УДК 517.949.8

Н.А.Абиев, В.Д.Жанузакова

ОПТИМАЛЬНАЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ПРОЦЕДУРА ДЛЯ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

В данной статье для приближенного решения уравнения теплопроводности рассматривается разностная схема, зависящая от параметра. Уточняется порядок аппроксимации этой схемы и предлагается оптимальный вариант проведения расчетов.

Пусть рассматривается дифференциальная начально-краевая задача

$$\begin{aligned} &u_t(t,x) = a^2 u_{xx}(t,x) + f(t,x), && 0<t<T,\ 0<x<l, \\ &u(0,x)=\varphi(x), && 0\le x\le l, \\ &u(t,0)=\mu(t),\ u(t,1)=\overline{\mu}(t), && 0\le t\le T, \end{aligned} \qquad (1)$$

описывающая процесс переноса тепла в однородном стержне длины l.
$f,\varphi,\mu,\overline{\mu}$-достаточно гладкие известные функции, соответственно f-функция источников тепла, φ-начальное распределение температуры, $\mu,\overline{\mu}$-известные температурные режимы на концах стержня, a- постоянное число, зависящее от удельной теплоемкости и коэффициента теплопроводности, т.е. от материала стержня.

Корректность постановки такой задачи доказана в теории уравнений математической физики, например в [5].

Для приближенного решения задачи (1) на ЭВМ отрезки $0\le x\le l$, $0\le t\le T$ разобьем на N и M равных частей соответственно и рассмотрим семейство разностных схем с параметром θ [3,4]:

$$\begin{aligned} &\frac{u_n^{k+1}-u_n^k}{\tau} = a^2\theta\,\frac{u_{n-1}^{k+1}-2u_n^{k+1}+u_{n+1}^{k+1}}{h^2} + a^2(1-\theta)\,\frac{u_{n-1}^{k}-2u_n^{k}+u_{n+1}^{k}}{h^2} + g_n^k, \\ &\qquad\qquad n=1,2,\ldots,N-1, \qquad k=0,1,\ldots,M-1, \\ &u_n^0=\varphi_n=\varphi(nh), \qquad n=0,1,\ldots,N, \\ &u_0^k=\mu^k=\mu(k\tau),\quad u_N^k=\overline{\mu}^k=\overline{\mu}(k\tau), \qquad k=0,1,\ldots,M, \end{aligned} \qquad (2)$$

где $h=l/N$, $\tau=T/M$, u_n^k - приближенное значение решения задачи (1) в узле $(t_k,x_n)\in D_{h\tau}$, получаемое по схеме (2), $D_{h\tau}=\{(t_k,x_n):\quad t_k=k\tau, x_n=nh,\quad k=0,1,\ldots,M,\ n=0,1,\ldots,N\}$- заданная равномерная сетка.

Введем следующие обозначения $u=u(t,x)$, $\hat{u}=u(t+\tau,x)$, $\overline{u}=u(t+0{,}5\tau,x)$,

$$Lu=u_{xx}(t,x), \qquad \Lambda u=\frac{u(t,x-h)-2u(t,x)+u(t,x+h)}{h^2}.$$

Начально-краевые условия дифференциальной задачи (1) аппроксимируются точно.

Рассмотрим погрешность аппроксимации $\delta f(t_k,x_n)$ схемы (2) на решении уравнения (1). Пусть $u(t_k,x_n)$- значение точного решения уравнения (1) в точке (t_k,x_n) сетки $D_{h\tau}$. Подставим точное значение $u(t_k,x_n)$ в разностное уравнение (2).
Тогда

$$\delta f(t_k,x_n)=\frac{\hat{u}(t_k,x_n)-u(t_k,x_n)}{\tau}-a^2[\theta\Lambda\hat{u}(t_k,x_n)+(1-\theta)\Lambda u(t_k,x_n)]-g(t_k,x_n). \qquad (3)$$

