**Исследование точности и экономичности некоторых численных методов решения задачи Дирихле для двумерного стационарного уравнения теплопроводности.**

Неустроев А. Л., ИУ7-19.

*С использованием ряда вычислительных экспериментов на примере трех тестовых задач выполнено исследование точности и экономичности трех сеточных методов приближенного решения задачи Дирихле для стационарного уравнения теплопроводности в двумерной прямоугольной области. Сделан вывод, что наименьшей погрешностью и наилучшей экономичностью среди исследованных методов обладает метод продольно-поперечной прогонки.*

Метод конечных разностей, или метод сеток, является одним из наиболее распространенных численных методов приближенного решения дифференциальных уравнений в частных производных. Суть этого метода состоит в приближенной замене производных их конечно-разностными аппроксимациями и сведении дифференциального уравнения к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), для решения которых разработан ряд эффективных численных методов.

В настоящей работе выполнено сравнение точности и экономичности трех сеточных методов решения задачи Дирихле для стационарного уравнения теплопроводности в двумерной прямоугольной области. Сравниваются метод прогонки в рамках трехслойной продольно-поперечной схемы и два варианта метода Монте-Карло. Точность этих методов оценивается путем сопоставления результатов расчета температуры тонкой квадратной пластины, полученных этими методами, с точным аналитическим решением задачи Дирихле для нескольких тестовых вариантов граничных условий и функций внешнего источника тепла.

В первом разделе работы сформулированы три тестовые задачи, для которых стационарное уравнение теплопроводности имеет простые аналитические решения.

Во втором разделе эти тестовые задачи решаются методом прогонки. Решение стационарного уравнения теплопроводности ищется физически прозрачным и математически строго обоснованным "методом установления" как решение нестационарного уравнения теплопроводности при . Нестационарное уравнение теплопроводности путем замены переменных преобразуется к каноническому виду уравнения параболического типа, которое с помощью конечно-разностной аппроксимации сводится к СЛАУ. Полученная СЛАУ решается методом продольно-поперечной прогонки.

В третьем разделе тестовые задачи из первого раздела решаются с использованием двух вариантов метода случайного блуждания по сетке.

В четвертом разделе обсуждаются полученные результаты.

1. **Физико-математическая модель и постановка задачи.**

Двумерное уравнение теплопроводности в однородной изотропной среде имеет вид

, (1)

где и - плотность и удельная теплоемкость среды,  - коэффициент теплопроводности,  - мощность внешнего источника тепла. В стационарном случает уравнение (1) не содержит производной по времени:

, (2)

где . Уравнения типа (2) в математике называется уравнением Пуассона. Уравнение (2) необходимо дополнить граничными условиями. Будем рассматривать квадратную пластину, расположенную в области  с однородными граничными условиями Дирихле:

, (3)

где - некоторая константа. Уравнение (2) с заданным источником и граничными условиями (3) всегда имеет единственное решение.

В настоящей работе с использованием трех различных численных методов получены приближенные решения уравнения (2) с граничными условиями (3). Точность этих приближенных решений оценена путем их сравнения с точным аналитическим решением уравнения (2) для двух тестовых источников  и трех тестовых значений . В качестве тестовых источников и тестовых значений  выбраны следующие:

Вариант №1.

, . (4)

Источник  имеет максимум в центре пластины  и монотонно убывает до нуля к краям пластины. Аналитическое решение уравнения (2) в этом случае имеет вид

. (5)

Температура (5) имеет максимум  в центре пластины и монотонно спадает до к краям пластины.

Вариант №2.

, . (6)

Источник (6) осциллирует внутри пластины. Он имеет пять максимумов  и четыре минимума . Точкам максимума соответствует максимальный нагрев, точкам минимума – максимальное охлаждение. Аналитическое решение уравнения (2) с источником и граничными условиями (6) имеет вид

. (7)

Температура (7) осциллирует внутри пластины аналогично источнику (6) и может быть как положительной, так и отрицательной.

