

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра материаловедения,
технологии и управления качеством

Синёв И.В., Симаков В.В.

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Учебное пособие

для студентов 2 курса
направления подготовки бакалавриата
22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»,
профиля подготовки «Нанотехнологии, диагностика и синтез
современных материалов»,
института физики

Авторы

Синёв Илья Владимирович – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры материаловедения, технологии и управления качеством, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского.

Симаков Вячеслав Владимирович – д.т.н., доцент, профессор кафедры материаловедения, технологии и управления качеством, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1 Краевые задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений	4
1.1 Линейные краевые условия	6
1.2 Построение разностных схем методом баланса	7
1.2.1 Физическая интерпретация краевых задач	8
1.2.2 Расчётная сетка.	12
1.2.3 Разностная схема для дифференциального уравнения.	16
1.2.4 Разностная аппроксимация краевых условий	21
1.2.5 Метод прогонки для решения систем линейных уравнений с матри- цами специального вида	27
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	33

ВВЕДЕНИЕ

Численные методы являются основой решения комплексных задач, возникающих в ходе развития материаловедения и новейших областей техники и технологии. Использование ЭВМ при решении научных и технических задач позволяет провести детальное математическое моделирование процессов и систем, которое существенно сокращает потребность в натурных экспериментах, а в ряде случаев может их заменить.

Важным аспектом алгоритмов численных методов является гарантирование нахождения приближенного решения с заданной точностью за конечное число математических операций. При этом для численных методов характерна множественность возможных методов решения.

В пособии излагаются основы численных методов решения задач алгебры, математического анализа, оптимизации, обыкновенных дифференциальных уравнений. Рассмотрены алгоритмы и возможности их применения для приближенного решения различных классов математических задач. В пособии изложен материал, необходимый студентам для приобретения навыков применения численных методов для решения задач теоретического и прикладного характера в области профессиональной деятельности. Наибольшее внимание уделяется фундаментальным разделам численных методов – численному решению систем линейных алгебраических уравнений, методам оптимизации и разностным методам решения задач математической физики.

Теоретический материал изложен сжато, но при этом большое внимание уделено рекомендациям по практическому применению рассмотренных алгоритмов. Изложение материала проиллюстрировано рядом примеров направленных на развитие практических навыков применения численных методов для решения конкретных задач. Предполагается, что при изучении данного курса студенты знакомы с основами высшей математики и владеют навыками программирования.

1 Краевые задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений

Исследование большого круга естественно-научных и инженерных проблем приводит к математическим задачам, относящимся к решению дифференциальных уравнений и граничных проблем для них, интегральных и других функциональных уравнений.

В практике чаще всего встречаются задачи, для которых точное решение не может быть найдено или оно имеет невысокую эффективность. Поэтому приближенные методы решения задач граничных задач, например, задач математической физики, в особенности метод сеток получили широкое распространение.

Основные *достоинства приближенных методов* заключаются в том, что они являются *универсальными и эффективными*, так как позволяют находить приближенное решение для широкого класса задач новейших областей науки, техники и технологий. Как правило, такие задачи формулируются в виде основного дифференциального уравнения (системы дифференциальных уравнений) и дополнительных (граничных) условий, которые обеспечивают существование и единственность решения.

Под краевой (граничной) задачей понимают задачу о нахождении решения дифференциального уравнения (системы дифференциальных уравнений), удовлетворяющего краевым условиям на границе рассматриваемой области.

В каждой краевой задаче искомое решение должно удовлетворять дифференциальному в рассматриваемой области Ω , а также некоторому дополнительному условию на границе $\partial\Omega$ или в нескольких различных точках этой области. Например для одномерных задач, когда искомая функция зависит только от одной пространственной переменной $u(x)$, краевые задачи можно сформулировать в виде:

$$\frac{du(x)}{dx} = f(x, u), \quad \varphi(\xi, u(\xi)) = 0, \quad \xi \in \mathcal{A} \quad (1)$$

где $u(x) = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T$ – искомая неизвестная вектор-функция; x – независимое переменное; $f(x, u) = (f_1, f_2, \dots, f_n)^T$ – вектор-функция многих переменных, определенная в некоторой замкнутой области изменения своих аргументов; $\varphi(\xi, u) = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)^T$ – вектор-функция многих переменных,

определяющая дополнительные условия для неизвестной функции в различных точках пространства; $\mathcal{A} = \partial\Omega \cup \Omega$ – множество точек на границе $\partial\Omega$ и/или внутренних точках замкнутой области Ω .

Однако, существуют задачи с более сложными по форме дополнительными условиями, например, условиями нормировки стандартными для задач квантовой механики:

$$\int_{\mathcal{A}} \|\mathbf{u}(\xi)\|^2 d\xi = 1,$$

где $\|\mathbf{u}(\xi)\|$ – норма, заданная в некотором функциональном пространстве; \mathcal{A} – область интегрирования, которая в общем случае бесконечна $\mathcal{A} \rightarrow \infty$.

Формулировка корректно поставленных краевых задач возможна для систем дифференциальных уравнений, имеющих порядок не ниже второго.

Найти точное решение краевой задачи (1) в элементарных функциях возможно в крайне узких классах краевых задач, т.к. необходимо найти не только общее решение системы дифференциальных уравнений, но и явно определить из краевых условий значения входящих в общее решение постоянных коэффициентов. Поэтому для численного решения краевых задач применяется метод стрельбы и разностный метод.

Метод стрельбы основан на формулировке задачи Коши, которая эквивалентна краевой задаче (1). Необходимо отметить, что в отличие от задачи Коши, для которой при выполнении определенных условий гарантируется существование и единственность решения, *краевая задача* для того же дифференциального уравнения *может не иметь решения* или иметь несколько решений (в том числе и бесконечное множество решений).

В разностном методе задача приближенно заменяется решением алгебраической системы уравнений, в которой в качестве неизвестных выступают значения решения в узлах пространственной сетки.

В случае нелинейных задач оба метода являются итерационными, причем построение быстро сходящихся итерационных процессов само является достаточно сложной задачей.

1.1 Линейные краевые условия

Для систем дифференциальных уравнений специального вида

$$\begin{cases} w'(x) = f_1(x, u, w) \\ u'(x) = f_2(x) \cdot w(x) \end{cases} \quad (2)$$

в зависимости от вида условий на границах отрезка $0 \leq x \leq \ell$ (граница области поиска решений $\partial\Omega$) различают три основных типа граничных задач: задачу Дирихле, Неймана и смешанную краевую задачу (таблица 1).

Таблица 1 – Основные виды краевых условий для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (2)

№	Краевое условие	Граница $x = 0$	Граница $x = \ell$
1	Дирихле	$u(0) = u_0$	$u(\ell) = u_1$
2	Неймана	$w(0) = w_0$	$w(\ell) = w_1$
3	Смешанная	$a_0 \cdot w(0) + b_0 \cdot u(0) = c_0$	$a_1 \cdot w(\ell) + b_1 \cdot u(\ell) = c_1$



Рисунок 1 – Виды краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений вида (2)

С формальной точки зрения, задача Дирихле и Неймана являются частными случаями смешанной краевой задачи (рисунок 1): например, если $a_0 \equiv 0$, то

смешанная краевая задача трансформируется в задачу Дирихле:

$$0 \cdot w(0) + b_0 \cdot u(0) = c_0, \quad \Rightarrow \quad u(0) = \frac{c_0}{b_0} = u_0,$$

а если полагать $b_0 \equiv 0$, то формулируется задача Неймана:

$$a_0 \cdot w(0) + 0 \cdot u(0) = c_0, \quad \Rightarrow \quad w(0) = \frac{c_0}{a_0} = w_0.$$

Поэтому для общности, можно рассматривать только смешанную краевую задачу стандартного вида:

$$\begin{cases} w'(x) = f_1(x, u, w) \\ u'(x) = f_2(x) \cdot w(x) \\ a_0 \cdot w(0) + b_0 \cdot u(0) = c_0 \\ a_1 \cdot w(\ell) + b_1 \cdot u(\ell) = c_1 \end{cases}, \quad (3)$$

где $f_1(x, u, w)$ и $f_2(x)$ – известные функции, в том числе может быть разрывные; $a_{0,1}$, $b_{0,1}$ и $c_{0,1}$ – известные постоянные коэффициенты, определяемые физическим смыслом решаемой задачи.

1.2 Построение разностных схем методом баланса

Различные физические процессы (теплопроводности или диффузии, колебаний, газодинамики и т. д.) характеризуются некоторыми интегральными законами сохранения (тепла, массы, количества движения, энергии и т. д.). При выводе дифференциальных уравнений различных математических моделей объектов или явлений отталкиваются от некоторого интегрального соотношения (уравнения баланса), выражающего закон сохранения для малого объема. Дифференциальное уравнение получается из уравнения баланса при стягивании рассматриваемого объема к нулю в предположении существования непрерывных производных, входящих в уравнение.

Метод конечных разностей физически означает переход от непрерывной среды к некоторой ее дискретной модели. При таком переходе естественно требовать, чтобы основные свойства физического процесса сохранялись, т.е. выполнялись законы сохранения различных физических субстанций (количества тепла, массы, заряда, импульса и т.д.).

Численные методы решения краевых задач основаны на замене диффе-

ренциальной задачи (3) системой линейных алгебраических уравнений, т.е. разностной схемой.

