Решение прямой задачи нестационарной нелинечной теплопроводности методом конечных разностей

Table of Contents

Уравнение теплопроводности

изменение запасенной в объеме энергии = поток энергии, выходящий из объема вовне + произведенная внутренними источниками энергия

$$\frac{d}{dt}\int\int\int_V \rho c(T)\,dV = -\int\int_S \vec{q}\cdot\vec{n}\,dS + \int\int\int_V Q\,dV$$

Теорема Гаусса (теорема о дивергеции) связывает суммарный поток вектора перпендикулярной повехности с суммарной дивергенцией вектора в объеме

$$\int\int_S \vec{q}\cdot\vec{n}\,dS = \int\int\int_V \nabla\cdot\vec{q}\,dV$$

Уравнение теплопроводности:

$$C(T)\frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla\cdot\vec{q}(\vec{r},T) + Q(T,\vec{r})$$

$C(T)$- теплоемкость

$\vec{q}(\vec{r},T)$ - вектор плотности теплового потока

$$\vec{q}(\vec{r},T) = -\lambda(T,\vec{r})\nabla T(\vec{r})$$

$\lambda(T, \overrightarrow{r})$ - температуропроводность (может зависеть как от температуры, так и от координаты), зависимость от температуры автоматически делает теплопровность, зависящей от координаты (по крайней мере для неравномерного распределения темпеатуры).

$Q(T, \overrightarrow{r})$ - плотность внутренних источников

$$C(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda(T, \overrightarrow{r})\nabla T(\overrightarrow{r})) + Q(T, \overrightarrow{r})$$

$\nabla = \sum_i \hat{x}_i \frac{\partial}{\partial x_i}$ - градиент в ортогональной декартовой системе координат

$\nabla \cdot = \sum_i \hat{x}_i \cdot \frac{\partial}{\partial x_i}$ - дивергенция

Для одномерной задачи (слой, бесконечный в латеральном направлении) с изотропной теплопроводностью, зависящей только от температуры при остуствии внутренних источников тепла, получаем нелинейное нестационарное дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа (слева первая производная, справа - вторая):

$$C(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial x})$$

Для программирования и решения обратных задач, удобно переписать это выражение в виде:

$$\frac{1}{a(T)}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\lambda'(T)}{\lambda(T)}(\frac{\partial T}{\partial x})^2 \qquad (1)$$

Здесь $a(T) = \frac{\lambda(T)}{c_p(T)\rho}$ - коэффициент температуропроводности, а $\lambda'(T) = \frac{d\lambda}{dT}$. Правая часть данного уравнения содержит линейный дифференциальный оператор и нелинейную часть.

Чтобы решить ДУЧП, необходимо задать начальные условия - распределение температуры в слое:

$T(x, 0) = \phi(x), x \in [0, b]$

И граничные условия, граничные условия могут быть различными:

Дирихле (1 -го рода):

$T(x, t)|_{x=0, x=b} = f(t), t \in [0, t_m]$ - температура на границе

Неймана (2 - го рода):

$\lambda\frac{\partial T}{\partial x}(x, t)|_{x=0, x=b} = q(t), t \in [0, t_m]$ - тепловой поток на границе

Третьего рода:

$\lambda\frac{\partial T}{\partial x}(x, t)|_{x=0, x=b} = R(T(x, t)|_{x=0, x=b}), t \in [0, t_m]$

$R(T(x,t)) = h(T(x,t))(T(x,t) - T_{\inf})$ - конвекция

$R(T(x,t)) = \sigma\epsilon(T(x,t))(T^4(x,t) - T^4_{ref})$ - излучение

Уравнение (1) - нелинейное, поэтому в общем случае, если теплопроводность зависит от температуры, оно может быть решено только численно.

Полная постановка прямой задачи для слоя заданной толщины будет иметь, например, для ГУ 1 - го рода сверху и 2 - го рода снизу следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{1}{a(T)}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\lambda'(T)}{\lambda(T)}(\frac{\partial T}{\partial x})^2 \\ T(x,0) = \phi(x), x \in [0,b] \\ T(b,t) = f(t), t \in [0,t_m] \\ -\lambda(T(b,t))\frac{\partial T}{\partial x}(b,t) = \widetilde{q}(t) \end{cases}$$

Решение прямой задачи методом конечных разностей

Для решения уравнения надо вначале дискретизовать сам дифур:

$$\frac{1}{a(T)}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\lambda'(T)}{\lambda(T)}(\frac{\partial T}{\partial x})^2 \qquad \textbf{(2)}$$

Данное уравнение имеет первую производную по времени и вторую и первую призводную по координате. Кроме того, в нем есть нелинейная часть (самое правое слагаемое). Обратим внимание, что когда теплопроводность не зависит от температуры, этот слен становится равным нулю и телпоперенос определяется только температуропроводностью.

Будем дискретизовать его на равномерной сетке.

$x_n = \Delta x(n-1), n = 1...N$ - равномерная сетка по координате

$t_m = \Delta t(m-1), m = 1...M$ - равномерная сетка по времени

Пока не будем задумываться как учитывать границы, наша задача просто заменить дифференциальный операторы в уравнении (1) дискретными сеточными операторами.

Можно разными способами выразить приближенную производную через значение в узлах сетки.

Производная по времени.

Формула Тейлора:

$$T(t+a) = T(t) + a\frac{dT}{dt}(t) + +a^2\frac{1}{2}\frac{d^2T}{dt^2}(t) + ... + a^q\frac{1}{q!}\frac{d^qT}{dt^q}(t) + o(a^q)$$

Отсюда можно получить выражение для температуры в предыдущие моменты времени, так, например, температура

T^{m-k} в момент времени, отстоящий назад во времени от момента времени t_m на $k\Delta t$, может быть выражена через T^m:

$$T^{m-k} = T^m - k\Delta t \frac{dT}{dt}_m + (k\Delta t)^2 \frac{1}{2}\frac{d^2T}{dt^2}_m + ... + (k\Delta t)^q \frac{1}{q!}\frac{d^qT}{dt^q}_m + o((k\Delta t)^q)$$

Мы должны рассчитывать производную в $m+1$- й момент времени, соотвественно, мы будем выражать предыдущие моменты времени через $m+1$- й.

Воспользуемся формулой первого порядка :

$$T^m = T^{m+1} - \Delta t \frac{dT}{dt}^{m+1} + o(\Delta t)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}_{m+1,n} \approx \frac{T_n^{m+1} - T_n^m}{\Delta t}$$

То есть, берутся температуры n - го элемента сетки в m и m+1 - й моменты времени.

Это, так называемая **BFD1** - **B**ackward **F**inite **D**ifference первого рода.

Аналогично можно вывести формулы более высокого порядка для производной в точке $m+1$ из точек в предыдущие моменты времени, для примера посмотрим на второй порядок **BFD2**:

Мы должны выразить T^m и T^{m-1} через производную и значение функции в $m+1$- й момент времени

$$a = -\Delta t : T^m = T^{m+1} - \Delta t \frac{dT}{dt}^{m+1} + \frac{1}{2}\Delta t^2 \frac{d^2T}{dt^2}^{m+1} + o(\Delta t^2)$$

$$a = -2\Delta t : T^{m-1} = T^{m+1} - 2\Delta t \frac{dT}{dt}^{m+1} + 2\Delta t^2 \frac{d^2T}{dt^2}^{m+1} + o(\Delta t^2)$$

Если предположить, что $\partial T/\partial t^{m+1} = w_1 T^{m+1} + w_0 T^m + w_{-1} T^{m-1}$, то есть наша задача - найти неизвестные коэффициенты, выражающие производную температуры в $m+1$-й момент времени через предыдущие.

Подставив выражения для разложений Тейлора в эту формулу, получим:

$$\frac{dT}{dt}^{m+1} = (w_1 + w_0 + w_{-1})T^{m+1} - (w_0\Delta t + 2w_{-1}\Delta t)\frac{dT}{dt}^{m+1} + (\frac{1}{2}w_0\Delta t^2 + 2w_{-1}\Delta t^2)\frac{d^2T}{dt^2}^{m+1} + o(\Delta t^2)$$

Так как это равенство должно выполняться для любого момента времени, то :

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & -\Delta t & -2\Delta t \\ 0 & \frac{1}{2}\Delta t^2 & 2w_{-1}\Delta t^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_0 \\ w_{-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Из последнего: $w_0 = -4w_{-1}$, из второго $w_0 = -\frac{1}{\Delta t} - 2w_1 : w_{-1} = \frac{1}{2\Delta t},\ w_0 = -\frac{4}{2\Delta t},\ w_1 = \frac{3}{2\Delta t}$

$$\frac{\partial T}{\partial t}_{m+1,n} \approx w_1 T^{m+1} + w_0 T^m + w_{-1} T^{m-1} = \frac{3T_n^{m+1} - 4T_n^m + T_n^{m-1}}{2\Delta t}$$

Производная по координате:

Для расчета первой производной по координате можно воспользоваться выражением для центральной производной, которая дает ($O(\Delta x^2)$):

$$\frac{\partial T}{\partial x}_{mn} \approx \frac{T_{n-1}^m - T_{n+1}^m}{2\Delta x}$$

$$D_{tsym} = \frac{1}{2\Delta x}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

```
N = 3;
M = 40;
a = zeros(M,N)
D = Dt(M)
Dsym = Dtsym(M)
D*rand(M,N)
ppp = [2,0.4,4,1,2];
x = linspace(0,1,M)';
y = polyval(ppp,x);
h = x(end) - x(end-1)
y_der = polyval(polyder(ppp),x);
xmean = (x(1:end-1) + x(2:end))/2;
plot(x,y_der,"b",xmean,D*y/h,"or",xmean,Dsym*y/h,"*g")
```

Почему для расчета производной по времени не годится центральная производная?