Разложим функции $u=u(t,x)$ и $\hat{u}=u(t+\tau,x)$ в ряд Тейлора по степеням $\tau/2$:

$$u(t,x)=u(t+0{,}5\tau,x)-0{,}5\tau u_t(t+0{,}5\tau,x)+\frac{\tau^2}{8}u_{tt}(t+0{,}5\tau,x)+O(\tau^3),$$

$$\hat{u}(t,x) = u(t+0{,}5\tau, x) + 0{,}5\tau u_t(t+0{,}5\tau, x) + \frac{\tau^2}{8} u_{tt}(t+0{,}5\tau, x) + O(\tau^3).$$

Отсюда $\quad \dfrac{\hat{u}-u}{\tau} = \bar{u}_t + O(\tau^2)$. (4)

Разложим теперь функции $\bar{u}(t, x+h)$ и $\bar{u}(t, x-h)$:

$$\bar{u}(t, x \pm h) = \bar{u}(t,x) \pm h\bar{u}_x(t,x) + \frac{h^2}{2}\bar{u}_{xx}(t,x) \pm \frac{h^3}{6}\bar{u}_{xxx}(t,x) + \frac{h^4}{24}\bar{u}_{xxxx}(t,x) \pm$$
$$\pm \frac{h^5}{120}\bar{u}_{xxxxx}(t,x) + O(h^6).$$

Теперь нетрудно вывести, что

$$\Lambda\bar{u}(t,x) = \bar{u}_{xx}(t,x) + \frac{h^2}{12}\bar{u}_{xxxx}(t,x) + O(h^4) = L\bar{u} + \frac{h^2}{12}L^2\bar{u} + O(h^4). \qquad (5)$$

С учетом (4) и (5) равенство (3) приобретает вид:

$$\delta f(t_k, x_n) = [\bar{u}_t(t_k, x_n) - a^2 L\bar{u}(t_k, x_n) - g(t_k, x_n)] - a^2(\theta - 0{,}5)\tau L\bar{u}_t(t_k, x_n) -$$
$$-\frac{a^2h^2}{12} L^2\bar{u}(t_k, x_n) - a^2(\theta - 0{,}5)\frac{\tau h^2}{12} L^2\bar{u}_t(t_k, x_n) + O(\tau^2) + O(h^4). \qquad (6)$$

Далее возможны 3 известных основных случая.

I случай. $\theta \neq 0{,}5$. В этом случае полагая $g(t_k, x_n) = \bar{f}(t_k, x_n)$, мы добиваемся аппроксимации уравнения (1) с порядком точности $\delta_1 = O(\tau) + O(h^2)$.

II случай. $\theta = 0{,}5$ (схема Кранка-Николсона). Полагая $g(t_k, x_n) = \bar{f}(t_k, x_n)$, мы добиваемся аппроксимации уравнения (1) с порядком точности уже $\delta_2 = O(\tau^2) + O(h^2)$.

III случай. Подходящим выбором функции $g(t_k, x_n)$ и веса θ можно добиться аппроксимации порядка $\delta_3 = O(\tau^2) + O(\tau h^2) + O(h^4)$.

Обычно порядок аппроксимации в этом случае полагают равным $O(\tau^2) + O(h^4)$, что, на наш взгляд, не очень-то корректно. Порядок $O(\tau^2) + O(h^4)$ является условным и получается при определенной зависимости между шагами сетки, например, при предположении $\tau \sim h^2$. Обоснуем сказанное.

Действительно, с учетом равенства $L\bar{u}_t(t_k, x_n) = a^2L^2\bar{u}(t_k, x_n) + L\bar{f}(t_k, x_n)$ выражение (6) примет вид

$$\delta f(t_k, x_n) = [\bar{u}_t(t_k, x_n) - a^2 L\bar{u}(t_k, x_n) + \frac{h^2}{12} L\bar{f}(t_k, x_n) - g(t_k, x_n)] -$$
$$-[a^2(\theta - 0{,}5)\tau + h^2/12]L\bar{u}_t(t_k, x_n) + O(\tau^2) + O(\tau h^2) + O(h^4).$$

Положим $\quad \theta = \theta^* = 0{,}5 - \dfrac{h^2}{12\tau a^2}, \qquad g(t_k, x_n) = \bar{f}(t_k, x_n) + \dfrac{h^2}{12} L\bar{f}(t_k, x_n)$.

Тогда получаем схему с порядком аппроксимации $O(\tau^2) + O(\tau h^2) + O(h^4)$.