В дальнейшем для численного решения уравнения (2) будет использоваться метод сеток. Один из параметров, который будет рассчитываться – относительная вычислительная погрешность расчета значений температуры  в узлах сетки с номерами  по отношению к . Эта вычислительная погрешность обусловлена заменой производных их конечноразностными аппроксимациями и в узле определяется формулой

. (8)

Естественно предположить, что в узлах сетки, ближайших к точкам, в которых  обращается в ноль, значение  может быть весьма большим. Это не связано с точностью используемых алгоритмов численных расчетов, а является следствием деления на малую величину . Чтобы подтвердить это, в работе исследована еще одна тестовая задача (вариант №3), в которой значения температуры в каждой точке пластины отличаются от (7) на одинаковую положительную константу.

Вариант №3.

, . (9)

Решение уравнения (2) с  и  из (9) имеет вид

. (10)

Решение (10) осциллирует в пространстве подобно решению (7), но теперь во всех точках пластины , т.е.  нигде не проходит через ноль. Благодаря этому относительная погрешность (8) для варианта №3 должна быть меньше, чем для варианта №2.

1. **Приближенное решение задачи Дирихле для стационарного уравнения теплопроводности методом продольно-поперечной прогонки**

Метод прогонки применяется как для численного решения уравнений эллиптического типа, к которым относится уравнение (2), так и для численного решения уравнений параболического типа, к которым относится уравнение (1). Однако, методы прогонки, разработанные для решения уравнений параболического типа, являются более экономичными и устойчивыми, чем методы прогонки, разработанные для решения уравнений эллиптического типа [1,2].

Чтобы свести интересующую нас задачу численного решения стационарного уравнения теплопроводности (2) к более экономичной задаче численного решения уравнения параболического типа, воспользуемся искусственным приемом. Введем в (1) некоторое «фиктивное время» . Тогда вместо (1) получим уравнение параболического типа в канонической форме

. (11)

Из физических соображений понятно (и это может быть математически строго доказано [2]), что если источник  и граничные условия не зависят от , то при  решение уравнения (11) будет сходиться к решению стационарного уравнения теплопроводности (2) при любых начальных условиях. Такой прием нахождения решения стационарного уравнения теплопроводности называется "метод установления" и позволяет свести задачу численного решения уравнения эллиптического типа (2) к задаче численного решения уравнения параболического типа (11).

Перейдем к реализации метода прогонки. Для аппроксимации дифференциального уравнения (11) разностным уравнением, введем пространственно-временную сетку с шагом  по оси  и шагом  по оси . Количество узлов сетки по осям  и  будет

, , (12)

где  и  - линейные размеры прямоугольной пластины по осям  и . Пространственные координаты узлов сетки определяются формулой

, , . (13)

Узлы с номерами , ,  лежат на границах области.

Фиктивное время  в (11) так же разбивается на дискретные интервалы. Существуют разные варианты разбиения  на интервалы [1]. Мы будем использовать схему с дробным шагом, которая считается более экономичной и более устойчивой, чем схема с целым шагом. В схеме с дробным шагом сетка является трехслойной. Нижний слой соответствует моменту фиктивного времени , средний слой моменту , верхний слой моменту , где  - некоторый дискретный шаг по переменной , .

Введем обозначение ,  и по стандартным формулам [1] аппроксимируем производные в (11) конечными разностями. В результате получим

, (14)

, (15)

где разностные операторы  и  определяются формулами

, (16)

. (17)

Граничные условия к уравнениям (14), (15) следуют из (3):

. (18)

Граничные условия (18) необходимо дополнить начальными условиями. Вне зависимости от начальных условий, решение (11) при  будет сходиться к решению стационарного уравнения [1,2]. Поэтому в качестве начальных условий для простоты можно выбрать

. (19)

Погрешность выполненной выше аппроксимации при переходе от дифференциального уравнения (11) к уравнениям в конечных разностях (14)-(15) равна  [1].

