МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра компьютерного моделирования

КУРСОВАЯ РАБОТА

# Сравнительный анализ методов численного решения уравнения теплопроводности на примере двухтемпературной модели взаимодействия лазерного излучения с металлами

Ананевича Ивана Романовича
студента 3 курса, специальность
«компьютерная физика»
Научный руководитель:
Козловский Александр Николаевич

Минск, 2020

# СОДЕРЖАНИЕ

# ВВЕДЕНИЕ

Уравнение с частными производными представляют собой уравнения, включающие скорости изменения относительно непрерывных переменных. Типичные примера линейных уравнений в частных производных включают уравнение теплопроводности, волновое уравнение, уравнение Лапласа, уравнение Гельмгольца, уравнение Пуассона и уравнение Клейна-Гордона.

Линейные дифференциальные уравнения в частных производных второго порядка могут быть классифицированы как параболический, гиперболический и эллиптический типы. Параболическое уравнение используется для описания широкого спектра нестационарных явлений, в том числе теплопроводности, диффузии частиц и ценообразования инвестиционных инструментов.

Уравнение теплопроводности описывает распределение тепла (или изменение температуры) в заданном регионе в течение времени. Оно имеет фундаментальное значение в различных областях науки. В математике это прототипическое параболическое уравнение. В теории вероятностей уравнение теплопроводности связано с изучением броуновского движения через уравнение Фоккера-Планка. В финансовой математике оно используется для решения дифференциального уравнения в частных производных Блэка-Шоулза. В физике с помощью уравнения теплопроводности можно рассмотреть взаимодействие лазера с металлами, процессы нагревания, плавления и кристаллизации различных веществ.

В данной курсовой работе внимание будет уделено численному решению уравнения теплопроводности различными методами на примере двухтемпературной модели взаимодействия лазерного излучения с металлами.

Цели курсовой работы:

1. Обзор литературы по данной теме.
2. Изучить взаимодействие лазерного излучения с металлами на примере двухтемпературной модели.
3. Смоделировать решение одномерного уравнения теплопроводности различными разностными схемами: явная двухслойная схема, неявная

двухслойная схема, схема Кранка-Николсон, схема Дюфорта и Франкеля, схема Ричардсона.

4. Провести сравнительный анализ данных методов.

# ГЛАВА 1. КОНЕЧНОРАЗНОСТНЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Будем рассматривать построение, терминологию и характерные черты метода конечных разностей для уравнения в частных производных на примере однородного уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad x \epsilon [0, l], \qquad t \epsilon [0, T] \tag{1.1}$$

сопровождаемого начальным по временной переменной $t$

$$u(x, 0) = \varphi(x), \qquad \text{при} \quad x \epsilon [0, l] \tag{1.2}$$

и краевыми по пространственной переменной $x$

$$u(0, t) = \alpha(t), \qquad u(l, t) = \beta(t), \qquad \text{при} \quad t \epsilon [0, T] \tag{1.3}$$

условиями.

Как видим, область Ω, на которой определена задача, представляет собой прямоугольник $(0, l) \times (0, T)$ в системе координат $Oxt$, а ее граница $\Gamma$ состоит из отрезков прямых $x = 0,\ x = l,\ t = 0$ . Разобьем этот прямоугольник на прямоугольные части прямыми $x = x_i$ и $t = t_k$, так как показано на рисунке 1.1, где:

$$x_i = ih,\ \ h = \frac{l}{n},\ \ i = 0, 1, \dots, n \tag{1.4}$$

$$t_k = k\tau,\ \ \tau = \frac{T}{m},\ \ k = 0, 1, \dots, m \tag{1.5}$$

Точки $(x_i, t_k) \,\epsilon\, \Omega$ , лежащие на пересечении этих прямых, называют узлами сетки. Числа $h$ и $\tau$, фигурирующие в $(1.4), (1.5)$, называют шагами сетки по переменным $x$ и $t$ соответственно. Узлы, лежащие на одной прямой $t = t_k$ при фиксированном $k = 0, 1, \dots, m$, называют слоем.

Конечноразностный метод решения уравнений в частных производных основывается на простой идее построения приближенных сеточных решений: спроектировать данное уравнение на сетку, заменяя входящие в него непрерывные функции сеточными функциями, а частные производные – их простейшими разностными аппроксимациями.

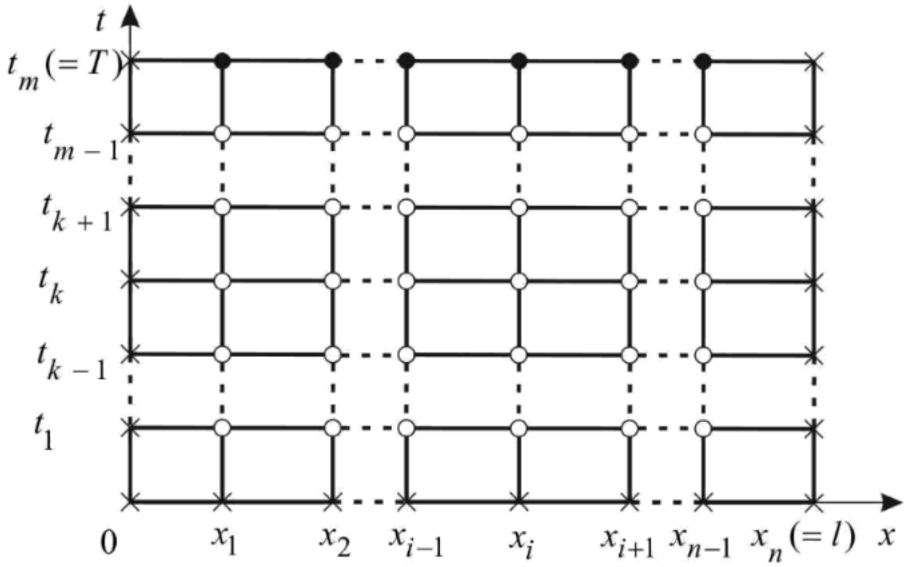


Рис. 1.1. Сетка $\Omega_h^\tau$ для конечноразностного метода решения задач $(1.1)-(1.3)$

Здесь частные производные рассматриваются в фиксированной точке, к ним можно применить формулы численного дифференцирования функций одной переменной. А именно, для производной $u_{xx}$ наиболее естественно употребить симметричную формулу [4], согласно которой

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{u(x_{i-1},t_k)-2u(x_i,t_k)+u(x_{i+1},t_k)}{h^2}+O(h^2) \qquad (1.6)$$