Для реализации расчетов по схеме (2) запишем ее в виде

$$Au_{n-1}^{k+1} + Bu_n^{k+1} + Cu_{n+1}^{k+1} = w_n^k, \quad n = 1,2,\ldots,N-1, \qquad k = 0,1,\ldots,M-1,$$
$$u_n^0 = \varphi_n = \varphi(nh), \qquad n = 0,1,\ldots,N,$$
$$u_0^k = \mu^k = \mu(k\tau), \quad u_N^k = \bar{\mu}^k = \bar{\mu}(k\tau), \qquad k = 0,1,\ldots,M,$$

где $\quad A = C = -\tau a^2\theta, \quad B = 2\tau a^2\theta + h^2, \quad w_n^k = h^2u_n^k + \tau a^2(1-\theta)\,(u_{n-1}^k - 2u_n^k + u_{n+1}^k) + \tau h^2 g_n^k,$

и используем метод прогонки. Сходимость метода прогонки на каждом временном слое обеспечивается условием диагонального преобладания: $|B| > |A| + |C|$.

Для практической пригодности схемы (2) нужна еще ее устойчивость. Схема называется устойчивой, если ошибки, обусловленные неточностью физических экспериментов или округлениями ЭВМ, не возрастают в процессе вычислений. Как известно из теории разностных схем [1,2,4], для устойчивости схемы (2) достаточно выполнения неравенства $\theta \geq 0{,}5 - \frac{h^2}{4\tau a^2}$. (7)

Рассмотрим теперь три схемы: неявную схему с опережением ($\theta = 1$), схему Кранка-Николсона ($\theta = 0{,}5$) и схему повышенной точности ($\theta = \theta^*$).

Поскольку для всех $\theta \geq 0{,}5$ неравенство (7) выполнено при любом выборе шагов τ и h, то схема с опережением и схема Кранка-Николсона абсолютно устойчивы. Абсолютно устойчива также схема повышенной точности: $\theta^* \geq 0{,}5 - \frac{h^2}{4\tau a^2}$.

Проанализируем различные соотношения между шагами сетки.

1) Возьмем $\tau \sim h$. Тогда, как несложно заметить, что при $\tau \sim h \to 0$ схемы Кранка-Николсона и повышенной точности имеют “почти одинаковые” порядки аппроксимации

$\delta_2 = O(\tau^2) + O(h^2) \sim O(h^2)$, $\delta_3 = O(\tau^2) + O(\tau h^2) + O(h^4) \sim O(h^2)$.

Для схемы с опережением этот порядок ниже: $\delta_1 = O(\tau) + O(h^2) \sim O(h)$.

Наши теоретические выводы подтверждаются численными экспериментами. Расчеты проводились на модельной задаче

$$u_t(t,x) = u_{xx}(t,x) + (1-\pi^2)e^t \sin \pi x, \quad 0 < t < 1, \ 0 < x < 1,$$
$$u(0,x) = \sin \pi x, \quad 0 \leq x \leq 1,$$
$$u(t,0) = u(t,1) = 0, \quad 0 \leq t \leq 1$$

с известным точным решением $u(t,x) = e^t \sin \pi x$.

Для случая $\tau \sim h$ приводим таблицу зависимости максимальной погрешности приближенных вычислений $\max\limits_{1\leq k\leq M-1}\max\limits_{1\leq n\leq N-1}\left|u_n^k - u(t_k, x_n)\right|$ от параметра θ:

N	10	20	30	40	50	60
M	10	20	30	40	50	60
$\theta = 1$	$1{,}01 \cdot 10^{-1}$	$5{,}61 \cdot 10^{-2}$	$3{,}86 \cdot 10^{-2}$	$2{,}94 \cdot 10^{-2}$	$2{,}37 \cdot 10^{-2}$	$1{,}99 \cdot 10^{-2}$
$\theta = 0{,}5$	$1{,}71 \cdot 10^{-2}$	$4{,}28 \cdot 10^{-3}$	$1{,}9 \cdot 10^{-3}$	$1{,}07 \cdot 10^{-3}$	$6{,}82 \cdot 10^{-4}$	$4{,}71 \cdot 10^{-4}$
$\theta = \theta^*$	$3{,}27 \cdot 10^{-3}$	$8{,}02 \cdot 10^{-4}$	$3{,}57 \cdot 10^{-4}$	$1{,}98 \cdot 10^{-4}$	$1{,}29 \cdot 10^{-4}$	$9{,}79 \cdot 10^{-5}$

