} u_{j,k+1,m}^{n+2/3} + \left(1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}\right) u_{j,k,m}^{n+2/3} - \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} u_{j,k-1,m}^{n+2/3} = u_{j,k,m}^{n+1/3}.$$

Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k,m}^{n+1/3} = u_{j,k,m}^{n+1/3}.$$

Легко видеть, что для второй подсхемы (9.8) схемы расщепления достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|\tilde{a}_k| + |\tilde{c}_k| = 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} < 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2} = |\tilde{b}_k|.$$

Рекуррентное прогоночное соотношение для второй подсхемы (9.8) имеет вид:

$$u_{j,k,m}^{n+2/3} = \tilde{\alpha}_k u_{j,k+1,m}^{n+2/3} + \tilde{\beta}_k. \quad (9.12)$$

Прогоночные коэффициенты определяются согласно соотношениям (4.13):

$$\tilde{\alpha}_k = -\frac{\tilde{a}_k}{\tilde{b}_k + \tilde{c}_k \tilde{\alpha}_{k-1}}, \quad \tilde{\beta}_k = \frac{\tilde{\xi}_{j,k,m}^{n+1/3} - \tilde{c}_k \tilde{\beta}_{k-1}}{\tilde{b}_k + \tilde{c}_k \tilde{\alpha}_{k-1}}. \quad (9.13)$$

Для определения значений прогоночных коэффициентов на 1-м шаге, т.е. $\tilde{\alpha}_1, \tilde{\beta}_1$, и решения на правой границе используются граничные условия по координате y . Методики определения, а также последовательность вычислений (метод прогонки) аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2. Отличие состоит лишь в том, что соотношения (9.12) и (9.13) включают переменные j и m , поэтому необходимо задать внешние циклы по этим переменным:

$$j = 2, \dots, N_x - 1;$$

$$m = 2, \dots, N_z - 1;$$

следовательно, при решении второй подсхемы (9.8) (т.е. на второй трети интервала Δt) метод прогонки будет использован $(N_x - 2)(N_z - 2)$ раз.

Результатом решения второй подсхемы (9.8) схемы расщепления являются значения функции $u(t, x, y, z)$ на шаге по времени $(n + 2/3)$, необходимые для решения третьей подсхемы (9.9). Однако следует отметить, что (как и в случае результата решения первой подсхемы (9.7)) оценка погрешности значений функции $u(t, x, y, z)$ на шаге по времени $(n + 2/3)$ не представляется возможной, так как аппроксимация схемой расщепления (9.7)–(9.9) исходного дифференциального уравнения (9.1) достигается только в результате последовательного решения всех трёх подсхем.

9.6.4. Характеристика третьей подсхемы

Третья подсхема (9.9) схемы расщепления, являясь аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения параболического типа, обладает всеми свойствами последней: она абсолютно устойчива, решается с помощью метода прогонки.

Приведём подсхему (9.9) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$-\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2} u_{j,k,m+1}^{n+1} + \left(1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2}\right) u_{j,k,m}^{n+1} - \sigma \frac{\Delta t}{h_z^2} u_{j,k,m-1}^{n+1} = u_{j,k,m}^{n+2/3}.$$

Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$\tilde{a}_m = \tilde{c}_m = -\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2}, \quad \tilde{b}_m = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k,m}^{n+2/3} = u_{j,k,m}^{n+2/3}.$$

Легко видеть, что для третьей подсхемы (9.9) схемы расщепления достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|\tilde{\tilde{a}}_m| + |\tilde{\tilde{c}}_m| = 2\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2} < 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2} = |\tilde{\tilde{b}}_m|.$$

Рекуррентное прогоночное соотношение для третьей подсхемы (9.9) имеет вид:

$$u_{j,k,m}^{n+1} = \tilde{\tilde{\alpha}}_m u_{j,k,m+1}^{n+1} + \tilde{\tilde{\beta}}_m. \quad (9.14)$$

Прогоночные коэффициенты определяются согласно соотношениям (4.13):

$$\tilde{\tilde{\alpha}}_m = -\frac{\tilde{\tilde{a}}_m}{\tilde{\tilde{b}}_m + \tilde{\tilde{c}}_m \tilde{\tilde{\alpha}}_{m-1}}, \quad \tilde{\tilde{\beta}}_m = \frac{\tilde{\tilde{\xi}}_{j,k,m}^{n+2/3} - \tilde{\tilde{c}}_m \tilde{\tilde{\beta}}_{m-1}}{\tilde{\tilde{b}}_m + \tilde{\tilde{c}}_m \tilde{\tilde{\alpha}}_{m-1}}. \quad (9.15)$$

Для определения значений прогоночных коэффициентов на 1-м шаге, т.е. $\tilde{\tilde{\alpha}}_1, \tilde{\tilde{\beta}}_1$, и решения на правой границе используются граничные условия по координате z . Методики определения, а также алгоритм решения аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2. Отличие состоит лишь в том, что соотношения (9.14) и (9.15) включают переменные j и k , поэтому необходимо задать внешние циклы по этим переменным:

$$\begin{aligned} j &= 2, \dots, N_x - 1; \\ k &= 2, \dots, N_y - 1; \end{aligned}$$

следовательно, при решении третьей подсхемы (9.9) (т.е. на последней трети интервала Δt) метод прогонки будет использован $(N_x - 2)(N_y - 2)$ раза.

Результатом решения третьей подсхемы (9.9) схемы расщепления являются значения функции $u(t, x, y, z)$ на $(n + 1)$ -м шаге по времени.

9.6.5. Алгоритм решения

На рис. 9.3 приведён алгоритм решения (в виде блок-схемы) схемы расщепления (9.7)–(9.9), являющейся наиболее простым способом интерпретации неявной разностной схемы (9.4), аппроксимирующей трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа (9.1).

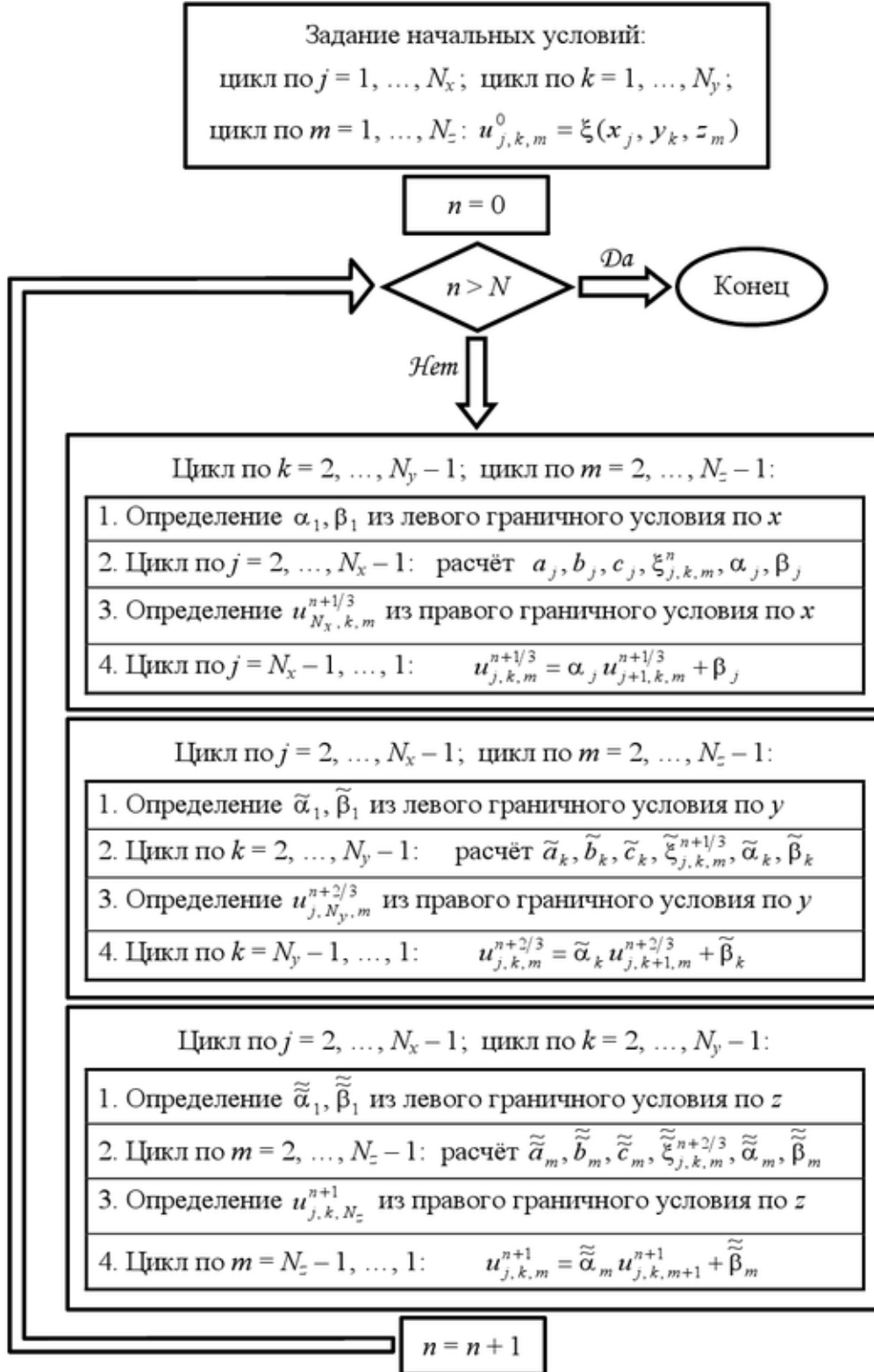


Рис. 9.3. Блок-схема решения схемы расщепления (9.7)–(9.9),
 аппроксимирующей трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа

9.7. Схема со стабилизирующей поправкой

Преобразуем с помощью метода дробных шагов неявную разностную схему (9.4) в схему со стабилизирующей поправкой, имеющую вид с учётом обозначений (9.2):

$$\begin{aligned}\frac{u_{j,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} &= \sigma \lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/3} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n + \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n + f_{j,k,m}^n, \\ \frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{\Delta t} &= \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+2/3} - \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n, \\ \frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^{n+2/3}}{\Delta t} &= \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1} - \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n.\end{aligned}\tag{9.16}$$

Для записи схемы (9.16) необходимо выделить два пространственных направления (в данном случае y и z) и учесть поправку по каждому из них (во второй и третьей подсхемах, соответственно). Схема со стабилизирующей поправкой (9.16) рекомендуется для использования в случае, если существует особенность поведения (например, осцилляции) искомой функции $u(t, x, y, z)$ в одном или двух пространственных направлениях.

Первая подсхема в схеме со стабилизирующей поправкой (9.16) аппроксимирует производную по времени на первой трети интервала Δt и является неявной по координате x , явной по координате y и явной по координате z . Вторая подсхема аппроксимирует производную $\partial u / \partial t$ на второй трети интервала Δt , является неявной по координате y и учитывает поправку по этой координате. Третья подсхема аппроксимирует производную $\partial u / \partial t$ на последней трети интервала Δt , является неявной по координате z и учитывает поправку по этой координате. Каждая из подсхем (как и в случае схемы расщепления (9.7)–(9.9)) является абсолютно устойчивой и решается с помощью метода прогонки.

Складывая подсхемы, получаем:

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/3} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+2/3} + \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1} + f_{j,k,m}^n.$$

Данное соотношение показывает, что схема со стабилизирующей поправкой (9.16) имеет, как и неявная разностная схема (9.4), первый порядок аппроксимации по времени и второй – по каждой из координат:

$$O(\Delta t, h_x^2, h_y^2, h_z^2).$$

Алгоритм решения схемы со стабилизирующей поправкой (9.16) аналогичен алгоритму решения схемы расщепления (9.7)–(9.9). Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы

$$a_j = c_j = -\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad b_j = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2},$$

$$\xi_{j,k,m}^n = u_{j,k,m}^n + \sigma \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n + \sigma \Delta t \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n + \Delta t f_{j,k,m}^n;$$

- для второй подсхемы

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k,m}^{n+1/3} = u_{j,k,m}^{n+1/3} - \sigma \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n;$$

- для третьей подсхемы

$$\tilde{\tilde{a}}_m = \tilde{\tilde{c}}_m = -\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2}, \quad \tilde{\tilde{b}}_m = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2}, \quad \tilde{\tilde{\xi}}_{j,k,m}^{n+2/3} = u_{j,k,m}^{n+2/3} - \sigma \Delta t \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n.$$

Легко видеть, что для всех трёх подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется.

9.8. Схема предиктор-корректор

9.8.1. Методика записи уравнений схемы

Преобразуем с помощью метода дробных шагов неявную разностную схему (9.4) в схему предиктор-корректор. Данная схема требует особого способа расщепления интервала Δt (рис. 9.4): интервал Δt между точками t^n и t^{n+1} на разностной сетке делится пополам (полученная промежуточная точка обозначена как $t^{n+1/2}$); интервал $\Delta t/2$ между точками t^n и $t^{n+1/2}$ делится на три равные части (полученные промежуточные точки обозначены как $t^{n+1/6}$ и $t^{n+1/3}$).

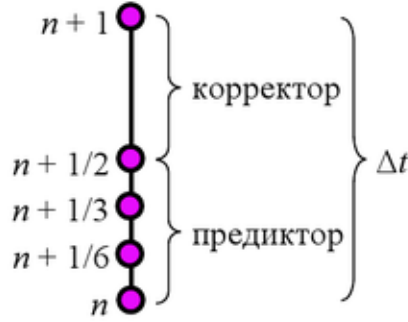


Рис. 9.4. Деление интервала Δt для записи схемы предиктор-корректор

На первой трети интервала $\Delta t/2$ записывается неявная разностная схема, в которой учитывается только производная второго порядка по координате x :

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1/6} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t/2} = \sigma \frac{u_{j+1,k,m}^{n+1/6} - 2u_{j,k,m}^{n+1/6} + u_{j-1,k,m}^{n+1/6}}{h_x^2}. \quad (9.17)$$

На второй трети интервала $\Delta t/2$ записывается неявная разностная схема, в которой учитывается только производная второго порядка по координате y :

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^{n+1/6}}{\Delta t/2} = \sigma \frac{u_{j,k+1,m}^{n+1/3} - 2u_{j,k,m}^{n+1/3} + u_{j,k-1,m}^{n+1/3}}{h_y^2}. \quad (9.18)$$

На последней трети интервала $\Delta t/2$ записывается неявная разностная схема, в которой учитывается только производная второго порядка по координате z :

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1/2} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{\Delta t/2} = \sigma \frac{u_{j,k,m+1}^{n+1/2} - 2u_{j,k,m}^{n+1/2} + u_{j,k,m-1}^{n+1/2}}{h_z^2}. \quad (9.19)$$

Результатом последовательного решения подсхем (9.17)–(9.19), называемых в совокупности **предиктором**, являются значения функции $u(t, x, y, z)$ на шаге по времени $(n + 1/2)$. Для завершения расчётов на всём интервале Δt используется поправочное разностное соотношение (**корректор**), имеющее вид с учётом обозначений (9.2):

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1/2} + f_{j,k,m}^{n+1/2}. \quad (9.20)$$

Таким образом, схема предиктор-корректор в случае трёхмерных задач состоит из четырёх подсхем.

9.8.2. Характеристика подсхем. Метод решения

Каждая из подсхем, составляющих предиктор (9.17)–(9.19), является абсолютно устойчивой и решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы предиктора (9.17)

$$a_j = c_j = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_x^2}, \quad b_j = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k,m}^n = u_{j,k,m}^n;$$

- для второй подсхемы предиктора (9.18)

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k,m}^{n+1/6} = u_{j,k,m}^{n+1/6};$$

- для третьей подсхемы предиктора (9.19)

$$\tilde{\tilde{a}}_m = \tilde{\tilde{c}}_m = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_z^2}, \quad \tilde{\tilde{b}}_m = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_z^2}, \quad \tilde{\tilde{\xi}}_{j,k,m}^{n+1/3} = u_{j,k,m}^{n+1/3}.$$

Легко видеть, что для всех трёх подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется.