Для приближения замены $u_t$ используем простейшие формулы правой, левой и симметричной аппроксимации первой производной, согласно которым

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{u(x_i,t_{k+1})-u(x_i,t_k)}{\tau}+O(\tau) \qquad (1.7)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{u(x_i,t_k)-u(x_i,t_{k-1})}{\tau}+O(\tau) \qquad (1.8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{u(x_i,t_{k+1})-u(x_i,t_{k-1})}{2\tau}+O(\tau^2) \qquad (1.9)$$

Будем предполагать, что мы находимся в условиях, когда решение $u(x,t)$ данной задачи существует, единственно и обладает достаточной гладкостью. Также будем считать, что

$$u_i^k \approx u(x_i,t_k) \qquad (1.10)$$

## 1.1 Явная двухслойная схема

Подставив в уравнение (1.1) аппроксимации $u_{xx}$ по формуле (1.6) и $u_t$ по формуле (1.7) , отбросив погрешности аппроксимаций и учтя при этом обозначение (1.10), получим

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} = a^2 \frac{u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k}{h^2} \tag{1.11}$$

Будем считать, что расчетный узел $(x_i, t_k)$ смещается по сетке $\Omega_h^\tau$, то есть полагаем в уравнении (1.11), что $i = 1, 2, \dots, n-1,\ k = 0, 1, \dots, m-1$.

Сеточные уравнения, которые получаются в результате аппроксимации производных в данном уравнении математической физики разностными отношениями, в совокупности с уравнениями, аппроксимирующими на той же сетке начальные и граничные условия называются разностными схемами. Конфигурации узлов, в которых связаны одним уравнением разностной схемы значения неизвестной функции, называют шаблоном разностной схемы.

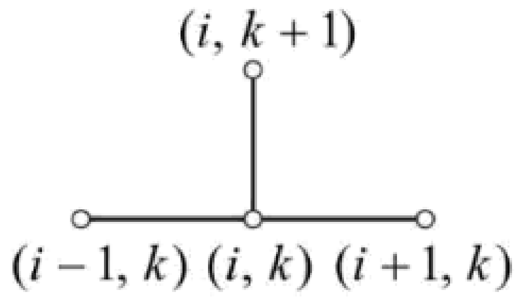


Рис. 1.2. Явный двухслойный шаблон

для параболического уравнения

Введем постоянную, как это сделано в [4], которая носит название число Куранта

$$\gamma = a^2 \frac{\tau}{h^2} \tag{1.12}$$

и перепишем разностную схему (1.11) соответственно следующим образом

$$u_i^{k+1} = \gamma u_{i-1}^k + (1 - 2\gamma) u_i^k + \gamma u_{i+1}^k \tag{1.13}$$

$$(\text{где } i = 1, 2, \dots, n-1; k = 0, 1, \dots, m-1)$$

Эта запись позволяет, как можно осуществить процесс заполнения $(n-1) \times m$-таблицы значениями $u_i^k$, определяемые представленной схемой.

Учитывая, что на нулевом слое значения

$$u_i^0 = \varphi_i, \qquad i = 0, 1, \dots, n \tag{1.14}$$

известны при любом $i$, формула (1.13) позволяет непосредственно вычислить все приближенные значения $u_i^1$ первого слоя. Эти вычисления можно производить или последовательно, одно за другим, полагая $i = 1, 2, \dots, n-1$, или параллельно, все сразу, при этих же значениях $i$ (что говорит о естественной возможности оптимального использования здесь ресурсов компьютера с параллельной обработкой информации).

$$u_0^k = \alpha^k, \qquad u_n^k = \beta^k, \qquad k = 0, 1, \dots, m \tag{1.15}$$

Привлекая найденные значения первого слоя, найдем значения второго слоя, при этом для вычисления $u_1^2$ и $u_{n-1}^2$ потребуется подставить в формулу граничные условия $u_0^1 = \alpha^1$ и $u_n^1 = \beta^1$ соответственно (см. (1.15)).

## 1.2 Неявная двухслойная схема

Аналогично пункту 1.1 подставим в формулу (1.1) формулы (1.6) и (1.8), учтем при этом обозначение (1.10) и получим

$$\frac{u_i^k - u_i^{k-1}}{\tau} = a^2 \frac{u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k}{h^2} \tag{1.16}$$

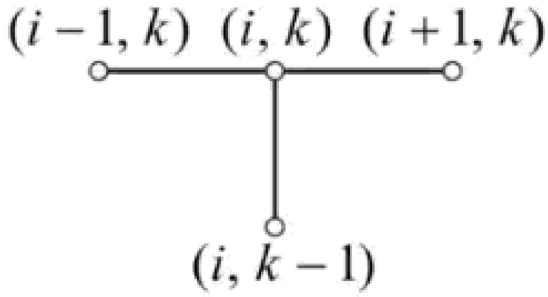


Рис. 1.3. Неявный двухслойный шаблон
для параболического уравнения

Учтем (1.12) и перепишем разностную схему (1.16) следующим образом

$$-u_i^{k-1} = \gamma u_{i-1}^k - (1 + 2\gamma)u_i^k + \gamma u_{i+1}^k, \;\; i = 1, 2, \dots, n-1; k = 1, 2, \dots, m \tag{1.17}$$

В равенстве (1.17) при $k = 1$ и любом $i \epsilon [1, n-1]$ известна только левая часть (благодаря начальным данным (1.14)). Следовательно, для нахождения значений $u_i^1$ в узлах первого слоя нужно решить систему линейных алгебраических уравнений

$$-\varphi_i = \gamma u_{i-1}^k - (1+2\gamma)u_i^k + \gamma u_{i+1}^k \quad (1.18)$$

где $i = 1, 2, \dots, n-1$ ; $u_0^1 = \alpha^1$, $u_n^1 = \beta^1$ . Матрица этой системы имеет трехдиагональную структуру с диагональным преобладанием $(1 + 2\gamma > \gamma + \gamma)$, а это означает, что система может быть решена методом прогонки [4] (см. Приложение А). Значения искомой функции $u$ в узлах второго слоя получаются как решение системы

$$-u_i^1 = \gamma u_{i-1}^2 - (1+2\gamma)u_i^2 + \gamma u_{i+1}^2 \quad (1.19)$$

где $i = 1, 2, \dots, n-1$ ; $u_0^2 = \alpha^2$, $u_n^2 = \beta^2$ и так далее. Всего для заполнения таблицы потребуется решить $m$ однотипных систем линейных алгебраических уравнений.