N	70	80	90	100	110
M	70	80	90	100	110
$\theta = 1$	$1{,}71 \cdot 10^{-2}$	$1.51 \cdot 10^{-2}$	$1{,}32 \cdot 10^{-2}$	$1{,}21 \cdot 10^{-2}$	$1{,}07 \cdot 10^{-2}$
$\theta = 0{,}5$	$3{,}35 \cdot 10^{-4}$	$2{,}85 \cdot 10^{-4}$	$1{,}63 \cdot 10^{-4}$	$1{,}67 \cdot 10^{-4}$	$9{,}96 \cdot 10^{-5}$
$\theta = \theta^*$	$7{,}31 \cdot 10^{-5}$	$4{,}24 \cdot 10^{-5}$	$1.07 \cdot 10^{-5}$	$4{,}57 \cdot 10^{-5}$	$7{,}84 \cdot 10^{-5}$

Как видно из этой таблицы, при $\tau \sim h$ и небольших N, M максимальная погрешность схемы повышенной точности примерно в 10 раз меньше погрешности схемы Кранка-Николсона. Грань между этими схемами стирается ($\delta_2 \sim \delta_3 \sim O(h^2)$) только в идеальном случае - при бесконечном измельчении области изменения аргументов, т.е. при бесконечно больших N и M. Это явление начинает наблюдаться уже при значениях N=M=110. На практике же из-за ограниченности памяти ЭВМ ограничиваются небольшими значениями N и M. В таких случаях явно предпочтительнее схема повышенной точности, поскольку $\frac{O(\tau h^2)+O(h^4)}{O(h^2)} = O(\tau) + O(h^2) = O(h)$.

2) Рассмотрим теперь случай $\tau \sim h^2$. При $\tau \sim h^2 \to 0$ схема повышенной точности достигает своего максимального порядка аппросимации $\delta_3 = O(\tau^2) + O(\tau h^2) + O(h^4) \sim O(h^4)$.

Схема с опережением и схема Кранка-Николсона в данном случае имеют одинаковые порядки аппроксимации $\delta_1 = O(\tau) + O(h^2) \sim O(h^2)$, $\delta_2 = O(\tau^2) + O(h^2) \sim O(h^2)$.

Таблица зависимости $\max\limits_{1\le k\le M-1}\max\limits_{1\le n\le N-1}\left|u_n^k - u(t_k, x_n)\right|$ от параметра θ в случае $\tau \sim h^2$ имеет следующий вид:

N	5	6	10	12	13	15
M	25	36	100	144	169	225
$\theta = 1$	$3{,}06\cdot 10^{-2}$	$2{,}2\cdot 10^{-2}$	$7{,}18\cdot 10^{-3}$	$5{,}53\cdot 10^{-3}$	$4{,}68\cdot 10^{-3}$	$3{,}51\cdot 10^{-3}$
$\theta = 0{,}5$	$7{,}8\cdot 10^{-2}$	$5{,}67\cdot 10^{-2}$	$2{,}03\cdot 10^{-2}$	$1{,}41\cdot 10^{-2}$	$1{,}19\cdot 10^{-2}$	$8{,}97\cdot 10^{-3}$
$\theta = \theta^*$	$1{,}79\cdot 10^{-3}$	$9{,}02\cdot 10^{-4}$	$1{,}15\cdot 10^{-4}$	$5{,}6\cdot 10^{-5}$	$3{,}79\cdot 10^{-5}$	$2{,}38\cdot 10^{-5}$