При  решение разностных уравнений (14)-(17) абсолютно сходится к точному решению уравнения (2) и устойчиво по отношению к граничным и начальным условиям [1].

Уравнение (14) содержит три неизвестных величины , , , соответствующих фиктивному времени . Остальные величины в (14) берутся из предыдущего слоя . При любом фиксированном индексе , уравнение (14) образует относительно неизвестных  СЛАУ с трехдиагональной матрицей. Поэтому, значения  легко вычисляются прогонкой по индексу , т.е. по направлению .

Уравнение (15) содержит три неизвестных величины , , , соответствующих моменту . Остальные величины в (15) берутся из предыдущего слоя . При любом фиксированном индексе , уравнение (15) образует относительно неизвестных  СЛАУ с трехдиагональной матрицей. Поэтому, значения  легко вычисляются прогонкой по индексу , т.е. по направлению .

Итоговый алгоритм расчета температуры следующий. Используя начальные условия (19), решаем СЛАУ (14) для каждого фиксированного  методом прогонки по индексу  для слоя . Найденное решение подставляем в (15) для слоя  и решаем СЛАУ (15) для каждого фиксированного  методом прогонки по индексу . В результате вычисляем все значения . Используя полученные значения , решаем СЛАУ (14) в слое  и так далее. Процесс итераций по  прекращается, когда для всех значений  выполняется условие , где  - заданная точность вычисления.

На базе изложенного выше алгоритма в работе реализована программа для численного решения уравнения (2) с граничными условиями Дирихле в прямоугольнике. Программа реализована на языке C# в среде разработки Visual Studio 2012.

С помощью этой программы рассчитаны стационарные значения температуры  в узлах сетки для трех тестовых вариантов функции источника и граничных условий, приведенных в предыдущем разделе. Для расчетов использовалась сетка из  узлов. Итерации по  производились до тех пор, пока точность вычисления не достигла значения . Шаг по  рассчитывался по формуле

. (20)

Такое значение  обеспечивает оптимальный компромисс между точностью разностной аппроксимации производной по  в (11) и количеством итераций по , необходимых для реализации заданной точности  [2].

Для оценки вычислительной точности метода прогонки рассчитывались такие характеристики, как максимальная абсолютная вычислительная погрешность

, (21)

усредненная по всем узлам абсолютная вычислительная погрешность

, (22)

максимальная относительная вычислительная погрешность

, (23)

и усредненная по всем узлам относительная вычислительная погрешность

. (24)

Результаты расчета этих характеристик приведены в таблице 1.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | , | , | , % | , % |
| Вариант №1 | 0,0032 | 0,0024 | 0,0037 | 0,0014 |
| Вариант №2 | 0,0369 | 0,0138 | 3,2475 | 0,1164 |
| Вариант №3 | 0,0369 | 0,0138 | 0,2545 | 0,0325 |

Таблица 1. Вычислительные погрешности температуры при использовании метода прогонки для трех вариантов тестовых задач.

Анализ представленных в таблице 1 данных выполнен в четвертом разделе работы.

Машинное время, затрачиваемое на решение одной тестовой задачи, лежало в диапазоне (10-13)с.

Следует отметить, что реализованная компьютерная программа позволяет не только рассчитывать стационарное распределение температуры в пластине, но и решать некоторые нестационарные задачи. Например, рассчитывать распределение температуры в пластине через некоторое время  после включения источника нагрева (4), (6) или (9) при условии, что начальная температура пластины . Для этого из соотношения  достаточно определить число шагов  и для данного  рассчитать температуры . В то же время, число итераций , необходимых для расчета стационарного распределения температуры, от  и  не зависит, поскольку определяется заданной точностью вычисления .