Правая часть корректора (9.20) аппроксимирована относительно точки $t^{n+1/2}$. Это означает, что разностный оператор в левой части является центральной конечной разностью, которая имеет второй порядок аппроксимации (см. раздел 2.2.2). Следовательно, роль корректора (9.20) в схеме предиктор-корректор (9.17)–(9.20) заключается в повышении порядка аппроксимации схемы по времени:

$$O(\Delta t^2, h_x^2, h_y^2, h_z^2),$$

что делает её более точной по сравнению со схемой расщепления (9.7)–(9.9).

Для решения корректора (9.20) используется рекуррентное соотношение:

$$u_{j,k,m}^{n+1} = u_{j,k,m}^n + \Delta t (\sigma \lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1/2} + f_{j,k,m}^{n+1/2}). \quad (9.21)$$

Итак, роль предиктора (9.17)–(9.19) в схеме предиктор-корректор (9.17)–(9.20) заключается в обеспечении абсолютной устойчивости всей схемы; роль корректора (9.20) – в повышении порядка аппроксимации схемы по времени.

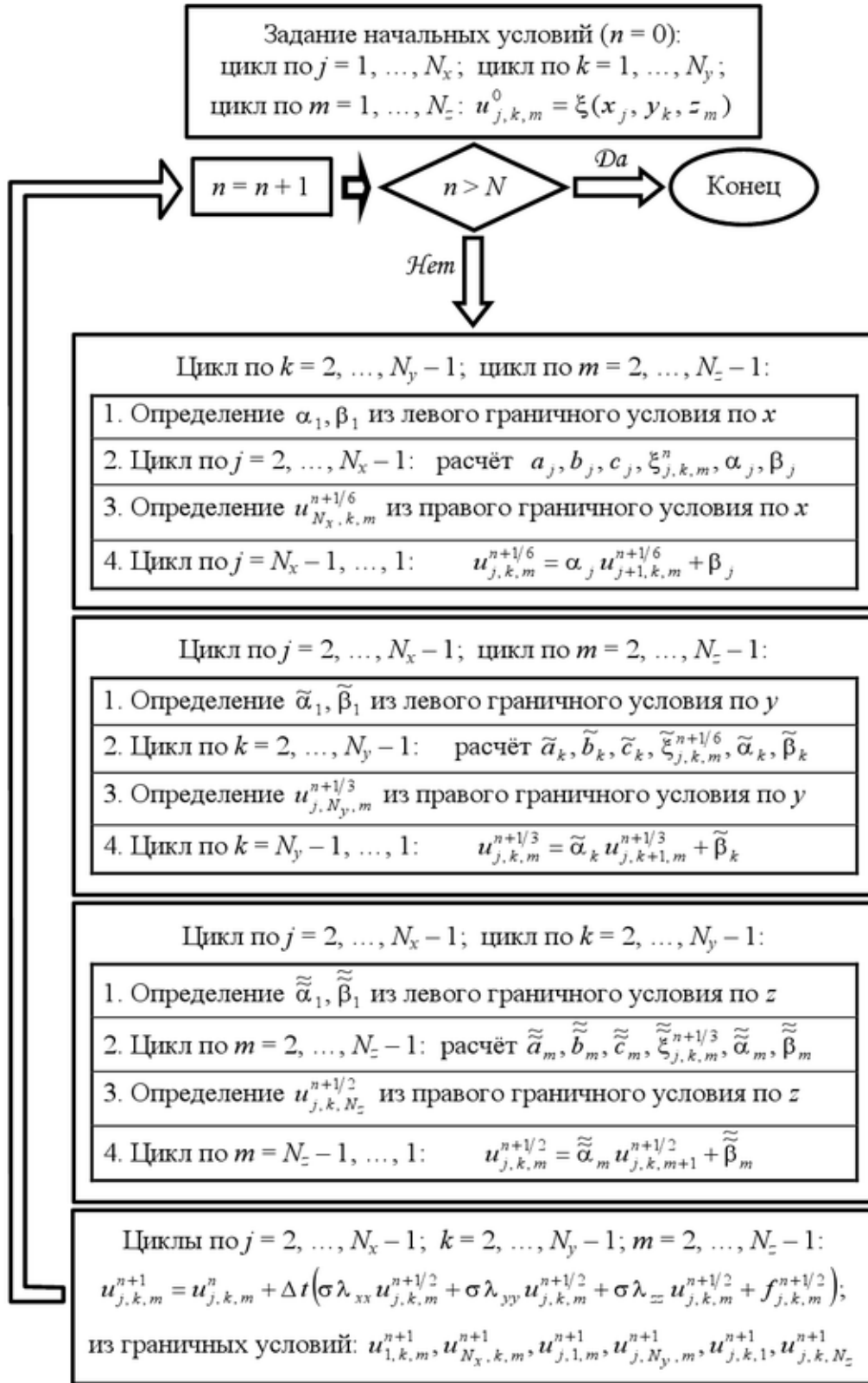


Рис. 9.5. Блок-схема решения схемы предиктор-корректор (9.17)–(9.20), аппроксимирующей трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа

На рис. 9.5 приведён алгоритм решения (в виде блок-схемы) схемы предиктор-корректор (9.17)–(9.20), являющейся наиболее сложной интерпретацией неявной разностной схемы (9.4), аппроксимирующей трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа (9.1).

9.9. Сравнительная характеристика изученных разностных схем

В заключение приведём сравнительную характеристику разностных схем, аппроксимирующих трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа, не содержащее первых производных по координатам x , y и z :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + f(t, x, y, z); \quad \sigma > 0.$$

При записи разностных схем использованы обозначения (9.2).

1. Явная разностная схема

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \left(\lambda_{xx} u_{j,k,m}^n + \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n + \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n \right) + f_{j,k,m}^n.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x^2, h_y^2, h_z^2)$.

- Условно устойчива $\Delta t \leq \frac{1}{\frac{2\sigma}{h_x^2} + \frac{2\sigma}{h_y^2} + \frac{2\sigma}{h_z^2}}$.

- Решается с помощью рекуррентного соотношения (9.6).

2. Схема расщепления

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} &= \sigma \lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/3} + f_{j,k,m}^n, \\ \frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{\Delta t} &= \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+2/3}, \quad \frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^{n+2/3}}{\Delta t} = \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1}. \end{aligned}$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x^2, h_y^2, h_z^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая подсхема решается с помощью метода прогонки.

3. Схема со стабилизирующей поправкой

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/3} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n + \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n + f_{j,k,m}^n,$$

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{\Delta t} = \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+2/3} - \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^n,$$

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^{n+2/3}}{\Delta t} = \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1} - \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^n.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x^2, h_y^2, h_z^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая подсхема решается с помощью метода прогонки.

4. Схема предиктор-корректор

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1/6} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t/2} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/6},$$

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^{n+1/6}}{\Delta t/2} = \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+1/3},$$

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1/2} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{\Delta t/2} = \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1/2},$$

$$\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k,m}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k,m}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{zz} u_{j,k,m}^{n+1/2} + f_{j,k,m}^{n+1/2}.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h_x^2, h_y^2, h_z^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая из подсхем предиктора решается с помощью метода прогонки; корректор (четвёртая подсхема) – с помощью рекуррентного соотношения (9.21).

9.10. Решение трёхмерных дифференциальных уравнений параболического типа, содержащих первые производные по координатам

Запишем трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа, содержащее производные первого порядка по координатам x , y и z , в следующем общем виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v_1 \frac{\partial u}{\partial x} + v_2 \frac{\partial u}{\partial y} + v_3 \frac{\partial u}{\partial z} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + f(t, x, y, z). \quad (9.22)$$

Методы численного решения подобных уравнений аналогичны методам, рассмотренным в разделе 9.9. Однако эта аналогия справедлива только при правильном выборе конечных разностей для аппроксимации производных $\partial u / \partial x$, $\partial u / \partial y$ и $\partial u / \partial z$.

В качестве примера рассмотрим случай

$$v_1 < 0, \quad v_2 > 0, \quad v_3 < 0.$$

Запишем для уравнения (9.22) схему расщепления, соблюдая правило выбора конечных разностей для аппроксимации производных $\partial u / \partial x$, $\partial u / \partial y$ и $\partial u / \partial z$:

$$\begin{aligned} & \frac{u_{j,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} + v_1 \frac{u_{j+1,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{h_x} = \\ & = \sigma \frac{u_{j+1,k,m}^{n+1/3} - 2u_{j,k,m}^{n+1/3} + u_{j-1,k,m}^{n+1/3}}{h_x^2} + f_{j,k,m}^n; \\ & \frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{\Delta t} + v_2 \frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} - u_{j,k-1,m}^{n+2/3}}{h_y} = \sigma \frac{u_{j,k+1,m}^{n+2/3} - 2u_{j,k,m}^{n+2/3} + u_{j,k-1,m}^{n+2/3}}{h_y^2}; \\ & \frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^{n+2/3}}{\Delta t} + v_3 \frac{u_{j,k,m+1}^{n+1} - u_{j,k,m}^{n+1}}{h_z} = \sigma \frac{u_{j,k,m+1}^{n+1} - 2u_{j,k,m}^{n+1} + u_{j,k,m-1}^{n+1}}{h_z^2}. \end{aligned} \quad (9.24)$$

Разностная схема (9.24) имеет первый порядок аппроксимации по каждой переменной:

$$O(\Delta t, h_x, h_y, h_z).$$

Каждая из подсхем, являясь аналогом неявной разностной схемы для одномерной задачи (см. раздел 6.3), абсолютно устойчива и решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы

$$a_j = -|v_1| \frac{\Delta t}{h_x} - \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad b_j = 1 + |v_1| \frac{\Delta t}{h_x} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2},$$

$$c_j = -\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k,m}^n = u_{j,k,m}^n + \Delta t f_{j,k,m}^n;$$

- для второй подсхемы

$$\tilde{a}_k = -\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + v_2 \frac{\Delta t}{h_y} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2},$$

$$\tilde{c}_k = -v_2 \frac{\Delta t}{h_y} - \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k,m}^{n+1/3} = u_{j,k,m}^{n+1/3};$$

- для третьей подсхемы

$$\tilde{\tilde{a}}_m = -|v_3| \frac{\Delta t}{h_z} - \sigma \frac{\Delta t}{h_z^2}, \quad \tilde{\tilde{b}}_m = 1 + |v_3| \frac{\Delta t}{h_z} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2},$$

$$\tilde{\tilde{c}}_m = -\sigma \frac{\Delta t}{h_z^2}, \quad \tilde{\tilde{\xi}}_{j,k,m}^{n+2/3} = u_{j,k,m}^{n+2/3}.$$

Легко видеть, что для всех трёх подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется. Алгоритм решения разностной схемы (9.24) такой же, как и при отсутствии производных $\partial u / \partial x$, $\partial u / \partial y$ и $\partial u / \partial z$ в исходном дифференциальном уравнении (см. раздел 9.6.5).

Рассмотрим трёхмерное дифференциальное уравнение параболического типа, содержащее не все производные первого и второго порядка, например:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v_2 \frac{\partial u}{\partial y} + v_3 \frac{\partial u}{\partial z} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(t, x, y, z); \quad v_2, v_3 > 0. \quad (9.25)$$

Схема расщепления для уравнения (9.25) имеет вид:

$$\begin{aligned}
\frac{u_{j,k,m}^{n+1/3} - u_{j,k,m}^n}{\Delta t} &= \sigma \frac{u_{j+1,k,m}^{n+1/3} - 2u_{j,k,m}^{n+1/3} + u_{j-1,k,m}^{n+1/3}}{h_x^2} + f_{j,k,m}^n; \\
\frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} - u_{j,k,m}^{n+1/3}}{\Delta t} + v_2 \frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} - u_{j,k-1,m}^{n+2/3}}{h_y} &= \sigma \frac{u_{j,k+1,m}^{n+2/3} - 2u_{j,k,m}^{n+2/3} + u_{j,k-1,m}^{n+2/3}}{h_y^2}; \quad (9.26) \\
\frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m}^{n+2/3}}{\Delta t} + v_3 \frac{u_{j,k,m}^{n+1} - u_{j,k,m-1}^{n+1}}{h_z} &= 0.
\end{aligned}$$

В связи с отсутствием в уравнении (9.25) первой производной по x порядок аппроксимации схемы (9.26) по этой координате будет выше, чем по y и z :

$$O(\Delta t, h_x^2, h_y, h_z).$$

Первая и вторая подсхемы в схеме (9.26) являются аналогами неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения параболического типа; они абсолютно устойчивы и решаются с помощью метода прогонки. Третья подсхема в схеме (9.26) является аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения в частных производных первого порядка; она также абсолютно устойчива, но решается с помощью рекуррентного соотношения:

$$u_{j,k,m}^{n+1} = \frac{u_{j,k,m}^{n+2/3} + v_3 \frac{\Delta t}{h_z} u_{j,k,m-1}^{n+1}}{1 + v_3 \frac{\Delta t}{h_z}}.$$

Также следует отметить, что по координате z требуется только одно (а именно, левое) граничное условие. Всё это необходимо учесть при составлении алгоритма решения схемы расщепления (9.26), аппроксимирующей уравнение (9.25).

Глава 10. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка

10.1. Анализ возможности использования метода прогонки

Запишем обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка в следующем общем виде:

$$v \frac{du}{dx} = \sigma \frac{d^2u}{dx^2} - ku + f(x); \quad x \in [a, b], \quad \sigma > 0, \quad v > 0. \quad (10.1)$$

Уравнение (10.1) следует дополнить граничными условиями (для определённости будем рассматривать граничные условия 1-го рода):

$$u(x=a) = \varphi_1, \quad u(x=b) = \varphi_2.$$

Запишем для уравнения (10.1) разностную схему, аппроксимируя производную второго порядка разностным оператором (2.12), а производную первого порядка – левой конечной разностью (в соответствии с правилом выбора конечных разностей для аппроксимации первых производных по координатам):

$$v \frac{u_j - u_{j-1}}{h} = \sigma \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} - ku_j + f(x_j). \quad (10.2)$$

Отметим, что в случае $v < 0$ для аппроксимации производной первого порядка следует использовать правую конечную разность.

Приведём разностную схему (10.2) к виду (4.10), удобному для использования метода прогонки:

$$-\frac{\sigma}{h^2} u_{j+1} + \left(\frac{v}{h} + \frac{2\sigma}{h^2} + k \right) u_j - \left(\frac{v}{h} + \frac{\sigma}{h^2} \right) u_{j-1} = f(x_j).$$

Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$a_j = -\frac{\sigma}{h^2}, \quad b_j = \frac{v}{h} + \frac{2\sigma}{h^2} + k, \quad c_j = -\frac{v}{h} - \frac{\sigma}{h^2}, \quad \xi_j = f(x_j).$$

Проверяя для разностной схемы (10.2) достаточное условие сходимости прогонки (4.16)

Рис. 10.1. Блок-схема решения разностной схемы (10.2) для случая $k > 0$

$$|a_j| + |c_j| = \frac{v}{h} + \frac{2\sigma}{h^2} < \frac{v}{h} + \frac{2\sigma}{h^2} + k = |b_j|,$$

приходим к выводу, что оно выполняется только при условии $k > 0$. Алгоритм решения (в виде блок-схемы) разностной схемы (10.2) для этого случая представлен на рисунке 10.1.

При $k \leq 0$ достаточное условие сходимости прогонки (4.16) не выполняется и, следовательно, для решения разностной схемы (10.2) в этом случае метод прогонки использовать нельзя.