N	16	17	18	19	20	22
M	256	289	324	361	400	484
$\theta = 1$	$3{,}11\cdot 10^{-3}$	$2{,}74\cdot 10^{-3}$	$2{,}45\cdot 10^{-3}$	$2{,}37\cdot 10^{-3}$	$1{,}97\cdot 10^{-3}$	$1{,}64\cdot 10^{-3}$
$\theta = 0{,}5$	$7{,}93\cdot 10^{-3}$	$6{,}99\cdot 10^{-3}$	$6{,}26\cdot 10^{-3}$	$5{,}61\cdot 10^{-3}$	$5{,}06\cdot 10^{-3}$	$4{,}19\cdot 10^{-3}$
$\theta = \theta^*$	$1{,}19\cdot 10^{-5}$	$1\cdot 10^{-5}$	$9{,}53\cdot 10^{-6}$	$8{,}34\cdot 10^{-6}$	$2{,}86\cdot 10^{-6}$	$1{,}66\cdot 10^{-6}$

3) Рассмотрим случай, когда шаг по времени остается фиксированным, а шаг по пространственной переменной стремится к нулю: $\tau = \tau_0$, $h \to 0$.

Нетрудно заметить, что $\delta_1 = O(\tau_0)$, $\delta_2 = O(\tau_0^2)$, $\delta_3 = O(\tau_0^2)$.

Результаты расчетов при фиксированном M:

N	50	100	150	200	250	400
M	20	20	20	20	20	20
$\theta = 1$	$6{,}02\cdot 10^{-2}$	$6{,}09\cdot 10^{-2}$	$6{,}08\cdot 10^{-2}$	$6{,}03\cdot 10^{-2}$	$5{,}99\cdot 10^{-2}$	$6{,}2\cdot 10^{-2}$
$\theta = 0{,}5$	$2{,}64\cdot 10^{-5}$	$6{,}71\cdot 10^{-4}$	$4{,}95\cdot 10^{-4}$	$8{,}24\cdot 10^{-4}$	$7{,}77\cdot 10^{-4}$	$1{,}65\cdot 10^{-3}$
$\theta = \theta^*$	$7{,}87\cdot 10^{-4}$	$8{,}85\cdot 10^{-4}$	$5{,}87\cdot 10^{-4}$	$9{,}02\cdot 10^{-4}$	$8{,}34\cdot 10^{-4}$	$1{,}67\cdot 10^{-3}$

Как показывают расчеты, при фиксированном шаге по времени дальнейшее измельчение шага h не приводит к существенному уменьшению погрешности.

Это объясняется тем, что при $\tau = \tau_0$, $h \to 0$ начинает нарушаться условие диагонального преобладания. Такая вычислительная процедура, следовательно, не оптимальна, к тому же $\theta^* = 0{,}5 - \frac{h^2}{12\tau a^2} \to 0{,}5$ и $\bar{f}(t_k, x_n) + \frac{h^2}{12} L\bar{f}(t_k, x_n) \to \bar{f}(t_k, x_n)$, т.е. схема повышенной точности приобретает черты схемы Кранка-Николсона.

4) Пусть теперь фиксирован шаг по пространственной переменной, а шаг по времени стремится к нулю: $h = h_0$, $\tau \to 0$.

Тогда $\delta_1 = O(h_0^2)$, $\delta_2 = O(h_0^2)$, $\delta_3 = O(h_0^4)$.

Таблица зависимости максимальной погрешности от параметра θ для этого случая:

N	20	20	20	20
M	50	100	150	200
$\theta = 1$	$1{,}95\cdot 10^{-2}$	$7{,}25\cdot 10^{-3}$	$3{,}13\cdot 10^{-3}$	$1{,}10\cdot 10^{-3}$
$\theta = 0{,}5$	$4{,}95\cdot 10^{-3}$	$5{,}04\cdot 10^{-3}$	$5{,}06\cdot 10^{-3}$	$5{,}07\cdot 10^{-3}$
$\theta = \theta^*$	$1{,}31\cdot 10^{-4}$	$4{,}05\cdot 10^{-5}$	$1{,}69\cdot 10^{-5}$	$1{,}40\cdot 10^{-5}$

Отсюда видно, что в случае $h = h_0$, $\tau \to 0$ происходит заметное ускорение уменьшения погрешности, чем в случае $\tau = \tau_0$, $h \to 0$.