1. **Приближенное решение задачи Дирихле для стационарного уравнения теплопроводности методом Монте-Карло**

Метод статистических испытаний, называемый методом Монте-Карло, широко используется для приближенного решения уравнений математической физики. Существует много вариантов метода Монте-Карло: случайные блуждания по сетке, случайные блуждания по сферам, случайные блуждания по квадратам и т.д. [3,4]. В методе случайного блуждания по сетке стационарное уравнение теплопроводности сначала с помощью конечно-разностной аппроксимации производных сводится к СЛАУ, а затем приближенное численное решение СЛАУ находится методом статистических испытаний.

В настоящей работе рассматриваются два варианта случайного блуждания по сетке: стандартный и модифицированный.

Накроем пластину квадратной сеткой с шагом . Координаты узлов этой сетки будут . Узел считается внутренним, если он и все четыре соседних узла находятся внутри пластины. В противном случае узел считается граничным. Во внутренних узлах аппроксимируем производные в (2) конечными разностями. Тогда в каждом внутреннем узле  уравнение (2) заменится разностным уравнением

. (25)

В граничных узлах . Решение СЛАУ (25) при  сходится к решению задачи Дирихле для уравнения (2) с граничными условиями (3) [3,4].

Если перенумеровать все внутренние и граничные узлы в общем порядке одним индексом , то СЛАУ (25) можно переписать в виде

, , , (26)

 - общее количество узлов сетки. Свободные члены в (26) равны , если узел номер  внутренний, и , если узел номер  граничный. Матрица коэффициентов  имеет следующий вид: внутреннему узлу с номером  отвечает строка , в которой 4 элемента равны 0.25, а остальные – нули; граничному узлу с номером  отвечает строка ; все диагональные элементы . В (26)  в узле с номером  явным образом зависит от значения  только в том же узле. Однако, неявным образом  в (26) зависит от значений  и во всех других узлах сетки через посредство величин . С физической точки зрения этот математический результат является вполне ожидаемым.

Процедура решения СЛАУ типа (26) методом статистических испытаний хорошо известна [3, 4]. Решение имеет вид , где  - математическое ожидание случайной величины , которая определяется следующим образом. Из внутреннего узла с номером  испускается частица, которая с равной вероятностью 0.25 может перейти на любой из четырех соседних узлов. Если соседний узел, на которых частица перешла, оказывается граничным, то процесс блуждания частицы останавливается. Если соседний узел, на который перешла частица, является внутренним, то из него частица с равной вероятностью 0.25 может вновь перейти на любой из четырех соседних узлов. В результате возникает цепь из случайных блужданий частицы по узлам сетки. Цепь обрывается, когда частица попадает в граничный узел. Вероятность того, что цепь случайных блужданий никогда не выйдет на границу, равна нулю [3,4]. Каждой случайной цепи, начинающейся в узле с номером , сопоставляется случайная величина :

. (27)

Суммирование в (27) ведется по всем внутренним узлам, через которые проходит цепь, от начального узла с номером  до узла с номером , последнего перед выходом цепи на границу. Для приближенного численного расчета  в узле с номером , математическое ожидание  заменяется на среднее по выборке из  испытаний:

. (28)

Каждому испытанию с номером  соответствует случайная цепь и свое значение случайной величины . Выборочное среднее по  испытаниям случайной величины  вычисляется по формуле

. (29)

При  выборочное среднее  сходится к  как , т.е. весьма медленно.

Если выполнить несколько серий по  испытаний в каждой, то от серии к серии выборочное значение случайной величины  будет меняться. Абсолютная  и относительная  статистические погрешности случайной величины  с вероятностью 0.95 ограничены сверху неравенствами [4]

, (30)

, (31)

где  - выборочная оценка дисперсии случайной величины :

. (32)

Формулы (30)-(32) позволяют оценить величину статистической погрешности расчета температуры при заданном количестве испытаний .