Разностная схема – совокупность разностных алгебраических уравнений, аппроксимирующих систему дифференциальных уравнений и дополнительные (граничные) условия исходной задачи. Разностные схемы, выражающие на сетке законы сохранения физических субстанций, называют консервативными (или дивергентными). Законы сохранения для всей сеточной области (“интегральные законы сохранения”) для консервативных схем должны быть алгебраическим следствием разностных уравнений.

Для получения консервативных разностных схем естественно исходить из уравнений баланса, записанных для элементарных объемов (ячеек) сеточной области. Входящие в эти уравнения балансы интегралы и производные следует заменить приближенными разностными выражениями. В результате получаем однородную разностную схему. Такой метод получения консервативных однородных разностных схем называется интегро-интерполяционным методом (методом баланса).

1.2.1 Физическая интерпретация краевых задач

Уравнение (3) можно интерпретировать как уравнение установившегося распределения температуры $u(x)$ в стержне длины ℓ . В такой постановке краевую задачу можно записать в виде:

$$\begin{cases} w'(x) + r(x) \cdot u(x) = q(x) \\ w(0) + p_0 \cdot u(0) = s_0 \\ -w(\ell) + p_\ell \cdot u(\ell) = s_\ell \end{cases}, \quad (4)$$

где $w(x)$ – тепловой поток, величина которого в соответствии с **законом теплопроводности Фурье** пропорциональна градиенту температуры:

$$w(x) = -k(x) \cdot u'(x); \quad (5)$$

$k(x)$ – коэффициент температуропроводности материала стержня; $r(x) \cdot u(x)$ – мощность распределенных стоков ($r > 0$) или источников ($r < 0$) тепла вдоль боковой поверхности стержня; $r(x)$ – коэффициент конвекционного теплообмена боковой поверхности стержня с окружающей средой; $q(x)$ – мощность

внутренних распределенных источников ($q > 0$) или стоков ($q < 0$) тепла в стержне.

Граничные условия (4) определяют процесс теплообмена концов стержня $x = \{0, \ell\}$ с окружающей средой по закону конвекционного теплообмена Ньютона – “Тепловой поток тепла \dot{w} через поверхность материального тела в окружающую среду прямо пропорционален разнице температур между поверхностью тела и окружающей средой”:

$$\dot{w} = r \cdot (u - \dot{u}),$$

где r – коэффициент конвективного теплообмена; u – температура поверхности тела; \dot{u} – температура окружающей среды.

Процессы выделения или поглощения тепла в твердом теле могут быть связаны с рядом явлений:

- 1) выделение тепла ($q(x) > 0$) при пропускании электрического тока через стержень (закон Джоуля-Ленца), вследствие протекания в объеме стержня каких-либо экзотермических химических реакций;
- 2) поглощение тепла ($q(x) < 0$) за счет термоэлектрических явлений (например, эффект Пельтье), а также вследствие протекания эндотермических химических реакций в объеме материала стержня.

Необходимо отметить, что в зависимости от физического смысла постановки краевых задач коэффициенты дифференциального уравнения задачи (4) могут быть и разрывными функциями. Можно выделить несколько практически важных случаев:

- 1) *однородный стержень* с локальной теплоизоляцией, т.е. конвекционный теплообмен участка $x \in [a, b]$ боковой поверхности стержня с окружающей средой затруднен или отсутствует (рисунок 2а):

$$r(x) = \begin{cases} r_1, & 0 \leq x < a \\ r_2, & a \leq x \leq b, \\ r_1, & b < x \leq \ell \end{cases}$$

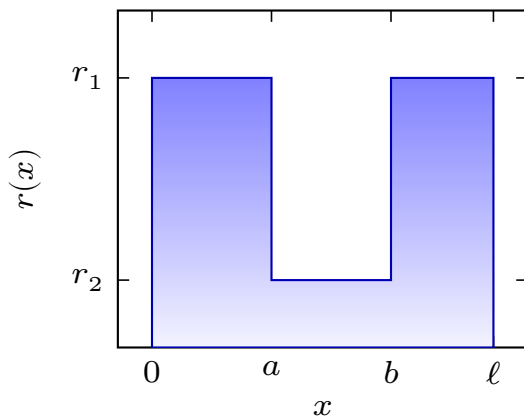
где $[a, b]$ – теплоизолированный участок однородного стержня;

- 2) *однородный стержень* с локальным нагревом, т.е. на участке стержня $[a, b]$ происходит нагрев стержня за счет внешних источников тепловой энергии

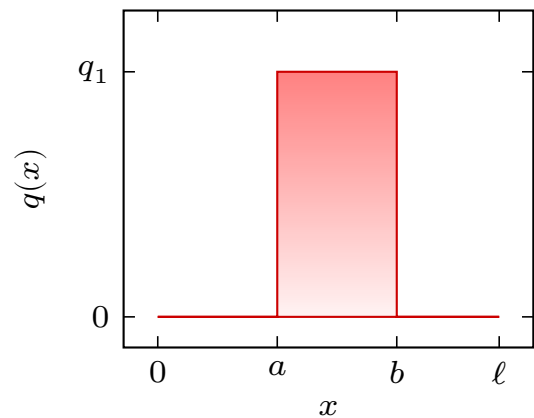
(рисунок 2b), например, излучения:

$$q(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x < a \\ q_1, & a \leq x \leq b, \\ 0, & b < x \leq \ell \end{cases}$$

где $[a, b]$ – участок локального нагрева стержня внешними источниками тепловой энергии;



(a) теплоизолированный участок



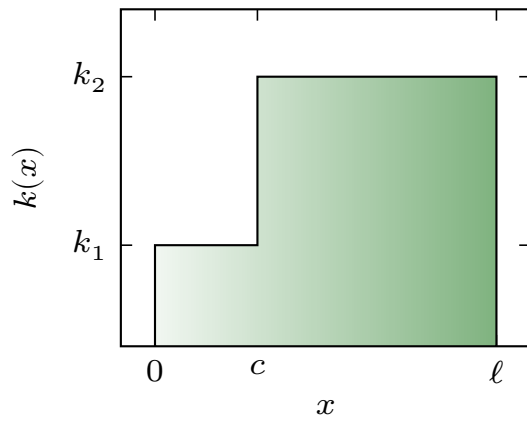
(b) локальный нагрев

Рисунок 2 – Однородный образец

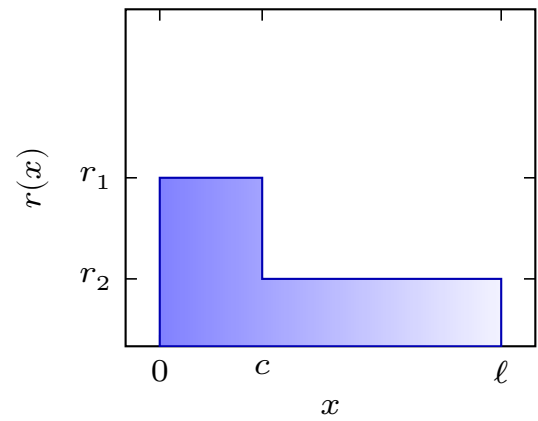
3) *неоднородный стержень*, состоящий из нескольких разнородных материалов, которые отличаются коэффициентами температуропроводности $k_1 \neq k_2$ и конвекционного теплообмена $r_1 \neq r_2$ (рисунок):

$$k(x) = \begin{cases} k_1, & 0 \leq x \leq c \\ k_2, & c < x \leq \ell \end{cases}, \quad r(x) = \begin{cases} r_1, & 0 \leq x \leq c \\ r_2, & c < x \leq \ell \end{cases},$$

где c – точка контакта двух различных материалов; $[0, c]$ и $(c, \ell]$ – участки стержня, состоящие из разных материалов с различными коэффициентами температуропроводности $k_1 \neq k_2$ и конвекционного теплообмена $r_1 \neq r_2$;



(a) теплопроводность



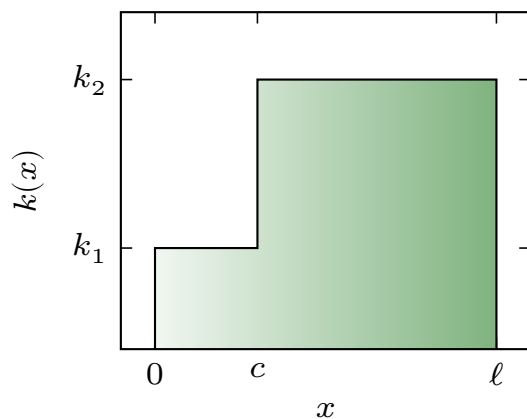
(b) конвекционный теплообмен

Рисунок 3 – Неоднородный образец

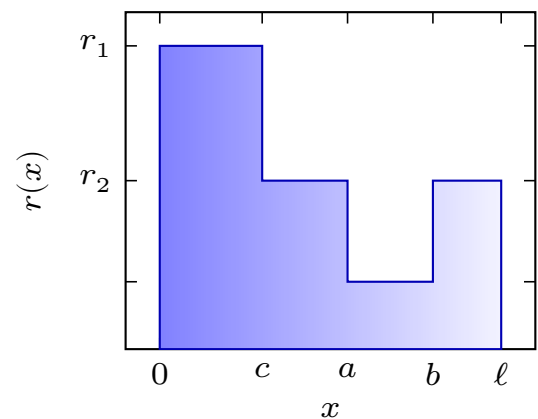
- 4) *неоднородный стержень*, с локальной теплоизоляцией, т.е. конвекционный теплообмен на участке боковой поверхности стержня $[a, b]$ с окружающей средой затруднен или отсутствует (рисунок):

$$k(x) = \begin{cases} k_1, & 0 \leq x \leq c \\ k_2, & c < x \leq \ell \end{cases}, \quad r(x) = \begin{cases} r_1, & 0 \leq x \leq a \\ r_2, & a < x \leq b \\ r_3, & b < x \leq \ell \end{cases},$$

где $[a, b]$ – теплоизолированный участок неоднородного стержня ($r \equiv 0$).