Схемы, рассмотренные в пунктах 1.1 и 1.2, связывают значения искомой функции на двух соседних слоях, откуда их название – двухслойные схемы.

## 1.3 Схема Ричардсона

Подставив (1.6) и (1.9) в (1.1) и учтя обозначение (1.10), получим

$$\frac{u_i^k - u_i^{k-1}}{2\tau} = a^2 \frac{u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k}{h^2} \quad (1.20)$$


Рис. 1.4. Явный трехслойный шаблон для параболического уравнения

Используя число Куранта из формулы (1.12) , (1.20) перепишем в следующем виде

$$u_i^{k+1} = u_i^{k-1} + 2\gamma u_{i-1}^k - 4\gamma u_i^k + 2\gamma u_{i+1}^k \quad (1.21)$$

(где $i = 1, 2, \ldots, n-1; k = 1, 2, \ldots, m-1$)

Данная схема считается явной трехслойной схемой (так как для заполнения сетки конечноразностного метода необходимо использовать сразу три слоя). Правда, поскольку начать процесс вычислений по этой схеме можно только положив $k = 1$, то есть с формулы

$$u_i^2 = 2\gamma u_{i-1}^1 - 4\gamma u_i^1 + 2\gamma u_{i+1}^1 - \varphi_i \quad (1.22)$$

где значения $u_i^1$ $(i = 1, 2, \ldots, n-1)$ еще не подсчитаны, нужна дополнительная связь между неизвестными и известными величинами. Найти значения $u_i^1$ можно используя формулу (1.13) из пункта 1.1, как это показано в [4].

После этого становятся возможным счет по формуле (1.22) и все последующие вычисления по общей формуле (1.21) при $k = 2, 3, \ldots, m-1$.

## 1.4 Обобщенная схема Кранка-Николсон

Возьмем за основу следующего построения явную и неявную разностные схемы (из пункта 1.1 и 1.2 соответственно) для уравнения (1.1) в исходной форме (1.7) и (1.8). Перепишем равенство (1.8) в виде

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} = a^2 \frac{u_{i-1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i+1}^{k+1}}{h^2} \quad (1.23)$$

(то есть увеличим в нем на единицу верхний индекс) и сравним результат с (1.7). Можно увидеть, что в левых частях (1.11) и (1.23) стоит одна и та же аппроксимация $u_t$. Дроби в правых частях этих уравнений представляют собой аппроксимации второй производной $u_{xx}$ одного типа, но на разных слоях: на слое $k$ в уравнении (1.11) и на $k + 1$ в уравнении (1.23).

Приходим к равенству

$$\frac{u_i^{k+1}-u_i^k}{\tau}=\frac{a^2}{h^2}\left[\sigma\left(u_{i-1}^k-2u_i^k+u_{i+1}^k\right)+(1-\sigma)(u_{i-1}^{k+1}-2u_i^{k+1}+u_{i+1}^{k+1})\right] \quad (1.24)$$

где $\sigma\epsilon[0,1]$ – вещественный параметр (вес), $i=1,2,\dots,n-1; k=0,1,\dots,m-1.$

Разностная схема (1.24) обобщает схемы (1.7) и (1.23). При $\sigma=1$ – это явная схема (1.7), при $\sigma=0$ – неявная схема (1.23). Если $0<\sigma<1$, то равенство (1.24) связывает шесть точек двух слоев, то есть отвечает шаблону изображенном на рисунке 1.5. [4]

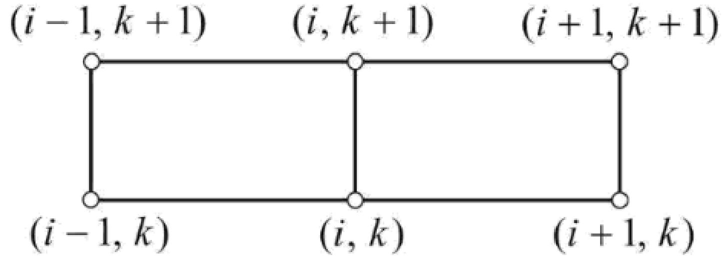


Рис. 1.5. Двухслойный шеститочечный шаблон для разностной схемы (1.24)

Важным случаем семейства формул (1.24) является случай $\sigma=0{,}5$. При этом значении $\sigma$ с учетом (1.12) из (1.24) имеем равенство

$$u_i^{k+1}-u_i^k=\frac{\gamma}{2}\left(u_{i-1}^k-2u_i^k+u_{i+1}^k\right)+\frac{\gamma}{2}(u_{i-1}^{k+1}-2u_i^{k+1}+u_{i+1}^{k+1}) \quad (1.25)$$

которому далее придаем типичный вид трехточечного разностного уравнения второго порядка относительно неизвестных значений на $(k+1)$ -м слое:

$$\gamma u_{i-1}^{k+1}-(2+2\gamma)u_i^{k+1}+\gamma u_{i+1}^{k+1}=G_i^k \quad (1.26)$$

где

$$G_i^k=-\gamma u_{i-1}^k-(2-2\gamma)u_i^k-\gamma u_{i+1}^k \quad (1.27)$$

Система линейных алгебраических уравнение (1.26) решается методом прогонки (см. Приложение А).

## 1.5 Схема Дюфорта и Франкеля

Данная схема очень схожа со схемой Ричардсона, основное отличие – отсутствие центрального узла. Схема Дюфорта и Франкеля является явной четырехточечной трехслойной схемой (см. формулу (1.28) ). Шаблон этой схемы изображен на рисунке 1.6.

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^{k-1}}{2\tau} = a^2 \frac{u_{i+1}^k - u_i^{k+1} - u_i^{k-1} + u_{i-1}^k}{h^2} \tag{1.28}$$

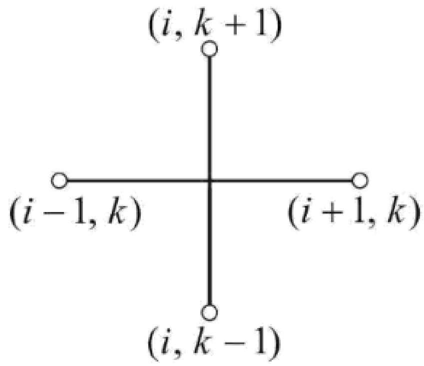


Рис. 1.6. Трехслойный четырехточечный шаблон

для разностной схемы (1.28)

Значения функции на втором слое по времени рассчитываются по формуле (1.13) из пункта 1.1. [4]

# ГЛАВА 2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С МЕТАЛЛАМИ

Рассмотрим взаимодействие лазерного излучения с металлами, в результате которого происходит нагревание металла. Для определения температуры, необходимо решить задачу теплопроводности для электронов и решетки, рассматриваемых как отдельные подсистемы со своими температурами, и учесть теплообмен между ними, описываемый соотношением

$$\Delta E = \alpha(T_i - T_e) \tag{2.1}$$

где $\Delta E -$ энергия теряемая электронами в единице объема за единицу времени, $\alpha -$ коэффициент теплообмена электронов с решеткой ($\alpha = 5 \cdot 10^{17}$ эрг $\cdot$ см$^{-3} \cdot$ сек$^{-1} \cdot$ град$^{-1}$), $T_i,\ T_e -$ температуры решетки и электронов.

