2.3. Уравнения параболического типа

Уравнение диффузии/теплопроводности.

Рассмотрим задачу о теплопроводности в довольно общей постановке:

$$\begin{cases} u_t = ku_{xx} + f(x,\, t), & 0 < t, \quad 0 < x < l, \\ \alpha_L\, u(0,\, t) - \beta_L\, u_x(0,\, t) = \mu_L(t), & |\alpha_L| + |\beta_L| > 0, \\ \alpha_R\, u(0,\, t) + \beta_R\, u_x(0,\, t) = \mu_R(t), & |\alpha_R| + |\beta_R| > 0, \\ u(x,\, 0) = \varphi(x). \end{cases} \tag{2.26}$$

Выпишем разностную схему, которая первой приходит в голову:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = k\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f\Big(x_j,\, t^{n+\frac{1}{2}}\Big). \tag{2.27}$$

Схема является явной, то есть позволяет пересчитать значения во внутренних узлах на $^{n+1}$ временном слое по явной формуле. Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени и второй по координате $O(\tau) + O(h^2)$. Схема является устойчивой при выполнении условия:

$$\tau \leq \frac{h^2}{2k}. \tag{2.28}$$

Данное условие является более жёстким по сравнению с условием Куранта для уравнений гиперболического типа ($\tau \leq h/a$). Пусть для повышения точности расчета требуется уменьшить шаг h в 10 раз, тогда для сохранения устойчивости временной шаг потребуется уменьшить в 100 раз, а значит придется выполнить в 100 раз больше временных шагов до достижения конечного времени.

При использовании явной схемы граничные условия учитываются после расчета значений во внутренних узлах. Поскольку схема имеет первый порядок, ограничимся формулами первого порядка для угловых точек:

$$\begin{aligned} \alpha_L\, u_0^{n+1} - \beta_L\, \frac{u_1^{n+1} - u_0^{n+1}}{h} &= \mu_L\big(t^{n+1}\big), \\ \alpha_R\, u_N^{n+1} + \beta_R\, \frac{u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1}}{h} &= \mu_R\big(t^{n+1}\big). \end{aligned} \tag{2.29}$$

Если в уравнении (2.26) для аппроксимации производной u_{xx} использовать значения узлов на новом временном слое, то получится неявная схема для уравнения теплопроводности:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = k\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f\Big(x_j,\, t^{n+\frac{1}{2}}\Big). \tag{2.30}$$

Схема является неявной, поскольку значения в узлах на новом временном слое не выражаются по явной формуле из значений u_j^n на предыдущем временном слое. Значения u_j^{n+1} связаны друг с другом посредством системы линейных уравнений с трёхдиагональной матрицей. Как известно, оптимальным способом решения СЛАУ с трёхдиагональной матрицей является метод прогонки.

Неявная схема для уравнения теплопроводности, как и предыдущая явная, имеет первый порядок аппроксимации по времени и второй по координате $O(\tau) + O(h^2)$. Важным преимуществом схемы является <u>абсолютная</u> устойчивость: схема является устойчивой при любом выборе шага интегрирования τ.

Если скрестить явную и неявную схемы с весовыми коэффициентами σ и $1 - \sigma$, то мы получим схему Кранка–Николсон:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = (1-\sigma)\frac{u_{j+1}^{n} - 2u_j^{n} + u_{j-1}^{n}}{h^2} + \sigma\,\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f\Big(x_j,\, t^{n+\frac{1}{2}}\Big), \tag{2.31}$$

параметр $\sigma \in [0,\, 1]$. При $\sigma = 0$ получаем явную схему, при $\sigma = 1$ полностью неявную. При использовании симметричной схемы с $\sigma = \frac{1}{2}$ разностная схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и координате $O(\tau^2) + O(h^2)$. Схема абсолютно устойчива при преобладании неявной части $\sigma \geq \frac{1}{2}$.

Добавим к неявной схеме граничные условия со вторым порядком аппроксимации:

$$\begin{aligned} \alpha_L\, u_0^{n+1} - \beta_L\, \frac{3u_2^{n+1} - 4u_1^{n+1} + u_0^{n+1}}{2h} &= \mu_L\big(t^{n+1}\big), \\ \alpha_R\, u_N^{n+1} + \beta_R\, \frac{3u_N^{n+1} - 4u_{N-1}^{n+1} + u_{N-2}^{n+1}}{h} &= \mu_R\big(t^{n+1}\big). \end{aligned} \tag{2.32}$$

Угловые точки также включаются в СЛАУ. При использовании граничных условий высокого порядка, построенных по трём точкам, матрица СЛАУ теряет трехдиагональный вид, поскольку в этом случае первая и последняя строка матрицы содержат по 3 значения вместо двух. Перед выполнением прогонки предлагаю исключить лишние коэффициенты из матрицы методом Гаусса. Так называемые эквивалентные преобразования расширенной матрицы (не забудьте поправить правую часть). Проще это делать непосредственно в коде в общем виде, а не выписывать формулы на бумаге.

Лабораторная работа.