(a) теплопроводность



(b) конвекционный теплообмен

Рисунок 4 – Неоднородный образец с локальной теплоизоляцией

1.2.2 Расчётная сетка

При численном решении той или иной математической задачи невозможно получить решение для всех значений аргумента, изменяющегося внутри некоторой области евклидова пространства. Поэтому в этой области выбирается некоторое конечное множество точек и отыскивается приближенное решение только в этих точках. Такое множество точек называется сеткой, а отдельные точки – узлами сетки. Необходимо отметить, что свойства разностного решения задачи и, в частности, его близость к точному решению зависят от выбора сетки.

Процедуру построения расчетной сетки можно рассматривать как построение взаимно-однозначного отображения области определения функции (физической области) на некоторую расчетную область более простой формы.

Для перехода от дифференциальной краевой задачи (4) к системе алгебраических уравнений на отрезке $[0, \ell]$ введем произвольную неравномерную сетку – конечное упорядоченное множество точек $\{x_i\}$, принадлежащих этому отрезку (рисунок 5):

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_i < \dots < x_{n-1} < x_n = \ell,$$

где $x_i \in [0, \ell]$ – узлы сетки; $i = 0, 1, 2, \dots, n$ – порядковый номер узла сетки; n – количество узлов сетки.

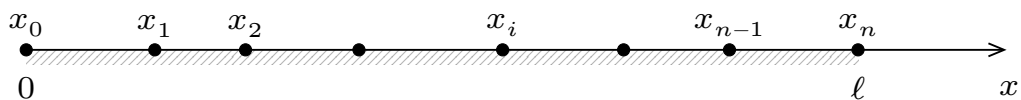


Рисунок 5 – Схематическое изображение расположения узлов x_i расчетной сетки $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$

Если известны точки разрывов коэффициентов $f(x) = \{k(x), r(x), q(x)\}$ системы дифференциальных уравнений (4), то всегда можно выбрать неравномерную сетку так, чтобы эти точки разрывов совпадали с узлами расчетной сетки (рисунок 6).

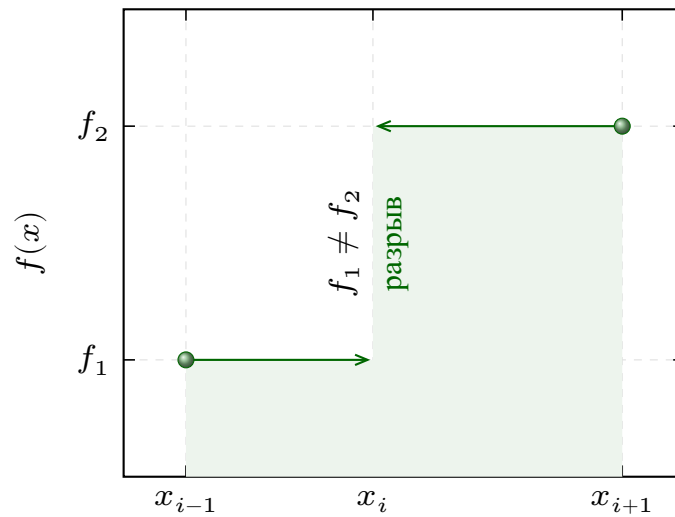


Рисунок 6 – График функции $f(x)$, которая имеет разрыв в точке $x = x_i$

Кроме того, всегда можно построить локально равномерную сетку по алгоритму:

- 1) Строится равномерная сетка $\{\hat{x}_i\}$ во всей расчётной области $[0, \ell]$:

$$\hat{x}_i = \frac{i}{n} \cdot \ell, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

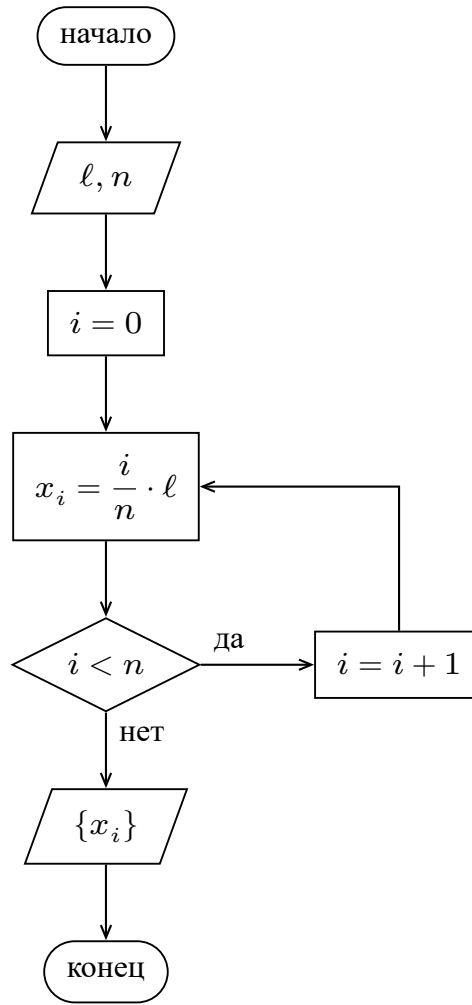


Рисунок 7 – Блок-схема алгоритма построения равномерной расчетной сетки $\{x_i\} = (0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, \ell)$ с заданным количеством интервалов n

- 2) Упорядочиваются все точки разрыва ξ_j ($j = 0, 1, 2, \dots, m$) коэффициентов краевой задачи, включая левую ($\xi_0 = 0$) и правую ($\xi_{m+1} = \ell$) границы расчётной области (рисунок 8):

$$0 = \xi_0 < \xi_1 < \xi_2 < \dots < \xi_m < \xi_{m+1} = \ell,$$

где m – количество внутренних точек разрыва коэффициентов краевой задачи.

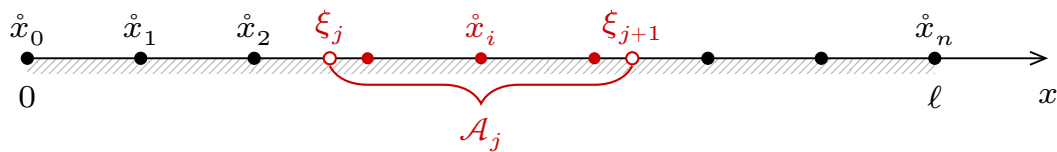


Рисунок 8 – Схематическое расположение узлов равномерной сетки $\{\dot{x}_i\}$

- 3) Определяются области непрерывности $\mathcal{A}_j = [\xi_j, \xi_{j+1})$ всех коэффициентов краевой задачи в расчётной области:

$$\mathcal{A}_0 \cup \mathcal{A}_1 \cup \dots \cup \mathcal{A}_m = [0, \ell].$$

- 4) Находится количество узлов m_j равномерной сетки $\{\hat{x}_i\}$, которые принадлежат каждой области непрерывности:

$$m_j = m_j + \begin{cases} 1 & \text{if } \hat{x}_i \in \mathcal{A}_j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}.$$

- 5) Строятся равномерные сетки в пределах каждой области непрерывности \mathcal{A}_j :

$$\{\hat{x}_i\}_j = \xi_j + \frac{i}{m_j} \cdot (\xi_{j+1} - \xi_j), \quad i = 0, 1, \dots, m_j - 1,$$

- 6) Формируется локально равномерная сетка с помощью объединения всех равномерных сеток и правой границы расчётной области:

$$\{x_i\} = \{\hat{x}_i\}_0 \cup \{\hat{x}_i\}_1 \cup \dots \cup \{\hat{x}_i\}_m \cup \ell$$

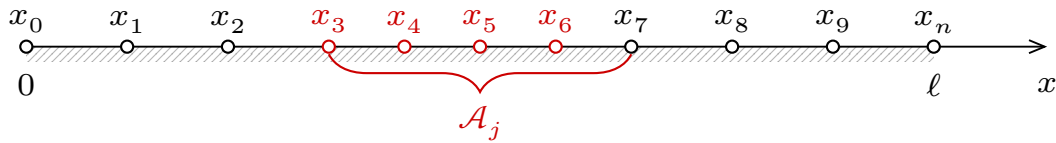


Рисунок 9 – Расположение узлов *локально равномерной* сетки $\{x_i\}$

Выделим на отрезке $[0, \ell]$ подмножество промежуточных узлов $\{x_{i\pm 1/2}\}$ (рисунок 10):

$$x_{i\pm 1/2} = \frac{x_i + x_{i\pm 1}}{2}, \quad i = 1, 2, \dots, n - 1,$$

где $x_{i\pm 1/2}$ – середины отрезков $[x_{i-1}, x_i]$ и $[x_i, x_{i+1}]$, соответственно.