На основе теоретических положений и проведенных численных экспериментов делаем следующие выводы:

- Схема повышенной точности имеет максимальный порядок аппроксимации $O(\tau^2) + O(h^4)$ только при $\tau \sim h^2$;
- При проведении расчетов независимо от вида применяемой схемы предпочтительнее измельчать шаг τ, измельчение же h к такому результату не приводит. Например, для достижения точности порядка 10^{-5} вместо N=100, M=100 эффективнее выбрать N=12 , M=144. Так, мы примерно в $\frac{10000}{12 \times 144} \approx 6$ раз экономим память ЭВМ и столько же раз сокращаем общее время расчетов.

Приводим текст программы расчетов:

```
CLS: a = 1: c = 3.14159: n = 10: m = 100: h = 1 / n:  tau = 1 / m
s = tau * a ^ 2:  teta2 = 1 / 2 - h ^ 2 / (12 * s)
DIM u(m + 1, n + 1), ut(m + 1, n + 1), w(m, n - 1), K(n), l(n)
DEF fnUU (t, x) = EXP(t) * SIN(c * x)
DEF fnF (t, x) = fnUU(t, x) * (1 + (a * c) ^ 2)
DEF fnFd (t, x) = -c ^ 2 * fnF(t, x)
PRINT "Выбирайте схему:": PRINT
PRINT "Явная схема                              - 1"
PRINT "Неявная схема с весом единица            - 2"
PRINT "Схема Кранка-Николсона                   - 3"
PRINT "Схема высокого порядка                   - 4"
PRINT "Неявная схема с произвольным весом   - 5": PRINT
INPUT "Введите номер выбранной Вами схемы"; vybor: PRINT
SELECT CASE vybor
      CASE 1
          teta = 0:
      CASE 2
          teta = 1:
      CASE 3
          teta = 1 / 2:
      CASE 4
          teta = teta2: ind = 4
      CASE 5
          PRINT "Для произвольной схемы выбирайте вес из интервала (0,1)"
          INPUT "teta= "; teta
END SELECT
IF teta > .5 - h ^ 2 / (4 * s) THEN 2
     PRINT "Устойчивости может не оказаться. Хотите продолжать расчеты?"
    INPUT "'Да' - 1, 'Нет' - 0"; q:  IF q = 0 THEN 3
2  A1 = -s * teta:   B1 = h ^ 2 - 2 * A1:   C1 = A1
   FOR i = 0 TO n:     u(0, i) = fnUU(0, i * h):  NEXT i
   FOR j = 1 TO m:    u(j, 0) = fnUU(j * tau, 0):    u(j, n) = fnUU(j * tau, 1): NEXT j
max = 0
FOR j = 0 TO m - 1
   K(0) = 0:    l(0) = u(j + 1, 0)
   FOR i = 1 TO n - 1
```

```
      t = j * tau:        x = i * h:        g = fnF(t + tau / 2, x)
      IF ind = 4 THEN g = g + h ^ 2 * fnFd(t + tau / 2, x) / 12
      w(j, i) = h ^ 2 * (u(j, i) + tau * g) + s * (1 - teta) * (u(j, i - 1) - 2 * u(j, i) + u(j, i + 1))
      d = A1 * K(i - 1) + B1:     K(i) = -C1 / d:      l(i) = (w(j, i) - A1 * l(i - 1)) / d
   NEXT i
   FOR i = n - 1 TO 1 STEP -1
      u(j + 1, i) = K(i) * u(j + 1, i + 1) + l(i):
      ut(j + 1, i) = fnUU((j + 1) * tau, i * h)
      pog = ABS(u(j + 1, i) - ut(j + 1, i)):
      IF max < pog THEN max = pog
      PRINT "u("; j + 1; ","; i; ")="; USING "##.############"; u(j + 1, i);
      PRINT " ut("; j + 1; ","; i; ")="; USING "##.############"; ut(j + 1, i)
   NEXT i
NEXT j
    PRINT "Максимальная абсолютная погрешность расчетов":  PRINT  max
3   END
```

ЛИТЕРАТУРА

1. Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы. –М.: Наука, 1973. –400с.
2. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. –М.: Наука, 1989. –608с.
3. Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. –М.: Мир, 1972. –420с.
4. Самарский А.А. Теория разностных схем. –М.: Наука, 1977. –656с.
5. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1972.