Центральная производная дает нам производную в m- й веремени, а обратная производная - производную в m+1, таким образом:

$\frac{3T_n^{m+1} - 4T_n^m + T_n^{m-1}}{2\Delta t} \approx \frac{\partial T^{m+1}}{\partial t}_n$ - производная в $m+1$ - й момент времени

$\frac{T_n^{m+1} - T_n^{m-1}}{2\Delta t} \approx \frac{\partial T^m}{\partial t}_n$ - производная в m - й момент времени

Теперь посмотрим на оператор второй производной:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}_{m+1,n} \approx \frac{T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}}{\Delta x^2} -$$

$$D^2 = \frac{1}{\Delta x^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Тут можно обратить внимание, что так как у нас есть два индекса - один соотвествует координате, а другой - времени, то возможны явная и неявная схемы.

В явной схеме температуры на следующем шаге по времени выражаются через температуры на текущем шаге по времени (m+1 стоит слева, а m - справа в рекурентном соотношении для дифференциального оператора), в неявных схемах m+1 стоит и слева, и справа .

Построим сетку для координаты и времени:

$x_n = (n-1)\Delta x, n \in 1...N$

$t_m = (m-1)\Delta t, m \in 1...M$

Задача состоит в том, чтобы после замены дифференциальных операторов конечно-разностными, распределение температуры по толщине образца в $m+1$-й момент времени, можно было выразить через распределение температуры в m - й момент времени.

$$\frac{1}{a(T)}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\lambda'(T)}{\lambda(T)}(\frac{\partial T}{\partial x})^2$$

В данном уравнении справа у нас есть два члена:

первый - линейный дифференциальный оператор второго порядка - вторая производная по координате

второй - квадратичный, для дискретизации можно, вообще говоря использовать разные варианты.

Вначале рассмтрим первый член правой части (линейный), для дискретизации можно использовать **явную** схему, **неявную** схему и схему **Кранка-Николсона** (комбинацию двух вариантов)

Явная схема дискретизации:

$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}_{mn} \approx \frac{T_{n+1}^{m} - 2T_n^{m} + T_{n-1}^{m}}{\Delta x^2}$ - явная (explicit) схема дискретизации, производная считается для m-го момента времени.

Неявная схема дискретизации:

$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{mn} \approx \frac{T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}}{\Delta x^2}$ - неявная (implicit) схема дискретизации, так как для расчета производной координате используется (m+1)-й момент времени

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{mn} \approx \frac{1}{\Delta x^2}[\theta(T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}) + (1-\theta)(T_{n+1}^{m} - 2T_n^{m} + T_{n-1}^{m})]$$

Кранк-Николсон:

$\theta = 1/2$

Для производной по времени, стоящей слева может быть использовано выражение как второго, так и первого порядка точности.

Различные схемы и их особенности

Вначале будем рассматрицать чисто конечно-разностные схемы без привязки к граничным условиям, следовательно во всех рассуждениях данного раздела первые и последние строки матриц, а также правой части выражений будут "не верными", их нужно будет потом модифицировать под конкретные граничные условия.

$$\frac{1}{a(T)}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\lambda'(T)}{\lambda(T)}(\frac{\partial T}{\partial x})^2$$

$F_n^m = \frac{a_n^m \Delta t}{\Delta x^2}$ - число Фурье

$\phi_n^m = \frac{\lambda'^m_n}{4\lambda_n^m}$ - коэффициент нелинейной части ($\phi = \frac{1}{4}\frac{d}{dT}(ln(\lambda(T)|_{T=T_{mn}})$

Какие есть основные моменты относительно уравнения:

- Производная по времени (левая часть уравнения) различные формы обратной производной (BDF1, BDF2, BDF3...)
- Момент времени аппроксимации второй производной (явная m,неявная m+1, Кранк-Николсон)
- Момент времени для нелинейной части (m или m+1)
- Момент времени расчета теплофизических свойств (m или m+1)

	Производная по времени	2-я Производная по координате	Нелинейная часть	Мом врем расч тепл

1	$(T_n^{m+1} - T_n^m)$ BWD	$F_n^m[T_{n+1}^m - 2T_n^m + T_{n-1}^m]$ Явная (explicit)	$F_n^m \phi_n^m (T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$ Явная (explicit)	m
2	$(T_n^{m+1} - T_n^m)$ BWD	$F_n^m[T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}]$ Неявная (implicit)	$F_n^m \phi_n^m (T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$ Явная (explicit)	m
3	$(T_n^{m+1} - T_n^m)$ BWD	$\frac{F_n^m}{2}([T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}] + [T_{n+1}^m - 2T_n^m + T_{n-1}^m])$ Кранк-Николсон (CN)	$F_n^m \phi_n^m (T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$ Явная (explicit)	m

4	$\frac{3}{2}T_n^{m+1} - 2T_n^m + \frac{1}{2}T_n^{m-1}$ BFD2	$F_n^m[T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}]$ Неявная (implicit)	$F_n^m \phi_n^m (T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$ Явная (explicit)	m
5	$\frac{3}{2}T_n^{m+1} - 2T_n^m + \frac{1}{2}T_n^{m-1}$ BFD2	$\underline{F_n^m 2([T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}] + [T_{n+1}^m - 2T_n^m + T_{n-1}^m])}$ Кранк-Николсон	$F_n^m \phi_n^m (T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$ Явная	m
6	$\frac{3}{2}T_n^{m+1} - 2T_n^m + \frac{1}{2}T_n^{m-1}$ BFD2	$\frac{F_n^m}{2}([T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}] + [T_{n+1}^m - 2T_n^m + T_{n-1}^m])$ Кранк-Николсон (CN)	$F_n^m \phi_n^m (T_{n-1}^{m+1} - T_{n+1}^{m+1})^2$ Неявная (implicit)	m
7	$\frac{3}{2}T_n^{m+1} - 2T_n^m + \frac{1}{2}T_n^{m-1}$ BFD2	$F_n^{m+1} \frac{1}{2}([T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}] + [T_{n+1}^m - 2T_n^m + T_{n-1}^m])$ Кранк-Николсон (CN)	$F_n^{m+1} \phi_n^{m+1} (T_{n-1}^{m+1} - T_{n+1}^{m+1})^2$ Неявная (implicit)	$m+$

1 - Самая простая явная схема, обладает условной сходимостью

2 - Неявная схема обладает, обладает безусловной сходимостью

3 - Схема Кранка-Никлсона (сердняя между явной и неявной) дает относительно "дешево" аппроксимацию второго порядка по времени

4 - Схема второго порядка сходимости по времени и координате, второй порядок по времени достигается использованием обратного дифференцирования BDF2.

5 - Схема второго порядка, исопльзующая как схему Кранка-Николсона, так и BDF2 для аппроксимации производной по времени

6 - Сочетает в себе обратное дифференцирования, Кранка-Николсона и неявную схему для нелинейного члена, в этом случае для вычисления распределения температуры в $m+1$-й момент времени, из-за того, что неизвестная T^{m+1} сходит под квадратом, теперь нужно пользоваться численным методом решения системы нелинейных уравнений (например, методом Ньютона-Рафсона)

7 - Тоже самое, что и пункт 5, но теперь все свойства также рассчитываются для m+1 - го шага

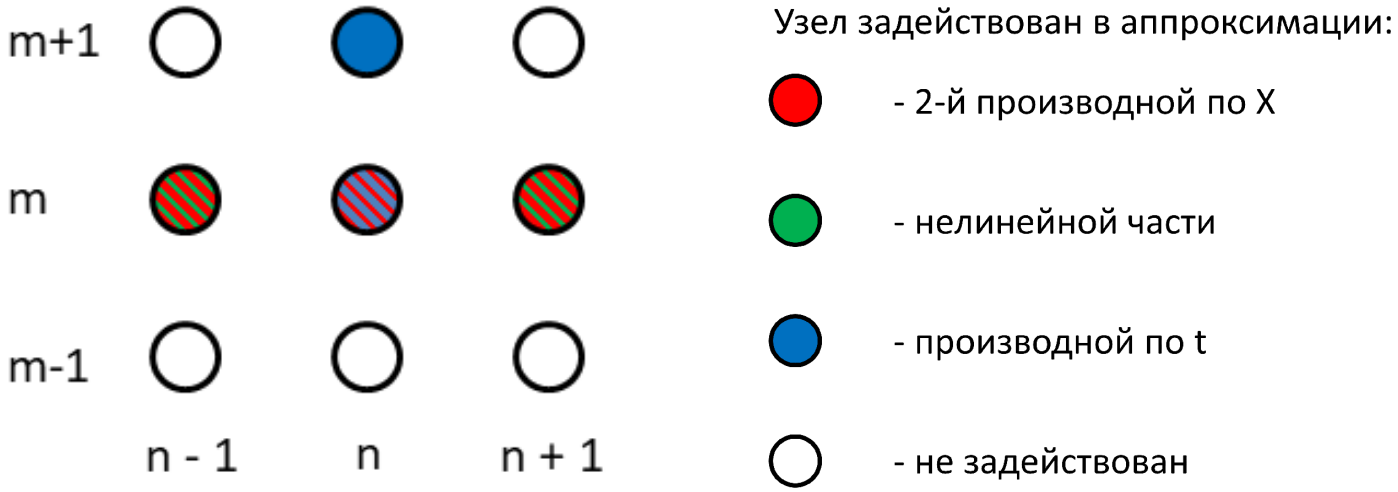
Далее получим матричные выражения для приведенных в таблице разностных схем.

Заголовки схем будут даваться по принципу:

тип производной по времени = тип второй производной + тип нелинейной части

Схема 1. BFD1 = explicit + explicit

Это самая простая схема, слева стоит аппроксимация производной первого порядка, производная второго порядка аппроксимируется явной схемой и нелинейный член выражается через цетральную явную производную. Температура в $m+1$- й момент времени входит столько в обратную производную, то распределение температуры на следующем шаге можно получить в одно матричное умножение



$$(T_n^{m+1} - T_n^m) = F_n^m[T_{n+1}^m - 2T_n^m + T_{n-1}^m] + F_n^m\phi_n^m(T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

$$T_n^{m+1} = F_n^m T_{n+1}^m + (1 - 2F_n^m)T_n^m + F_n^m T_{n-1}^m + F_n^m\phi_n^m(T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

Это выражение можно записать в матричной форме.