10.2. Метод установления

Представим стационарную задачу, описываемую уравнением (10.1) для случая $k = 0$ (т.е. когда метод прогонки неприменим), в нестационарном виде. Для этого в уравнение (10.1) необходимо добавить фиктивную производную по времени:

$$v \frac{du}{dx} = \sigma \frac{d^2 u}{dx^2} + f(x) \quad \rightarrow \quad (10.3)$$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} = \sigma \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} + f(x). \quad (10.4)$$

При этом искомая функция станет уже функцией двух переменных:

$$u(x) \rightarrow \tilde{u}(x, t).$$

Полученное уравнение (10.4) относится к одномерным (по пространственной переменной) дифференциальным уравнениям параболического типа, методы численного решения которых мы уже рассматривали в главе 4. Таким образом, возникает вопрос: можно ли для решения уравнения (10.3) воспользоваться решением уравнения (10.4)? Чтобы получить ответ на этот вопрос, следует проанализировать результат численного решения уравнения (10.4).

Известно, что численное решение нестационарной задачи (10.4) требует задания начального условия. Если оно будет отличаться от истинного решения стационарной задачи (10.3):

$$\tilde{u}(x, t=0) \neq [u(x)],$$

то производная по времени не будет равна нулю, и в ходе численного решения уравнения (10.4) возникнет некоторая динамика, т.е. изменение значений $\tilde{u}(x, t)$ при $t \rightarrow \infty$.

Однако поскольку в качестве граничных условий для численного решения нестационарной задачи (10.4) используются граничные условия исходной стационарной задачи

$$u(x=a) = \varphi_1, \quad u(x=b) = \varphi_2,$$

т.е. граничные условия, не зависящие от времени, то с течением времени ($t \rightarrow \infty$) производная по времени будет стремиться к нулю, а решение $\tilde{u}(x, t)$ нестационарной задачи (10.4) – к решению стационарной задачи (10.3):

$$t \rightarrow \infty, \quad \tilde{u}(x, t) \rightarrow [u(x)], \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \rightarrow 0. \quad (10.5)$$

Таким образом, использование граничных условий, не зависящих от времени, даёт положительный ответ на поставленный вопрос.

Данный метод решения стационарной задачи путём преобразования её в нестационарную получил название **метода установления**. Процесс пошагового

приближения решения нестационарной задачи к решению исходной стационарной задачи называют **итерационным процессом**, переход от n -го шага к $(n+1)$ -му – **итерацией**, значение Δt – **шагом итерации**, а индекс n – **номером итерации**.

10.3. Метод установления с использованием явной разностной схемы

Запишем для уравнения (10.4) явную разностную схему (соблюдая правило выбора конечной разности для аппроксимации производной $\partial u / \partial x$):

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(x_j). \quad (10.6)$$

В разделе 6.2.1 было доказано, что данная разностная схема условно устойчива; условием устойчивости является соотношение (6.3). Следовательно, максимальное значение шага итерации, при котором разностная схема (10.6) будет устойчива, определяется выражением:

$$\Delta t = \frac{h^2}{vh + 2\sigma}. \quad (10.7)$$

Выражая из разностной схемы (10.6) величину u_j^{n+1} , получаем рекуррентное соотношение

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta t \left[\frac{v}{h} (u_{j-1}^n - u_j^n) + \frac{\sigma}{h^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + f(x_j) \right],$$

которое с учётом равенства (10.7) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + \frac{h^2}{vh + 2\sigma} \left[\frac{\sigma}{h^2} u_{j+1}^n - \left(2\frac{\sigma}{h^2} + \frac{v}{h} \right) u_j^n + \left(\frac{\sigma}{h^2} + \frac{v}{h} \right) u_{j-1}^n + f(x_j) \right] \Rightarrow \\ &\Rightarrow u_j^{n+1} = \frac{\sigma u_{j+1}^n + (\sigma + vh) u_{j-1}^n + h^2 f(x_j)}{vh + 2\sigma}. \end{aligned} \quad (10.8)$$

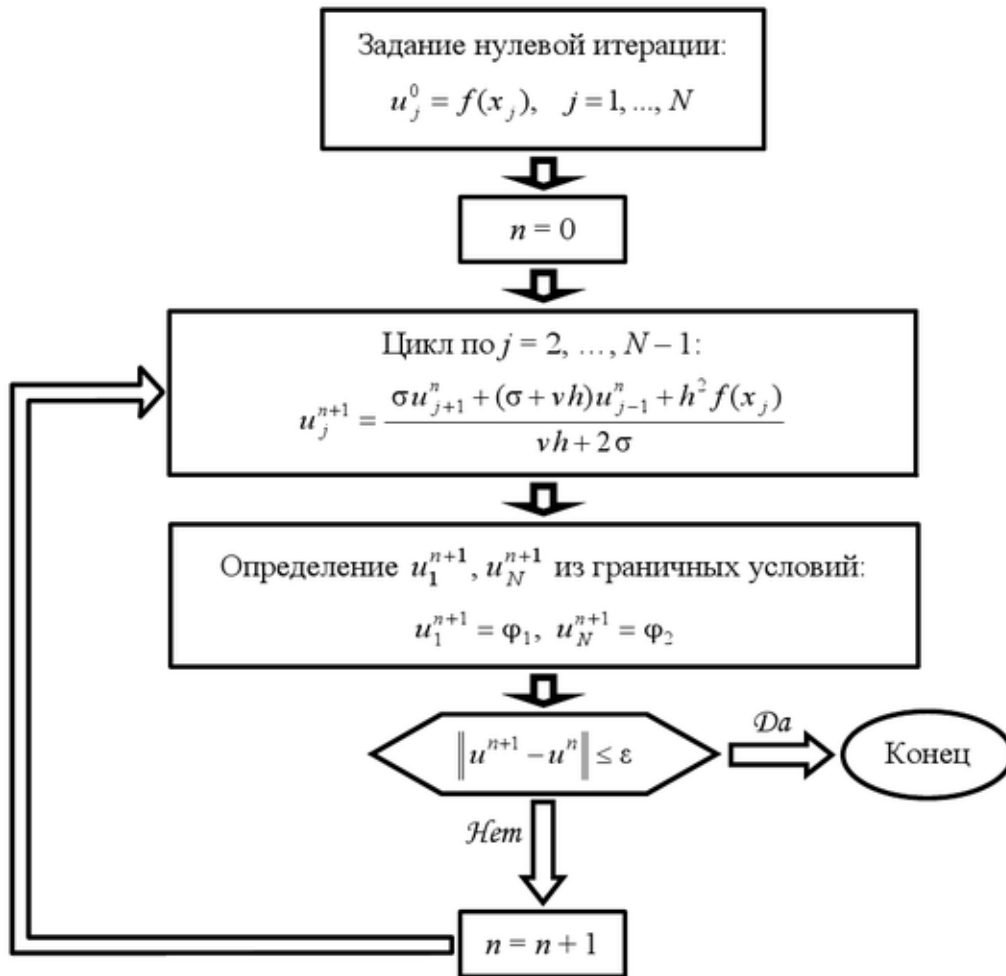


Рис. 10.2. Блок-схема решения обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка методом простой итерации

Метод установления с использованием явной разностной схемы называют **методом простой итерации**, а выражение (10.8) – **формулой простой итерации**. Равенство (10.7) определяет шаг итерации для метода простой итерации.

В качестве нулевой итерации (начального условия, необходимого для решения в связи с введением фиктивной производной по времени) обычно задают свободный член исходного дифференциального уравнения (10.3):

$$u_j^0 = f(x_j).$$

Расчёт итераций следует продолжать до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие (10.5), в разностном представлении соответствующее неравенству:

$$\|u^{n+1} - u^n\| = \sqrt{h \sum_{j=1}^N (u_j^{n+1} - u_j^n)^2} \leq \varepsilon,$$

где ε – некоторая наперёд заданная положительная величина, характеризующая точность вычислений.

На рис. 10.2 приведён алгоритм решения (в виде блок-схемы) уравнения (10.3) методом установления с использованием явной разностной схемы (т.е. методом простой итерации). В силу условной устойчивости явной разностной схемы (10.6) метод простой итерации предполагает использование слишком маленького шага итерации, зависящего согласно соотношению (10.7) от величины шага по координате x . Поэтому для того, чтобы итерационный процесс сошёлся, потребуется достаточно большое количество итераций, а именно:

$$n \sim \frac{1}{h^2}.$$

10.4. Метод установления с использованием неявной разностной схемы

Запишем для уравнения (10.4) неявную разностную схему (соблюдая правило выбора конечной разности для аппроксимации производной $\partial u / \partial x$):

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(x_j). \quad (10.9)$$

В разделе 6.3.1 было доказано, что данная разностная схема абсолютно устойчива. Поэтому значение шага итерации в данном случае может быть выбрано произвольно в отличие от метода простой итерации, в котором значение шага итерации задаётся с помощью соотношения (10.7). Выбор более грубого шага итерации (по сравнению с методом простой итерации) позволяет ускорить сходимость итерационного процесса и уменьшить количество итераций:

$$n \sim \frac{1}{h}.$$

В разделе 6.3.2 было показано, что разностные схемы типа (10.9) решаются с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), для разностной схемы (10.9) имеют вид:

$$\begin{aligned} a_j &= -\sigma \frac{\Delta t}{h^2}, & b_j &= 1 + v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2}, \\ c_j &= -v \frac{\Delta t}{h} - \sigma \frac{\Delta t}{h^2}, & \xi_j^n &= u_j^n + \Delta t f(x_j). \end{aligned}$$

Легко видеть, что для разностной схемы (10.9) достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} < 1 + v \frac{\Delta t}{h} + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} = |b_j|.$$

Алгоритм решения, а также методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2.

Также как и в случае метода простой итерации, в качестве нулевой итерации (начального условия, необходимого для решения в связи с введением фиктивной производной по времени) обычно задают свободный член:

$$u_j^0 = f(x_j).$$

Расчёт итераций продолжается до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие (10.5), в разностном представлении соответствующее неравенству:

$$\|u^{n+1} - u^n\| = \sqrt{h \sum_{j=1}^N (u_j^{n+1} - u_j^n)^2} \leq \varepsilon.$$

Итерационным выражением является прогоночное соотношение (4.11), имеющее такой же вид, как и в общем случае.

10.5. Метод установления с использованием разностной схемы Кранка–Николсона

Запишем для уравнения (10.4) разностную схему Кранка–Николсона:

$$\begin{aligned} & \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{v}{2} \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} + \frac{v}{2} \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \\ & = \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(x_j). \end{aligned} \quad (10.10)$$

Как и неявная разностная схема (10.9), разностная схема Кранка–Николсона (10.10) является абсолютно устойчивой, что обеспечивает возможность произвольного выбора значения шага итерации. Однако разностная схема Кранка–Николсона (10.10) имеет более высокий (второй) порядок аппроксимации по времени:

$$O(\Delta t^2, h).$$

Данная особенность разностной схемы Кранка–Николсона (10.10) позволяет использовать при её решении более грубый шаг итерации, чем при решении неявной разностной схемы (10.9), для получения результатов с такой же точностью; а это в свою очередь способствует ускорению сходимости итерационного процесса и уменьшению количества итераций:

$$n < \frac{1}{h}.$$

В разделе 6.4 было показано, что разностные схемы типа (10.10) решаются с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), для разностной схемы (10.10) имеют вид:

$$\begin{aligned} a_j &= -\sigma \frac{\Delta t}{2h^2}, \quad b_j = 1 + \frac{v}{2} \frac{\Delta t}{h} + \sigma \frac{\Delta t}{h^2}, \quad c_j = -\frac{v}{2} \frac{\Delta t}{h} - \frac{\sigma}{2} \frac{\Delta t}{h^2}, \\ \xi_j^n &= u_j^n + \frac{\sigma}{2} \frac{\Delta t}{h^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) - \frac{v}{2} \frac{\Delta t}{h} (u_j^n - u_{j-1}^n) + \Delta t f(x_j). \end{aligned}$$

Легко видеть, что достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется:

$$|a_j| + |c_j| = \frac{v \Delta t}{2h} + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} < 1 + \frac{v \Delta t}{2h} + \frac{\sigma \Delta t}{h^2} = |b_j|.$$

Алгоритм решения, а также методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2.

Также как и в случае метода простой итерации, в качестве нулевой итерации (начального условия) обычно задают свободный член. Расчёт итераций продолжается до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие (10.5). Итерационным выражением является прогоночное соотношение (4.11), имеющее такой же вид, как и в общем случае.

10.6. Обобщение изученных методов

В заключение приведём обобщение методов численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$v \frac{du}{dx} = \sigma \frac{d^2u}{dx^2} - ku + f(x); \quad x \in [a, b], \quad \sigma > 0, \quad v > 0. \quad (10.11)$$

I. $k > 0$. Записывается разностная схема

$$v \frac{u_j - u_{j-1}}{h} = \sigma \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} - ku_j + f(x_j),$$

для решения которой используется метод прогонки.

II. $k = 0$. Используется метод установления, заключающийся во введении в исходное уравнение (10.11) фиктивной производной по времени (т.е. преобразовании стационарной задачи в нестационарную):

$$v \frac{du}{dx} = \sigma \frac{d^2u}{dx^2} + f(x) \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} = \sigma \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} + f(x).$$

В силу независимости от времени граничных условий (соответствующих исходной стационарной задаче) с течением времени ($t \rightarrow \infty$) производная по вре-

мени будет стремиться к нулю, а решение нестационарной задачи – к решению исходной стационарной задачи:

$$t \rightarrow \infty, \quad \tilde{u}(x, t) \rightarrow [u(x)], \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \rightarrow 0.$$

Для решения нестационарной задачи (т.е. для реализации итерационного процесса) используются следующие разностные схемы.

1. Явная разностная схема (метод простой итерации)

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \sigma \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h)$.
- Условно устойчива $\Delta t \leq \frac{h^2}{vh + 2\sigma}$.
- Решается с помощью итерационного соотношения

$$u_j^{n+1} = \frac{\sigma u_{j+1}^n + (\sigma + vh)u_{j-1}^n + h^2 f(x_j)}{vh + 2\sigma}.$$

- Требуется $n \sim \frac{1}{h^2}$ итераций.

2. Неявная разностная схема

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(x_j).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается с помощью метода прогонки.
- Требуется $n \sim \frac{1}{h}$ итераций.

3. Разностная схема Кранка–Николсона

$$\begin{aligned} & \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{v}{2} \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{h} + \frac{v}{2} \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \\ & = \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(x_j). \end{aligned}$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h)$.
- Абсолютно устойчива.
- Решается с помощью метода прогонки.
- Требуется $n < \frac{1}{h}$ итераций.

При использовании любой из перечисленных разностных схем в качестве нулевой итерации (начального условия, необходимого для решения в связи с введением фиктивной производной по времени) задают свободный член:

$$u_j^0 = f(x_j).$$

Расчёт итераций продолжается до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие:

$$\|u^{n+1} - u^n\| = \sqrt{h \sum_{j=1}^N (u_j^{n+1} - u_j^n)^2} \leq \varepsilon.$$

Напомним, что в случае $v < 0$ для аппроксимации производной по координате первого порядка следует использовать правую конечную разность.

Следует отметить, что метод установления требует соблюдения следующих **правил при введении фиктивной производной по времени**:

- 1) исходное стационарное уравнение предварительно должно быть приведено к виду (10.11), т.е. производная второго порядка должна находиться в правой части уравнения и иметь положительный знак, а производная первого порядка – в левой части уравнения;
- 2) фиктивная производная по времени должна быть введена в левую часть уравнения и иметь положительный знак.