Значения неизвестной функции $u(x)$ (температуры) рассмотрим в узлах сетки $\{x_i\}$, а потоковую величину $w(x)$ (тепловой поток) – в промежуточных узлах $\{x_{i\pm 1/2}\}$.

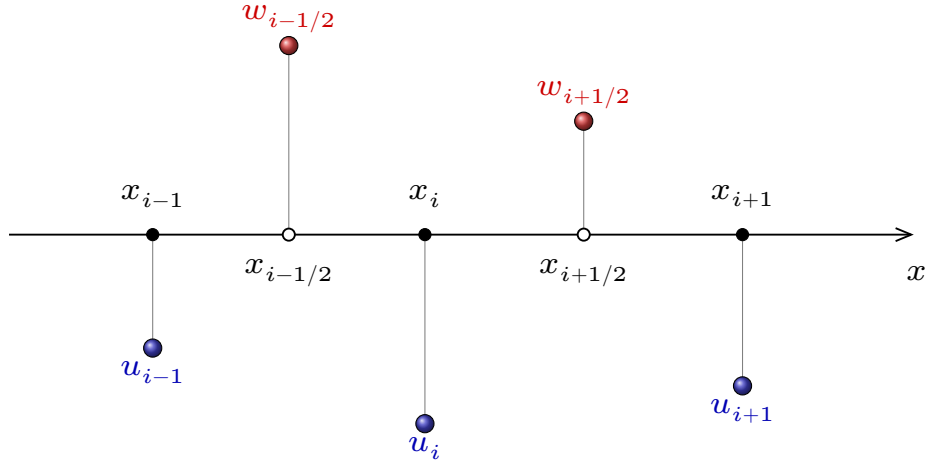


Рисунок 10 – Схематическое изображение расположения узлов основной $\{x_{i\mp 1}\}$ и промежуточной $\{x_{i\mp 1/2}\}$ расчетной сеток

1.2.3 Разностная схема для дифференциального уравнения

Для построения разностной схемы для краевой задачи воспользуемся интегро-интерполяционным методом (или *методом баланса*) построения разностных схем. Проинтегрируем *дифференциальное уравнение* (4) в пределах контрольной области $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} w'(x) dx + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} r(x) \cdot u(x) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x) dx \quad (6)$$

Тогда уравнение теплового баланса для контрольной области (6) запишется в виде:

$$w(x_{i+1/2}) - w(x_{i-1/2}) + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} r(x) \cdot u(x) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x) dx \quad (7)$$

На рисунке 11 представлена графическая иллюстрация процессов переноса тепла, теплообмена и тепловыделения (телопоглощения) для контрольной области $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$.

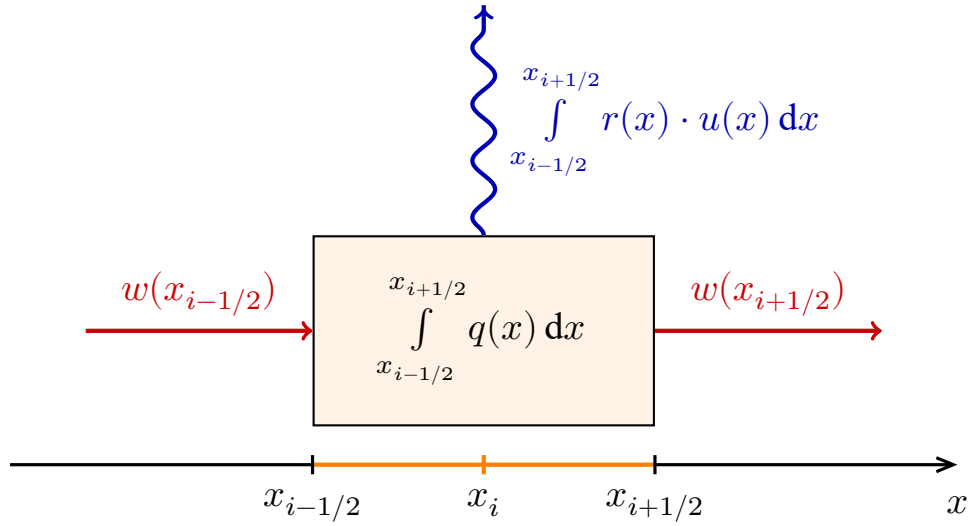


Рисунок 11 – Иллюстрация баланса тепла (7) для контрольной области $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$

Рассмотрим физический смысл каждого члена уравнения теплового баланса (7):

- 1) первое слагаемое $w(x_{i-1/2})$ определяет количество тепла, “втекающего” через сечение $x = x_{i-1/2}$;
- 2) второе слагаемое $w(x_{i+1/2})$ это количество “вытекающего” тепла через сечение $x = x_{i+1/2}$;
- 3) третье слагаемое в левой части представляет собой количество тепла, отдаваемое стержнем внешней среде за счет конвекционного теплообмена на его боковой поверхности;
- 4) правая часть (7) соответствует количеству тепла, выделяющегося на отрезке $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ за счет распределенных источников тепла с плотностью $q(x)$.

Для определения теплового потока в промежуточных узлах сетки $w(x_{i\pm 1/2})$, воспользуемся закон теплопроводности Фурье (5), из которого следует:

$$u'(x) = -w(x) \cdot k^{-1}(x) \quad \Rightarrow \quad \int_{x_i}^{x_{i+1}} u'(x) \, dx = - \int_{x_i}^{x_{i+1}} w(x) \cdot k^{-1}(x) \, dx.$$

После интегрирования левой части:

$$u(x_{i+1}) - u(x_i) = - \int_{x_i}^{x_{i+1}} w(x) \cdot k^{-1}(x) dx. \quad (8)$$

При построении разностной схемы, в выражениях (7) и (8) необходимо вычислять определенные интегралы. Однако, во многих практически важных приложениях первообразные подынтегральных функций не могут быть выражены в элементарных функциях. Кроме того, коэффициенты краевой задачи могут быть известны только в узлах расчетной сетки $\{k(x_i), r(x_i), q(x_i)\}$. В этом случае для вычислений определенных интегралов необходимо пользоваться *численным методом интегрирования*.

Для этого воспользуемся простейшими интерполяциями коэффициентов $f(x) = \{k(x), r(x), q(x)\}$ (рисунок 6), неизвестной функции $u(x)$ (температуры) и ее потока $w(x)$ (тепловой поток) в окрестности узлов $\{x_i\}$ в виде:

$$\begin{cases} w(x) = w(x_{i+1/2}), & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ f(x) = f(x_i), & x_i \leq x < x_{i+1} \\ u(x) = u(x_i), & x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2} \end{cases} \quad (9)$$

Тогда левосторонняя формула прямоугольников совпадает с точным значением интегралов (рисунок 12):

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y(x) dx \approx y(x_i) \cdot (x_{i+1} - x_i). \quad (10)$$

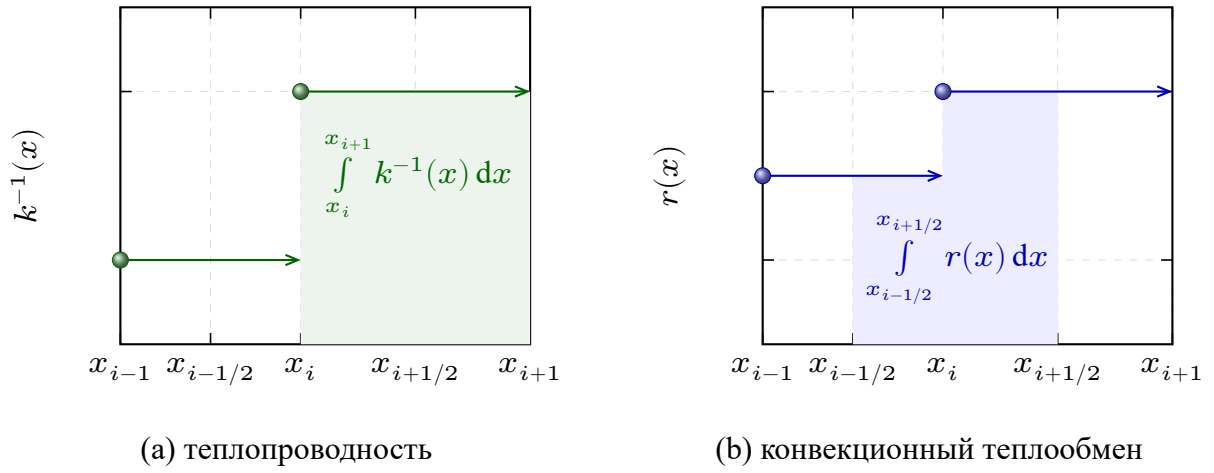


Рисунок 12 – Приближенное вычисление значения определенных интегралов в уравнении баланса тепла (7) и законе Фурье (8)

Приближенное значение интеграла в (8) выразим воспользовавшись кусочной аппроксимацией (9) теплового потока $w(x) \approx w(x_{i+1/2})$ на интервале (x_i, x_{i+1}) :

$$u(x_{i+1}) - u(x_i) \approx -w(x_{i+1/2}) \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} k^{-1}(x) dx \quad (11)$$