Пусть у нас есть вектор- столбец распределения температуры по толщине в текущий момент времени $\vec{T}^{m}$, тогда распределение температур в следующий момент времени, выражается через сумму линейной и нелинейной компонент:

$$\vec{T}^{m+1} = A^{m}\vec{T}^{m} + \vec{b}^{m} \qquad (2)$$

где

$$A^{m} = \begin{bmatrix} 1-2F_1^m & F_1^m & 0 & \cdots & 0 \\ F_2^m & 1-2F_2^m & F_2^m & \cdots & 0 \\ 0 & F_3^m & 1-2F_3^m & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 1-2F_{N-1}^m & F_{N-1}^m \\ 0 & 0 & 0 & F_N^m & 1-2F_N^m \end{bmatrix}$$

A^{m} - трехдиагональная матрица

$$[\vec{b}^{m}(\vec{T}^{m})]_n = F_n^m \phi_n^m (T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

Индекс n у нас меняется от 1 до N поэтому не понятно пока, как правильно получить выражения для первой и последней строки матрицы A^{m} и для первого и последнего элемента вектора $\vec{b}^{m}$.

Данная схема наызвается явной, так как выражение (2) не требует инвертирования матрицы, выражение получается просто умножением матрицы на вектор распределения температур в предыдущий момент времени.

Формулу для вектора $\vec{b}^{m}$ можно переписать в матричном виде через матрицу центральной производной:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Тогда вектор $\vec{b}^{m}$:

$$\vec{b}^{m}(\vec{T}^{m}) = \mathrm{diag}(\vec{F}^{m} \circ \vec{\phi}^{m})(D\vec{T}^{m} \circ D\vec{T}^{m})$$

где $\vec{F}^{m} = \begin{matrix} F_1^m \\ \vdots \\ F_N^m \end{matrix}$, $\vec{\phi}^{m} = \begin{matrix} \phi_1^m \\ \vdots \\ \phi_N^m \end{matrix}$ - вектора коэффициентов

$\circ$ - поэлементное умножение (произведение Адамара) $\vec{c}(\vec{x}) = \vec{a} \circ \vec{b} : [\vec{c}]_i = [\vec{a}]_i [\vec{b}]_i : \vec{c} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 \\ \vdots \\ a_n b_n \end{bmatrix}$

$\mathrm{diag}(\vec{a})$ - операция диагонализации вектора, $\mathrm{diag}(\vec{a}) = \begin{bmatrix} a_1 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & a_N \end{bmatrix}$

Операция $\mathrm{diag}(\vec{a})A$ умножает каждую строку матрицы на соответствующую координату вектора $\vec{a}$,

если умножать матрицу справа $A \cdot \mathrm{diag}(\vec{a})$ на диагонализованный вектор, то каждый столбец матрицы умножается на соотвествующую координату

```
clearvars
a = sym('a',[3,1]);
b = sym('b',[2,1]);
C = sym('c',[3,2]);
diag(a)*C
```

ans =

$$\begin{pmatrix} a_1 c_{1,1} & a_1 c_{1,2} \\ a_2 c_{2,1} & a_2 c_{2,2} \\ a_3 c_{3,1} & a_3 c_{3,2} \end{pmatrix}$$

```
C*diag(b)
```

ans =

$$\begin{pmatrix} b_1 c_{1,1} & b_2 c_{1,2} \\ b_1 c_{2,1} & b_2 c_{2,2} \\ b_1 c_{3,1} & b_2 c_{3,2} \end{pmatrix}$$

```
% в матлаб произведение адамара работает добавлением точки
a.*C
```

ans =

$$\begin{pmatrix} a_1 c_{1,1} & a_1 c_{1,2} \\ a_2 c_{2,1} & a_2 c_{2,2} \\ a_3 c_{3,1} & a_3 c_{3,2} \end{pmatrix}$$

```
C.*transpose(b)
```

ans =

$$\begin{pmatrix} b_1 c_{1,1} & b_2 c_{1,2} \\ b_1 c_{2,1} & b_2 c_{2,2} \\ b_1 c_{3,1} & b_2 c_{3,2} \end{pmatrix}$$

Матричное выражение дает неправильное значение для первого и последнего элемента так как для вычисления, например, первого элемента $[\vec{b}^m(\vec{T}^m)]_1 = F_1^m \phi_1^m (T_0^m - T_2^m)^2$ нам требуется знать T_0^m - а координаты с нулевым индексом у нас нет. Аналогично и для последнего элемента - требуется $N+1$- й индекс. Но это не страшно, так как значения первого и последнего элементов вектора $\vec{b}^m$ будут получаться из граничных условий.

Граничные условия для схемы 1.

С начальным условием все более-менее понятно, оно дает нам вектор $\vec{T}^1$

Если заданы граничные условия Дирихле, то есть, зависимость температуры сверху и снизу от времени в виде некоторых функций от времени, то $T_1^m = f(t_m) = f^m$, $T_N^m = g(t_m) = g^m$

Если треуется сохранить трехдиагональный вид матрицы A^m мы должны модифицировать вектор $\vec{b}^m$ таким образом, чтобы решение соотвествовало f^m

Матрица имеет вид:

$$A^m = \begin{bmatrix} 1-2F_1^m & F_1^m & 0 & \cdots & 0 \\ F_2^m & 1-2F_2^m & F_2^m & \cdots & 0 \\ 0 & F_3^m & 1-2F_3^m & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 1-2F_{N-1}^m & F_{N-1}^m \\ 0 & 0 & 0 & F_N^m & 1-2F_N^m \end{bmatrix}$$

$$\vec{T}^{m+1} = A^m \vec{T}^m + \vec{b}^m$$

Чтобы зафиксировать граничное условие в виде температуры на верхней границе, нам надо,

чтобы первая строка матрицы A при умножении на вектор температуры предыдущего момента времени давала нам гарантировано

f^{m+1}. Если мы хотим сохранить вид матрицы без изменений, то мы можем модифицировать первую координату вектора b_1^m:

$f^{m+1} = (1-2F_1^m) f^m + F_1^m T_2^m + b_1^m$ что дает

$b_1^m = f^{m+1} - (1-2F_1^m) f^m - F_1^m T_2^m$

Или в более короткой записи:

$b_1^m = f^{m+1} - A^m(1,:)\vec{T}^m$

где $A^m(1,:)$ - вектор-строка - первая строка матрицы

Аналогично можно задать граничные условия Дирихле снизу:

$$b_N^m = g^{m+1} - A^m(N,:)\overrightarrow{T}^m$$

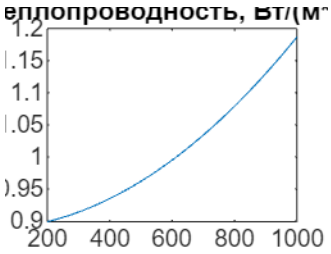
```
function [T,x,t,maxFn] = explicit_case1_dirichle2(C_f, L_f,Ld_f, H, tmax,initT_f,BC_up_f,BC_dwn_f,M,N)
% solves heat transfer equation using BFD1 - explicit - explicit scheme
% C_f - thermal capacity function (cp*Ro)
% L_f - thermal conductivity function
% Ld_f - thermal conductivity derivative
% H - thickness
% tmax - time interval
% initT_f - initial temperature distribution function
% BC_up_f - upper BC function of time
% BC_dwn_f - dwn BC function of time
% N,M - spatial and time discretization
x = linspace(0,H,N)';dx = x(2) - x(1);
t = linspace(0,tmax,M)';dt = t(2) - t(1);
% резервируем память под решение
T = zeros(N,M); % колонка - распределение температуры по тощине в заданный момент времени
% заполняем первый столбец - начальное распределение температуры известно
T(:,1) = initT_f(x);
% заполняем первую и последнюю строки - зависимость температуры сверху и снизу от времени известно
T(1,:) = BC_up_f(t); % applying upper BC
T(N,:) = BC_dwn_f(t); % applying lower BC
dd = dt/(dx*dx);
maxFn = 0;
A = zeros(N);
im1 = diagonal_inds(-1,N, N); % индексы -1-й диагонали
ip1 = diagonal_inds(1,N, N); % индексы +1-й диагонали
ip0 = diagonal_inds(0,N, N); % индексы 0-й диагонали
D = DiffMat2(N,N);
    for m = 1:M-1
        lam_m = L_f(T(:,m));% thermal conductivity evaluated for the m'th timestep
        Cm = C_f(T(:,m));
        am = lam_m./Cm;
        Fm = dd*am;% Fm
        phi_m = Ld_f(T(:,m))./(lam_m*4); % phi
        % граничные условия
        A(ip0) = 1 - 2*Fm;
        A(ip1) = Fm(1:end-1);
        A(im1) = Fm(2:end);
        % нелинейная часть
        b = Fm.*phi_m.*(D*T(:,m)) .^2;
        % модифицируем вектор b, чтобы не менять размер матрицы
        b(1) = T(1,m+1)  - A(1,:)*T(:,m);
        b(end) = T(end,m+1)  - A(end,:)*T(:,m);
        % решение
        T(:,m+1) = A*T(:,m) + b;

    end
end
```