На основе изложенного выше алгоритма, в работе реализована программа для расчета температуры  в каждом узле сетки, а также максимальной по узлам абсолютной статистической погрешности

, (33)

усредненной по узлам абсолютной статистической погрешности

, (34)

максимальной по узлам относительной статистической погрешности

, (35)

усредненной по узлам относительной статистической погрешности

. (36)

Статистические погрешности по формулам (33)-(36) рассчитывались для трех вариантов тестовых задач из раздела 1. Для этих же тестовых задач рассчитывались абсолютные и относительные вычислительные погрешности, определяемые формулами (21)-(24), в которых индексы узлов  заменялись на индекс .

Квадратная сетка состояла из  узлов, для каждого узла выполнялось  испытаний. Машинное время, затрачиваемое на решение одной тестовой задачи, составляло 254 минуты. Результаты расчета статистических погрешностей представлены в таблице 2, значения абсолютных и относительных вычислительных погрешностей температуры представлены в таблице 3.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | , | , | , % | , % |
| Вариант №1 | 3.14 | 0.76 | 12.31 | 1.78 |
| Вариант №2 | 4.33 | 1.08 | 174.56 | 18.85 |
| Вариант №3 | 4.58 | 0.97 | 9.17 | 2.58 |

Таблица 2. Статистические погрешности метода Монте-Карло.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | , | , | , % | , % |
| Вариант №1 | 8.81 | 1.34 | 16.35 | 2.91 |
| Вариант №2 | 7.52 | 2.77 | 398.92 | 31.48 |
| Вариант №3 | 10.35 | 1.96 | 32.20 | 4.65 |

Таблица 3. Вычислительные погрешности температуры при использовании метода Монте-Карло.

Обсуждение представленных в таблицах 2, 3 данных содержится в четвертом разделе работы.

Использованный выше стандартный алгоритм расчета температуры методом Монте-Карло требует больших затрат машинного времени. Этот алгоритм можно легко модифицировать, чтобы улучшить его экономичность. Для этого, в первую очередь, рассчитаем температуру в ближайших к границам квадрата узлах. Далее примем эти узлы за новую границу уменьшенного квадрата и рассчитаем температуру в узлах, ближайших к новой границе. Снова примем эти узлы за новую границу и так далее. На каждом следующем шаге площадь области блуждания будет меньше, чем на предыдущем. В стандартном алгоритме Монте-Карло площадь области возможного блуждания частицы, испускаемой из любого узла, равна площади пластины. Для модифицированного алгоритма, чем ближе узел находится к центру пластины, тем меньше площадь области блуждания частиц, испускаемых из этого узла. Естественно предположить, что такой модифицированный алгоритм будет значительно более экономичным, чем алгоритм стандартного метода Монте-Карло.

Для подтверждения этого в работе, с использованием модифицированного алгоритма Монте-Карло, решены те же тестовые задачи, которые выше были решены с использованием стандартного алгоритма Монте-Карло. Как и следовало ожидать, машинное время, затрачиваемое на решение одной тестовой задачи, оказалось на порядок меньше, чем для стандартного алгоритма Монте-Карло, и составило 23 минуты. Результаты расчета представлены в таблицах 4, 5.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | , | , | , % | , % |
| Вариант №1 | 0.47 | 0.21 | 3.44 | 0.59 |
| Вариант №2 | 0.53 | 0.31 | 97.15 | 4.14 |
| Вариант №3 | 0.54 | 0.31 | 2.94 | 1.63 |

Таблица 4. Статистические погрешности экономичного метода Монте-Карло.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | , | , | , % | , % |
| Вариант №1 | 0.79 | 0.14 | 3.5 | 0.47 |
| Вариант №2 | 1.37 | 0.32 | 99.49 | 4.62 |
| Вариант №3 | 1.51 | 0.33 | 4.8 | 1.47 |

Таблица 5. Вычислительные погрешности экономичного метода Монте-Карло.