Применяя *левостороннюю формулу прямоугольников* для вычисления интеграла (10), найдем поток тепла в промежуточных узлах сетки $w(x_{i+1/2})$:

$$w_{i+1/2} = -\lambda_i \cdot (u_{i+1} - u_i) \quad (12)$$

где $w_{i+1/2}$ – величина теплового потока в узле вспомогательной сетки $x_{i+1/2}$; u_{i+1} и u_i – значение температуры в узлах расчётной сетки x_{i+1} и x_i , соответственно; λ – параметр, имеющий смысл тепловой проводимости среды на участке $x_i \leq x < x_{i+1}$:

$$\lambda_i = \frac{k_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Аналогично, рассматривая участок $[x_{i-1}, x_i]$, можно получить выражение для теплового потока во вспомогательном узле $x_{i-1/2}$:

$$w_{i-1/2} = -\lambda_{i-1} \cdot (u_i - u_{i-1}) \quad (13)$$

Приближенное значение интегрального (суммарного) конвекционного теплового потока через боковую поверхность контрольной области $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} r(x) \cdot u(x) dx \approx u(x_i) \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} r(x) dx = \sigma_i \cdot u_i,$$

где σ – параметр имеющий смысл проводимости контактной области между средой и окружением:

$$\sigma_i = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} r(x) dx.$$

Для определения контактной проводимости среды σ_i используем кусочную аппроксимацию (рисунок 12), а также условие расположения узлов сетки $\{x_i\}$, таких что коэффициент конвекционного теплообмена $r(x)$ имеет *точки разрыва только в узлах расчётной сетки*:

$$\begin{aligned} \sigma_i &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} r(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} r(x) dx \approx \\ &\approx r(x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i-1/2}) + r(x_i) \cdot (x_{i+1/2} - x_i) = \\ &= r_{i-1} \cdot \frac{x_i - x_{i-1}}{2} + r_i \cdot \frac{x_{i+1} - x_i}{2}. \end{aligned} \tag{14}$$

Суммарное количество тепла, выделяемого распределенными источниками в пределах контрольной области $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, определяется аналогично:

$$\begin{aligned} \varepsilon(x_i) &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} q(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} q(x) dx \approx \\ &\approx q_{i-1} \cdot \frac{x_i - x_{i-1}}{2} + q_i \cdot \frac{x_{i+1} - x_i}{2}. \end{aligned} \tag{15}$$

Таким образом, баланс тепловой энергии в контрольной области $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ с учетом соотношений для переноса тепла за счет теплопроводности материала среды (12), конвекционного теплообмена с окружающей средой (14) и распределенных источников (15), можно записать в виде системы

разностных уравнений:

$$\begin{cases} w_{i+1/2} - w_{i-1/2} + \sigma_i \cdot u_i = \varepsilon_i \\ w_{i+1/2} = -\lambda_i \cdot (u_{i+1} - u_i) \\ w_{i-1/2} = -\lambda_{i-1} \cdot (u_i - u_{i-1}) \end{cases} \quad (16)$$

Система уравнений (16) по своему построению является разностным аналогом основного дифференциального уравнения (4). Записывая уравнение (16) во всех узлах сетки, в которых оно определено ($i = 1, 2, \dots, n - 1$), получим систему из $2n - 1$ линейных алгебраических уравнений относительно $2n + 1$ неизвестных:

$$\begin{cases} u_0, & u_1, \dots & u_i, & \dots & u_n, \\ w_{1/2}, & \dots & w_{i-1/2}, & w_{i+1/2}, & \dots & w_{n-1/2}, \end{cases} \quad (17)$$

Два недостающих уравнения задаются с помощью *аппроксимации краевых условий* (4).

1.2.4 Разностная аппроксимация краевых условий

Воспользуемся *интегро-интерполяционным методом* и проинтегрируем основное уравнение (4) вблизи левой границы рассматриваемой области $x = 0$:

$$\int_{x_0}^{x_{1/2}} w'(x) \, dx + \int_{x_0}^{x_{1/2}} r(x) \cdot u(x) \, dx = \int_{x_0}^{x_{1/2}} q(x) \, dx$$

Уравнение теплового баланса вблизи левой границы области $x = x_0$:

$$w_{1/2} - w_0 + \sigma_0 \cdot u_0 = \varepsilon_0, \quad (18)$$

где $w_{1/2}$ – тепловой поток в первом промежуточном узле $x_{1/2}$:

$$w_{1/2} = -\lambda_0 \cdot (u_1 - u_0); \quad (19)$$

w_0 – тепловой поток на левой границе области (4):

$$w_0 \equiv w(0) = s_0 - p_0 \cdot u(0) = s_0 - p_0 \cdot u_0; \quad (20)$$

σ_0 и ε_0 – контактная проводимость и количество тепла выделяемое распре-

ленными источникам на левой границе:

$$\sigma_0 = \int_{x_0}^{x_{1/2}} r(x) \, dx \approx r(x_0) \cdot (x_{1/2} - x_0) = r_0 \cdot \frac{x_1 - x_0}{2},$$

$$\varepsilon_0 = \int_{x_0}^{x_{1/2}} q(x) \, dx \approx q(x_0) \cdot (x_{1/2} - x_0) = q_0 \cdot \frac{x_1 - x_0}{2}$$

Аналогично рассматривая правую границу области $x = \ell$, уравнение теплового баланса можно записать в виде:

$$w_n - w_{n-1/2} + \sigma_n \cdot u_n = \varepsilon_n, \quad (21)$$

где w_n – тепловой поток на правой границе области (4):

$$w_n \equiv w(\ell) = p_\ell \cdot u(\ell) - s_\ell = p_\ell \cdot u_n - s_\ell; \quad (22)$$

$w_{n-1/2}$ – тепловой поток в последнем промежуточном узле $x_{n-1/2}$:

$$w_{n-1/2} = -\lambda_{n-1} \cdot (u_n - u_{n-1}); \quad (23)$$

σ_n и ε_n – контактная проводимость и количество тепла выделяемое распределенными источникам на правой границе $x = \ell$:

$$\sigma_n = \int_{x_{n-1/2}}^{x_n} r(x) \, dx \approx r(x_{n-1}) \cdot (x_n - x_{n-1/2}) = r_{n-1} \cdot \frac{x_n - x_{n-1}}{2},$$

$$\varepsilon_n = \int_{x_{n-1/2}}^{x_n} q(x) \, dx \approx q(x_{n-1}) \cdot (x_n - x_{n-1/2}) = q_{n-1} \cdot \frac{x_n - x_{n-1}}{2}.$$

Объединяя все разностные соотношения для дифференциального уравнения (16) и граничных условия (18), (21) получаем следующую разностную

схему для граничной задачи:

$$\begin{cases} w_{1/2} - w_0 + \sigma_0 \cdot u_0 = \varepsilon_0 \\ w_{i+1/2} - w_{i-1/2} + \sigma_i \cdot u_i = \varepsilon_i \\ w_{i+1/2} = -\lambda_i \cdot (u_{i+1} - u_i) \\ w_{i-1/2} = -\lambda_{i-1} \cdot (u_i - u_{i-1}) \\ w_n - w_{n-1/2} + \sigma_n \cdot u_n = \varepsilon_n \end{cases} \quad (24)$$

Блок-схема алгоритма вычислений коэффициентов разностной аппроксимации краевой задачи представлена на рисунке 13.

Структура системы линейных уравнений (24) относительно неизвестных (17) позволяет сформулировать систему уравнений только для неизвестных $\{u_0, u_1, \dots, u_n\}$.

Подставим выражение для потоков в узлах вспомогательной сетки

$$\begin{cases} w_{i+1/2} = -\lambda_i \cdot (u_{i+1} - u_i) \\ w_{i-1/2} = -\lambda_{i-1} \cdot (u_i - u_{i-1}) \end{cases}$$

в уравнение теплового баланса для каждого контрольного объема

$$w_{i+1/2} - w_{i-1/2} + \sigma_i \cdot u_i = \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, (n-1)$$

и в результате с учетом (20) и (22) получим:

$$\begin{cases} -\lambda_0 \cdot (u_1 - u_0) - (s_0 - p_0 \cdot u_0) + \sigma_0 \cdot u_0 = \varepsilon_0 \\ -\lambda_i \cdot (u_{i+1} - u_i) + \lambda_{i-1} \cdot (u_i - u_{i-1}) + \sigma_i \cdot u_i = \varepsilon_i \\ (p_\ell \cdot u_n - s_\ell) + \lambda_{n-1} \cdot (u_n - u_{n-1}) + \sigma_n \cdot u_n = \varepsilon_n \end{cases}$$

Группируя слагаемые при неизвестных u_{i-1}, u_i, u_{i+1} :

$$\begin{cases} c_0 \cdot u_0 - b_0 \cdot u_1 = y_0 \\ -a_i \cdot u_{i-1} + c_i \cdot u_i - b_i \cdot u_{i+1} = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \\ -a_n \cdot u_{n-1} + c_n \cdot u_n = y_n \end{cases} \quad (25)$$