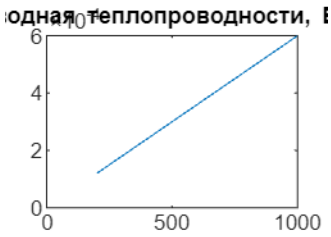
Для явной схемы быстрее оказывается решение при помощи циклов без формирования матрицы, в этом случае удобнее применить граничные условия, нам достаточно просто зафиксировать температры сверху и снизу и в цикле по координате перебирать элементы со 2-го по N-1-й.

```
% функция для решения уравнения теплопроводности при помощи явной схемы
% первого порядка и явной схемы
function [T,x,t,maxFn] = explicit_case1_dirichle(C_f, L_f,Ld_f, H, tmax,initT_f,BC_up_f,BC_dwn_f,M,N)
% C_f - функция теплоемкости от температуры(cp*Ro)
% L_f - функция теплопроводности от температуры
% Ld_f - функция производной теплопроводности от температуры
% H - толщина в м
% tmax - интервал времени
% initT_f - функция начального распределения температуры от координаты
% BC_up_f - функция зависимости температуры сверху от времени
% BC_dwn_f - функция зависимости температуры снизу от времени
% N - число точек по координате
% M - число точек по времени
x = linspace(0,H,N)'; % сетка по координате
t = linspace(0,tmax,M)'; % сетка по времени
dx = x(2) - x(1);
dt = t(2) - t(1);
T = zeros(N,M); % columns - distribution, rows time
T(:,1) = initT_f(x);
T(1,:) = BC_up_f(t); % applying upper BC
T(N,:) = BC_dwn_f(t); % applying lower BC
dd = dt/(dx*dx);
maxFn = 0;
for m = 1:M-1 % цикл по времени
    lam_m = L_f(T(:,m));% теплопроводность для распределения температур  в m-й момент времени
    Cm = C_f(T(:,m));% теплоемкость для распределения температур  в m-й момент времени
    am = lam_m./Cm;% темпеаратуропроводность для распределения температур  в m-й момент времени
    Fm = dd*am;% Fm - число Фурье
    phi_m = Ld_f(T(:,m))./(lam_m*4); % phi  - коэффициент при нелинейной функции
    for n = 2:N-1 % цикл по координате
        r = Fm(n);
        r1 = 1 - 2*r;
        fi = phi_m(n);
        b_n = r*fi*(T(n - 1,m) - T(n + 1,m))^2 ; % [\vec{b}^m(\vec{T}^m)]_n= F_{n}^m \phi_{n}^m
(T^{m}_{n-1} - T^{m}_{n+1})^2
        T(n,m + 1) = r*(T(n - 1,m) + T(n + 1,m)) + r1*T(n,m) + b_n;
        if r > maxFn
            maxFn = r;
        end
    end
end
end
```

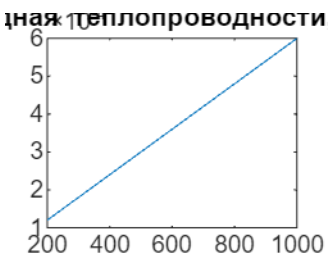
```
clearvars
lam_pars =[3e-7,0,0.887];
lam_fun = @(T)polyval(lam_pars,T); % теплопроводность
lam_der_pars = polyder(lam_pars); % коэффициенты производной
lam_der = @(T)polyval(lam_der_pars,T);% производная теплопроводности
plot(linspace(200,1000,30),lam_fun(linspace(200,1000,30)));title("Теплопроводность,
Вт/(м*К)")
```




```
plot(linspace(200,1000,30),lam_der(linspace(200,1000,30)));title("Производная
теплопроводности, Вт/(м*K^2)")
```




```
N = 50;% число точек сетки по координате
M = 1000;% число точек сетки по времени
Tmax = 1000; % максимальная температура
tmax = 100; % режим нагрева
Tinit = 20; % начальная температура
Cp = 1000; % теплоемкость
Ro = 2700;% плотность
H = 15e-3; % толщина слоя в мм
Cp_fun = @(T) Cp*Ro*ones(size(T));% не зависит от температуры
initT_f = @(X) Tinit*ones(size(X));% стартовая температура постоянна
BC_dwn_f = @(t) Tinit*ones(size(t));% температура снизу постоянна
BC_up_f = @(t) Tinit + t*(Tmax - Tinit)/tmax;% температура сверху линейно возрастает
plot(linspace(0,tmax,100),BC_up_f(linspace(0,tmax,100)));title("Режим нагрева")
```

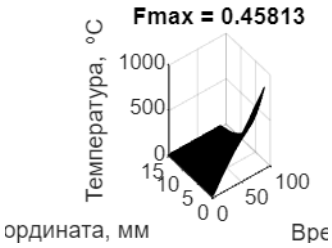



```
% решаем диффур
tic
[T,x,t,maxFn] = explicit_case1_dirichle(Cp_fun, lam_fun,lam_der, H, ...
    tmax,initT_f,BC_up_f,BC_dwn_f,M,N);
toc
```

```
Elapsed time is 0.006780 seconds.
```

```
[xp,tp] = meshgrid(x,t(1:100:end));
surf(tp,1e3*xp,T(:,(1:100:end))');title("Fmax = "+ maxFn)
```

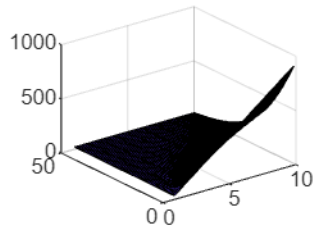
```
xlabel("Время,с")
ylabel("Координата, мм")
zlabel("Температура, ^oC")
```



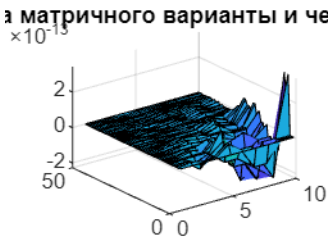

```
tic
T2 = explicit_case1_dirichle2(Cp_fun, lam_fun,lam_der, H, ...
    tmax,initT_f,BC_up_f,BC_dwn_f,M,N);
toc
```

```
Elapsed time is 0.010181 seconds.
```

```
surf(T2(:,1:100:end))
```




```
surf(T2(:,1:100:end) - T(:,1:100:end));title("Разница матричного варианты и через циклы")
```



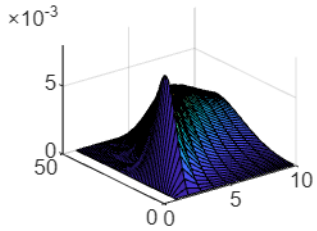

```
tic
[T_imp,x,t,maxFn] = implicit_case2_dirichle(Cp_fun, lam_fun,lam_der, H, ...
    tmax,initT_f,BC_up_f,BC_dwn_f,M,N);
toc
```

```
Elapsed time is 0.026860 seconds.
```

```
norm(T_imp-T2)
```

```
ans = 29.7878
```

```
surf((T_imp(:,1:100:end) - T(:,1:100:end))./T(:,1:100:end));
```



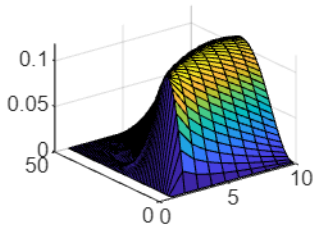

```
tic
TCN= CN_case3_dirichle(Cp_fun, lam_fun,lam_der, H, ...
    tmax,initT_f,BC_up_f,BC_dwn_f,M,N);
toc
```

```
Elapsed time is 0.029133 seconds.
```

```
norm(T_imp-TCN)
```

```
ans = 14.8886
```

```
surf(T_imp(:,1:100:end)-TCN(:,1:100:end))
```



Устойчивость конечно-разностной схемы на примере явной схемы

Немного про устойчивость разностных схем, в общем случае, в особенности для достаточно сложных уравнений это целая наука, но общую идею можно проиллюстрировать для простого случая решения линейного уравнения (если теплопроводность от температуры не зависит, то вектор $\vec{b}^{m}$ будет равен нулю, а матрица $A^m = A$ будет постоянной.

Ну и сетка постоянна, и число шагов по координате равно числу шагов по времени (то есть матрица A^m будет кадратной). И есть известное начальное распределение температуры по толщине, тогда распределение температуры по толщине в последующие моменты времени будет даваться:

$$\vec{T}^{2} = A\vec{T}^{1}$$

$$\vec{T}^{3} = AA\vec{T}^{1}$$

$$\vdots$$

$\vec{T}^{k+1} = A \cdot \ldots \cdot A\vec{T}^{1} = [A]^k\vec{T}^{1}$ - распределение температуры в k-й момент времени

$[A]^k$ - умножение матрицы саму на себя k раз.

Разложим матрицу в спектр:

$A = U\Lambda U^{-1}$, U - матрица собственных векторов, Λ - диагональная матрица собственных значений. Тогда для степени матрицы:

$[A]^k = U\Lambda U^{-1} \cdot \ldots \cdot U\Lambda U^{-1} = U\Lambda^k U^{-1}$ - то есть, степень матрицы имеет те же собственные вектора, что и исходная

В нашем случае матрица симметрична, поэтому собственные вектора являются ортонормированными, тогда:

$[A]^k = U\Lambda^k U^{-1} = U\Lambda^k U^T = \Sigma_{i=1}^{N} \lambda_i^k \vec{u}_i \vec{u}_i^T$

Из данного выражения видно, что если в спектре собственных значений матрицы A есть те, которые больше 1, то вклад от них будет экспоненциально возрастать и схема станет неустойчивой.

Таким образом, схема будет устойчивой (для линейного конечно-разностного оператора), если все собственные значения лежат в интервале от -1 до 1.