1. **Обсуждение результатов.**

Метод прогонки.

Проанализируем результаты численных экспериментов, представленные в таблице 1. Эти результаты получены методом продольно-поперечной прогонки.

Из трех вариантов тестовых задач, наименьшие абсолютная и относительная вычислительные погрешности имеют место для варианта №1, который соответствует функции источника, монотонно спадающей от центра пластины к ее границам.

Абсолютная вычислительная погрешность для тестовых вариантов №2 и №3 одинаковая. Этого следовало ожидать, поскольку распределения температуры, определяемые формулами (7) и (10), подобны друг другу и во всех точках пластины отличаются на одну и ту же константу. Абсолютная вычислительная погрешность для тестовых вариантов №2 и №3 больше, чем для варианта №1. Это связано с тем, что для вариантов №2 и №3 температура пластины, определяемая формулами (7) и (10), осциллирует. Понятно, что при одном и том же шаге сетки разностная аппроксимация производных в уравнении (2) для осциллирующих функций (7) и (10) будет менее точной, чем для монотонной в пределах пластины функции (5).

Максимальная относительная погрешность расчета для тестового варианта №2 более чем на порядок превышает аналогичную характеристику для тестового варианта №3. Это не связано с вычислительной погрешностью метода прогонки, а является следствием того, что в варианте №2 температура в разных точках пластины может быть как положительной, так и отрицательной. В узлах сетки, ближайших к точкам, в которых температура пластины проходит через ноль, относительная погрешность велика из-за деления абсолютной погрешности на малую величину.

Основываясь на данных таблицы 1, можно утверждать, что абсолютная вычислительная погрешность метода прогонки мала и этот метод позволяет получать результаты, близкие по точности к аналитическому решению стационарного уравнения теплопроводности.

Метод Монте-Карло.

Из двух исследованных вариантов метода Монте-Карло несомненным преимуществом, с точки зрения экономичности, обладает модифицированный алгоритм с постоянно сжимающейся областью случайного блуждания. Кроме того, из сравнения данных таблиц 2, 3 с данными таблиц 4, 5 видно, что модифицированный метод обладает меньшей статистической погрешностью и меньшей вычислительной погрешностью, по сравнению со стандартным методом Монте-Карло. Это может быть связано с тем, что в модифицированном методе Монте-Карло среднее число блужданий частиц по сетке меньше, чем в стандартном методе Монте-Карло.

Сравним экономичность и точность модифицированного метода Монте-Карло и метода прогонки. Машинное время, затрачиваемое на решение одной тестовой задачи, составляло (10-13)с при использовании прогонки и 23 минуты при использовании модифицированного метода Монте-Карло. Следовательно, при решении двумерных задач теплопроводности, метод продольно-поперечной прогонки является значительно более экономичным, чем модифицированный метод Монте-Карло. Кроме того, метод продольно-поперечной прогонки обладает на (12) порядка меньшей вычислительной погрешностью, чем модифицированный метод Монте-Карло, что следует из сравнения данных таблицы 1 с данными таблицы 5.

Суммируя результаты работы, можно сделать следующие выводы. Из двух исследованных вариантов метода Монте-Карло лучшей точностью и экономичностью обладает модифицированный метод Монте-Карло. В тоже время, модифицированный метод Монте-Карло применительно к решению двумерных задач теплопроводности существенно уступает по экономичности и вычислительной точности методу продольно-поперечной прогонки.

Литература.

1. Самарский А. А. Теория разностных схем. –М.: Наука, 1989. -616с.
2. Калиткин Н. Н. Численные методы. –М.: Наука, 1978. -512с.
3. Бусленко Н. П., Шрейдер Ю. А. Метод статистических испытаний (Монте-Карло) и его реализация на цифровых вычислительных машинах. –М.: Физматгиз, 1961. -228с.
4. Соболь И. М. Численные методы Монте-Карло. –М.: Наука, 1973. -312с.