Глава 11. Решение дифференциальных уравнений эллиптического типа

11.1. Примеры дифференциальных уравнений эллиптического типа

В разделе 1.6 мы рассматривали математическую модель трубчатого реактора с продольным и поперечным перемешиванием, в котором протекает простая необратимая реакция. Материальный баланс по концентрации исходного реагента для стационарного режима имеет вид:

$$v \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_R \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D_R}{r} \frac{\partial c}{\partial r} - k c,$$

где c – концентрация исходного реагента; v – линейная скорость потока; k – константа скорости химической реакции; x – координата по длине реактора; r – координата по радиусу реактора; D_L, D_R – коэффициенты диффузии в продольном и поперечном направлениях.

Данное уравнение является дифференциальным уравнением эллиптического типа. Другим примером дифференциального уравнения эллиптического типа является уравнение теплопроводности для стационарного двумерного температурного поля:

$$\lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + q = 0,$$

где T – температура; λ – теплопроводность материала; x, y – пространственные координаты; q – внутренний источник (сток) теплоты.

Для простоты дальнейшего изложения представим дифференциальное уравнение эллиптического типа в следующем общем виде:

$$\sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, y) = 0; \quad x \in [a, b], \quad y \in [c, d], \quad \sigma > 0. \quad (11.1)$$

Уравнение (11.1) должно быть дополнено двумя граничными условиями по каждой из пространственных координат (для определённости будем рассматривать граничные условия 1-го рода):

$$\begin{cases} u(x=a, y) = \varphi_1(y), \\ u(x=b, y) = \varphi_2(y); \end{cases} \quad \begin{cases} u(x, y=c) = \psi_1(x), \\ u(x, y=d) = \psi_2(x). \end{cases}$$

11.2. Метод установления

Введём для дифференциального уравнения (11.1) двумерную разностную сетку и запишем разностную схему, используя для аппроксимации каждой из производных второго порядка разностный оператор (2.12):

$$\sigma \left(\frac{u_{j+1,k} - 2u_{j,k} + u_{j-1,k}}{h_x^2} + \frac{u_{j,k+1} - 2u_{j,k} + u_{j,k-1}}{h_y^2} \right) + f(x_j, y_k) = 0.$$

Очевидно, что данная разностная схема неразрешима.

Для численного решения дифференциальных уравнений эллиптического типа (также как и для решения обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка) используют **метод установления**, заключающийся в преобразовании стационарной задачи в нестационарную. С этой целью в уравнение (11.1), описывающее стационарную задачу, следует добавить фиктивную производную по времени:

$$\begin{aligned} \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, y) &= 0 \quad \rightarrow \\ \rightarrow \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} &= \sigma \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial y^2} \right) + f(x, y). \end{aligned} \quad (11.2)$$

При этом искомая функция станет уже функцией трёх переменных:

$$u(x, y) \rightarrow \tilde{u}(x, y, t).$$

Полученное уравнение (11.2) относится к двумерным дифференциальным уравнениям параболического типа, методы численного решения которых мы уже рассматривали в главе 7.

Если при численном решении уравнения (11.2), описывающего нестационарную задачу, использовать граничные условия, соответствующие исходной стационарной задаче (11.1), т.е. граничные условия, не зависящие от времени, то с течением времени ($t \rightarrow \infty$) производная по времени будет стремиться к нулю, а решение $\tilde{u}(x, y, t)$ нестационарной задачи (11.2) – к решению стационарной задачи (11.1):

$$t \rightarrow \infty, \quad \tilde{u}(x, y, t) \rightarrow u(x, y), \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \rightarrow 0. \quad (11.3)$$

Отметим, что выполнение условия (11.3) обеспечивается независимостью от времени не только граничных условий, но и свободного члена уравнений (11.1) и (11.2).

Таким образом, для численного решения дифференциальных уравнений эллиптического типа можно использовать разностные схемы, аппроксимирующие двумерные дифференциальные уравнения параболического типа. Напомним, что процесс пошагового приближения решения нестационарной задачи к решению исходной стационарной задачи называют **итерационным процессом**, переход от n -го шага к $(n + 1)$ -му – **итерацией**, а значение Δt – **шагом итерации**.

11.3. Метод установления с использованием явной разностной схемы

Метод установления с использованием явной разностной схемы называют **методом простой итерации**. Явная разностная схема для уравнения (11.2) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \left(\frac{u_{j+1,k}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j-1,k}^n}{h_x^2} + \right. \\ \left. + \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2} \right) + f(x_j, y_k). \end{aligned} \quad (11.4)$$

В разделе 7.4.1 было доказано, что данная разностная схема условно устойчива. Условием устойчивости является соотношение (7.4), которое при $h_x = h_y = h$ имеет вид:

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{4\sigma}.$$

Следовательно, максимальное значение шага итерации, при котором разностная схема (11.4) будет устойчива, определяется следующим выражением:

$$\Delta t = \frac{h^2}{4\sigma}. \quad (11.5)$$

Выражая из разностной схемы (11.4) величину $u_{j,k}^{n+1}$, получаем рекуррентное соотношение

$$u_{j,k}^{n+1} = u_{j,k}^n + \Delta t \left[\frac{\sigma}{h^2} (u_{j+1,k}^n + u_{j-1,k}^n + u_{j,k+1}^n + u_{j,k-1}^n - 4u_{j,k}^n) + f(x_j, y_k) \right],$$

которое с учётом равенства (11.5) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} u_{j,k}^{n+1} &= u_{j,k}^n + \frac{h^2}{4\sigma} \left[-\frac{4\sigma}{h^2} u_{j,k}^n + \frac{\sigma}{h^2} (u_{j+1,k}^n + u_{j-1,k}^n + u_{j,k+1}^n + u_{j,k-1}^n) \right] + \\ &\quad + \frac{h^2}{4\sigma} f(x_j, y_k) \Rightarrow \\ \Rightarrow u_{j,k}^{n+1} &= \frac{u_{j+1,k}^n + u_{j-1,k}^n + u_{j,k+1}^n + u_{j,k-1}^n}{4} + \frac{h^2}{4\sigma} f(x_j, y_k). \end{aligned} \quad (11.6)$$

Выражение (11.6) является **формулой простой итерации** для дифференциальных уравнений эллиптического типа; равенство (11.5) определяет величину шага итерации.

В качестве нулевой итерации (начального условия, необходимого для решения в связи с введением фиктивной производной по времени) обычно задают свободный член исходного дифференциального уравнения (11.1):

$$u_{j,k}^0 = f(x_j, y_k).$$

Расчёт итераций следует продолжать до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие (11.3), в разностном представлении соответствующее неравенству:

$$\|u^{n+1} - u^n\| = \sqrt{h^2 \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N (u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n)^2} \leq \varepsilon,$$

где ε – некоторая наперёд заданная положительная величина, характеризующая точность вычислений.

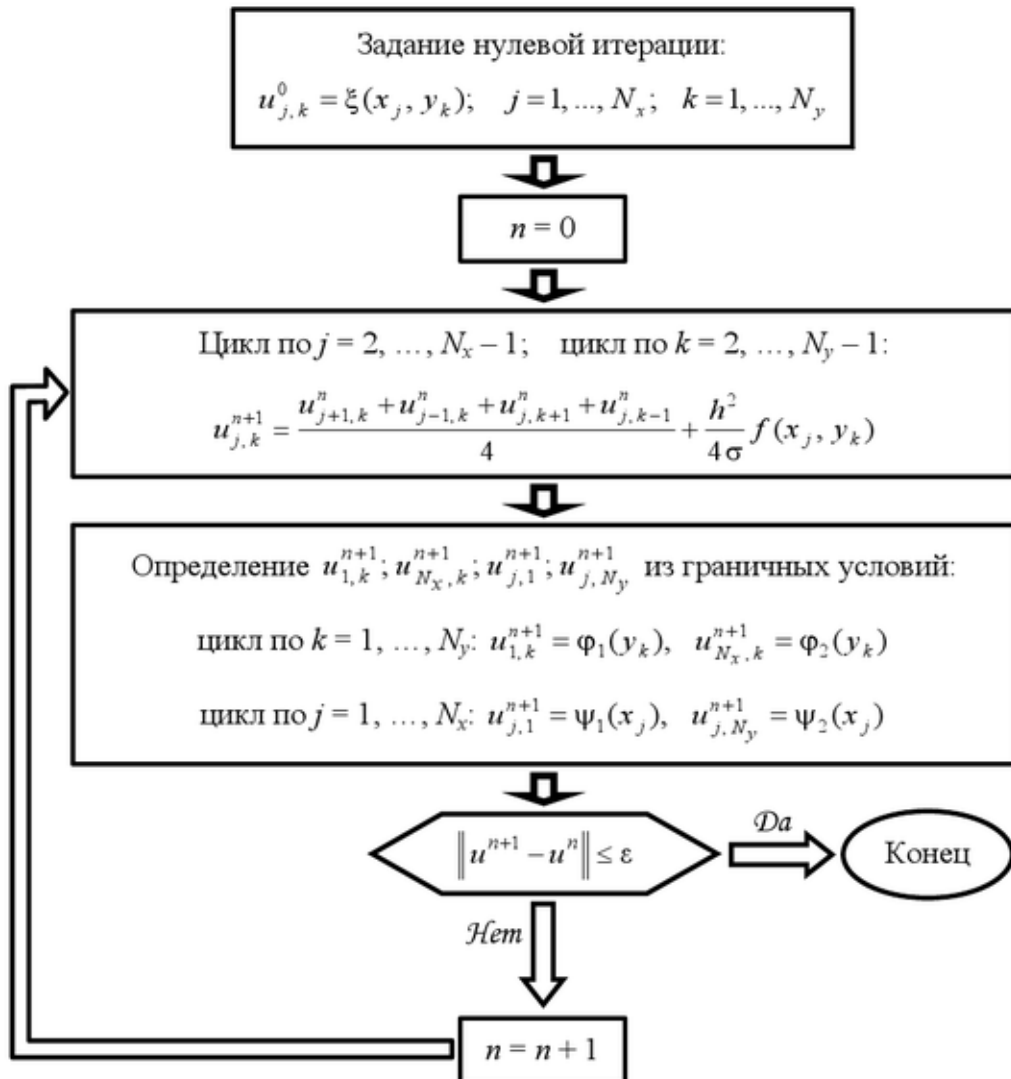


Рис. 11.1. Блок-схема решения дифференциального уравнения эллиптического типа методом простой итерации

На рис. 11.1 приведён алгоритм решения (в виде блок-схемы) уравнения (11.1) методом установления с использованием явной разностной схемы (т.е. методом простой итерации). В силу условной устойчивости явной разностной схемы (11.4) метод простой итерации предполагает использование слишком маленького шага итерации (11.5). Поэтому для того чтобы итерационный процесс сошёлся, требуется достаточно большое количество итераций, а именно:

$$n \sim \frac{1}{h^2}.$$

11.4. Метод установления с использованием схемы расщепления

Запишем для уравнения (11.2) схему расщепления:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} &= \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + f(x_j, y_k), \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} &= \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2}. \end{aligned} \quad (11.7)$$

Каждая из подсхем схемы расщепления (11.7), являясь аналогом неявной разностной схемы для одномерного дифференциального уравнения параболического типа, обладает абсолютной устойчивостью. Поэтому значение шага итерации в данном случае может быть выбрано произвольно в отличие от метода простой итерации, для которого значение шага итерации задаётся с помощью соотношения (11.5). Выбор более грубого шага итерации (по сравнению с методом простой итерации) позволяет существенно ускорить сходимость итерационного процесса и уменьшить количество итераций:

$$n \sim \frac{1}{h}.$$

Каждая из подсхем схемы расщепления (11.7) решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы

$$a_j = c_j = -\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad b_j = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k}^n = u_{j,k}^n + \Delta t f(x_j, y_k);$$

- для второй подсхемы

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/2} = u_{j,k}^{n+1/2}.$$

Легко видеть, что для обеих подсхем схемы расщепления (11.7) достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется. Алгоритм решения схемы (11.7), а также методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе аналогичны описанным ранее в разделах 7.6.4 и 4.2.2, соответственно.

Также как и в случае метода простой итерации, в качестве нулевой итерации (начального условия) обычно задают свободный член:

$$u_{j,k}^0 = f(x_j, y_k).$$

Расчёт итераций следует продолжать до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие (11.3), в разностном представлении соответствующее неравенству:

$$\|u^{n+1} - u^n\| = \sqrt{h^2 \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N (u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n)^2} \leq \varepsilon.$$

В качестве итерационного выражения служит прогоночное соотношение (4.11), имеющее вид:

- для первой подсхемы $u_{j,k}^{n+1/2} = \alpha_j u_{j+1,k}^{n+1/2} + \beta_j$;
- для второй подсхемы $u_{j,k}^{n+1} = \tilde{\alpha}_k u_{j,k+1}^{n+1} + \tilde{\beta}_k$.

11.5. Метод установления с использованием схемы переменных направлений

Запишем для уравнения (11.2) схему переменных направлений:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} &= \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + \\ &+ \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h_y^2} + f(x_j, y_k), \end{aligned} \quad (11.8)$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + \frac{\sigma}{2} \frac{u_{j,k+1}^{n+1} - 2u_{j,k}^{n+1} + u_{j,k-1}^{n+1}}{h_y^2}.$$

Как и схема расщепления (11.7), схема переменных направлений (11.8) является абсолютно устойчивой, что обеспечивает возможность произвольного выбора значения шага итерации. Однако схема переменных направлений (11.8) имеет более высокий (второй) порядок аппроксимации по времени, что позволяет использовать при её решении более грубый шаг итерации, чем при решении схе-

мы расщепления (11.7), для получения результатов с такой же точностью; а это в свою очередь способствует ускорению сходимости итерационного процесса и уменьшению количества итераций:

$$n < \frac{1}{h}.$$

Каждая из подсхем схемы переменных направлений (11.8) решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы

$$a_j = c_j = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_x^2}, \quad b_j = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2},$$

$$\xi_{j,k}^n = u_{j,k}^n + \frac{\sigma}{2} \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k}^n + \Delta t f(x_j, y_k);$$

- для второй подсхемы

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/2} = u_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\sigma}{2} \Delta t \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2}.$$

Легко видеть, что для обеих подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется. Алгоритм решения схемы (11.8) аналогичен алгоритму решения схемы расщепления (7.7)–(7.8), аппроксимирующей двумерное дифференциальное уравнение параболического типа (см. раздел 7.6.4); методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе аналогичны описанным ранее в разделе 4.2.2.

Также как и в случае метода простой итерации, в качестве нулевой итерации (начального условия) обычно задают свободный член. Расчёт итераций следует продолжать до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие (11.3). В качестве итерационного выражения служит прогоночное соотношение (4.11), имеющее вид:

- для первой подсхемы $u_{j,k}^{n+1/2} = \alpha_j u_{j+1,k}^{n+1/2} + \beta_j;$

- для второй подсхемы $u_{j,k}^{n+1} = \tilde{\alpha}_k u_{j,k+1}^{n+1} + \tilde{\beta}_k.$

11.6. Метод установления с использованием схемы предиктор-корректор

Запишем для уравнения (11.2) схему предиктор-корректор:

- предиктор

$$\begin{aligned}\frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j,k}^n}{\Delta t/2} &= \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/4} - 2u_{j,k}^{n+1/4} + u_{j-1,k}^{n+1/4}}{h_x^2}, \\ \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^{n+1/4}}{\Delta t/2} &= \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j,k-1}^{n+1/2}}{h_y^2},\end{aligned}\tag{11.9}$$

- корректор

$$\begin{aligned}\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} &= \sigma \frac{u_{j+1,k}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j-1,k}^{n+1/2}}{h_x^2} + \\ &+ \sigma \frac{u_{j,k+1}^{n+1/2} - 2u_{j,k}^{n+1/2} + u_{j,k-1}^{n+1/2}}{h_y^2} + f(x_j, y_k).\end{aligned}\tag{11.10}$$

Как и схема переменных направлений (11.8), схема предиктор-корректор (11.9)–(11.10) является абсолютно устойчивой (абсолютную устойчивость схемы обеспечивает предиктор) и имеет второй порядок аппроксимации по времени (благодаря наличию корректора). Таким образом, в данном случае допускается такая же величина шага итерации, как и при использовании схемы переменных направлений (11.8), для получения результатов с такой же точностью. Количество итераций, как и в случае схемы переменных направлений (11.8), определяется соотношением:

$$n < \frac{1}{h}.$$

Каждая из подсхем, входящих в состав предиктора (11.9), решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

- для первой подсхемы предиктора

$$a_j = c_j = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_x^2}, \quad b_j = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_x^2}, \quad \xi_{j,k}^n = u_{j,k}^n;$$

- для второй подсхемы предиктора

$$\tilde{a}_k = \tilde{c}_k = -\frac{\sigma \Delta t}{2 h_y^2}, \quad \tilde{b}_k = 1 + \sigma \frac{\Delta t}{h_y^2}, \quad \tilde{\xi}_{j,k}^{n+1/4} = u_{j,k}^{n+1/4}.$$

Легко видеть, что для обеих подсхем достаточное условие сходимости прогонки (4.16) выполняется. Алгоритм решения схемы предиктор-корректор (11.9)–(11.10), а также методики определения прогоночных коэффициентов и решения на правой границе аналогичны описанным ранее в разделах 7.9.3 и 4.2.2, соответственно.