Для трехдиагональных матриц тёплица размером $N \times N$, у которых на главной диагонале стоят постоянные значений:

a - главной

b - на плюс первой

c - на минус первой

Собственные значения для такой трехдиагоральной матрицы даются аналитической формулой:

$$\lambda_i = a - 2\sqrt{bc}\,cos(\frac{i\pi}{(N+1)})$$

Или для нашего конкретного случая:

$$\lambda_i = (1-2F) - 2Fcos(\frac{i\pi}{(N+1)})$$

Отсюда, из условия , что все собственные значения должны быть меньше или равны единице, поулчаем:

$$-1 \le (1-2F) - 2Fcos(\frac{i\pi}{(N+1)}) \le 1 \text{ для } \forall\ i \in 1...N$$

$$F \le 1/2$$

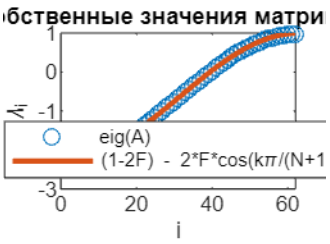
```
clearvars
N = 62
```

```
N = 62
```

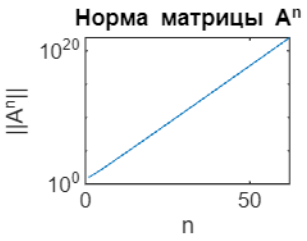
```
F = 0.812
```

```
F = 0.8120
```

```
A = toeplitz([1-2*F,F,zeros(1,N-2)]);
e = eig(A);
y = (1-2*F)  - 2*F*cos((1:N)*pi/(N+1));
plot(e,"o")
hold on
plot(y,"LineWidth",2)
hold off
legend(["eig(A)","(1-2F) - 2*F*cos(k\pi/(N+1)"],"Location","best")
xlabel("i");ylabel("\lambda_i")
title("Собственные значения матрицы A")
```




```
% теперь посмотрим на то как будет расти норма матрицы
% по мере решения линейного дифура
An = eye(size(A));
nrm = zeros(size(y));
for ii = 1:N
    An = A*An;
    nrm(ii) = norm(An,"fro");
end
plot(nrm)
yscale("log")
title("Норма матрицы A^n")
xlabel("n")
ylabel("||A^n||")
```

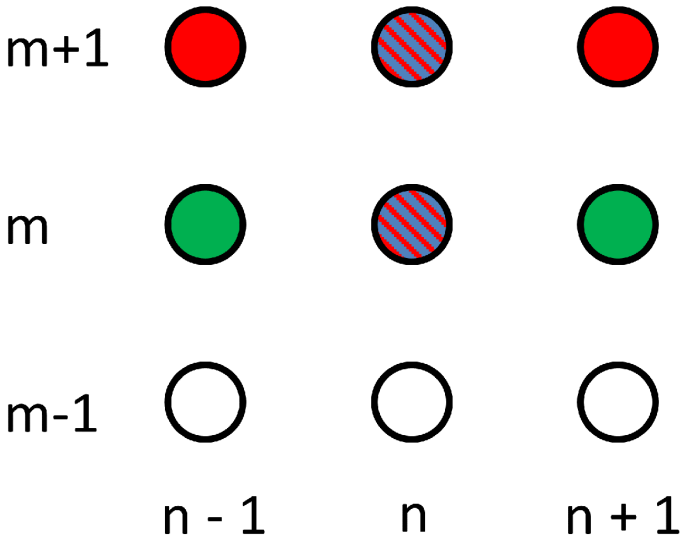



```

```

Схема 2. BFD1 = implicit + explicit

Производная по времени обратное дифференцирование, первого порядка, чисто неявная схема для второй производной по координате, явная схема для аппркосимация производной в нелинейной части, свойства берутся на с предыдущего момента времени.



Узел задействован в аппроксимации:

- 2-й производной по X

- нелинейной части

- производной по t

- не задействован

$$(T_n^{m+1} - T_n^m) = F_n^m T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}] + F_n^m \phi_n^m (T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

$$B^m = \begin{bmatrix} 1+2F_1^m & -F_1^m & 0 & \cdots & 0 \\ -F_2^m & 1+2F_2^m & -F_2^m & \cdots & 0 \\ 0 & -F_3^m & 1+2F_3^m & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -F_{N-1}^m \\ 0 & 0 & 0 & -F_N^m & 1+2F_N^m \end{bmatrix}$$

Вектор $\vec{b}^m$ - нелинейная функция (квадратичная) такая же, как и в схеме 1

Таким образом неявная схема решения свелась к системе линейных уравнений для нахождения распределения температуры по толщине в следующий момент времени через предыдущие:

$$B^m \vec{T}^{m+1} = \vec{T}^m + \vec{b}^m$$

Для применения граничных условий $T_1^m = f(t_m) = f^m$, $T_N^m = g(t_m) = g^m$ есть два варианта, как и для явной схемы.

1. Можно модифицировать первую строку матрицы B^m и вектор $\vec{b}^m$ так, чтобы система давала правильное решение: $B^m = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -F_2^m & 1+2F_2^m & -F_2^m & \cdots & 0 \\ 0 & -F_3^m & 1+2F_3^m & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -F_{N-1}^m \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$, $\vec{b}_1^m = f^{m+1} - f^m$, тогда первое уравнение системы будет давать тривиальное решение.И аналогично для последней строки.
2. Можно решать усеченную систему уравнений:

   $B^{*m} = B^m(2:N-1,:) = \begin{bmatrix} -F_2^m & 1+2F_2^m & -F_2^m & & \\ & \ddots & & & \\ & & -F_{N-1}^m & 1+2F_{N-1}^m & -F_{N-1}^m \end{bmatrix}$, тогда вместо системы из N уравнений можно решать систему из N-2 уравнений:

$$B^{*m} \vec{T}^{m+1}[2:N-1] = \vec{T}^m + \vec{b}^m$$

```
function [T,x,t,maxFn] = implicit_case2_dirichle(C_f, L_f,Ld_f, H, tmax,initT_f,BC_up_f,BC_dwn_f,M,N)
% C_f - thermal capacity function (cp*Ro)
% L_f - thermal conductivity function
% Ld_f - thermal conductivity derivative
% H - thickness
% tmax - time interval
% initT_f - initial temperature distribution function
% BC_up_f - upper BC function of time
% BC_dwn_f - dwn BC function of time
% N,M - spatial and time discretization
x = linspace(0,H,N)';
t = linspace(0,tmax,M)';
dx = x(2) - x(1);
dt = t(2) - t(1);
T = zeros(N,M); % columns - distribution, rows time
T(:,1) = initT_f(x);
T(1,:) = BC_up_f(t); % applying upper BC
T(N,:) = BC_dwn_f(t); % applying lower BC
dd = dt/(dx*dx);
maxFn = 0;
B = zeros(N);
D = DiffMat2(N,N); % finite difference matrix

im1 = diagonal_inds(-1,N, N); % индексы -1-й диагонали
ip1 = diagonal_inds(1,N, N); % индексы +1-й диагонали
```

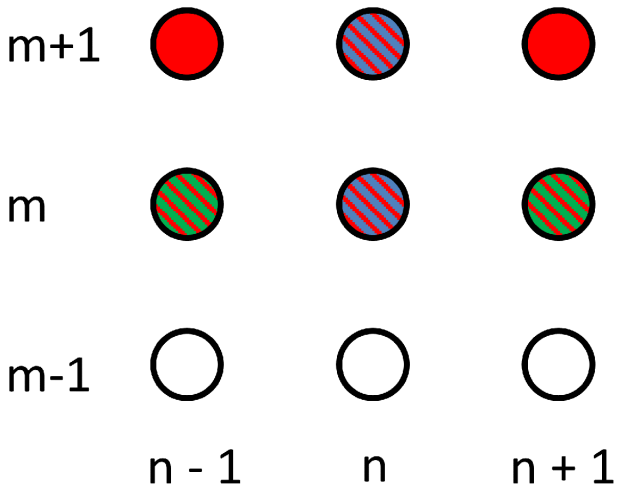
```
ip0 = diagonal_inds(0,N, N); % индексы 0-й диагонали
        for m = 1:M-1
            lam_m = L_f(T(:,m));% thermal conductivity evaluated for the m'th timestep
            Cm = C_f(T(:,m));
            am = lam_m./Cm;
            Fm = dd*am;% Fm
            phi_m = Ld_f(T(:,m))./(lam_m*4); % phi
            b = Fm.*phi_m.*(D*T(:,m)) .^2; % рассчитываем нелинейную компоненту
            b(1) = T(1,m + 1) - T(1,m);
            b(end) = T(end,m + 1) - T(end,m);

            B(ip0) = 1 + 2*Fm;
            B(ip1) = - Fm(1:end-1);
            B(im1) = - Fm(2:end);

            B(1) = 1;B(1,2) = 0;B(1,3) = 0;
            B(end) = 1;B(end,end - 1) = 0;B(end,end - 1) = 0;
            T(:,m + 1) = B\(T(:,m) + b);
        end
end
```

Схема 3. BFD1 = CN + explicit

Отличается от предыдущий исопльзованием схемы Кранка-Николсона для аппроксимации второй производной, что дает второй порядок точности по времени



Узел задействован в аппроксимации:

- 2-й производной по X

- нелинейной части

- производной по t

- не задействован

$$(T_n^{m+1} - T_n^m) = \frac{1}{2}(F_n^m[T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}]) + \frac{1}{2}(F_n^m[T_{n+1}^m - 2T_n^m + T_{n-1}^m]) + F_n^m\phi_n^m(T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

$$-\frac{1}{2}F_n^m T_{n+1}^{m+1} + T_n^{m+1}(1 + F_n^m) - \frac{1}{2}F_n^m T_{n-1}^{m+1} = \frac{1}{2}F_n^m T_{n+1}^m + T_n^m(1 - F_n^m) + \frac{1}{2}F_n^m T_{n-1}^m + F_n^m\phi_n^m(T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

В матричной форме это имеет вид:

$$C^m \vec{T}^{m+1} = N^m \vec{T}^m + \vec{b}^m$$

$$C^m = \begin{bmatrix} 1+F_1^m & -\frac{1}{2}F_1^m & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{2}F_2^m & 1+F_2^m & -\frac{1}{2}F_2^m & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}F_3^m & 1+F_3^m & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -\frac{1}{2}F_{N-1}^m \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}F_N^m & 1+F_N^m \end{bmatrix},$$