Предельно упростим геометрические условия и будем считать, что поток света плотностью $q(t)$ равномерно распределен по поверхности $x = 0$ металла. Также будем считать, что поглощение света происходит в бесконечно тонком слое вблизи поверхности металла.

До времени порядка $\tau'(T_{\text{н}}) = \frac{c_e(T_{\text{н}})}{\alpha} \sim 10^{-12}$ сек ($T_{\text{н}} -$ начальная температура металла, $c -$ теплоемкость ) теплообмен с решеткой никак не сказывается на температуре электронов. В течение этого времени температура электронов быстро растет. Поскольку решетка при этом остается холодной вплоть до времени порядка $\tau = \frac{c_i}{\alpha}$ , то рост температуры электронов продолжается до тех пор, пока поток энергии к ионам $\alpha(T_i - T_e) \approx \alpha T_e$ не сравняется с поглощенным световым потоком. В дальнейшем электроны будут передавать решетке практически всю поглощаемую энергию. Выравнивание электронной и решеточной температур происходит за время превышающее $\tau$, после чего металл характеризуется одной температурой $T$.

Из (2.1), как показано в [1], можно получить систему уравнений

$$\begin{cases} \chi_e \dfrac{\partial^2 T_e}{\partial x^2} = \alpha(T_i - T_e) \\ c_i \dfrac{\partial T_i}{\partial t} = \alpha(T_i - T_e) \end{cases} \tag{2.2}$$

Искомое решение должно удовлетворять следующим начальному и граничным условиям:

$$\begin{cases} -\chi_e \dfrac{\partial T_e}{\partial x}(0, t) = q(t) \\ T_{e,i}(\infty, t) = T_{e,i}(x, 0) = 0 \end{cases} \tag{2.3}$$

# ГЛАВА 3. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Рассмотрим решение уравнения теплопроводности различными методами, которые были рассмотрены в главе 1. При выборе конечноразностного метода, важно принимать в расчет устойчивость данных методов и условия сходимости их решений. [3]

В результате были получены графики, при различных значениях времени выполнения программы: $t_1 = 0$ сек , $t_2 = 0{,}001$ сек , $t_3 = 0{,}005$ сек , $t_4 = 0{,}01$ сек, $t_5 = 0{,}03$ сек, $t_6 = 0{,}05$ сек, $t_7 = 0{,}07$ сек, $t_8 = 0{,}1$ сек, $t_9 = 0{,}5$ сек.

Решение явной схемой (1.13) представлено на рис. 3.1 – 3.2. Как видно из графиков, данная схема устойчива при $\gamma = 0{,}5$ , а при $\gamma = 1$ решение расходится. Порядок аппроксимации: $O(\tau + h^2)$.

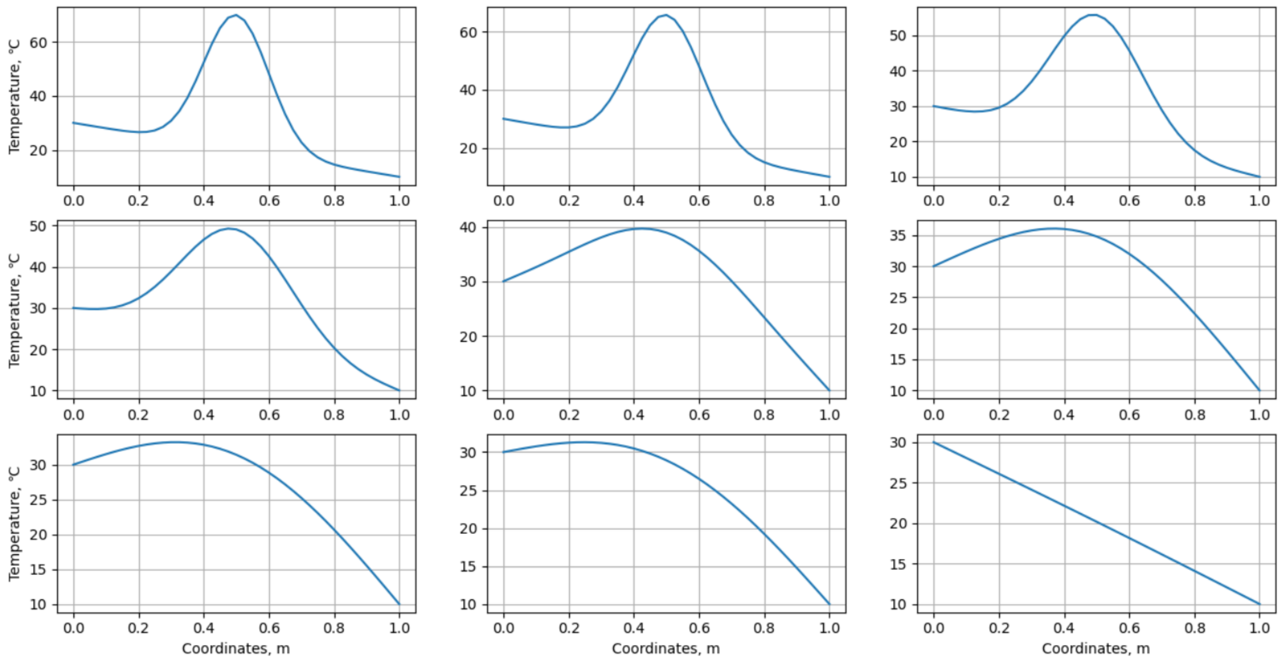


Рис. 3.1. Зависимость температуры (°C) от координаты (м)

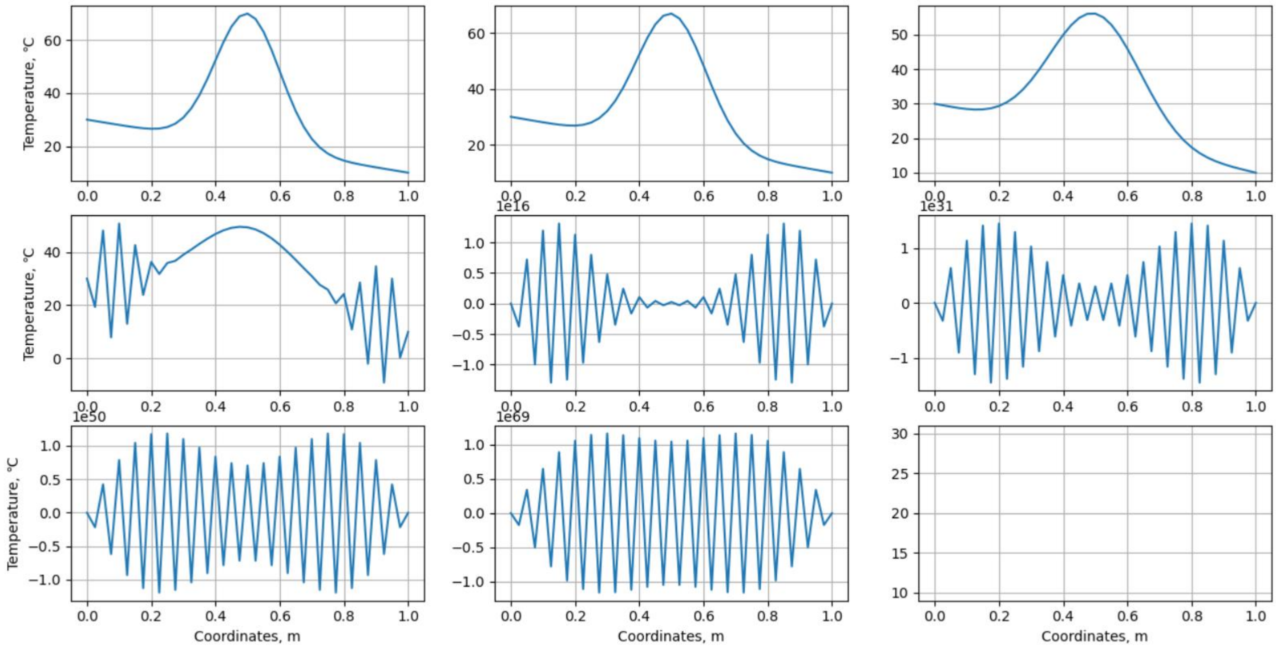


Рис. 3.2. Зависимость температуры (℃) от координаты (м)

Решение уравнения теплопроводности неявной схемой (1.17) представлено на рис. 3.3. Данная схема устойчива при любых значениях $\gamma$, что делает ее более удобной для использования по сравнению с явной схемой. Порядок аппроксимации: $O(\tau + h^2)$.

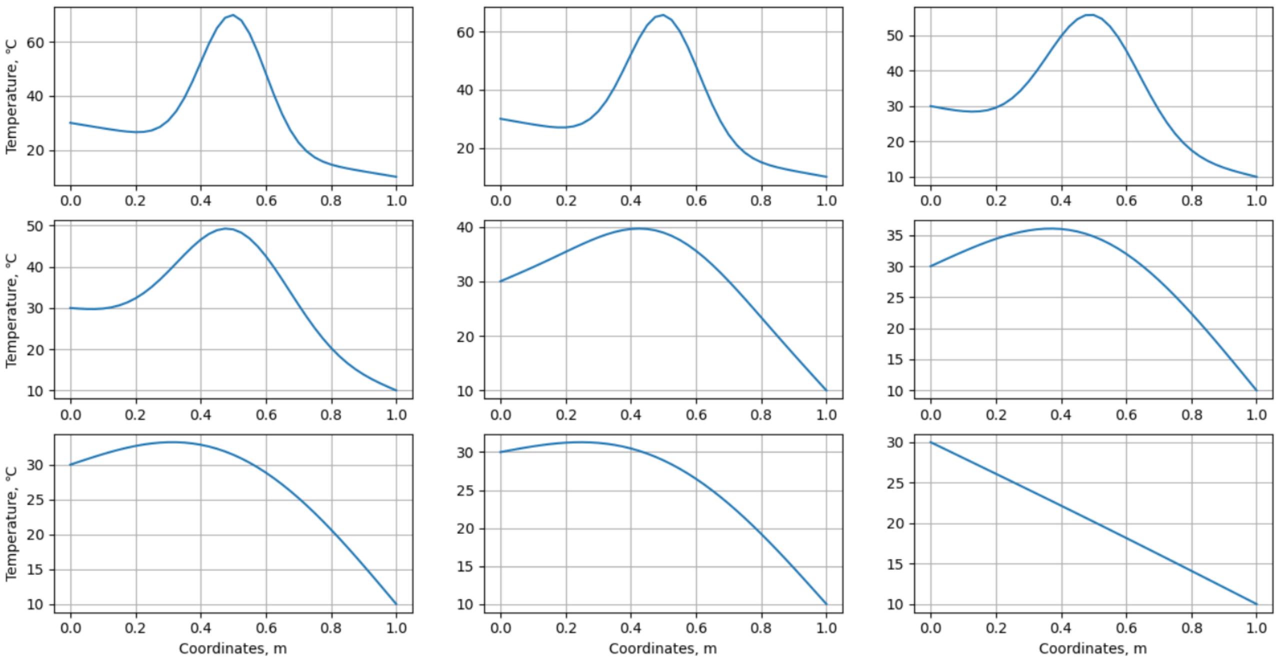


Рис. 3.3. Зависимость температуры (℃) от координаты (м)

На рис. 3.4 представлено решение уравнения (1.1) схемой Ричардсона (1.21). Как видно из графиков, решение расходится при любых значениях числа Куранта. Порядок аппроксимации: $O(\tau^2 + h^2)$.

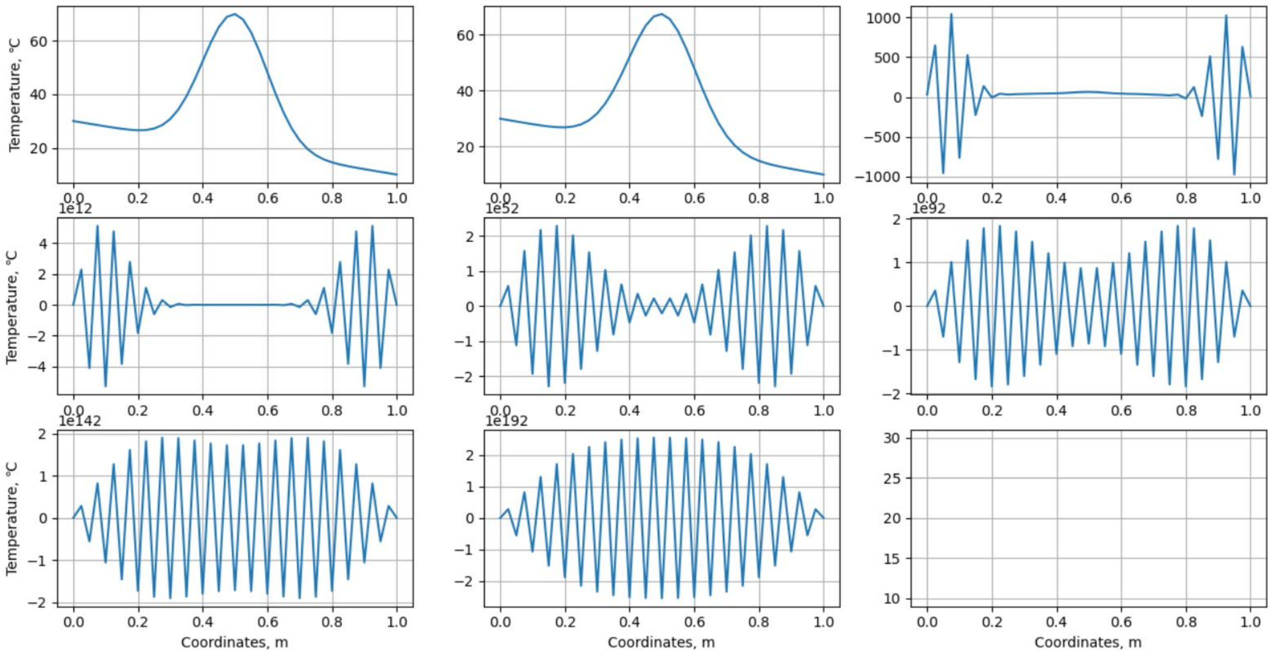


Рис. 3.4. Зависимость температуры (°C) от координаты (м)

Решение схемой Кранка-Николсон (1.24) для уравнения теплопроводности продемонстрировано на рис. 3.5. Данная схема является устойчивой при любых значениях $\gamma$. Порядок аппроксимации: $O(\tau^2 + h^2)$.

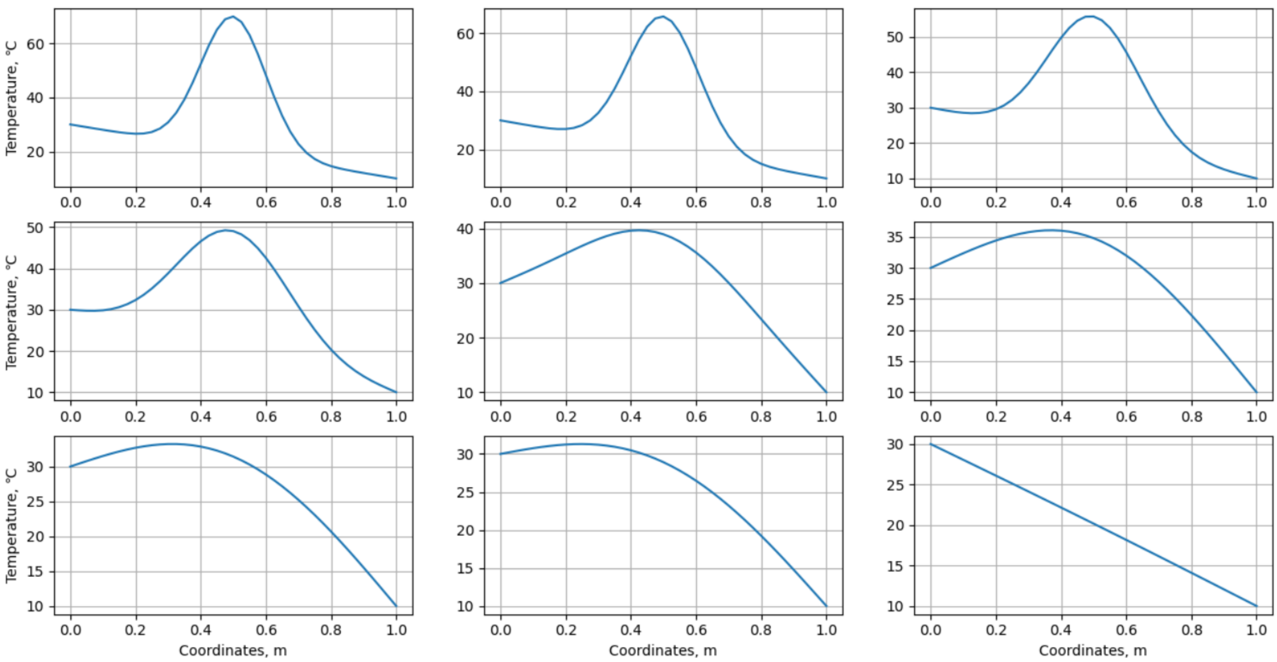


Рис. 3.5. Зависимость температуры (°C) от координаты (м)

Решение схемой Дюфорта и Франкеля (1.28) представлено на рис. 3.6. Как видно из графиков, данная схема устойчива при любых значениях числа Куранта. Порядок аппроксимации: $O(\tau^2 + h^2 + \tau^2/h^2)$.

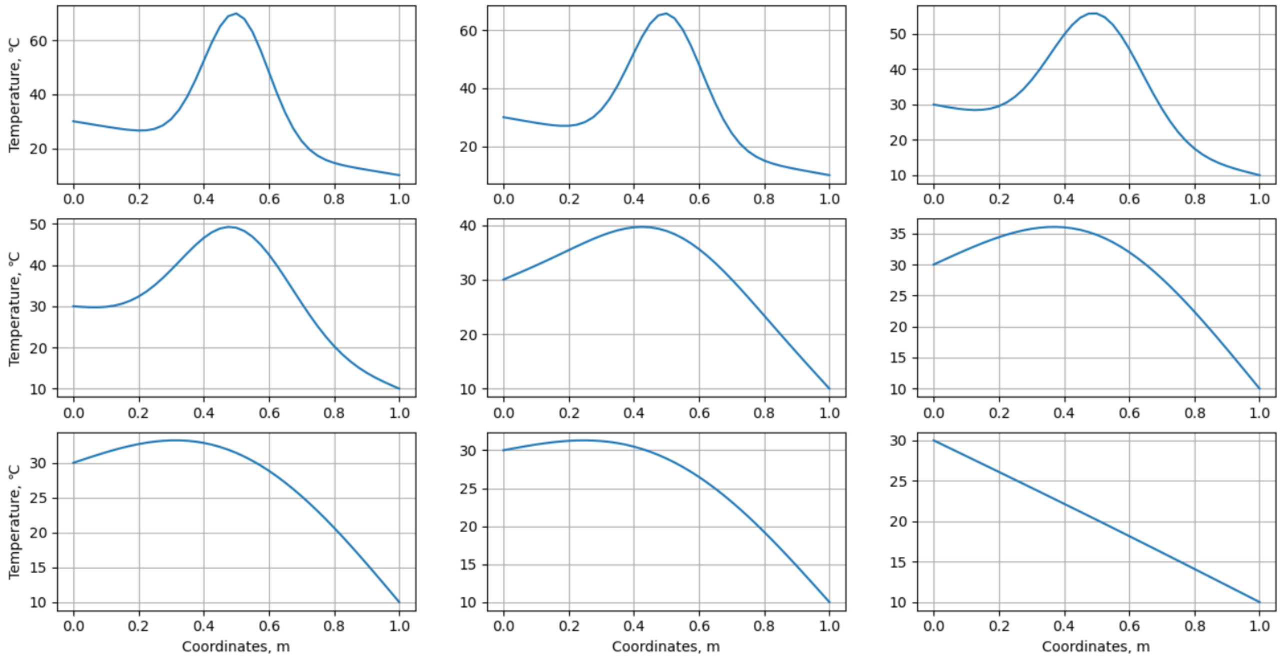


Рис. 3.6. Зависимость температуры (°С) от координаты (м)

## 3.1 Задача о взаимодействии лазерного излучения с металлами

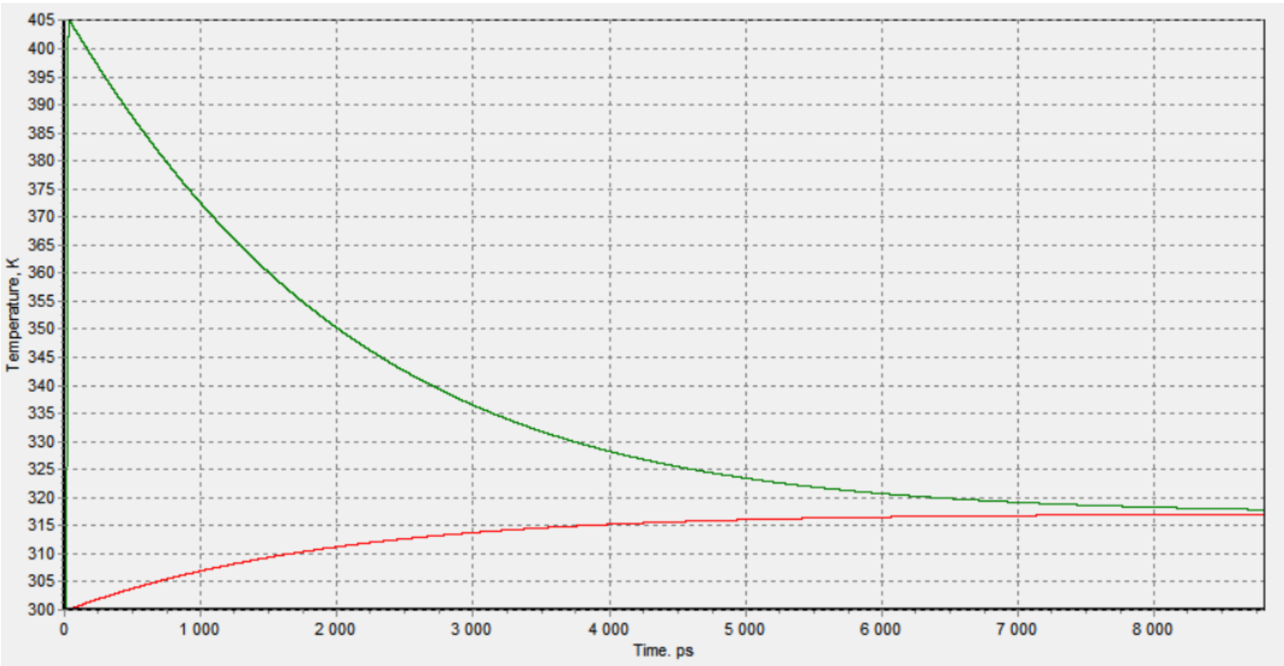


Рис. 3.7. Зависимость температуры электронов

(зеленая линия) и решетки (красная линия) от времени

Решение задачи было получено при помощи явной и неявной схем. Так как графики получились абсолютно одинаковыми, в работе представлено решение лишь одной из них, а именно явной схемой.

Как видно из графика рис. 3.7, при взаимодействии лазерного излучения с металлами в течение некоторого очень маленького промежутка времени энергия электронов быстро растет. Решетка при этом остается холодной, рост температуры электронов продолжается пока поток энергии к ионам не сравняется с поглощенным световым потоком. В дальнейшем электроны будут передавать решетке практически всю поглощаемую энергию. При выравнивании электронной и решеточной температур, металл характеризуется одной температурой.

Значения всех параметров необходимых для решения задачи о двухтемпературной модели взаимодействия лазерного излучения с металлами были взяты из [5] и [6].

При решении задачи о двухтемпературной модели взаимодействия лазерного излучения с металлами были использованы формулы:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = K_e \frac{\partial^2 T_e}{\partial x^2} - g(T_e - T_l) + q(x,t)$$

$$C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = g(T_e - T_l)$$

где

$T_e, T_l$ – температура электронных и ионных подсистем

$K_e, K_l$ – электронная и решеточная теплопроводность

$C_e, C_l$ – электронная и решеточная теплоемкость

$g$ – коэффициент связи

$q$ – источник энерговыделения

# ВЫВОД

В ходе данной курсовой работы были рассмотрены различные конечноразностные методы решения уравнения теплопроводности на примере двухтемпературной модели взаимодействия лазерного излучения с металлами.

Были получены решения уравнения теплопроводности явной двухслойной схемой, неявной двухслойной схемой, схемой Ричардсона, схемой Дюфорта и Франкеля, схемой Кранка-Николсон. Численное решение, которых позволило определить устойчивость и аппроксимации методов, предложенных в данной работе. Когда как явная двухслойная схема устойчива только при числе Куранта меньше 0,5, а схема Ричардсона неустойчива при всевозможных значениях числа Куранта, остальные схемы устойчивы при любых значениях $\gamma$.

# СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. С.И. Анисимов, Я.А. Имас, Г.С. Романов, Ю.В. Ходыко. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука. 1970. 232с.
2. А.А. Самарский, А.В. Гулин. Численные методы. М.: Наука. 1989. 432с.
3. Р.Рихтмайер, К. Мортон. Разностные методы решения краевых задач. М.: Мир. 1972. 418с.
4. В.М. Вержбицкий. Численные методы математической физики. М.: Директ-Медиа. 2013. 212с.
5. О.Г. Романов, Г.И.Желтов, Г.С. Романов. Воздействие фемтосекундных лазерных импульсов на металлические наночастицы в жидкости. ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ. 2011. Том 75. №12.
6. E.L. Gurevich, Y. Levy, S.V. Gurevich, N.M. Bulgakova. Role of the temperature instabilities for formation of nano-patterns upon single femtosecond laser pulses on gold. 2018. 28c.

# ПРИЛОЖЕНИЕ А

В общем случае системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей имеют вид

$$a_i y_{i-1} - c_i y_i + b_i y_{i+1} = -f_i, \qquad i = 1, 2, \dots, N-1 \tag{1}$$

$$y_0 = \vartheta_1 y_1 + \mu_1, \qquad y_N = \vartheta_2 y_{N-1} + \mu_2 \tag{2}$$

Для численного решения систем с трехдиагональными матрицами применяется метод прогонки [2]. Будем искать решение системы (1) в виде

$$y_i = \alpha_{i+1} y_{i+1} + \beta_{i+1}, \qquad i = 0,1, \dots, N-1 \tag{3}$$

$$\alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - \alpha_i a_i}, \qquad \beta_{i+1} = \frac{a_i \beta_i + f_i}{c_i - \alpha_i a_i}, \qquad i = 1,2, \dots, N-1 \tag{4}$$

Из (2) можно получить, что

$$\alpha_1 = \vartheta_1, \qquad \beta_1 = \mu_1 \tag{5}$$

Для начала счета по формуле (3) требуется знать $y_N$, которое равно

$$y_N = \frac{\vartheta_2 \beta_N + \mu_2}{1 - \alpha_N \vartheta_2} \tag{6}$$

Коэффициенты A, C, B неявной (н) и схемы Кранка-Николсон (КН):

$$A_{\text{н}} = C_{\text{н}} = A_{\text{КН}} = C_{\text{КН}} = -\gamma, \text{где } \gamma - \text{число Куранта} \tag{7}$$

$$B_{\text{н}} = 1 + 2\gamma, \qquad B_{\text{КН}} = 2 + 2\gamma \tag{8}$$

Метод прогонки:

```
def sweep_method(U, A, C, B):
    alpha = [0.] * N
    beta = [0.] * N
    # tmp = [0.] * N

    for i in range(1, int(M)):
        alpha[0] = 0.
        beta[0] = U[i - 1][0]

        for j in range(1, N):
            # tmp[j] = gamma * U[i - 1][j - 1] + (2 - 2 * gamma)
                 * U[i - 1][j] + gamma * U[i - 1][j + 1]
            alpha[j] = - C / (B + A * alpha[j - 1])
            beta[j] = (U[i - 1][j] - A * beta[j - 1]) / (B + A * alpha[j - 1])
            # beta[j] = (tmp[j] - A * beta[j - 1]) / (B + A * alpha[j - 1])
                 для схемы Кранка-Николсон

    for j in reversed(range(1, N)):
        U[i][j] = alpha[j] * U[i][j + 1] + beta[j]
```

# ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Явная двухслойная схема:

```
def solve(M, N, tau, h):
    U = np.zeros((M + 1, N + 1), dtype=float)

    for i in range(1, N):
        U[0][i] = initial(i * h)

    for i in range(0, M + 1):
        U[i][0] = border1(i * tau)
        U[i][N] = border2(i * tau)

    for i in range(1, M + 1):
        for j in range(1, N):
            U[i][j] = U[i - 1][j] + alpha * (U[i - 1][j - 1] +
                      U[i - 1][j + 1] –  2 * U[i - 1][j])

    return U
```

Неявная двухслойная схема:

```
def solve():
    U = np.zeros((int(M) + 1, N + 1), dtype=float)

    for i in range(1, N):
        U[0][i] = initial(i * h)

    for i in range(0, int(M) + 1):
        U[i][0] = border1(i * tau)
        U[i][N] = border2(i * tau)

    sweep_method(U) # метод прогонки
    return U
```

Схема Ричардсона:

```
def solve():
    U = np.zeros((int(M) + 1, N + 1), dtype='float')

    for i in range(1, N):
        U[0][i] = initial(i * h)

    for i in range(0, int(M) + 1):
        U[i][0] = border1(i * tau)
        U[i][N] = border2(i * tau)

    for i in range(1, N):
        U[1][i] = U[0][i] + gamma * (U[0][i] + U[0][i] - 2 * U[0][i])

    for i in range(2, int(M) + 1):
        for j in range(1, N):
            U[i][j] = U[i - 2][j] + 2 * gamma * U[i - 1][j - 1] - 4 * gamma *
                      U[i - 1][j] + 2 * gamma * U[i - 1][j + 1]
    return U
```

Схема Кранка-Николсон:

```
def solve():
    U = np.zeros((int(M) + 1, N + 1), dtype=float)

    for i in range(1, N):
        U[0][i] = initial(i * h)

    for i in range(0, int(M) + 1):
        U[i][0] = border1(i * tau)
        U[i][N] = border2(i * tau)

    sweep_method(U) # метод прогонки
    return U
```

Схема Дюфорта и Франкеля:

```
def solve():
    U = np.zeros((int(M) + 1, N + 1), dtype='float')

    for i in range(1, N):
        U[0][i] = initial(i * h)

    for i in range(0, int(M) + 1):
        U[i][0] = border1(i * tau)
        U[i][N] = border2(i * tau)

    for i in range(1, N):
        U[1][i] = U[0][i] + gamma * (U[0][i] + U[0][i] - 2 * U[0][i])

    for i in range(2, int(M) + 1):
        for j in range(1, N):
            U[i][j] = ((2 * gamma) / (1 + 2 * gamma)) * (U[i - 1][j + 1] +
              U[i - 1][j - 1]) + U[i - 2][j] *
                        (1 - 2 * gamma) / (1 + 2 * gamma)
    return U
```