Также как и в случае метода простой итерации, в качестве нулевой итерации (начального условия) обычно задают свободный член. Расчёт итераций следует продолжать до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие (11.3). Итерационным выражением для подсхем, входящих в состав предиктора (11.9), является прогоночное соотношение (4.11), имеющее вид:

- для первой подсхемы предиктора $u_{j,k}^{n+1/4} = \alpha_j u_{j+1,k}^{n+1/4} + \beta_j$;
- для второй подсхемы предиктора $u_{j,k}^{n+1/2} = \tilde{\alpha}_k u_{j,k+1}^{n+1/2} + \tilde{\beta}_k$.

Итерационное выражение для корректора (11.10) имеет вид:

$$u_{j,k}^{n+1} = u_{j,k}^n + \sigma \Delta t \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \sigma \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2} + \Delta t f(x_j, y_k).$$

11.7. Обобщение изученных методов

В заключение приведём обобщение методов численного решения дифференциальных уравнений эллиптического типа:

$$\sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, y) = 0; \quad x \in [a, b], \quad y \in [c, d], \quad \sigma > 0. \quad (11.11)$$

Для численного решения уравнений типа (11.11) используется метод установления, заключающийся во введении в уравнение фиктивной производной по времени (т.е. преобразовании стационарной задачи в нестационарную):

$$\sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, y) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = \sigma \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial y^2} \right) + f(x, y).$$

В силу независимости от времени граничных условий (соответствующих исходной стационарной задаче) с течением времени ($t \rightarrow \infty$) производная по времени будет стремиться к нулю, а решение нестационарной задачи – к решению исходной стационарной задачи:

$$t \rightarrow \infty, \quad \tilde{u}(x, y, t) \rightarrow u(x, y), \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \rightarrow 0.$$

Для решения нестационарной задачи (т.е. для осуществления итерационного процесса) используются следующие разностные схемы.

1. Явная разностная схема (метод простой итерации)

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma(\lambda_{xx} u_{j,k}^n + \lambda_{yy} u_{j,k}^n) + f(x_j, y_k).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x^2, h_y^2)$.
- Условно устойчива $\Delta t \leq \frac{h^2}{4\sigma}$.
- Решается с помощью итерационного соотношения

$$u_{j,k}^{n+1} = \frac{u_{j+1,k}^n + u_{j-1,k}^n + u_{j,k+1}^n + u_{j,k-1}^n}{4} + \frac{h^2}{4\sigma} f(x_j, y_k).$$

- Требуется $n \sim \frac{1}{h^2}$ итераций.

2. Схема расщепления

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + f(x_j, y_k), \quad \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} = \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2}.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t, h_x^2, h_y^2)$.
- Абсолютно устойчива.

- Каждая подсхема решается с помощью метода прогонки.
- Требуется $n \sim \frac{1}{h}$ итераций.

3. Схема переменных направлений

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\sigma}{2} \lambda_{yy} u_{j,k}^n + f(x_j, y_k),$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} = \frac{\sigma}{2} \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\sigma}{2} \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1}.$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h_x^2, h_y^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая подсхема решается с помощью метода прогонки.
- Требуется $n < \frac{1}{h}$ итераций.

4. Схема предиктор-корректор

$$\frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j,k}^n}{\Delta t/2} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/4}, \quad \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^{n+1/4}}{\Delta t/2} = \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2},$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \sigma \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2} + f(x_j, y_k).$$

- Имеет порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, h_x^2, h_y^2)$.
- Абсолютно устойчива.
- Каждая из подсхем предиктора решается с помощью метода прогонки, корректор – с помощью итерационного соотношения:

$$u_{j,k}^{n+1} = u_{j,k}^n + \sigma \Delta t \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \sigma \Delta t \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2} + \Delta t f(x_j, y_k).$$

- Требуется $n < \frac{1}{h}$ итераций.

При использовании любой из перечисленных разностных схем в качестве нулевой итерации (начального условия, необходимого для решения в связи с введением фиктивной производной по времени) задают свободный член:

$$u_{j,k}^0 = f(x_j, y_k).$$

Расчёт итераций продолжается до тех пор, пока итерационный процесс не сойдётся, т.е. пока не будет выполняться условие:

$$\|u^{n+1} - u^n\| = \sqrt{h^2 \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N (u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n)^2} \leq \varepsilon.$$

Следует отметить, что метод установления требует соблюдения следующих **правил при введении фиктивной производной по времени**:

- 1) исходное стационарное уравнение предварительно должно быть приведено к виду (11.11), т.е. производные второго порядка должны находиться в правой части уравнения и иметь положительный знак;
- 2) фиктивная производная по времени должна быть введена в левую часть уравнения и иметь положительный знак.

Глава 12. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка

12.1. Явный метод Эйлера

Запишем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка в следующем общем виде:

$$\frac{du}{dt} = f(t, u). \quad (12.1)$$

Уравнение (12.1) следует дополнить начальным условием:

$$u(t=0) = u^0.$$

Запишем для уравнения (12.1) явную разностную схему:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = f(t^n, u^n). \quad (12.2)$$

Метод решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с использованием явной разностной схемы (12.2) называется **явным методом Эйлера**.

Разностная схема (12.2) имеет первый порядок аппроксимации по времени. Для её решения используется рекуррентное соотношение:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t f(t^n, u^n).$$

Рассмотрим конкретный пример:

$$\frac{du}{dt} = -ku; \quad k > 0. \quad (12.3)$$

Явная разностная схема для уравнения (12.3) имеет вид:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = -ku^n.$$

Проведём исследование устойчивости данной схемы с помощью спектрального метода:

$$u^n = \lambda^n \quad \Rightarrow \quad \frac{\lambda^{n+1} - \lambda^n}{\Delta t} = -k \lambda^n.$$

Упрощаем данное выражение, деля левую и правую его части на λ^n , и выражаем λ :

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = -k \quad \Rightarrow \quad \lambda = 1 - k \Delta t.$$

С учётом необходимого условия устойчивости разностных схем (3.8) имеем:

$$|\lambda| \leq 1 \quad \Rightarrow \quad -1 \leq 1 - k \Delta t \leq 1.$$

В полученном двойном неравенстве правое условие выполняется автоматически. Поэтому рассмотрим более подробно левое условие:

$$-1 \leq 1 - k \Delta t \quad \Rightarrow \quad \Delta t \leq \frac{2}{k}.$$

Полученное выражение является условием устойчивости явной разностной схемы, аппроксимирующей уравнение (12.3).

Таким образом, явный метод Эйлера является условно устойчивым и относится к методам с первым порядком точности.

12.2. Неявный метод Эйлера

Запишем для уравнения (12.1) неявную разностную схему:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = f(t^n, u^{n+1}). \quad (12.4)$$

Метод решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с использованием неявной разностной схемы (12.4) называется **неявным методом Эйлера**.

Также как и явная разностная схема (12.2), неявная разностная схема (12.4) имеет первый порядок аппроксимации по времени. Однако рекуррентное соотношение для её решения в общем виде не может быть получено (отметим, что оно вообще может быть получено не всегда).

Рассмотрим неявную разностную схему, аппроксимирующую уравнение (12.3):

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = -k u^{n+1}.$$

Проведём исследование устойчивости данной схемы с помощью спектрального метода:

$$u^n = \lambda^n \Rightarrow \frac{\lambda^{n+1} - \lambda^n}{\Delta t} = -k \lambda^{n+1}.$$

Упрощаем полученное выражение, деля левую и правую его части на λ^n , и выражаем λ :

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = -k \lambda \Rightarrow \lambda = \frac{1}{1 + k \Delta t}.$$

Видно, что собственные числа оператора перехода удовлетворяют необходимому условию устойчивости разностных схем (3.8) при любом значении Δt ; следовательно, неявная разностная схема, аппроксимирующая уравнение (12.3), является абсолютно устойчивой.

Таким образом, неявный метод Эйлера является абсолютно устойчивым; однако он, также как и явный метод Эйлера, относится к методам с первым порядком точности.

12.3. Метод Рунге-Кутты второго порядка

Рассмотрим метод решения уравнения (12.1), имеющий второй порядок точности. Для этого разобьём пополам интервал Δt между точками t^n и t^{n+1} (рис. 12.1). Полученную промежуточную точку обозначим как $t^{n+1/2}$. Запишем явную разностную схему, аппроксимирующую уравнение (12.1) на первом полушаге интервала Δt (т.е., на интервале $[t^n, t^{n+1/2}]$):

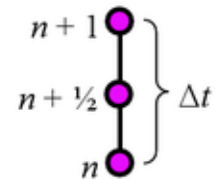


Рис. 12.1. Деление интервала Δt для использования метода Рунге-Кутты второго порядка

$$\frac{u^{n+1/2} - u^n}{\Delta t/2} = f(t^n, u^n).$$

Следовательно, решение в точке $t^{n+1/2}$ можно найти с помощью рекуррентного соотношения:

$$u^{n+1/2} = u^n + 0,5 \Delta t f(t^n, u^n). \quad (12.5)$$

Зная решение в точке $t^{n+1/2}$, можно записать для уравнения (12.1) разностную схему, в которой производная по времени будет аппроксимирована центральной конечной разностью:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = f(t^{n+1/2}, u^{n+1/2}), \quad (12.6)$$

где $t^{n+1/2} = t^n + 0,5 \Delta t$. Видно, что правая часть разностной схемы (12.6) аппроксимируется относительно точки $t^{n+1/2}$. Следовательно, разностный оператор в левой части является центральной конечной разностью, имеющей второй порядок аппроксимации.

Введём следующие обозначения:

$$\tau = \Delta t;$$

$$k_1 = f(t^n, u^n); \quad (12.7)$$

$$k_2 = f(t^n + 0,5\tau, u^n + 0,5\tau f(t^n, u^n)) = f(t^n + 0,5\tau, u^n + 0,5\tau k_1).$$

С учётом рекуррентного соотношения (12.5) и обозначений (12.7) разностная схема (12.6) будет иметь вид:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = f(t^{n+1/2}, u^{n+1/2}) = f(t^n + 0,5\tau, u^n + 0,5\tau f(t^n, u^n)) = k_2.$$

Таким образом, решение на $(n+1)$ -м шаге по времени можно найти с помощью рекуррентного соотношения:

$$u^{n+1} = u^n + \tau k_2.$$

Описанный метод решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка носит название **метода Рунге-Кутты второго порядка**.

12.4. Семейство методов Рунге-Кутты второго порядка

Заменим в выражении для k_2 (12.7) коэффициенты при τ неизвестными параметрами β_{21}, α_2 :

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t^n, u^n) = f^n; \\ k_2 &= f(t^n + \alpha_2 \tau, u^n + \beta_{21} \tau k_1). \end{aligned}$$

Разностную схему для уравнения (12.1) представим в виде:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = \gamma_1 k_1 + \gamma_2 k_2.$$

Тогда решение на $(n+1)$ -м шаге по времени будет определяться рекуррентным соотношением:

$$u^{n+1} = u^n + \gamma_1 \tau k_1 + \gamma_2 \tau k_2. \quad (12.8)$$

Разложим функцию k_2 в ряд Тейлора:

$$k_2 = f^n + \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_n \alpha_2 \tau + \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \beta_{21} \tau f^n + O(\tau^2).$$

Подставим данное выражение в рекуррентное соотношение (12.8):

$$u^{n+1} = u^n + \gamma_1 \tau f^n + \gamma_2 \tau f^n + \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_n \gamma_2 \alpha_2 \tau^2 + \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \gamma_2 \beta_{21} \tau^2 f^n + O(\tau^3). \quad (12.9)$$

Разложим функцию u^{n+1} в ряд Тейлора:

$$u^{n+1} = u^n + \frac{du}{dt} \Big|_n \tau + \frac{1}{2} \frac{d^2 u}{dt^2} \Big|_n \tau^2 + O(\tau^3).$$

Данная формула с учётом равенств

$$\frac{du}{dt} \Big|_n = f(t^n, u^n) = f^n,$$

$$\frac{d^2 u}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left[\frac{du}{dt} \right] = \frac{d}{dt} f(t, u) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u} \frac{du}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u} f(t, u),$$

$$\frac{d^2 u}{dt^2} \Big|_n = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_n + \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n f^n$$

примет следующий вид:

$$u^{n+1} = u^n + \tau f^n + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|^n \tau^2 + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|^n \tau^2 f^n + O(\tau^3). \quad (12.10)$$

Сравнивая соотношения (12.9) и (12.10), получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \gamma_1 \tau f^n + \gamma_2 \tau f^n = \tau f^n \\ \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|^n \gamma_2 \alpha_2 \tau^2 = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|^n \tau^2 \\ \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|^n \gamma_2 \beta_{21} \tau^2 f^n = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|^n \tau^2 f^n \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \gamma_1 + \gamma_2 = 1 \\ \gamma_2 \alpha_2 = \frac{1}{2} \\ \gamma_2 \beta_{21} = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (12.11)$$

Система (12.11) состоит из трёх уравнений с четырьмя неизвестными, поэтому она не может иметь однозначного решения. Для определения значений неизвестных параметров необходимо задать значение одного из них (обычно задают значение параметра α_2); тогда значения остальных параметров можно определить из уравнений системы (12.11):

$$\beta_{21} = \alpha_2, \quad \gamma_1 = 1 - \frac{1}{2\alpha_2}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{2\alpha_2}.$$

По этой причине принято говорить не о методе Рунге-Кутты второго порядка, а о семействе методов Рунге-Кутты второго порядка, поскольку в зависимости от выбранного значения параметра α_2 мы получим тот или иной вид рекуррентного соотношения (12.8).

На практике используются, как правило, два случая:

$$\begin{aligned} 1. \quad & \alpha_2 = 0.5, \quad \beta_{21} = 0.5, \quad \gamma_1 = 0, \quad \gamma_2 = 1, \\ & k_1 = f(t^n, u^n), \quad k_2 = f(t^n + 0.5\tau, u^n + 0.5\tau k_1), \\ & \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = k_2, \quad u^{n+1} = u^n + \tau k_2; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
2. \quad & \alpha_2 = 1, \quad \beta_{21} = 1, \quad \gamma_1 = 0.5, \quad \gamma_2 = 0.5, \\
& k_1 = f(t^n, u^n), \quad k_2 = f(t^n + \tau, u^n + \tau k_1), \\
& \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \quad u^{n+1} = u^n + \frac{\tau}{2}(k_1 + k_2).
\end{aligned}$$

Видно, что первый случай совпадает с методом Рунге-Кутты второго порядка, рассмотренным в разделе 12.3.