Вторая матрица также трехдиагональная

$$N^m = \begin{bmatrix} 1-F_1^m & \frac{1}{2}F_1^m & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{2}F_2^m & 1-F_2^m & \frac{1}{2}F_2^m & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}F_3^m & 1-F_3^m & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \frac{1}{2}F_{N-1}^m \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}F_N^m & 1-F_N^m \end{bmatrix}$$

Вектор $\vec{b}^m$ - нелинейная функция (квадратичная) такая же, как и в схеме 1

```
function [T,x,t,maxFn] = CN_case3_dirichle(C_f, L_f,Ld_f, H, tmax,initT_f,BC_up_f,BC_dwn_f,M,N)
% explicit - CN - explicit
% C_f - thermal capacity function (cp*Ro)
% L_f - thermal conductivity function
% Ld_f - thermal conductivity derivative
% H - thickness
% tmax - time interval
% initT_f - initial temperature distribution function
% BC_up_f - upper BC function of time
% BC_dwn_f - dwn BC function of time
% N,M - spatial and time discretization
x = linspace(0,H,N)';dx = x(2) - x(1);
t = linspace(0,tmax,M)';dt = t(2) - t(1);

T = zeros(N,M); % columns - distribution, rows time
T(:,1) = initT_f(x); % applying initial conditions
T(1,:) = BC_up_f(t); % applying upper BC
T(N,:) = BC_dwn_f(t); % applying lower BC
dd = dt/(dx*dx);
maxFn = 0;
C = zeros(N); %LHS matrix
Nm = zeros(N); %RHS matrix
D = DiffMat2(N,N); % finite difference matrix

im1 = diagonal_inds(-1,N, N); % индексы -1-й диагонали
```

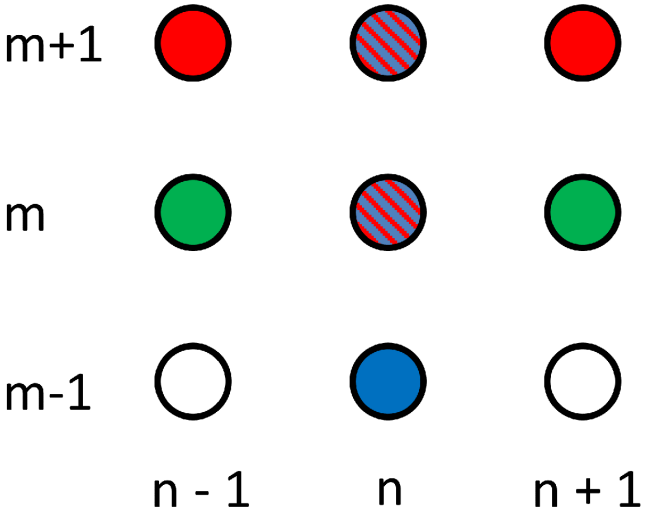
```
ip1 = diagonal_inds(1,N, N); % индексы +1-й диагонали
ip0 = diagonal_inds(0,N, N); % индексы 0-й диагонали
    for m = 1:M-1
        % filling material properties vectors
        lam_m = L_f(T(:,m));% thermal conductivity evaluated for the m'th timestep
        Cm = C_f(T(:,m));
        am = lam_m./Cm;
        Fm = dd*am;% Fm
        phi_m = Ld_f(T(:,m))./(lam_m*4); % phi
        b = Fm.*phi_m.*(D*T(:,m)) .^2;

        % filling LHS matrix
        C(ip0) = 1 + Fm;
        C(ip1) = - Fm(1:end-1)/2;
        C(im1) = - Fm(2:end)/2;
        % filling RHS matrix
        Nm(ip0) = 1 - Fm;
        Nm(ip1) = Fm(1:end-1)/2;
        Nm(im1) = Fm(2:end)/2;

        % applying BC to make first row equation trivial
        b(1) = T(1,m + 1) - Nm(1,:)*T(:,m);
        b(end) = T(end,m + 1) - Nm(end,:)*T(:,m);
        C(1) = 1;C(1,2) = 0;C(1,3) = 0;
        C(end) = 1;C(end,end - 1) = 0;C(end,end - 1) = 0;
        % solving
        T(:,m + 1) = C\(Nm*T(:,m) + b);
    end
end
```

Схема 4.BFD2 = implicit + explicit

Данная схема имеет ту же точность, что и предыдущая, но при этом использует полную неявную схему для второй производной и обратную производную второго порядка (**BFD2**).



Узел задействован в аппроксимации:

- 2-й производной по X

- нелинейной части

- производной по t

- не задействован

$$\frac{3}{2}T_n^{m+1} - 2T_n^m + \frac{1}{2}T_n^{m-1} = F_n^m[T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}] + F_n^m\phi_n^m(T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

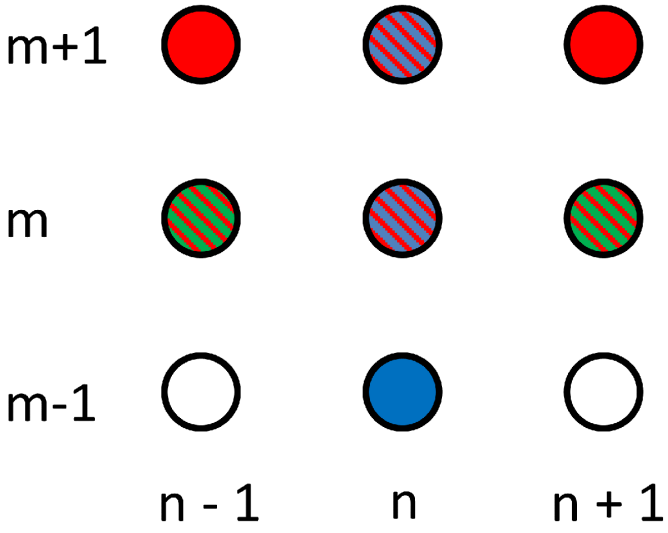
$$-F_n^m T_{n+1}^{m+1} + [\frac{3}{2} + 2F_n^m]T_n^{m+1} - F_n^m T_{n-1}^{m+1} = 2T_n^m - \frac{1}{2}T_n^{m-1} + F_n^m\phi_n^m(T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

$$P^m \overrightarrow{T}^{m+1} = 2\overrightarrow{T}^m - \frac{1}{2}\overrightarrow{T}^{m-1} + \overrightarrow{b}^m$$

$$P^m = \begin{bmatrix} \frac{3}{2}+2F_1^m & -F_1^m & 0 & \cdots & 0 \\ -F_2^m & \frac{3}{2}+2F_2^m & -F_2^m & \cdots & 0 \\ 0 & -F_3^m & \frac{3}{2}+2F_3^m & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -F_{N-1}^m \\ 0 & 0 & 0 & -F_N^m & \frac{3}{2}+2F_N^m \end{bmatrix}$$

Вектор $\vec{b}^m$ - нелинейная функция (квадратичная) такая же, как и в схеме 1. Ключевым отличием данной схемы от схемы 2 является то, что для аппроксимации производной по времени используется схема второго порядка.

Схема 5. BFD2 = CN + explicit



Узел задействован в аппроксимации:

- 2-й производной по X

- нелинейной части

- производной по t

- не задействован

Данная схема имеет ту же точность, что и предыдущая, но при этом использует схему Кранка-НИколсона для второй производной и обратную производную второго порядка (**BFD2**).

Левая часть тут получится такойже, как и у предыдущей схемы, а правая часть - похожа на схему 3, но с некоторыми модификациями

$$\frac{3}{2}T_n^{m+1} - 2T_n^m + \frac{1}{2}T_n^{m-1} = \frac{1}{2}(F_{nm}[T_{n+1}^{m+1} - 2T_n^{m+1} + T_{n-1}^{m+1}]) + \frac{1}{2}(F_{nm}[T_{n+1}^m - 2T_n^m + T_{n-1}^m]) + F_n^m\phi_n^m(T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

$$-\frac{1}{2}F_{nm}T_{n+1}^{m+1} + [\frac{3}{2} + F_{nm}]T_n^{m+1} - \frac{1}{2}F_{nm}T_{n-1}^{m+1} = \frac{1}{2}F_{nm}T_{n+1}^m + T_n^m(2 - F_{nm}) + \frac{1}{2}F_{nm}T_{n-1}^m - \frac{1}{2}T_n^{m-1} + F_n^m\phi_n^m(T_{n-1}^m - T_{n+1}^m)^2$$

$$P^m\vec{T}^{m+1} = Q^m\vec{T}^m - \frac{1}{2}\vec{T}^{m-1} + \vec{b}^m$$

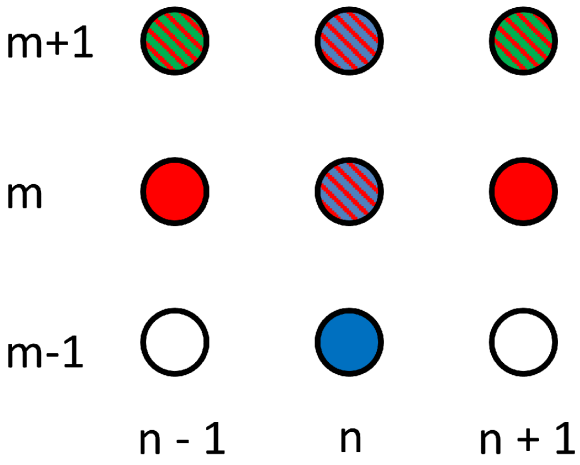
$$Q^m = \begin{bmatrix} 2 - F_{m1} & \frac{1}{2}F_{m1} & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{2}F_{m2} & 2 - F_{m2} & \frac{1}{2}F_{m2} & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}F_{m3} & 2 - F_{m3} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \frac{1}{2}F_{m,N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}F_{mN} & 2 - F_{mN} \end{bmatrix}$$

Вектор $\vec{b}^m$ - нелинейная функция (квадратичная) такая же, как и в схеме 1, матрица P^m такая же, как в схеме 4

Схема 6. BFD2 = CN + implicit

Схема практически полностью аналогична предыдущей, однако имеет существенной отличие, которое требует другого решателя системы уравнений!