Найти приближенное решение смешанной краевой задачи для неоднородного уравнения теплопроводности на отрезке $0 \le x \le 1$. Для расчета решения использовать симметричную схему (схема Кранка—Николсон). Предусмотреть возможность произвольного задания шага по координате x (шаг h) и времени t (шаг τ). По умолчанию расчет проводится до момента времени $T = 1$. Для получения решения использовать граничные условия первого и второго порядка точности. Для сравнения приведено точное решение $u_0(x,t)$. Проверить порядок аппроксимации схемы.

Уравнение Шрёдингера.

Уравнение Шрёдингера также параболического типа. Оно отличается от уравнения теплопроводности только чисто мнимым «коэффициентом теплопроводности».

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x). \tag{2.33}$$

Явная конечно-разностная схема для эволюционного уравнения Шрёдингра является неустойчивой при любых условиях. Неявная схема Кранка–Николсон абсолютно устойчива при использовании весового коэффициента $\sigma \ge \frac{1}{2}$.

$$\begin{aligned}\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} &= i(1-\sigma)\left(\frac{\hbar}{2m}\frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{h^2} - \frac{V(x_j)}{\hbar}\psi_j^n\right) + \\ &+ i\sigma\left(\frac{\hbar}{2m}\frac{\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}}{h^2} - \frac{V(x_j)}{\hbar}\psi_j^{n+1}\right), \qquad \sigma \ge \frac{1}{2}.\end{aligned} \tag{2.34}$$

Схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и координате $O(\tau^2) + O(h^2)$.

Дополнительные задачи.

2.38. Два стержня с одинаковыми параметрами (плотность, теплоемкость, сечения и т. д.) совмещают друг с другом, а между ними вставляют теплоизоляцию (сосредоточенная теплоемкость C). Правый конец теплоизолируют, а левый конец нагревают постоянным тепловым потоком q. Рассчитать температуру в стержнях.

2.39. Решить задачу диффузии на бесконечной прямой.

$$\begin{cases} u_t = a^2 u_{xx}, \quad 0 < t, \quad x \in \mathbb{R}, \\ u(x,\,0) = u_1 + (u_2 - u_1)\,\eta(x), \end{cases} \qquad \eta(x) \text{ — функция Хевисайда.}$$

Точное решение задачи:

$$u_0(x,\,t) = \frac{u_1 + u_2}{2} + \frac{u_2 - u_1}{2}\,\mathrm{erf}\left(\frac{x}{a\sqrt{t}}\right).$$

Указание. Для численного моделирования следует использовать нерегулярную одномерную сетку. Узлы сетки в интересующем интервале $|x| < l$ следует распределить равномерно, а при значениях $|x| > l$ экспоненциально. Для генерации сетки подойдет отображение $x_j = l \cdot \sinh s_j$, где s_j — равномерная сетка на отрезке $|s| \le S$. Значения $|s| < 1$ почти равномерно отображаются в окрестность $(-l,\,l)$, значения $|s| > 1$ распределены экспоненциально.

В угловых точках сетки следует использовать граничные условия $u_x(\pm\infty,\,t) = 0$.

Аппроксимация производных на неструктрированных одномерных сетках:

$$f'_j \approx \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{h_{j+\frac{1}{2}} + h_{j-\frac{1}{2}}}, \qquad f''_j \approx 2\,\frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{h^2_{j+\frac{1}{2}} + h^2_{j-\frac{1}{2}}}, \tag{2.35}$$

где f_j — значения функции в узлах, $h_{j+\frac{1}{2}} = x_{j+1} - x_j$ — длина отрезка.

2.40. Смоделировать функцию Грина для уравнения теплопроводности на полупрямой с граничным условием первого рода на левой границе.

$$\begin{cases} G_t = a^2 G_{xx}, \qquad 0 < t, \quad 0 < x, \\ G(0,\,t) = 0, \quad \lim\limits_{x\to\infty} G_x(x,\,t) = 0, \\ G(x,\,0) = \delta(x - \tilde{x}). \end{cases} \tag{2.36}$$

Использовать равномерную сетку на интервале $[0,\,2\tilde{x}]$ и неравномерную для значений $x > \tilde{x}$ с экспоненциальным распределением узлов. Вариант отображения для генерации узлов сетки: $x_j = \tilde{x}\left(1 + \dfrac{\sinh s_j}{\sinh 1}\right)$, где s_j — равномерная сетка в интервале $[-1,\,S]$ (смотри указания к задаче 2.39). Искомая функция Грина:

$$G(x,\,t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}}\,\exp\left(-\frac{(x-\tilde{x})^2}{4a^2 t}\right) - \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}}\,\exp\left(-\frac{(x+\tilde{x})^2}{4a^2 t}\right).$$

2.41. Смоделировать функцию Грина для уравнения теплопроводности на полупрямой с граничным условием второго рода на левой границе.

$$\begin{cases} G_t = a^2 G_{xx}, \qquad 0 < t, \quad 0 < x, \\ G_x(0,\,t) = 0, \quad \lim\limits_{x\to\infty} G_x(x,\,t) = 0, \\ G(x,\,0) = \delta(x - \tilde{x}). \end{cases} \tag{2.37}$$