12.5. Семейство методов Рунге-Кутты m -го порядка

Метод Рунге-Кутты m -го порядка включает следующие соотношения:

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t^n, u^n); \\
k_2 &= f(t^n + \alpha_2 \tau, u^n + \beta_{21} \tau k_1); \\
k_3 &= f(t^n + \alpha_3 \tau, u^n + \beta_{31} \tau k_1 + \beta_{32} \tau k_2); \\
k_4 &= f(t^n + \alpha_4 \tau, u^n + \beta_{41} \tau k_1 + \beta_{42} \tau k_2 + \beta_{43} \tau k_3); \\
&\dots\dots\dots \\
k_m &= f(t^n + \alpha_m \tau, u^n + \beta_{m1} \tau k_1 + \beta_{m2} \tau k_2 + \dots + \beta_{m,m-1} \tau k_{m-1}); \\
\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} &= \sum_{i=1}^m \gamma_i k_i.
\end{aligned}$$

Методика определения неизвестных параметров $\alpha_i, \beta_{ik}, \gamma_i$ аналогична той, которая была рассмотрена в разделе 12.4. Соответствие между порядком метода Рунге-Кутты и порядком его точности подчиняется следующему правилу:

- при $m < 5$ порядок точности совпадает с m ;
- при $m \geq 5$ порядок точности равен $m - 1$.

Рассмотрим метод Рунге-Кутты третьего порядка:

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t^n, u^n); \\
k_2 &= f(t^n + \alpha_2 \tau, u^n + \beta_{21} \tau k_1); \\
k_3 &= f(t^n + \alpha_3 \tau, u^n + \beta_{31} \tau k_1 + \beta_{32} \tau k_2); \\
\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} &= \gamma_1 k_1 + \gamma_2 k_2 + \gamma_3 k_3.
\end{aligned}$$

Таблица 3

Значения параметров $\alpha_i, \beta_{ik}, \gamma_i$ для метода Рунге-Кутты 3-го порядка

Метод Рунге-Кутты 3-го порядка				
I	α_i	β_{i1}	β_{i2}	γ_i
1				1/6
2	1/2	1/2		4/6
3	1	-1	2	1/6

Таблица 4

Значения параметров $\alpha_i, \beta_{ik}, \gamma_i$ для метода Рунге-Кутты 4-го порядка

Метод Рунге-Кутты 4-го порядка					
i	α_i	β_{i1}	β_{i2}	β_{i3}	γ_i
1					1/6
2	1/2	1/2			2/6
3	1/2	0	1/2		2/6
4	1	0	0	1	1/6

Таблица 5

Значения параметров $\alpha_i, \beta_{ik}, \gamma_i$ для метода Рунге-Кутты 6-го порядка

Метод Рунге-Кутты 6-го порядка							
i	α_i	β_{i1}	β_{i2}	β_{i3}	β_{i4}	β_{i5}	γ_i
1							$\frac{16}{135}$
2	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					0
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				$\frac{6656}{12825}$
4	$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$			$\frac{28561}{56430}$
5	1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$		$-\frac{9}{50}$
6	$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	$\frac{2}{55}$

Значения параметров $\alpha_i, \beta_{ik}, \gamma_i$, соответствующие наиболее часто используемому случаю, приведены в табл. 3.

В табл. 3 и 4 приведены значения параметров $\alpha_i, \beta_{ik}, \gamma_i$, соответствующие наиболее часто используемым случаям, для методов Рунге-Кутты 4-го и 6-го порядка, соответственно (6-й порядок метода Рунге-Кутты соответствует 5-му порядку точности).

12.6. Решение уравнений методом Рунге-Кутта

Рассмотрим методику решения дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутта на конкретном примере. Пусть задано дифференциальное уравнение с начальным условием:

$$\frac{du}{dt} = 2u - e^t, \quad u(t=0) = 1. \quad (12.12)$$

Требуется определить значение функции u в точке

$$u(t^0 + \tau) = ?$$

Значение шага по времени возьмём равным 0.1.

Видно, что решением уравнения (12.12) является функция $u = e^t$, значение которой в искомой точке составляет:

$$u = e^\tau = e^{0.1} = 1.1051709.$$

Выполним решение уравнения (12.12), используя метод Рунге-Кутта с различными порядками точности, и сравним полученные результаты с истинным решением (следует отметить, что для данного уравнения явный и неявный методы Эйлера неприменимы, так как соответствующие им разностные схемы для уравнения (12.12) будут неустойчивы).

Рассмотрим методику решения уравнения (12.12) методом Рунге-Кутта 2-го порядка с использованием первого набора параметров:

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= 0.5, & \beta_{21} &= 0.5, & \gamma_1 &= 0, & \gamma_2 &= 1; \\ k_1 &= f(t^0, u^0) = 2 \cdot 1 - e^0 = 2 - 1 = 1; \end{aligned}$$

$$k_2 = f(t^0 + 0.05, u^0 + 0.05k_1) = 2 \cdot (1 + 0.05 \cdot 1) - e^{0+0.05} = 1.048729;$$

$$u^{0.1} = u^0 + 0.1k_2 = 1.1048729.$$

Видно, что ошибка появляется в третьей цифре после запятой.

Рассмотрим методику решения уравнения (12.12) методом Рунге-Кутты 2-го порядка с использованием второго набора параметров:

$$\alpha_2 = 1, \quad \beta_{21} = 1, \quad \gamma_1 = 0.5, \quad \gamma_2 = 0.5;$$

$$k_1 = f(t^0, u^0) = 2 \cdot 1 - e^0 = 2 - 1 = 1;$$

$$k_2 = f(t^0 + 0.1, u^0 + 0.1k_1) = 2 \cdot (1 + 0.1 \cdot 1) - e^{0+0.1} = 1.094829;$$

$$u^{0.1} = u^0 + 0.05(k_1 + k_2) = 1.10474145.$$

Видно, что ошибка, как и в предыдущем случае, появляется в третьей цифре после запятой.

Рассмотрим методику решения уравнения (12.12) методом Рунге-Кутты 3-го порядка:

$$k_1 = f(t^0, u^0) = 2 \cdot 1 - e^0 = 2 - 1 = 1;$$

$$k_2 = f(t^0 + 0.05, u^0 + 0.05k_1) = 2 \cdot (1 + 0.05 \cdot 1) - e^{0+0.05} = 1.048729;$$

$$k_3 = f(t^0 + 0.1, u^0 - 0.1k_1 + 0.2k_2) =$$

$$= 2 \cdot (1 - 0.1 \cdot 1 + 0.2 \cdot 1.048729) - e^{0+0.1} = 1.114321;$$

$$u^{0.1} = u^0 + \frac{0.1}{6} \cdot (k_1 + 4k_2 + k_3) = 1.10515395.$$

Видно, что ошибка появляется в пятой цифре после запятой. Это наглядно доказывает, что метод Рунге-Кутты 3-го порядка более точен, чем метод Рунге-Кутты 2-го порядка.

Рассмотрим методику решения уравнения (12.12) методом Рунге-Кутты 4-го порядка:

$$k_1 = f(t^0, u^0) = 2 \cdot 1 - e^0 = 2 - 1 = 1;$$

$$k_2 = f(t^0 + 0.05, u^0 + 0.05k_1) = 2 \cdot (1 + 0.05 \cdot 1) - e^{0+0.05} = 1.048729;$$

$$k_3 = f(t^0 + 0.05, u^0 + 0.05k_2) = 2 \cdot (1 + 0.05 \cdot 1.048729) - e^{0+0.05} = 1.053602;$$

$$k_4 = f(t^0 + 0.1, u^0 + 0.1k_3) = 2 \cdot (1 + 0.1 \cdot 1.053602) - e^{0+0.1} = 1.105549;$$

$$u^{0.1} = u^0 + \frac{0.1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) = 1.1051702.$$

Видно, что ошибка появляется в седьмой цифре после запятой. Это наглядно доказывает, что метод Рунге-Кутта 4-го порядка более точен, чем методы Рунге-Кутта 2-го и 3-го порядка.

Глава 13. Принцип замороженных коэффициентов

13.1. Уравнения с непостоянными коэффициентами при производных

13.1.1. Исследование устойчивости явных разностных схем

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа, в котором коэффициент при производной второго порядка по координате не является константой, а зависит от переменных t и x :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma(t, x) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(t, x), \quad x \in [0, b], \quad t \in [0, t_k]. \quad (13.1)$$

Поскольку в математических моделях физико-химических процессов любой коэффициент является физической величиной, то для любых значений переменных t и x должно выполняться условие:

$$\forall t, x: \sigma(t, x) \geq 0.$$

Запишем для уравнения (13.1) явную разностную схему, стабилизируя значение функции $\sigma(t, x)$ в точке (t^n, x_j) на разностной сетке:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma(t^n, x_j) \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (13.2)$$

В разделе 3.4 было доказано, что такая разностная схема условно устойчива. Условием устойчивости для случая, когда σ является константой, служит соотношение (3.12). Выясним, какой вид будет иметь условие устойчивости для разностной схемы (13.2). Для этого выберем на разностной сетке произвольную точку $(\tilde{t}, \tilde{x})$:

$$0 < \tilde{x} < b, \quad 0 < \tilde{t} < t_k.$$

Запишем для уравнения (13.1) явную разностную схему с постоянным коэффициентом $\sigma(\tilde{t}, \tilde{x})$:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma(\tilde{t}, \tilde{x}) \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (13.3)$$

Соотношение (3.12), являющееся условием устойчивости, для разностной схемы (13.3) имеет вид:

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2\sigma(\tilde{t}, \tilde{x})}. \quad (13.4)$$

Однако точка $(\tilde{t}, \tilde{x})$ – произвольно выбранная точка на разностной сетке, и, следовательно, значение $\sigma(\tilde{t}, \tilde{x})$ – произвольно выбранное значение, которое может принимать функция $\sigma(t, x)$ при заданных интервалах изменения переменных t и x . Но для устойчивости разностной схемы (13.3) необходимо, чтобы условие (13.4) выполнялось для любой точки $(\tilde{t}, \tilde{x})$ на разностной сетке. Поэтому для записи условия (13.4) следует выбрать максимальное значение, которое может принимать функция $\sigma(t, x)$ при заданных интервалах изменения переменных $x \in [0, b], t \in [0, t_k]$:

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2\max[\sigma(t, x)]}.$$

Данное условие и является условием устойчивости явной разностной схемы (13.2).

Используя аналогичные рассуждения, можно получить условие устойчивости явной разностной схемы, аппроксимирующей одномерное дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка, в котором коэффициент при производной по координате не является константой:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v(t, x) \frac{\partial u}{\partial x} = f(t, x).$$

$$1) v(t, x) > 0: \quad \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v(t^n, x_j) \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = f(t^n, x_j),$$

$$\frac{\Delta t}{h} \leq \frac{1}{\max[v(t, x)]};$$

$$2) v(t, x) < 0: \quad \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v(t^n, x_j) \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h} = f(t^n, x_j),$$

$$\frac{\Delta t}{h} \leq \frac{1}{\max |v(t, x)|}.$$

13.1.2. Правило записи неявных разностных схем

Чтобы записать неявную разностную схему для уравнения (13.1), необходимо определиться на каком шаге по времени следует стабилизировать значение функции $\sigma(t, x)$. Как правило, для этого выбирают n -й шаг по времени. Во всех методах численного решения n -й шаг по времени считается известным для всех искомых функций, и, следовательно, как бы ни была задана функция $\sigma(t, x)$, при определении значений функции $u(t, x)$ на $(n+1)$ -м шаге по времени уже будут известны численные значения $\sigma(t, x)$ в каждой точке (t^n, x_j) разностной сетки. Таким образом, неявная разностная схема для уравнения (13.1) записывается в следующем виде:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma(t^n, x_j) \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f(t^n, x_j). \quad (13.5)$$

Данный подход, заключающийся в стабилизации коэффициентов, являющихся функцией времени, на последнем рассчитанном шаге, называют **принципом замороженных коэффициентов**.

Разностная схема (13.5) является абсолютно устойчивой и решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$a_j = c_j = -\sigma(t^n, x_j) \frac{\Delta t}{h^2}, \quad b_j = 1 + 2\sigma(t^n, x_j) \frac{\Delta t}{h^2}, \quad \xi_j^n = u_j^n + \Delta t f(t^n, x_j).$$

Легко видеть, что зависимость коэффициента σ от переменных t и x не оказывает влияния на сходимость прогонки.

Рассмотрим теперь двумерное дифференциальное уравнение параболического типа, в котором коэффициент σ зависит от переменных t, x и y :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma(t, x, y) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(t, x, y); \quad \forall t, x, y: \sigma(t, x, y) \geq 0. \quad (13.6)$$

Схема расщепления для уравнения (13.6) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} &= \sigma(t^n, x_j, y_k) \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + f(t^n, x_j, y_k), \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} &= \sigma(t^n, x_j, y_k) \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1}. \end{aligned}$$

Отметим, что согласно принципу замороженных коэффициентов функция $\sigma(t, x, y)$ аппроксимирована в обеих подсхемах на n -м шаге по времени.

Схема переменных направлений для уравнения (13.6) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^n}{\Delta t} &= \frac{\sigma(t^{n+1/2}, x_j, y_k)}{2} \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\sigma(t^{n+1/2}, x_j, y_k)}{2} \lambda_{yy} u_{j,k}^n, \\ \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} &= \frac{\sigma(t^{n+1/2}, x_j, y_k)}{2} \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \\ &+ \frac{\sigma(t^{n+1/2}, x_j, y_k)}{2} \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1} + f(t^{n+1/2}, x_j, y_k). \end{aligned}$$

В данном случае функция $\sigma(t, x, y)$ аппроксимирована в обеих подсхемах на шаге по времени $(n + 1/2)$ для того, чтобы сохранить второй порядок аппроксимации схемы по времени.

Схема предиктор-корректор для уравнения (13.6) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,k}^{n+1/4} - u_{j,k}^n}{\Delta t/2} &= \sigma(t^n, x_j, y_k) \lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/4}, \\ \frac{u_{j,k}^{n+1/2} - u_{j,k}^{n+1/4}}{\Delta t/2} &= \sigma(t^n, x_j, y_k) \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2}; \end{aligned}$$

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} = \sigma(t^{n+1/2}, x_j, y_k) [\lambda_{xx} u_{j,k}^{n+1/2} + \lambda_{yy} u_{j,k}^{n+1/2}] + f(t^{n+1/2}, x_j, y_k).$$

Согласно принципу замороженных коэффициентов функция $\sigma(t, x, y)$ аппроксимирована в первой и второй подсхемах на n -м шаге по времени; вся правая часть третьей подсхемы (корректора) аппроксимирована на шаге по времени $(n + 1/2)$ для достижения второго порядка аппроксимации схемы по времени.

13.2. Уравнения с нелинейным свободным членом

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа, свободный член которого является функцией квадрата искомой функции $u(t, x)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - k u^2, \quad k \geq 0. \quad (13.7)$$

Подобные уравнения входят в математические модели реакторов, в которых протекают химические реакции второго порядка.

Чтобы записать неявную разностную схему для уравнения (13.7), свободный член представляют в следующем виде:

$$k u^2 = (k u) \cdot u.$$

В данной записи выражение в скобках будет играть роль коэффициента, зависящего от переменных t и x . Тогда согласно принципу замороженных коэффициентов выражение $(k u)$ должно быть аппроксимировано на n -м шаге по времени. С учётом этого неявная разностная схема для уравнения (13.7) будет иметь вид:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - k u_j^n u_j^{n+1}. \quad (13.8)$$

Разностная схема (13.8) является абсолютно устойчивой и решается с помощью метода прогонки. Коэффициенты, соответствующие уравнению (4.10), имеют вид:

$$a_j = c_j = -\sigma \frac{\Delta t}{h^2}, \quad b_j^n = 1 + 2\sigma \frac{\Delta t}{h^2} + k u_j^n \Delta t, \quad \xi_j^n = u_j^n.$$

Если искомая функция $u(t, x)$ является физической величиной, то она не может быть отрицательна. В этом случае зависимость коэффициента b_j^n от значений функции $u(t, x)$ не оказывает влияния на сходимость прогонки.

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа, свободный член которого является произвольной степенной функцией искомой функции $u(t, x)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - k u^q, \quad k \geq 0. \quad (13.9)$$

По аналогии с предыдущим случаем представим свободный член в виде произведения коэффициента, зависящего от переменных t и x , и функции $u(t, x)$ в первой степени:

$$k u^q = (k u^{q-1}) \cdot u.$$

Тогда с учётом принципа замороженных коэффициентов неявная разностная схема для уравнения (13.9) будет иметь вид:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - k (u_j^n)^{q-1} u_j^{n+1}.$$

Данная разностная схема абсолютно устойчива, решается с помощью метода прогонки; условие сходимости прогонки (4.16) выполняется.

Глава 14. Решение интегро-дифференциальных уравнений

14.1. Постановка задачи

В разделе 1.7 мы рассматривали математическую модель, в которую помимо дифференциальных уравнений также входят интегро-дифференциальные уравнения, то есть уравнения, содержащие как производные, так и интегралы.

Интегро-дифференциальные уравнения могут встречаться в любых моделях, описывающих полидисперсные гетерогенные среды, состоящие из сплошной фазы (газ или жидкость) и дисперсной фазы (включения твёрдых частиц, капель жидкости или газовых пузырьков). Скорости процессов, протекающих с участием дисперсной фазы, зависят, как правило, от размера включений. Чтобы это учесть при записи уравнений математической модели, всю дисперсную фазу рассматривают как совокупность r -фаз. Каждая r -фаза состоит из включений, размеры (объёмы) которых изменяются от $r - dr$ до $r + dr$. Таким образом, в каждой из r -фаз размеры (объёмы) включений остаются постоянными, меняется только их число. Дисперсность гетерогенной фазы характеризуется **функцией распределения включений по размерам** $f(r)$, так что $f(r)dr$ – число включений, размеры (объёмы) которых находятся в интервале значений от r до $r + dr$. Отметим, что значение $f(r)dr$ может быть функцией как времени, так и пространственных координат, поэтому в общем случае рассматривают функцию $f(t, x, r)$; тогда $f(t, x, r)dr$ – число включений в момент времени t в точке x реактора, размеры которых находятся в интервале значений от r до $r + dr$. Уравнения, описывающие законы сохранения массы, импульса и энергии для всей дисперсной фазы, получают путём интегрирования соответствующих уравнений, записанных для r -фазы.

Примерами интегро-дифференциальных уравнений (помимо рассмотренных выше уравнений математической модели процесса массовой кристаллизации из растворов) могут служить следующие уравнения:

- уравнение, описывающее дробление включений

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = -f(r)A(r) + \int_r^R A(\gamma)B(r/\gamma)f(\gamma)d\gamma, \quad (14.1)$$

- уравнение, описывающее агломерацию твёрдых частиц или коагуляцию капель

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{2} \int_0^r K(\mu, r-\mu)f(\mu)f(r-\mu)d\mu - f(r) \int_0^R K(\mu, r)f(\mu)d\mu. \quad (14.2)$$

Здесь v – скорость перемещения включений; $A(r)$ – функция, характеризующая вероятность дробления включений размером r ; $B(r/\gamma)$ – функция, характеризующая вероятность дробления включений размером γ с образованием включений размером r ; $K(\mu, r)$ – функция, характеризующая вероятность агрегации включений размерами μ и r .

Первое слагаемое в правой части уравнения (14.1) описывает уменьшение числа включений r -фазы за счёт их дробления; второе слагаемое характеризует увеличение числа включений r -фазы за счёт дробления более крупных включений.

Первое слагаемое в правой части уравнения (14.2) описывает увеличение числа включений r -фазы за счёт агрегации включений с размерами μ и $r-\mu$; второе слагаемое характеризует уменьшение числа включений r -фазы за счёт их агрегации со всеми остальными включениями.

14.2. Методы численного вычисления интегралов

Рассмотрим непрерывную функцию одной переменной $u = u(x)$, для которой задан интервал её изменения $x \in [a, b]$. Разобьём интервал $[a, b]$ на N равных частей (рис. 14.1). Величину интервала деления обозначим за h .

На основе свойств определённого интеграла имеем:

$$\int_a^b u(x)dx = \sum_{i=1}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x)dx = \sum_{i=1}^{N-1} u(\xi_i)(x_{i+1} - x_i) = \sum_{i=1}^{N-1} u(\xi_i)h, \quad (14.3)$$

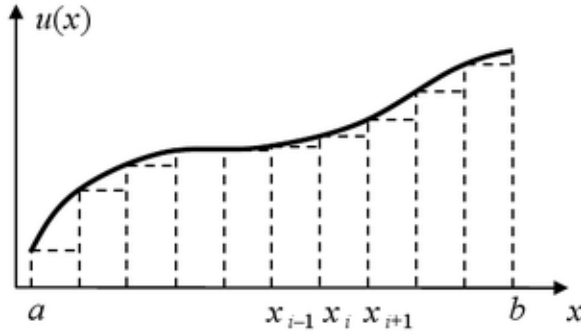


Рис. 14.1. Вычисление интеграла с помощью формулы прямоугольников

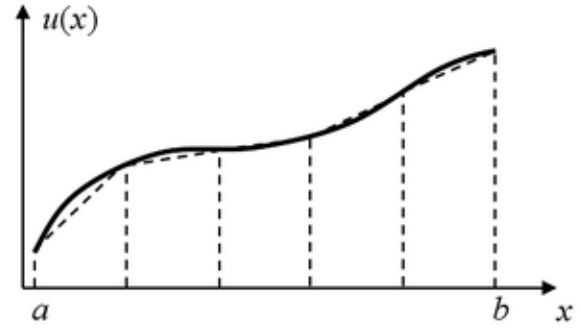


Рис. 14.2. Вычисление интеграла с помощью формулы трапеций

где $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$. При бесконечном увеличении числа интервалов деления получаем

$$N \rightarrow \infty \Rightarrow h \rightarrow 0 \Rightarrow \xi_i \rightarrow x_i.$$

Заменяя ξ_i на x_i в выражении (14.3), получаем приближённую формулу для расчёта определённого интеграла:

$$\int_a^b u(x) dx \approx h \sum_{i=1}^{N-1} u(x_i). \quad (14.4)$$

Формула (14.4) называется **формулой прямоугольников**, поскольку точное выражение площади кривой $u(x)$ она заменяет на сумму площадей вписанных в неё прямоугольников.

Если заменить точное выражение площади кривой $u(x)$ на сумму площадей трапеций, построенных на основе точек деления (рис. 14.2), то получим следующую приближённую формулу для расчёта определённого интеграла, называемую **формулой трапеций**:

$$\int_a^b u(x) dx \approx h \sum_{i=1}^{N-1} \frac{u(x_i) + u(x_{i+1})}{2}.$$

14.3. Примеры численного решения интегро-дифференциальных уравнений

14.3.1. Решение уравнений математической модели процесса массовой кристаллизации

Рассмотрим методику численного решения интегро-дифференциальных уравнений из математической модели процесса массовой кристаллизации. Уравнение, описывающее материальный баланс по концентрации кристаллизующегося компонента имеет вид:

$$\frac{dc}{dt} = - \int_0^R \rho_2^0 f \eta dr, \quad (14.5)$$

где c – концентрация кристаллизующегося компонента; ρ_2^0 – плотность кристалла; η – скорость роста кристалла; $f(r) dr$ – число кристаллов в единице объёма смеси с размером от r до $r + dr$; R – наибольший размер кристалла.

Уравнение (14.5) содержит одну производную, описывающую изменение концентрации кристаллизующегося компонента во времени. Причём, функция c является функцией только одной независимой переменной (времени). В правой части уравнения (14.5) находится интеграл, содержащий функцию распределения включений по размерам f , значения которой зависят от времени и от размера включений. То есть, функция f является функцией двух независимых переменных – t и r . Также в подынтегральное выражение входит функция скорости роста кристалла η , зависящая от размера кристалла и от величины пересыщения раствора (т.е. разности текущей и равновесной концентраций раствора), а, следовательно, являющаяся функцией двух независимых переменных – t и r .

Таким образом, для записи разностной схемы, аппроксимирующей уравнение (14.5), требуется ввести двумерную разностную сетку (по осям которой отложены независимые переменные – время t и размер кристаллов r), а также следующие обозначения:

$n = 0, 1, 2, \dots, M$ – порядковый номер точки деления по оси t ,

$k = 1, 2, 3, \dots, N_r$ – порядковый номер точки деления по оси r ,

$t^{n+1} - t^n = \Delta t$ – величина интервала между точками по оси t ,

$r_{k+1} - r_k = \Delta r$ – величина интервала между точками по оси r ,

$f(t^n, r_k) = f_k^n$ – значение функции $f(t, r)$, соответствующее точкам t^n, r_k .

Для аппроксимации производной по времени будем использовать, как и обычно, правую конечную разность:

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{t^n} \rightarrow \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t}.$$

Для аппроксимации интеграла будем использовать выражение (14.4). Причём, поскольку искомой функцией в уравнении (14.5) является функция $c(t)$, то при аппроксимации функций $f(t, r)$ и $\eta(t, r)$ требуется использование принципа замороженных коэффициентов (иначе разностная схема не будет разрешима). Учитывая всё сказанное, запишем разностную схему для аппроксимации уравнения (14.5):

$$\frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} = - \sum_{k=1}^{N_r} \rho_2^0 f_k^n \eta_k^n \Delta r. \quad (14.6)$$

Разностная схема (14.6) является явной и решается с помощью рекуррентного соотношения:

$$c^{n+1} = c^n - \Delta t \sum_{k=1}^{N_r} \rho_2^0 f_k^n \eta_k^n \Delta r.$$

Аналогично записывается разностная схема для уравнения, описывающего тепловой баланс:

$$\begin{aligned} \rho C_T \frac{dT}{dt} &= \Delta H \int_0^R \rho_2^0 f \eta dr + K F (T - T_x), \\ \rho^n C_T^n \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} &= \Delta H \sum_{k=1}^{N_r} \rho_2^0 f_k^n \eta_k^n \Delta r + K F (T^{n+1} - T_x), \end{aligned} \quad (14.7)$$

где C_T , ρ , T – теплоёмкость, плотность и температура смеси в кристаллизаторе; ΔH – тепловой эффект процесса; K – коэффициент теплопередачи; T_x – температура хладагента; F – поверхность кристаллизатора.

Разностная схема (14.7) решается с помощью рекуррентного соотношения:

$$T^{n+1} = \frac{\rho^n C_T^n T^n + \Delta t \left(\Delta H \sum_{k=1}^{N_r} \rho_2^0 f_k^n \eta_k^n \Delta r - K F T_x \right)}{\rho^n C_T^n - \Delta t K F}.$$

14.3.2. Решение уравнения, описывающего дробление включений

Рассмотрим методику численного решения интегро-дифференциального уравнения (14.1), описывающего процесс дробления включений. В левой части данного уравнения находятся две производные, описывающие изменение функции распределения включений по размерам f во времени и пространстве; правая часть, содержащая интеграл, характеризует изменение функции f за счёт процесса дробления включений (то есть, за счёт изменения их размера). Таким образом, в данном случае функция f является функцией трёх независимых переменных – t , x и r . Также в правой части уравнения (14.1) имеются две вероятностные функции A и B , значения которых зависят от размера включений.

Таким образом, для записи разностной схемы, аппроксимирующей уравнение (14.1), требуется ввести трёхмерную разностную сетку (по осям которой отложены независимые переменные – время t , координата по длине реактора x и размер включений r), а также следующие обозначения:

$$\begin{aligned} n &= 0, 1, 2, \dots, M - \text{порядковый номер точки деления по оси } t, \\ j &= 1, 2, 3, \dots, N_x - \text{порядковый номер точки деления по оси } x, \\ k &= 1, 2, 3, \dots, N_r - \text{порядковый номер точки деления по оси } r, \\ t^{n+1} - t^n &= \Delta t - \text{величина интервала между точками по оси } t, \\ x_{j+1} - x_j &= h - \text{величина интервала между точками по оси } x, \\ r_{k+1} - r_k &= \Delta r - \text{величина интервала между точками по оси } r, \\ f(t^n, x_j, y_k) &= f_{j,k}^n - \text{значение функции } f(t, x, r), \text{ соответствующее точкам} \end{aligned} \tag{14.8}$$

t^n, x_j, r_k .

Для аппроксимации производной по времени будем использовать, как и обычно, правую конечную разность. Выбор конечной разности для аппроксимации производной по координате определяется (согласно известному правилу) знаком величины v , характеризующей скорость перемещения включений: если направление оси x совпадает с направлением перемещения включений, то величина v будет положительна и для аппроксимации производной $\partial f/\partial x$ необходимо использовать левую конечную разность; если направление оси x противоположно направлению перемещения включений, то величина v будет отрицательна и для аппроксимации производной $\partial f/\partial x$ необходимо использовать правую конечную разность. Для аппроксимации интеграла будем использовать выражение (14.4) и принцип замороженных коэффициентов. Учитывая всё сказанное, запишем схему расщепления, аппроксимирующую уравнение (14.1) для случая $v > 0$:

$$\begin{aligned} \frac{f_{j,k}^{n+1/2} - f_{j,k}^n}{\Delta t} + v \frac{f_{j,k}^{n+1/2} - f_{j-1,k}^{n+1/2}}{h} &= 0; \\ \frac{f_{j,k}^{n+1} - f_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} &= -f_{j,k}^{n+1} A_k + \sum_{i=k}^{N_r} A_i B_{i,k} f_{j,i}^{n+1/2} \Delta r. \end{aligned} \quad (14.9)$$

Первая подсхема схемы расщепления (14.9) учитывает производную по координате и является неявной по переменной x ; вторая подсхема учитывает правую часть уравнения (14.1). Схема (14.9) имеет первый порядок аппроксимации по каждой из независимых переменных:

$$O(\Delta t, h, \Delta r).$$

Каждая из подсхем, составляющих схему (14.9), является абсолютно устойчивой и решается с помощью соответствующего рекуррентного соотношения:

$$f_{j,k}^{n+1/2} = \frac{f_{j,k}^n + v \frac{\Delta t}{h} f_{j-1,k}^{n+1/2}}{1 + v \frac{\Delta t}{h}}; \quad f_{j,k}^{n+1} = \frac{f_{j,k}^{n+1/2} + \Delta t \sum_{i=k}^{N_r} A_i B_{i,k} f_{j,i}^{n+1/2} \Delta r}{1 + \Delta t A_k}.$$

14.3.3. Решение уравнения, описывающего агрегацию включений

Рассмотрим методику численного решения интегро-дифференциального уравнения (14.2), описывающего процесс агрегации включений. В левой части данного уравнения находятся две производные, описывающие изменение функции распределения включений по размерам f во времени и пространстве; правая часть, содержащая два интеграла, характеризует изменение функции f за счёт процесса агрегации включений (то есть, за счёт изменения их размера). Таким образом, в данном случае функция f является функцией трёх независимых переменных – t , x и r . Также в правой части уравнения (14.2) имеется вероятностная функция K , значения которой зависят от размера включений.

Таким образом, для записи разностной схемы, аппроксимирующей уравнение (14.2), требуется ввести трёхмерную разностную сетку (по осям которой отложены независимые переменные – время t , координата по длине реактора x и размер включений r), а также обозначения, аналогичные обозначениям (14.8).