для производной по времени - обратное дифференцирование второго порядка, для второй производной - схема К-Н, при этом для аппроксимации производной в нелинейной части теперь используется **неявная** схема!



Узел задействован в аппроксимации:

- 2-й производной по X

- нелинейной части

- производной по t

- не задействован

$$P^m \vec{T}^{m+1} = Q^m \vec{T}^{m} - \frac{1}{2}\vec{T}^{m-1} + \vec{b'}^{m+1}(\vec{T}^{m+1})$$

$\vec{b'}^{m+1}_n = F^m_n \phi^m_n (T^{m+1}_{n+1} - T^{m+1}_{n-1})^2$ - в нелинейной части, физические свойства берутся из m - го момента времени, а вот производная по координате считается уже в неявном виде, поэтому вектор $\vec{b'}$ зависит от $\vec{T}^{m+1}$ относительно просто.

Это уже система нелинейных уравнений, так как неизвестный вектор $\vec{T}^{m+1}$ сходит в правую часть в виде квадратичной функции.

Для решения системы нелинейных уравнений может быть исопльзован метод Ньютона-Рафсона.

Метод Ньютона-Рафсона

Если у нас есть система нелинейных уравнений:

$$\vec{\Phi}(\vec{x}) = \vec{0}$$

где $\vec{\Phi}$ - нелинейная векторная функция векторного аргумента, которая осуществляет взамно-однозначный "мэппинг" вектора размером $N \times 1$ в другой вектор того же размера $\vec{\Phi} : \mathscr{R}^N \to \mathscr{R}^N$

В методе H-P данная система решается итерационно, итерация по методу H-P имеет вид:

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k - [\nabla\vec{\Phi}(\vec{x}_k)]^{-1}\vec{\Phi}(\vec{x}_k)$$

k - индекс шага

$\nabla\vec{\Phi}(\vec{x}_k) = J(\vec{x}_k)$ - матрица Якоби (градиент вектора).

Метод следует опять-таки из разложения векторной функции в ряд Тейлора:

$$\vec{\Phi}(\vec{x} + \vec{p}) = \vec{\Phi}(\vec{x}) + \nabla\vec{\Phi}(\vec{x})(\vec{p}) + \frac{1}{2!}\vec{p}^T\nabla^2\vec{\Phi}(\vec{x})\vec{p} + ...$$

Разложим в ряд Тейлора в окрестности точки $\vec{x}_k$:

$$\vec{\Phi}(\vec{x}_k) = \vec{\Phi}(\vec{x}^*) + \nabla\vec{\Phi}(\vec{x}^*)(\vec{x}_k - \vec{x}^*) + O(||x^* - x_k||^2) = \nabla\vec{\Phi}(\vec{x}^*)(\vec{x}_k - \vec{x}^*) + O(||x^* - x_k||^2)$$

Подставив в формулу для шага метода H-P получим:

$$\vec{x}_{k+1} - \vec{x}^* = \vec{x}_k - \vec{x}^* - [\nabla\vec{\Phi}(\vec{x}_k)]^{-1}[\nabla\vec{\Phi}(\vec{x}^*)(\vec{x}_k - \vec{x}^*) + O(||x^* - x_k||^2)]$$

Из формулы выше видно, что когда $\nabla\vec{\Phi}(\vec{x}_k) = \nabla\vec{\Phi}(\vec{x}^*)$ алгоритм сходится к решению $\vec{x}_{k+1} = \vec{x}^*$ с точностью второго порядка

Отличие от метод Ньютона в оптимизации:

- В задачах оптимизации, мы решаем переопределенную систему, где число уравнений больше числа неизвестных, здесь они равны

- Метод Ньютона в оптимизации - требует расчета матрицы вторых производных (матрица Гесса)

- Если применить метод Ньютона-Рафсона к выражению для **градиента** невязки в задаче оптимизации, то есть искать решение, которое дает нулевой градиент, то мы получим метод Ньютона для оптимизации.

Применение метода Ньютона-Рафсона для схемы 6

Для применения метода Ньютона-Рафсона к схеме BFD2 - CT - implicit, выражение перепишем в виде системы нелинейных уравнений, чтобы решать их методом Ньютона-Рафсона:

$$\vec{\Phi}(\vec{X}) = P^m\vec{X} - \vec{b'}(\vec{X}) + \frac{1}{2}\vec{T}^{m-1} - Q^m\vec{T}^m = \vec{0}$$

Неизвестным тут является вектор $\vec{X} \equiv \vec{T}^{m+1}$

Чтобы итерационно решать систему $\vec{\Phi}(\vec{X}) = \vec{0}$ необходимо уметь вычислять матрицу якоби $\nabla_{\vec{X}}\vec{\Phi}$,

в выражении для $\vec{\Phi}$ первые два слагаемых зависят от неизвестной (распределения температуры по толщине на следующем шаге),

а вторые два слагаемых - только от известных температур в предыдущие моменты времени.

В данном случае, матрица якоби задачи может быть достаточно просто посчитана аналитически.

Для первого слагаемого все просто:

$$\nabla_{\vec{X}}[P^m\vec{X}] = P^m$$

Для второго слагаемого ситуация сложнее:

Формулу для вектора $\vec{b'}$ можно переписать в матричном виде (первая и последняя строки этой матрицы - неправильные, так как зависят от типа граничных условий):

$$D = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$\vec{b'}(\vec{X}) = \mathrm{diag}(\vec{F}^m \circ \vec{\phi}^m)(D\vec{X} \circ D\vec{X})$, где $\vec{F}^m = \begin{matrix} F_1^m \\ \vdots \\ F_N^m \end{matrix}$, $\vec{\phi}^m = \begin{matrix} \phi_1^m \\ \vdots \\ \phi_N^m \end{matrix}$ - вектора коэффициентов

$\circ$ - поэлементное умножение (произведение Адамара) $\vec{c}(\vec{x}) = \vec{a} \circ \vec{b} : [\vec{c}]_i = [\vec{a}]_i[\vec{b}]_i : \vec{c} = \begin{bmatrix} a_1b_1 \\ \vdots \\ a_nb_n \end{bmatrix}$

$\mathrm{diag}(\vec{a})$ - операция диагонализации вектора, $\mathrm{diag}(\vec{a}) = \begin{bmatrix} a_1 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & a_N \end{bmatrix}$

Операция $\mathrm{diag}(\vec{a})A$ умножает каждую строку матрицы на соответствующую координату вектора $\vec{a}$,

если умножать матрицу справа $A \cdot \mathrm{diag}(\vec{a})$ на диагонализованный вектор, то каждый столбец матрицы умножается на соотвествующую координату

```
clearvars
a = sym('a',[3,1]);
```

```
b = sym('b',[2,1]);
C = sym('c',[3,2]);
diag(a)*C
C*diag(b)
% в матлаб произведение адамара работает добавлением точки
a.*C
C.*transpose(b)
```

Так как вектор $\vec{b'}(\vec{x})$ содержит произведение Адамара двух векторов, то вначале получим формулу для дифференцирования произведения Адама двух векторных функций, зависящих от векторного аргумента.

$\vec{c}(\vec{x}) = \vec{a}(\vec{x}) \circ \vec{b}(\vec{x}) \quad \vec{c} = \begin{bmatrix} a_1(\vec{x})b_1(\vec{x}) \\ \vdots \\ a_n(\vec{x})b_n(\vec{x}) \end{bmatrix}$, тогда

$$\nabla_{\vec{x}} \vec{c} = \begin{bmatrix} \nabla[a_1(\vec{x})b_1(\vec{x})] \\ \vdots \\ \nabla[a_n(\vec{x})b_n(\vec{x})] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla[a_1(\vec{x})]b_1(\vec{x}) \\ \vdots \\ \nabla[a_n(\vec{x})]b_n(\vec{x}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_1(\vec{x})\nabla[b_1(\vec{x})] \\ \vdots \\ a_n(\vec{x})\nabla[b_n(\vec{x})] \end{bmatrix} = \mathrm{diag}(\vec{b})\nabla\vec{a} + \mathrm{diag}(\vec{a})\nabla\vec{b}$$

То есть, градиент вектора (матрица Якоби) произведения Адамара двух векторных функций - это сумма матриц Якоби этих вух функции, в которых каждая строка умножена на соотвествующую координату второй функции.