где a_i , b_i и c_i – коэффициенты системы уравнений:

$$\begin{cases} b_0 = \lambda_0, & c_0 = b_0 + \sigma_0 + p_0, & y_0 = \varepsilon_0 + s_0 \\ a_i = \lambda_{i-1}, & b_i = \lambda_i, & c_i = a_i + b_i + \sigma_i, & y_i = \varepsilon_i \\ a_n = \lambda_{n-1}, & & c_n = a_n + \sigma_n + p_\ell, & y_n = \varepsilon_n + s_\ell \end{cases}$$

Таким образом, для нахождения неизвестных $\{u_0, u_1, \dots, u_n\}$ краевой задачи необходимо решить систему линейных уравнений (25), которую можно записать в матричном виде:

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{y},$$

где $\mathbf{u} = (u_0, u_1, \dots, u_n)^T$ – вектор неизвестных, $\mathbf{y} = (y_0, y_1, \dots, y_n)^T$ – вектор правых частей системы, \mathbf{M} – матрица системы линейных уравнений:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} c_0 & -b_0 & 0 & & & & \\ -a_1 & c_1 & -b_1 & 0 & & & \\ 0 & -a_2 & c_2 & -b_2 & 0 & & \\ & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \\ & & 0 & -a_i & c_i & -b_i & 0 \\ & & & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ & & & & 0 & -a_{n-1} & c_{n-1} & -b_{n-1} \\ & & & & & 0 & -a_n & c_n \end{pmatrix} \quad (26)$$

Следует отметить, что матрица \mathbf{M} содержит много нулевых элементов, расположенных в матрице не беспорядочно, а плотными массивами на заранее известных местах. Поэтому расчет по методу Гаусса можно организовать так, чтобы не задействовать при вычислениях нулевые элементы матрицы.

Поиск решения системы можно проводить стандартными методами линейной алгебры, хотя выбор наибольшего элемента в таких расчетах делать нельзя, так как перестановка столбцов разрушает специальную структуру матрицы. Кроме того, в матрицах с симметричной структурой недопустим выбор главного элемента матрицы.

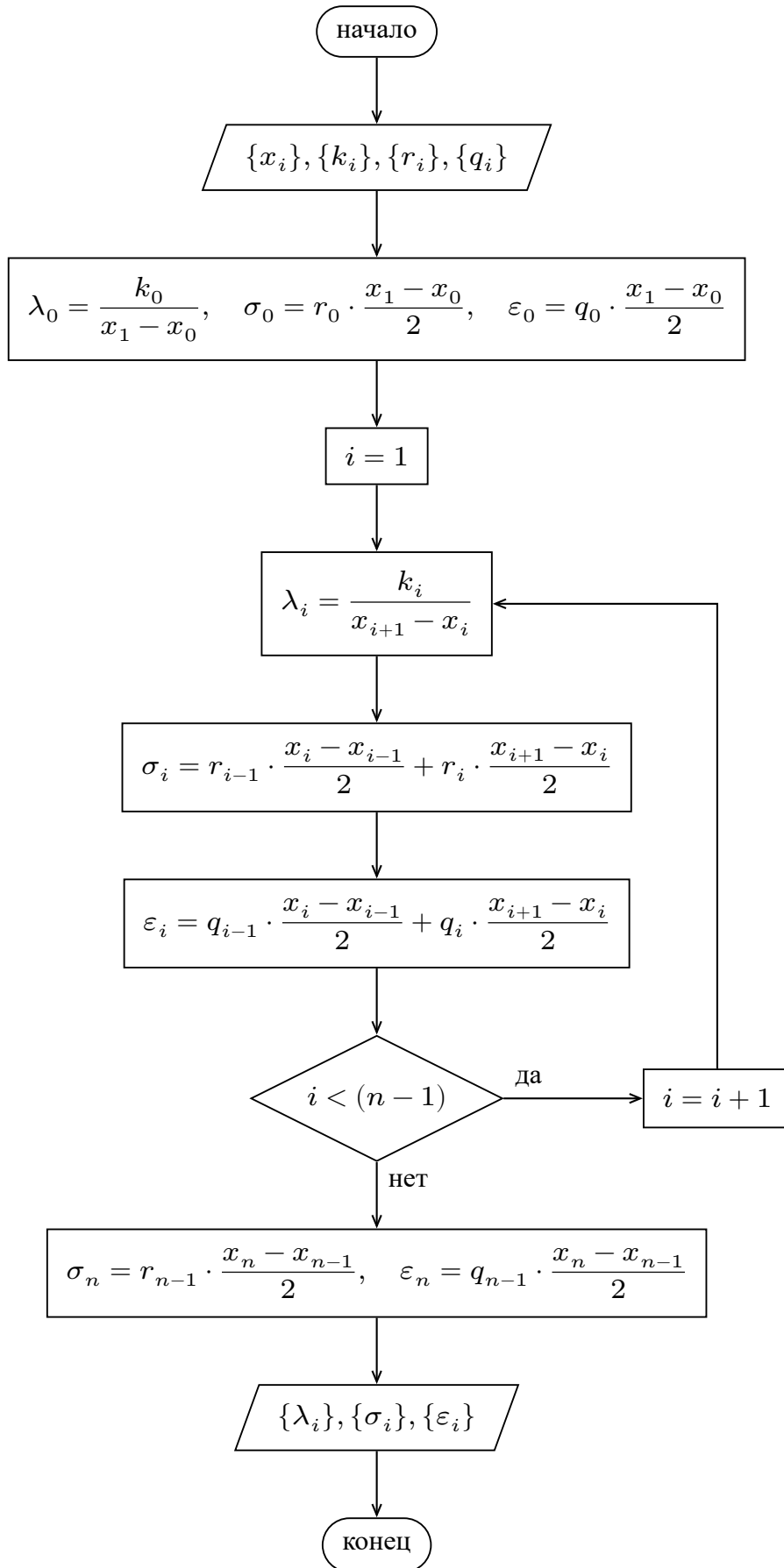


Рисунок 13 – Блок-схема алгоритма вычислений коэффициентов разностной схемы $\{\lambda_i\}, \{\sigma_i\}, \{\epsilon_i\}$

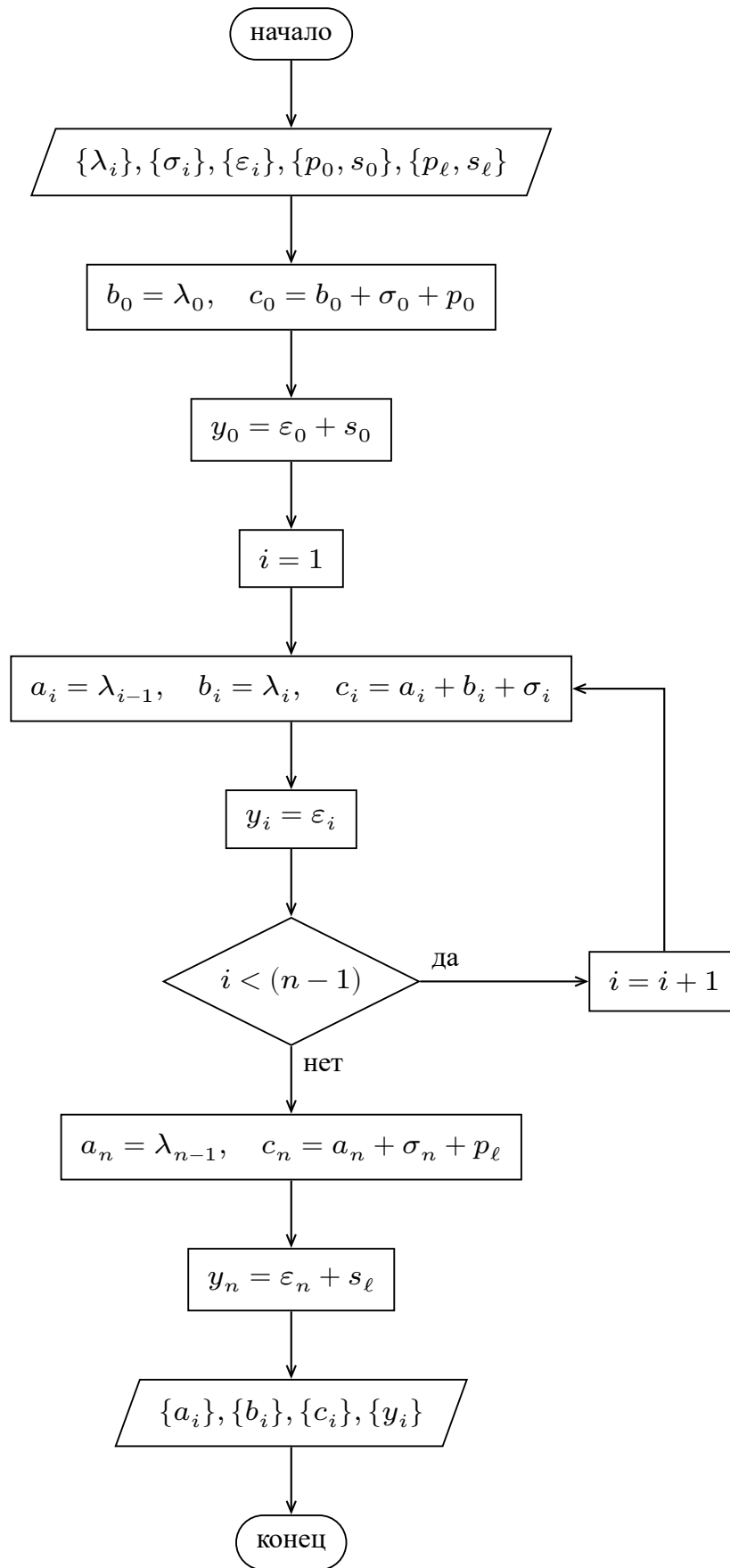


Рисунок 14 – Блок-схема алгоритма вычислений коэффициентов $\{a_i\}$, $\{b_i\}$, $\{c_i\}$ и $\{y_i\}$ системы линейных уравнений

1.2.5 Метод прогонки для решения систем линейных уравнений с матрицами специального вида

Система уравнений (25) представляет собой частный случай систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей \mathbf{M} , то есть с матрицей, все элементы которой, не лежащие на главной и двух побочных диагоналях, равны нулю. Такие разреженные матрицы специального вида часто встречаются при решениях краевых задач для дифференциальных уравнений второго порядка.