Для аппроксимации производной по времени будем использовать правую конечную разность. Выбор конечной разности для аппроксимации производной по координате определяется знаком величины v , характеризующей скорость перемещения включений. Для аппроксимации интегралов будем использовать выражение (14.4) и принцип замороженных коэффициентов. Учитывая всё сказанное, запишем схему расщепления, аппроксимирующую уравнение (14.2) для случая $v > 0$:

$$\begin{aligned} \frac{f_{j,k}^{n+1/2} - f_{j,k}^n}{\Delta t} + v \frac{f_{j,k}^{n+1/2} - f_{j-1,k}^{n+1/2}}{h} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k K_{i,k-i} f_{j,i}^n f_{j,k-i}^n \Delta r; \\ \frac{f_{j,k}^{n+1} - f_{j,k}^{n+1/2}}{\Delta t} &= -f_{j,k}^{n+1} \sum_{i=1}^{N_r} K_{i,k} f_{j,i}^{n+1/2} \Delta r. \end{aligned} \quad (14.10)$$

Первая подсхема схемы расщепления (14.10) является неявной по переменной x и явной по переменной r ; вторая подсхема является неявной по переменной r .

Схема (14.10) имеет первый порядок аппроксимации по каждой из независимых переменных:

$$O(\Delta t, h, \Delta r).$$

Каждая из подсхем, составляющих схему (14.10), является абсолютно устойчивой и решается с помощью соответствующего рекуррентного соотношения:

$$f_{j,k}^{n+1/2} = \frac{f_{j,k}^n + v \frac{\Delta t}{h} f_{j-1,k}^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^k k_{i,k-i} f_{j,i}^n f_{j,k-i}^n \Delta r}{1 + v \frac{\Delta t}{h}};$$

$$f_{j,k}^{n+1} = \frac{f_{j,k}^{n+1/2}}{1 + \Delta t \sum_{i=1}^{N_r} k_{i,k} f_{j,i}^{n+1/2} \Delta r}.$$

Глава 15. Решение сложных систем уравнений

15.1. Основной подход к решению сложных систем

Как правило, при математическом описании сложных химико-технологических систем требуется учёт изменения во времени и/или пространстве ряда величин (концентраций реагентов, температуры, давления и пр.). Поэтому математические модели химико-технологических процессов чаще всего состоят не из одного дифференциального уравнения, а из системы дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений. При этом в уравнении, описывающем изменение одной из искоемых функций системы, могут содержаться и другие неизвестные функции, изменение которых описывается другими уравнениями той же системы. В качестве примера следует привести хорошо известную зависимость скорости большинства химических реакций от температуры, которая, в свою очередь, может существенно меняться за счёт теплового эффекта по ходу реакционного процесса. В уравнениях, описывающих физико-химические процессы в гетерогенных средах, взаимосвязь величин, характеризующих процесс, как правило, ещё более сложная. Математическая модель процесса массовой кристаллизации из растворов – наглядное подтверждение сказанному.

Методы численного решения уравнений различного типа, позволяющие определить значения искомой функции при определённых значениях независимых переменных, применимы и к сложным системам уравнений. Однако для того чтобы решить какое-либо из уравнений системы, требуется знание значений всех входящих в него параметров и функций, определяемых из других уравнений системы. Поэтому при записи разностных схем для систем уравнений применяется принцип замороженных коэффициентов, позволяющий использовать известные значения всех функций системы, полученные на предыдущем расчётном шаге (в случае первого расчётного шага для определения значений функций системы используются начальные условия, задаваемые при постановке задачи).

В качестве примера рассмотрим систему двух одномерных дифференциальных уравнений параболического типа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - k u v, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - k u v. \quad (15.1)$$

В данной системе $u(t, x)$ и $v(t, x)$ – две различные функции двух независимых переменных. Видно, что свободный член первого уравнения системы содержит функцию $v(t, x)$, определяемую с помощью второго уравнения; а свободный член второго уравнения системы содержит функцию $u(t, x)$, определяемую с помощью первого уравнения. Неявная разностная схема для системы (15.1) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} &= \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - k u_j^{n+1} v_j^n; \\ \frac{v_j^{n+1} - v_j^n}{\Delta t} &= \frac{v_{j+1}^{n+1} - 2v_j^{n+1} + v_{j-1}^{n+1}}{h^2} - k u_j^n v_j^{n+1}. \end{aligned}$$

Видно, что при аппроксимации свободного члена в каждом из уравнений системы применён принцип замороженных коэффициентов, позволяющий использовать известные значения одной искомой функции для определения значений другой искомой функции. Такая разностная схема будет разрешима.

15.2. Решение математической модели процесса массовой кристаллизации из растворов

Рассмотрим емкостной кристаллизатор периодического действия, в котором происходит процесс массовой кристаллизации за счёт охлаждения раствора. Математическая модель данного процесса базируется на законах сохранения массы, импульса и энергии. Так как рассматривается аппарат идеального смешения, то можно допустить, что все градиенты (концентрации, температуры) отсутствуют и скорости частиц не меняются.

Математическая модель процесса массовой кристаллизации, протекающего в емкостном кристаллизаторе, имеет вид:

- уравнение изменения концентрации раствора

$$\frac{dc}{dt} = - \int_0^R \rho_2^0 f \eta dr; \quad (15.2)$$

- уравнение изменения температуры в реакторе

$$\left[\rho_1 C_{1T} + \rho_2^0 C_{2T} \int_0^R f r dr \right] \frac{dT}{dt} = \Delta H \int_0^R \rho_2^0 f \eta dr - K F (T - T_x); \quad (15.3)$$

- уравнение баланса числа частиц

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(f \eta)}{\partial r} = 0; \quad (15.4)$$

- выражение для скорости роста кристалла

$$\eta = \frac{dr}{dt} = k_2 S_r (c - c_s)^m; \quad (15.5)$$

- начальные условия

$$c(t=0) = c_0, \quad T(t=0) = T_0, \quad f(t=0, r) = 0; \quad (15.6)$$

- граничное условие к уравнению (15.4)

$$f(t, r = r_0) \cdot \eta(t, r = r_0) = I = k_1 (c - c_s)^p. \quad (15.7)$$

Здесь t – время; c – концентрация кристаллизующегося компонента; ρ_1 – плотность раствора; ρ_2^0 – плотность кристалла; T – температура; C_{1T} , C_{2T} – теплоёмкости раствора и кристалла, соответственно; η – скорость роста кристаллов; $f(r) dr$ – число кристаллов в единице объёма смеси с размером от r до $r + dr$; R – наибольший размер кристалла; r_0 – размер зародыша; I – скорость зародышеобразования; ΔH – тепловой эффект процесса; K – коэффициент теплопередачи; F – поверхность кристаллизатора; T_x – температура хладагента; c_s – равновесная концентрация раствора; $(c - c_s)$ – пересыщение раствора; S_r – поверхность кристалла размером r ; k_2 – кинетическая константа скорости роста кристалла; k_1 – кинетическая константа скорости зародышеобразования; m, p – показатели степени при пересыщении.

Равновесную концентрацию в небольшом диапазоне изменения температур можно представить в виде:

$$c_s = a + bT, \quad (15.8)$$

где a, b – константы.

Система уравнений (15.2)–(15.8), описывающих процесс массовой кристаллизации из растворов в емкостном кристаллизаторе, включает два интегродифференциальных уравнения (15.2) и (15.3), дифференциальное уравнение в частных производных 1-го порядка (15.4), а также два алгебраических уравнения (15.5) и (15.8), начальные условия (15.6) и граничные условия (15.7). Рассмотрим метод численного решения системы (15.2)–(15.8).

Методика составления разностных схем для уравнений (15.2) и (15.3) была подробно рассмотрена в разделе 14.3.1; разностные схемы для данных уравнений имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} &= - \sum_{j=1}^{N_r} \rho_2^0 f_j^n \eta_j^n \Delta r, \\ \left[\rho_1^n C_{1T}^n + \rho_2^0 C_{2T} \sum_{j=1}^{N_r} f_j^n r_j \Delta r \right] \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} &= \\ &= \Delta H \sum_{j=1}^{N_r} \rho_2^0 f_j^n \eta_j^n \Delta r + K F (T^{n+1} - T_x), \end{aligned} \quad (15.9)$$

где n – порядковый номер точки деления по оси t , j – порядковый номер точки деления по оси r .

Рекуррентные соотношения для определения концентрации раствора и температуры имеют вид:

$$\begin{aligned} c^{n+1} &= c^n - \Delta t \sum_{j=1}^{N_r} \rho_2^0 f_j^n \eta_j^n \Delta r, \\ T^{n+1} &= \frac{\left[\rho_1^n C_{1T}^n + \rho_2^0 C_{2T} \sum_{j=1}^{N_r} f_j^n r_j \Delta r \right] T^n}{\rho_1^n C_{1T}^n + \rho_2^0 C_{2T} \sum_{j=1}^{N_r} f_j^n r_j \Delta r - \Delta t K F} + \frac{\Delta t \left(\Delta H \sum_{j=1}^{N_r} \rho_2^0 f_j^n \eta_j^n \Delta r - K F T_x \right)}{\rho_1^n C_{1T}^n + \rho_2^0 C_{2T} \sum_{j=1}^{N_r} f_j^n r_j \Delta r - \Delta t K F}. \end{aligned}$$

Разностная схема для уравнения (15.4) записывается с учётом правила выбора конечной разности для аппроксимации производной по r и принципа замороженных коэффициентов:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} + \frac{f_j^{n+1} \eta_j^n - f_{j-1}^{n+1} \eta_{j-1}^n}{\Delta r} = 0. \quad (15.10)$$

Рекуррентное соотношение для определения функции плотности распределения кристаллов по размерам имеет вид:

$$f_j^{n+1} = \frac{f_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta r} f_{j-1}^{n+1} \eta_{j-1}^n}{1 + \frac{\Delta t}{\Delta r} \eta_j^n}.$$

Уравнения (15.5)–(15.8) в разностном виде записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} c^0 &= c_0, \quad T^0 = T_0, \quad f_j^0 = 0; \\ c_s^{n+1} &= a + bT^{n+1}; \quad \eta_j^{n+1} = k_2 S_j (c^{n+1} - c_s^{n+1})^m; \\ I^{n+1} &= k_1 (c^{n+1} - c_s^{n+1})^p; \quad f_1^{n+1} = I^{n+1} / \eta_1^{n+1}. \end{aligned}$$

15.3. Определение устойчивости разностных схем с помощью тестовых задач

15.3.1. Метод тестовых задач

Для исследования устойчивости сложных разностных схем, описывающих системы дифференциальных уравнений (то есть, когда исследование устойчивости с помощью спектрального метода затруднительно или вообще невозможно), применяют **метод тестовых задач**.

Как нам уже известно, устойчивость разностной схемы не зависит от вида свободного члена дифференциального уравнения, если он содержит только независимые переменные и не содержит функцию, изменение которой описывает дифференциальное уравнение. Иными словами, разностные схемы, отличающиеся только свободным членом типа

$$f(t^n, x_j, y_k, \dots), \quad (15.11)$$

обладают одинаковым типом устойчивости.

С другой стороны, если известно истинное решение дифференциального уравнения, то его всегда можно сравнить с решением, полученным при использовании той или иной разностной схемы, и таким образом определить, устойчива она или нет:

$$\begin{aligned} \|u_{j,k,\dots}^n - [u(t^n, x_j, y_k, \dots)]\| &\leq \varepsilon \Rightarrow \text{схема устойчива;} \\ \|u_{j,k,\dots}^n - [u(t^n, x_j, y_k, \dots)]\| &> \varepsilon \Rightarrow \text{схема неустойчива.} \end{aligned} \quad (15.12)$$

Здесь $[u(t^n, x_j, y_k, \dots)]$ – истинное решение исходного дифференциального уравнения в точке $(t^n, x_j, y_k, \dots)$; $u_{j,k,\dots}^n$ – решение разностной схемы в точке $(t^n, x_j, y_k, \dots)$.

Таким образом, суть метода тестовых задач заключается в следующем. Сначала необходимо задать некую функцию от независимых переменных, называемую **тестом**. Затем надо построить дифференциальное уравнение (тестовую задачу), для которого выбранный тест будет являться истинным решением; при этом новое дифференциальное уравнение должно отличаться от исходного только свободным членом типа (15.11). Далее, решая новое дифференциальное уравнение с помощью какой-либо разностной схемы, мы сможем сделать вывод о её устойчивости на основании сравнения полученных численных значений со значениями истинного решения (т.е., выбранного теста) в тех же точках разностной сетки. Если решение тестовой задачи подтверждает устойчивость разностной схемы, использовавшейся для её решения, то данную разностную схему также можно использовать для численного решения исходного дифференциального уравнения, истинное решение которого нам неизвестно. Если решение тестовой задачи свидетельствует о неустойчивости разностной схемы, использовавшейся для её решения, тогда следует выбрать другую разностную схему.

Обратим внимание на то, что при выборе теста целесообразно использовать функцию такого же типа, как и в выражении для свободного члена (15.11): если выражение (15.11) является алгебраическим, то тест следует задавать в виде алгебраической функции; если выражение (15.11) является тригонометрическим, то тест следует задавать в виде тригонометрической функции; если выражение (15.11) является экспоненциальным, то тест следует задавать в виде экспоненты и т.д.

15.3.2. Пример на построение тестовой задачи

Рассмотрим одномерное дифференциальное уравнение параболического типа, для решения которого требуется подобрать устойчивую разностную схему:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 10 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + x^2, \quad x \in [0, 1], \quad t \in [0, 1]. \quad (15.13)$$

Зададим тестовую функцию в виде:

$$\tilde{u} = tx^2. \quad (15.14)$$

Определим производные от тестовой функции (15.14), входящие в исходное уравнение (15.13):

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = x^2, \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} = 2tx, \quad \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} = 2t. \quad (15.15)$$

Представим дифференциальное уравнение, истинным решением которого должна быть тестовая функция (15.14), в следующем виде:

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = 10 \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} + x^2 + \varphi(t, x).$$

Подставляя выражения (15.15) в данное уравнение, определим вид неизвестной функции $\varphi(t, x)$, входящей в состав свободного члена:

$$x^2 = 20t + x^2 + \varphi(t, x) \quad \Rightarrow \quad \varphi(t, x) = -20t.$$

Таким образом, мы построили дифференциальное уравнение, которое отличается от исходного уравнения (15.13) только видом свободного члена и для

которого, в то же время, тестовая функция (15.14) является истинным решением:

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = 10 \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} + x^2 - 20t. \quad (15.16)$$

Однако для того чтобы его решить с использованием численных методов, требуется задать начальное и граничные условия. Зададим эти условия с помощью истинного решения уравнения (15.16), то есть с помощью тестовой функции (15.14):

$$\tilde{u}(t=0, x)=0; \quad \tilde{u}(t, x=0)=0; \quad \tilde{u}(t, x=1)=t.$$

Теперь мы можем записать для уравнения (15.16) какую-либо разностную схему, решить уравнение (15.16) с её помощью, сравнить полученные численные значения со значениями тестовой функции (15.14) в тех же точках разностной сетки и на основании выражения (15.12) сделать вывод об устойчивости использовавшейся разностной схемы. Поскольку уравнения (15.13) и (15.16) отличаются только видом свободного члена, в состав которого в обоих случаях не входит искомая функция, то одинаковые разностные схемы для этих уравнений будут обладать одинаковым типом устойчивости.

Учебное издание

**КОЛЬЦОВА Элеонора Моисеевна
СКИЧКО Алексей Сергеевич
ЖЕНСА Андрей Вячеславович**

**ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ХИМИИ**

Редактор Е. В. Копасова

Подписано в печать 29.01.08 г. Формат 60х84 1/16. Бумага SvetoCopy.
Отпечатано на ризографе. Усл. печ. л. 13,26. Уч.-изд. л. 11,08.
Тираж 150 экз. Заказ

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева
Издательский центр
Адрес университета и издательского центра:
125047, Москва, Миусская пл., 9