В соответствии с этим выражением легко получить формулу для матрицы Якоби вектора $\vec{b'}(\vec{x})$:

$$\nabla_{\vec{X}} \vec{b'}(\vec{X}) = \nabla[\mathrm{diag}(\vec{F}_m \circ \vec{\phi}_m)(D\vec{X} \circ D\vec{X})] = \mathrm{diag}(\vec{F}_m \circ \vec{\phi}_m)\nabla[(D\vec{X} \circ D\vec{X})] = \mathrm{diag}(\vec{F}_m \circ \vec{\phi}_m)[\mathrm{diag}(D\vec{X})\nabla[D\vec{X}] + D\vec{X})\nabla[D\vec{X}]$$

Итого, окончательное выражение для k-й итерации метода Ньютона-Рафсона для схемы **BFD2 - CT - implicit** будет иметь вид:

$$\vec{\Phi}(\vec{X}_k) = P^m\vec{X}_k - \vec{b'}(\vec{X}_k) + \frac{1}{2}\vec{T}^{m-1} - Q^m\vec{T}^m$$

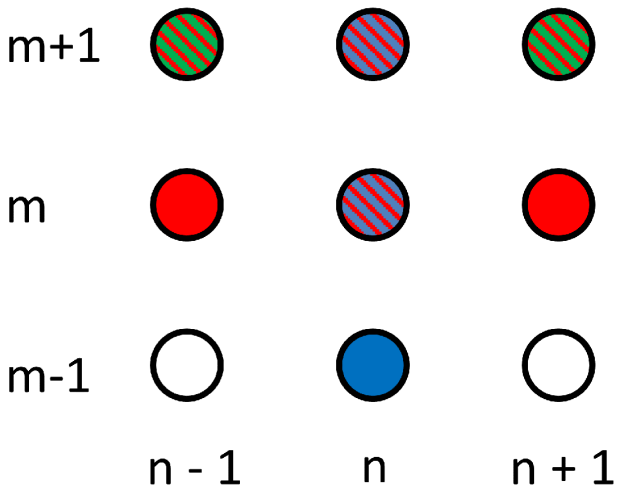
$$\nabla\vec{\Phi}(\vec{X}_k) = P^m + 2\mathrm{diag}[\vec{F}^m \circ \vec{\phi}^m \circ (D\vec{X}_k)]D$$

$$\vec{X}_{k+1} = \vec{X}_k - (\nabla\vec{\Phi}(\vec{X}_k))^{-1}\vec{\Phi}(\vec{X}_k)$$

```
syms x1 x2 real
A = sym('a',[2,2]);
jacobian(A*[x1;x2],[x1;x2])
F = A*[x1;x2] .* A*[x1;x2];
J = jacobian(F, [x1 x2])
```

Таким образом, для данной схемы достаточно просто посчитать Якобиан аналитически, что может быть

Схема 7. BFD2 - CN - implicit + implicit material properties



Узел задействован в аппроксимации:

- 2-й производной по X

- нелинейной части

- производной по t

- не задействован

Эта схема отличается от предыдущей тем, что материальные свойства тоже берутся в неявной форме, то есть:

$$P^{m+1}\vec{T}^{m+1} = Q^{m+1}\vec{T}^{m} - \frac{1}{2}\vec{T}^{m-1} + \vec{b}^{m+1}(\vec{T}^{m+1})$$

Теперь мы не только считаем производные для $m+1$ -го момента времени, но и теплофизические свойства рассчитываем из неявной схемы.

$b_n^{m+1} = F_n^{m+1}\phi_n^{m+1}(T_{n-1}^{m+1} - T_{n+1}^{m+1})^2$, также и все матрицы теперь тоже зависят от распределения температуры для $m+1$ -го момента времени

$\vec{b}(\vec{T}^{m+1}) = \mathrm{diag}(\vec{F}^{m+1} \circ \vec{\phi}^{m+1})(D\vec{T}^{m+1} \circ D\vec{T}^{m+1})$

Функция невязки для метода Ньютона-Рафсона будет иметь вид:

$\vec{\Phi}(\vec{X}) = P(\vec{X}) \cdot \vec{X} - \vec{b}(\vec{X}) + \frac{1}{2}\vec{T}^{m-1} - Q(\vec{X})\vec{T}^{m}$ - матрицы P и Q теперь являются функциями неизвестной переменной $\vec{X} \equiv \vec{T}^{m+1}$

В этой системе нелинейных уравнений все члены кроме $\frac{1}{2}\vec{T}^{m-1}$ и $\vec{T}^{m}$ зависят от неизвестного вектора $\vec{X}$

Граничные условия и возможность восстановления температуры

С начальным условием все более-менее понятно, оно дает нам соотвественно первую строку матрицы T_n^1

$T_n^1 = \phi(x_n)$

В матрицах конечно-разностных схем явно что-то не так с первой и последней строками.

Предположим, что теплофизика не зависит от температуры, а это значит, что вектор $\vec{b}^{m}$ не будет иметь нелинейного члена и станет равным просто вектору $\vec{T}^{m}$, также для простоты, пусть сетка выбрана такой, что $F_{mn} = \frac{a_{mn}\Delta t}{\Delta x^2} = 1$ и у нас равномерное распределения температуры по толщине, такое решение должно давать тривильную форму

```
N = 100;
A = toeplitz([3,-1,zeros(1,N-2)])
T0 = 20*ones(N,1);
T = zeros(N);
T(:,1) = T0;
for ii=2:N
    T(:,ii) = A\T(:,ii-1);
end
surf(T)
```

Нам нужно, чтобы матрица при решении задачи всегда давала заданное значение первой координаты вектора $\vec{T}^{m}$: $T_1^m(t_m) = f(t_m) = f^m$

Как вариант можно модифицировать матрицу B_m,

$$B_m \overrightarrow{T}^{m+1} = \overrightarrow{b}^{m}$$

насчет первой строки понятно, ее можно сделать тривиальной:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -F_{m2} & 1+2F_{m2} & -F_{m2} & \cdots & 0 \\ 0 & -F_{m3} & 1+2F_{m3} & \cdots & 0 \\ & & & \ddots & \\ \vdots & \vdots & F_{m,N-1} & 1+2F_{m,N-1} & -F_{m,N-1} \\ 0 & 0 & 0 & -F_{mN} & 1+2F_{mN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1^{m+1} \\ \vdots \\ T_N^{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^m \\ \vdots \\ b_N^m \end{bmatrix}$$

При этом мы должны поменять первую и вторую координаты вектора $\overrightarrow{b}^{m}$

$b_1^m = T_1^{m+1} = f(t_{m+1}) = f^{m+1}$,

$b_2^m = T_2^m + F_{m2}\phi_{m2}(T_1^m - T_3^m)^2 + F_{m2}T_1^{m+1}$

Остальные остаются без изменений, таким образом, добавление граничных условий влияет на

непосредственно элемент сетки, куда добавляем, а также на соседний.

Однако данный способ не идеален, так как исходная матрица была трехдиагональной, а теперь стала полной, для трехдиагональных матриц существует специальный быстрый солвер (при решении системы при помощи mldivide)

Для учета граничных условий и расчета теплового потока, рекомендуется использовать разностные соотношения второго порядка точности, учитывающие накопление тепла на предыдущем шаге:

$q^{m+1} = \frac{\lambda_0^m}{\Delta x}(T_0^{m+1} - T_1^{m+1}) + C_0^m \frac{\Delta x}{2\Delta t}(T_0^{m+1} - T_0^m)$ - тепловой поток сверху

$\widetilde{q}^{m+1} = \frac{\lambda_N^m}{\Delta x}(T_N^{m+1} - T_{N-1}^{m+1}) + C_0^m \frac{\Delta x}{2\Delta t}(T_N^{m+1} - T_N^m)$ - тепловой поток снизу

В матричной форме данные уравнения будут иметь вид0

Рассмотрим одномерную задачу теплопроводности

$$\begin{cases} C(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial x}) \\ T(x,0) = \phi(x), x \in [0,b] \\ T(d,t) = f(t), t \in [0,t_m] \\ -\lambda(T(b,t))\frac{\partial T}{\partial x}(b,t) = \widetilde{q}(t) \end{cases}$$

Это уравнение в частных производных, с двумя переменными - время и координата, толщина образца b, d - точка расположения термопары.Кроме того, мы знаем распределение температуры по толщине образца в начальный момент времени $\phi(x)$, зависимость температуры от времени на некоторой глубине d, которая задачется функцией $f(t)$ и зависимость от времени теплового потока через нижнюю границу $\widetilde{q}(t)$.

$C(T)$ - теплоемкость образца, она выражается через его удельную теплоемкость и плотность: $C(T) = c_v(T)\rho$.

$\lambda(T)$ - коэффициент теплопроводности

Если $d = 0$ - уравнение становится прямой задачей, с граничными условиями первого рода (температура) сверху и второго рода (тепловой поток) снизу. Собственно, в области $x \in [d,b]$ задача является прямой и решается однозначно. А вот в область $x \in [0,d]$ решение требуется продлить, восстановив граничные условия и температуру на верхней границе (то есть, это задача восстановления граничных условий). Задача в такой формулировке удобна, так как на практике, даже если мы ставим целью измерить температуры на поверхности слоя, термопары все равно должны заделываться на некоторую глубину под поверхностью образца, измерить температуру нагреваемой поверхности при помощи термопары невозможно.

Пусть нам известна зависимость температуры от времени сверху и тепловой поток снизу слоя.

Предположим, что температура у нас имеет следующую форму, это матрица $[T]$, элемент T_l^n которой, стоящий на m -й строке n - го столбца представляет собой температуру в m - й момент времени для точки с n - й координатой. Данная матрциа имеет размерность $M \times N$.

$$\begin{cases} \frac{1}{a(T)}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\lambda'(T)}{\lambda(T)}(\frac{\partial T}{\partial x})^2 \\ T(x,0) = \phi(x), x \in [0,b] \\ T(0,t) = f(t), t \in [0,t_m] \\ -\lambda(T(b,t))\frac{\partial T}{\partial x}(b,t) = \widetilde{q}(t) \end{cases}$$

FUNTIONS

```
% функция для решения уравнения теплопроводности при помощи явной схемы
```

```
% первого порядка и явной схемы

function D = Dt(M)
% M- number of input matrix rows
    persistent Di
    if isempty(Di) || M~=size(Di,1)
        Di = zeros(M-1,M);
        Di(diagonal_inds(0,M-1,M)) = -1;
        Di(diagonal_inds(1,M-1,M)) = 1;
    end
    D = Di;
end

function D = Dtsym(M)
% M- number of input matrix rows
    D = zeros(M-1,M);
    D(diagonal_inds(-1,M-1,M)) = -1/2;
    D(diagonal_inds(1,M-1,M)) = 1/2;
end
function D = D2t(N)
    D = zeros(N,N);
    D(diagonal_inds(0,M-1,M)) = -2;
    D(diagonal_inds(1,M-1,M)) = 1;
    D(diagonal_inds(-1,M-1,M)) = 1;
end
```