Для численного решения таких систем уравнений применяется *метод прогонки*, который представляет собой вариант *метода Гаусса* последовательного исключения неизвестных. Основная идея метода прогонки заключается в предположении о наличии линейной связи между значениями «соседних» неизвестных и решение системы (25) ищется в виде:

$$u_i = \alpha_{i+1} \cdot u_{i+1} + \beta_{i+1}, \quad (27)$$

где α_{i+1} и β_{i+1} – неизвестные коэффициенты прогонки, которые необходимо определить.

Пользуясь уравнением (27) выразим u_{i-1} :

$$u_{i-1} = \alpha_i \cdot u_i + \beta_i, \quad \rightarrow \quad u_{i-1} = \alpha_i \alpha_{i+1} \cdot u_{i+1} + (\alpha_i \beta_{i+1} + \beta_i). \quad (28)$$

Подставляя соотношения для u_{i-1} (28) и u_i (27) в систему (25) получим:

$$-a_i \cdot (\alpha_i \alpha_{i+1} \cdot u_{i+1} + (\alpha_i \beta_{i+1} + \beta_i)) + c_i \cdot (\alpha_{i+1} \cdot u_{i+1} + \beta_{i+1}) - b_i \cdot u_{i+1} = y_i$$

Это уравнение будет выполнено для всех $i = 1, 2, \dots, n-1$, если потребовать равенство нулю всех коэффициентов при неизвестных u_{i+1} и свободных членов:

$$\begin{cases} (c_i - a_i \cdot \alpha_i) \cdot \alpha_{i+1} = b_i \\ (c_i - a_i \cdot \alpha_i) \cdot \beta_{i+1} = a_i \cdot \beta_i + y_i \end{cases}$$

Из последнего выражения получаем рекуррентные соотношения для определения значений неизвестных коэффициентов прогонки α_{i+1} и β_{i+1} :

$$\alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - a_i \cdot \alpha_i}, \quad \beta_{i+1} = \frac{a_i \cdot \beta_i + y_i}{c_i - a_i \cdot \alpha_i} \quad (29)$$

Соотношения этих коэффициентов представляют собой нелинейные разностные уравнения первого порядка, для решения которых необходимо задать начальные значения α_1 и β_1 , определяемые из краевого условия на левой границе рассматриваемой области $x = 0$:

$$\begin{cases} c_0 \cdot u_0 - b_0 \cdot u_1 = y_0 \\ u_0 = \alpha_1 \cdot u_1 + \beta_1 \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} u_0 = \frac{b_0}{c_0} \cdot u_1 + \frac{y_0}{c_0} \\ u_0 = \alpha_1 \cdot u_1 + \beta_1 \end{cases}.$$

Сопоставляя выражение для u_0 получим:

$$\alpha_1 = \frac{b_0}{c_0}, \quad \beta_1 = \frac{y_0}{c_0}$$

Процесс вычисления коэффициентов α_{i+1} и β_{i+1} по рекуррентным соотношениям (29) называется *прямой прогонкой* (рисунок 15):

$$\begin{cases} \alpha_1 = \frac{b_0}{c_0}, & \alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - a_i \cdot \alpha_i} \\ \beta_1 = \frac{y_0}{c_0}, & \beta_{i+1} = \frac{a_i \cdot \beta_i + y_i}{c_i - a_i \cdot \alpha_i} \end{cases}, \quad i = 1, 2, \dots, (n-1) \quad (30)$$

После того как коэффициенты прогонки найдены, решение системы находится по рекуррентному соотношению (27), если известно значение функции u_n , которое можно определить из краевого условия на правой границе области $x = \ell$:

$$\begin{cases} -a_n \cdot u_{n-1} + c_n \cdot u_n = y_n \\ u_{n-1} = \alpha_n \cdot u_n + \beta_n \end{cases}. \quad (31)$$

Из решения системы уравнений (31) определяется значение неизвестной функции u_n на правой границе:

$$u_n = \frac{a_n \cdot \beta_n + y_n}{c_n - a_n \cdot \alpha_n}$$

Последовательное нахождение значений неизвестной функции $u(x)$ в узлах сетки по рекуррентному соотношению (27) называется *обратной прогонкой*.

кой:

$$u_n = \frac{a_n \cdot \beta_n + y_n}{c_n - a_n \cdot \alpha_n}, \quad u_i = \alpha_{i+1} \cdot u_{i+1} + \beta_{i+1}, \quad i = (n-1), \dots, 1, 0 \quad (32)$$

Неизвестные величины потоков $w_{i+1/2}$ можно определить рассматривая уравнение теплового баланса (16) как рекуррентное соотношение, выражающее поток в одном промежуточном узле через поток в соседнем узле:

$$\begin{cases} w_0 = s_0 - p_0 \cdot u_0 \\ w_{1/2} = w_0 - \sigma_0 \cdot u_0 + \varepsilon_0 \\ w_{i+1/2} = w_{i-1/2} - \sigma_i \cdot u_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, (n-1) \\ w_n = w_{n-1/2} - \sigma_n \cdot u_n + \varepsilon_n \end{cases} \quad (33)$$

Алгоритм решения смешанной краевой задачи для системы обыкновенных дифференциальных уравнений методом прогонки:

- 1) Сформировать локально однородную расчётную сетку $\{x_i\}$ в пределах области поиска решений краевой задачи.
- 2) Вычислить коэффициенты разностной схемы $\{\lambda_i\}$, $\{\sigma_i\}$, $\{\varepsilon_i\}$ (рисунок 13).
- 3) Определить коэффициенты $\{a_i\}$, $\{b_i\}$, $\{c_i\}$ и $\{y_i\}$ системы линейной уравнений (рисунок 14).
- 4) Вычислить коэффициенты прогонки $\{\alpha_i\}$ и $\{\beta_i\}$ (рисунок 15)
- 5) Найти решение полученной системы линейных алгебраических уравнений $\{u_0, u_1, \dots, u_n\}$ (рисунок 16).
- 6) Вычислить поток неизвестной функции $\{w_0, w_{i\pm 1/2}, w_n\}$ во всех промежуточных узлах расчётной сетки (рисунок 17).

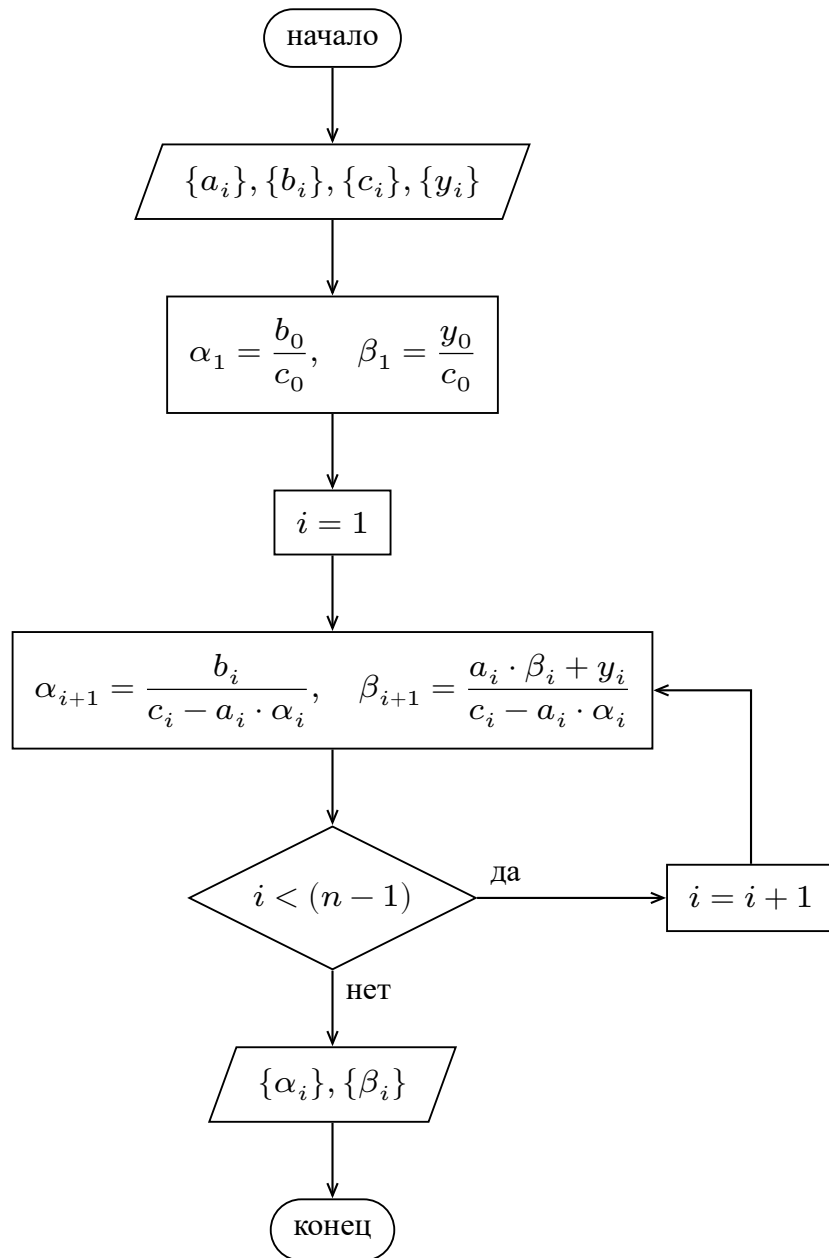


Рисунок 15 – Блок-схема алгоритма вычислений коэффициентов прогонки $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$ и $\{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n\}$

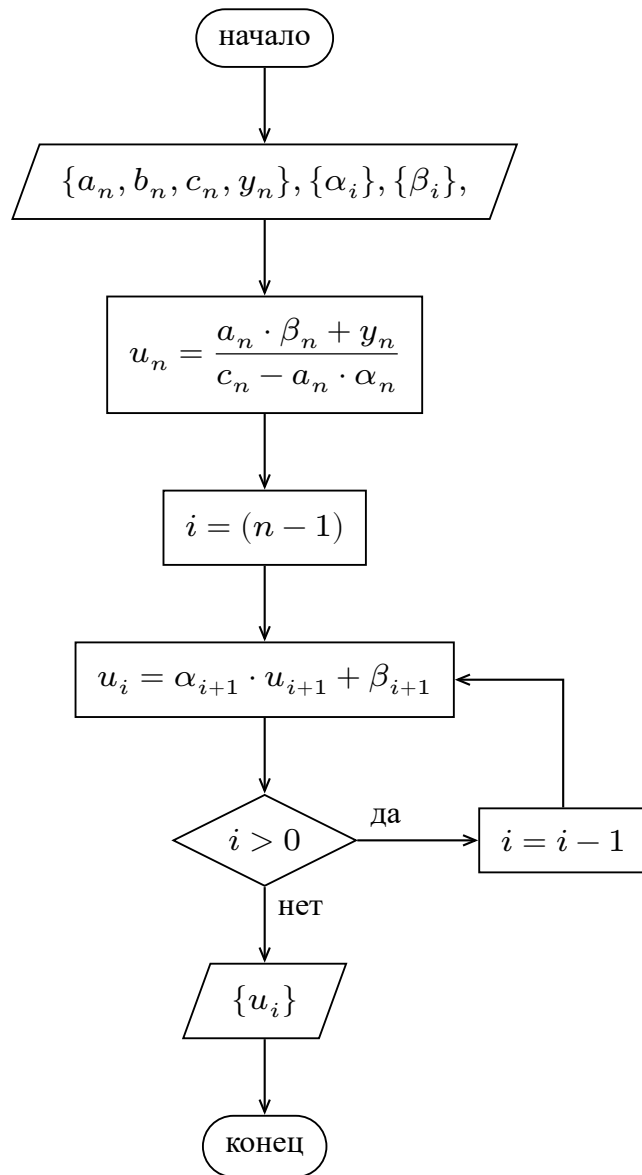


Рисунок 16 – Блок-схема алгоритма вычислений значений неизвестной функции $\{u_0, u_1, \dots, u_n\}$ в узлах расчетной сетки $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$

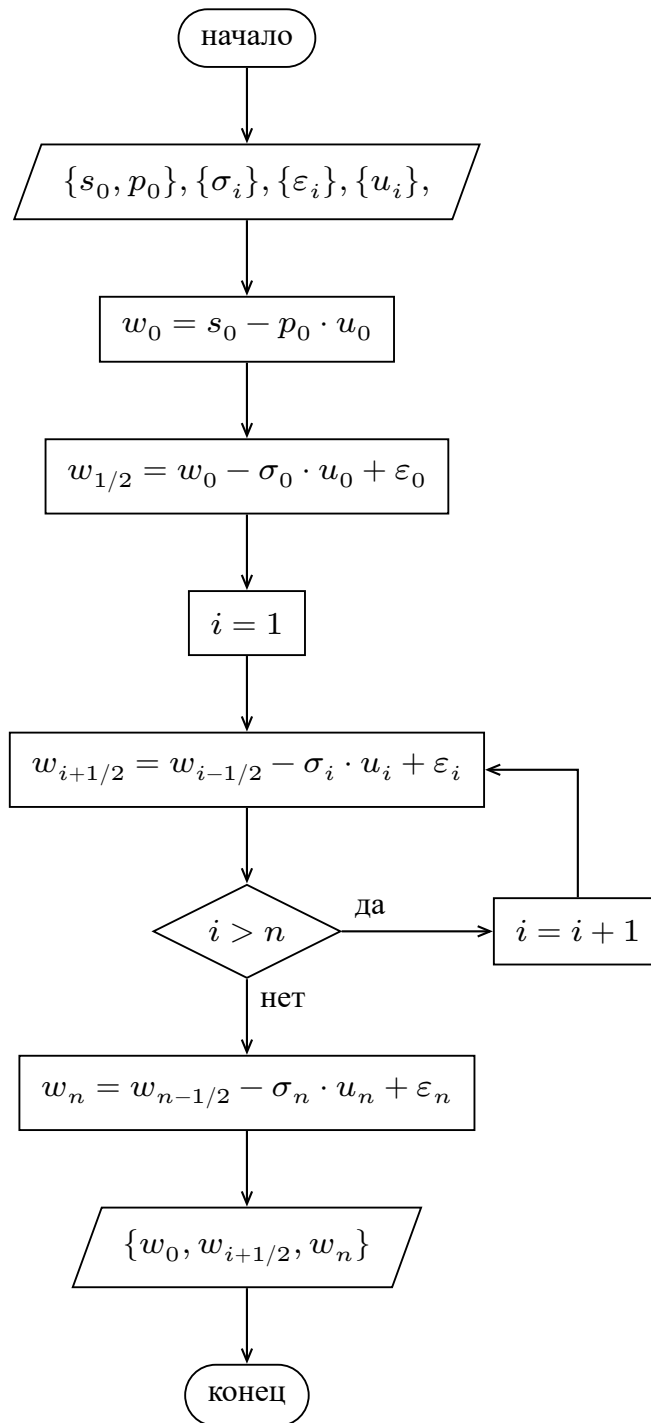


Рисунок 17 – Блок-схема вычислений потока неизвестной функции $\{w_0, w_{1/2}, w_{3/2}, \dots, w_{n-1/2}, w_n\}$ в промежуточных узлах расчетной сетки $\{x_0, x_{1/2}, x_{3/2}, \dots, x_{n-1/2}, x_n\}$

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Самарский А. А. Введение в численные методы. – Лань, 2009. – 288 с.
- 2 Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы: учебное пособие для вузов // М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит. 1989. – 432 с.
- 3 Самарский А. А. и др. Задачи и упражнения по численным методам: Учебное пособие // М.: Эдиториал УРСС, 2000. – 208 с.
- 4 Калиткин Н. Н. Численные методы. 2 изд. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 592 с.
- 5 Калиткин Н. Н. Численные методы: Учебное пособие. – Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1978. – 511 с.
- 6 Демидович, Б.П. Численные методы анализа: приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения / Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова ; под ред. Б.П. Демидович. – Изд. 3-е, перераб. – Москва : Главная редакция физико-математической литературы, 1967. – 368 с.
- 7 [Список математических символов \$\LaTeX\$](https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_mathematical_symbols_by_subject) –URL: https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_mathematical_symbols_by_subject
- 8 Бояршинов, М. Г. Вычислительные методы алгебры и анализа: учебное пособие / М. Г. Бояршинов. – Саратов : Вузовское образование, 2020. – 225 с. – ISBN 978-5-4487-0687-5. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/93065.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей. - DOI: <https://doi.org/10.23682/93065>
- 9 Олейникова, С. А. Численные методы решения оптимизационных задач: учебное пособие / С. А. Олейникова. – Воронеж : Воронежский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2021. – 114 с. – ISBN 978-5-7731-0960-0. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/118626.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей
- 10 Гарифуллин, М. Ф. Численные методы интегрирования дифференциальных уравнений / М. Ф. Гарифуллин. – Москва : Техносфера,

2020. – 192 с. – ISBN 978-5-94836-597-8. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/99103.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей

- 11 Ахмадиев, Ф. Г. Математическое моделирование и методы оптимизации: учебное пособие / Ф. Г. Ахмадиев, Р. М. Гильфанов. – Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2022. – 178 с. – ISBN 978-5-4497-1383-4. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/116448.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей
- 12 Рутта, Н. А. Методы и модели принятия оптимальных решений в экономике: учебное пособие для бакалавров / Н. А. Рутта. – Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2022. – 87 с. – ISBN 978-5-4497-1534-0. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/118015.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей