

УДК 519.6

**КОНСЕРВАТИВНА КІНЦЕВО-РІЗНИЦЕВА СХЕМА ЗАДАЧІ  
СТЕФАНА ДЛЯ РІВНЯННЯ ДИФУЗІЇ**  
**(© Славко Г.В.)**

КРЕМЕНЧУЦЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
им. Михайла Остроградського  
ФАКУЛЬТЕТ ЕЛЕКТРОНІКИ І КОМП'ЮТЕРНОЇ ІНЖЕНЕРІЇ  
вул. Першотравнева, 20, м. Кременчук, 39600, Україна  
E-MAIL: emath@mail.ru

**Abstract.** Conservative finite-difference solution's scheme of an equation of diffusion with a free boundary is adapted for a software realization in MathCAD. Developed program allows to research solutions for arbitrary function which determines a free boundary.

## ВСТУП

Метод кінцевих різниць – найбільш розповсюджений числовий метод розв'язання рівнянь з частинними похідними. Класичним прикладом є застосування цього методу для розв'язання рівняння дифузії – одновимірного по просторовій координаті рівняння параболічного типу. Задачі кристалізації вимагають побудови алгоритму розв'язання таких рівнянь, за умови вільної межі, що визначається деякою функцією, та граничних умов третього роду [1]. Специфіка мов програмування сучасних математичних програм Maple, MathCad, Matlab та інших потребує адаптації відомих алгоритмів кінцево-різницевих схем у відповідності з їх семантикою з урахуванням особливостей накопичення похиби обчислень [2]. Безперечні переваги застосування цих програм визначаються швидкістю програмування та наочністю подання отриманих результатів і компенсирують витрати часу на розробку таких алгоритмів. Тим не менше безпосереднє програмування у цих програмах в більшості випадків виявляється більш ефективним, ніж використання будованих функцій.

### 1. ЗАДАЧА СТЕФАНА У ЗАГАЛЬНОМУ ВИГЛЯДІ

Особливістю задачі (1)-(4) є вільна межа, що визначається функцією  $s(t)$  та граничні умови третього роду (комбінація шуканої функції та її похідної по просторовій координаті) за наявності похідної  $ds/dt$  функції, що визначає вільну границю. Таким чином, маємо задачу типу Стефана:

$$a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial t} = f(t), s(t) < x < L, t > 0, \quad (1.1)$$

граничні умови:

$$\alpha \frac{\partial u(s(t), t)}{\partial x} + \beta u(s(t), t) = \varphi_0(t), x = s(t), t > 0, \quad (1.2)$$

$$\gamma \frac{\partial u(L, t)}{\partial x} + \delta u(L, t) = \varphi_L(t), x = L, t > 0, \quad (1.3)$$

початкові умови:

$$u(x, 0) = \psi(x), s(0) \leq x \leq L, t = 0. \quad (1.4)$$

Граничні умови задачі дозволяють побудувати явну кінцево-різницеву схему. Її перевагою безумовно є можливість отримання значень шуканої сіткової функції на наступному часовому шарі через відомі значення попереднього шару, а тому програмна реалізації проста (без розв'язання систем лінійних рівнянь). Але, як відомо, застосування цієї схеми обмежується вимогою умової стійкості  $a^2 \tau / (h^k)^2 \leq 1/2$ , яка визначає можливі крокові характеристики сітки  $\tau, h^k$ . Наявність вільної межі обумовлює зміну для часових кроків просторових кроків, а це в свою чергу накладає більш жорсткі вимоги до сітки. Таким чином, явну різницеву схему за критеріями збіжності слід вважати неприйнятною для розв'язання цієї задачі. Тому будуватимемо неявну схему, яка хоч і призводить до необхідності розв'язання системи лінійних рівнянь, але є абсолютно стійкою, що особливо важливо для змінної сітки. Зазначимо тут, що для неявної схеми чисельний розв'язок у разі його зростання є завищеним, а у разі спадання – заниженим. Це відбувається за рахунок того, що числовий розв'язок за неявною схемою визначається значеннями сіткової функції на верхньому часовому шарі.

## 2. ПОБУДОВА КОНСЕРВАТИВНОЇ РІЗНИЦЕВОЇ СХЕМИ

Для побудови різницевої схеми для задачі (1)-(4) скористаємося методикою роботи [3]. Побудуємо для області

$$s(t) < x < L, 0 \leq t \leq T, T < \infty$$

кінцево-різницеву сітку

$$\begin{aligned} t^k &= k \cdot \tau, \quad k = \overline{0, M}, j = \overline{0, N}, \\ \omega_{h\tau} &= \{x_j^k = s^k + j \cdot h_k, \quad h^k = (L - s^k)/N, \quad s^k = s(t^k)\}. \end{aligned}$$

Наведемо деякі пояснення. Крок за часом  $\tau$  є незмінним для всіх шарів сітки  $\tau = T/M$ , де  $M$  – кількість часових інтервалів, а просторовий крок  $h^k$  змінюється у відповідності з виразом  $h^k = (1 - s^k)/N$ , де  $N$  – кількість просторових інтервалів. Зміна просторового кроку на кожному часовому кроці призводить до залежності просторових координат  $x_j^k$  вузлів сітки від часового шару. Часові шари визначаються виразом  $t^k = k \cdot \tau$ . Таким чином, будемо мати сітку, яка адаптується до зміни межі часово-просторової області. У вузлах сітки визначатимемо шукану функцію задачі  $u_j^k = u(x_j^k, t^k)$ . Диференційні оператори апроксимуємо відношенням кінцевих різниць для  $k$ -го та  $k+1$  часових шарів:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^{k+1} = \frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} + O(\tau), \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_j^{k+1} = \frac{u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1}}{(h_{k+1})^2} + O((h^{k+1})^2). \quad (2.2)$$

Підставимо (5),(6) в (1), отримаємо для внутрішніх вузлів сітки:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = a^2 \frac{u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1}}{(h_{k+1})^2} + f(t^{k+1}) + O(\tau + (h^{k+1})^2). \quad (2.3)$$

Якщо похідні першого порядку, що присутні в граничних умовах апроксимувати відношеннями правих і лівих кінцевих різниць:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{j=0}^{k+1} = \frac{u_1^{k+1} - u_0^{k+1}}{h^{k+1}} + O(h^{k+1}), \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{j=N}^{k+1} = \frac{u_N^{k+1} - u_{N-1}^{k+1}}{h^{k+1}} + O(h^{k+1}), \quad (2.4)$$

то апроксимація буде наближенням першого порядку і загальний порядок апроксимації схеми буде першим, не зважаючи на те, що в інших вузлах порядок апроксимації по просторовим змінним другий. Таким чином, для збереження другого порядку апроксимації, в граничних вузлах розкладемо  $u_1^{k+1}$  в околі точки  $x = s(t^{k+1})$  в ряд Тейлора за змінною  $x$  до третьої похідної включно, а  $u_{N-1}^{k+1}$  в такий же ряд в околі точки  $x = L$ . За умови, що функція  $u(x, t)$  в граничних вузлах має перші похідні за часом і другі по  $x$ , матимемо:

$$u_1^{k+1} = u(s^{k+1} + h^{k+1}, t^{k+1}) = u_0^{k+1} + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0^{k+1} h^{k+1} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_0^{k+1} \frac{(h^{k+1})^2}{2} + O((h^{k+1})^3), \quad (2.5)$$

$$u_{N-1}^{k+1} = u(L - h^{k+1}, t^{k+1}) = u_N^{k+1} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_N^{k+1} h^{k+1} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_N^{k+1} \frac{(h^{k+1})^2}{2} + O((h^{k+1})^3). \quad (2.6)$$

З (9) і (10) отримаємо:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0^{k+1} = \frac{u_1^{k+1} - u_0^{k+1}}{h^{k+1}} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_0^{k+1} \frac{h^{k+1}}{2} + O((h^{k+1})^2), \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_N^{k+1} = \frac{u_N^{k+1} - u_{N-1}^{k+1}}{h^{k+1}} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_N^{k+1} \frac{h^{k+1}}{2} + O((h^{k+1})^2). \quad (2.8)$$

Із (1) матимемо:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{a^2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} + f(t) \right). \quad (2.9)$$

Переходячи в (13) до граничних вузлів, отримаємо:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{j=0,N}^{k+1} = \frac{1}{a^2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{j=0,N}^{k+1} + f(t^{k+1}) \right). \quad (2.10)$$

Враховуючи апроксимацію (5) запишемо (14) у вигляді:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_0^{k+1} = \frac{1}{a^2} \frac{u_0^{k+1} - u_0^k}{\tau} + \frac{f(t^{k+1})}{a^2} + O(\tau), \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_N^{k+1} = \frac{1}{a^2} \frac{u_N^{k+1} - u_N^k}{\tau} + \frac{f(t^{k+1})}{a^2} + O(\tau). \quad (2.12)$$

Підставимо (15) і (16) у (11) і (12), відповідно:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0^{k+1} = \frac{u_1^{k+1} - u_0^{k+1}}{h^{k+1}} - \frac{h^{k+1}}{2a^2} \frac{u_0^{k+1} - u_0^k}{\tau} - \frac{f(t^{k+1}) h^{k+1}}{2a^2} + O((h^{k+1})^2 + \tau), \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_N^{k+1} = \frac{u_N^{k+1} - u_{N-1}^{k+1}}{h^{k+1}} + \frac{h^{k+1}}{2a^2} \frac{u_N^{k+1} - u_N^k}{\tau} + \frac{f(t^{k+1}) h^{k+1}}{2a^2} + O\left(\left(h^{k+1}\right)^2 + \tau\right). \quad (2.14)$$

Таким чином, отримали апроксимацію другого порядку і будемо використовувати її, а не апроксимацію (8) першого порядку. Зазначимо тільки, що шар ( $j = 0$ ) відповідає лівій (вільній) межі області ( $x_0^k = s^k$ ), а ( $j = N$ ) – правій ( $x_N^k = L$ ). Підставимо (17) у (2), отримаємо для граничних вузлів сітки:

$$\alpha \frac{u_1^{k+1} - u_0^{k+1}}{h^{k+1}} - \alpha \frac{h^{k+1}}{2a^2} \frac{u_0^{k+1} - u_0^k}{\tau} - \alpha \frac{f(t^{k+1}) h^{k+1}}{2a^2} + \beta u_0^{k+1} = \varphi_0(t^{k+1}).$$

Після перетворень:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\alpha h^{k+1}}{2a^2 \tau} + \frac{\alpha}{h^{k+1}} - \beta \right) u_0^{k+1} + \left( \frac{-\alpha}{h^{k+1}} \right) u_1^{k+1} &= \frac{\alpha h^{k+1}}{2a^2 \tau} u_0^k - \varphi_0(t^{k+1}) - \alpha \frac{f(t^{k+1}) h^{k+1}}{2a^2}, \text{ або} \\ \left( \frac{2a^2}{h^{k+1}} + \frac{h^{k+1}}{\tau} - \frac{2a^2 \beta}{\alpha} \right) u_0^{k+1} + \left( \frac{-2a^2}{h^{k+1}} \right) u_1^{k+1} &= \frac{h^{k+1}}{\tau} u_0^k - \varphi_0(t^{k+1}) \frac{2a^2}{\alpha} - f(t^{k+1}) h^{k+1}. \end{aligned}$$

Введемо позначення:

$$\begin{aligned} a_0 = 0, b_0 &= \frac{2a^2}{h^{k+1}} + \frac{h^{k+1}}{\tau} - \frac{2a^2 \beta}{\alpha}, c_0 = \frac{-2a^2}{h^{k+1}}, \\ d_0 &= \frac{h^{k+1}}{\tau} u_0^k - \varphi_0(t^{k+1}) \frac{2a^2}{\alpha} - f(t^{k+1}) h^{k+1}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

тоді

$$b_0 u_0^{k+1} + c_0 u_1^{k+1} = d_0, j = 0. \quad (2.16)$$

Тепер підставимо (18) у (3) і виконаємо аналогічні перетворення:

$$\begin{aligned} \left( \frac{-\gamma}{h^{k+1}} \right) u_{N-1}^{k+1} + \left( \frac{\gamma}{h^{k+1}} + \frac{\gamma h^{k+1}}{2a^2 \tau} + \delta \right) u_N^{k+1} &= \varphi_L(t^{k+1}) + \frac{\gamma h^{k+1}}{2a^2 \tau} u_N^k - \gamma \frac{f(t^{k+1}) h^{k+1}}{2a^2}, \\ \left( \frac{-2a^2}{h^{k+1}} \right) u_{N-1}^{k+1} + \left( \frac{2a^2}{h^{k+1}} + \frac{h^{k+1}}{\tau} + \frac{2a^2 \delta}{\gamma} \right) u_N^{k+1} &= \frac{2a^2}{\gamma} \varphi_L(t^{k+1}) + \frac{h^{k+1}}{\tau} u_N^k - f(t^{k+1}) h^{k+1}. \end{aligned}$$

Введемо позначення:

$$\begin{aligned} a_N &= \frac{-2a^2}{h^{k+1}}, b_N = \frac{2a^2}{h^{k+1}} + \frac{h^{k+1}}{\tau} + \frac{2a^2 \delta}{\gamma}, c_N = 0, \\ d_N &= \frac{2a^2}{\gamma} \varphi_L(t^{k+1}) + \frac{h^{k+1}}{\tau} u_N^k - f(t^{k+1}) h^{k+1}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

З урахуванням позначень, отримаємо:

$$a_N u_{N-1}^{k+1} + b_N u_N^{k+1} = d_N, j = N. \quad (2.18)$$

Таким чином, маємо апроксимацію граничних умов третього роду на вільній і правій границях з тим же порядком, що й апроксимація (7) диференційного рівняння (1). Перепишемо (7) у вигляді:

$$\left( \frac{-a^2}{(h_{k+1})^2} \right) u_{j-1}^{k+1} + \left( \frac{1}{\tau} + \frac{2a^2}{(h_{k+1})^2} \right) u_j^{k+1} + \left( \frac{-a^2}{(h_{k+1})^2} \right) u_{j+1}^{k+1} = \frac{u_j^k}{\tau} + f(t^{k+1}).$$

Після введення позначень, будемо мати:

$$a_j = \frac{-a^2}{(h_{k+1})^2}, b_j = \frac{1}{\tau} + \frac{2a^2}{(h_{k+1})^2}, c_j = \frac{-a^2}{(h_{k+1})^2}, d_j = \frac{u_j^k}{\tau} + f(t^{k+1}) \quad (2.19)$$

$$a_j u_{j-1}^{k+1} + b_j u_j^{k+1} + c_j u_{j+1}^{k+1} = d_j, j = \overline{1, N-1} \quad (2.20)$$

Остаточно, отримаємо шукану неявну різницеву схему:

$$u_j^0 = \psi(x_j^0), j = \overline{0, N}, (\text{початкова умова});$$

$$b_0 u_0^{k+1} + c_0 u_1^{k+1} = d_0, j = 0, (\text{вільна границя});$$

$$a_j u_{j-1}^{k+1} + b_j u_j^{k+1} + c_j u_{j+1}^{k+1} = d_j, j = \overline{1, N-1}, (\text{внутрішні вузли});$$

$$a_N u_{N-1}^{k+1} + b_N u_N^{k+1} = d_N, j = N, (\text{права границя});$$

$$\omega_{h\tau} = \{x_j^k = s^k + j \cdot h_k, h^k = (L - s^k)/N, s^k = s(t^k)\},$$

$$j = \overline{0, N}; t^k = k \cdot \tau, k = \overline{0, M};$$

$$a_0 = 0, b_0 = \frac{2a^2}{h^{k+1}} + \frac{h^{k+1}}{\tau} - \frac{2a^2\beta}{\alpha}, c_0 = \frac{-2a^2}{h^{k+1}},$$

$$d_0 = \frac{h^{k+1}}{\tau} u_0^k - \varphi_0(t^{k+1}) \frac{2a^2}{\alpha} - f(t^{k+1}) h^{k+1},$$

$$a_j = \frac{-a^2}{(h_{k+1})^2}, b_j = \frac{1}{\tau} + \frac{2a^2}{(h_{k+1})^2}, c_j = \frac{-a^2}{(h_{k+1})^2}, d_j = \frac{u_j^k}{\tau} + f(t^{k+1}),$$

$$a_N = \frac{-2a^2}{h^{k+1}}, b_N = \frac{2a^2}{h^{k+1}} + \frac{h^{k+1}}{\tau} + \frac{2a^2\delta}{\gamma}, c_N = 0,$$

$$d_N = \frac{2a^2}{\gamma} \varphi_L(t^{k+1}) + \frac{h^{k+1}}{\tau} u_N^k - f(t^{k+1}) h^{k+1}.$$

Маємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь з трьох діагональною матрицею, яка може бути розв'язана, наприклад, методом прогонки.

### 3. ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ РІЗНИЦЕВОЇ СХЕМИ

Отриману кінцево-різницеву схему реалізуємо засобами програмування MathCad (рис.1). Результатом обчислень буде двомірний масив  $Z$ , який відповідає значенням шуканої функції  $u_j^k = u(x_j^k, t^k)$  у вузлах сітки.

```

Z = | for i ∈ 0..N
      |   Ui,0 ← ψ(S(0) + i · L - S(0) / N)
      | for k ∈ 0..N - 1
      |   | [t ← τ · (k + 1) h ← (L - S(t)) / N]
      |   | (a0 ← 0 cN ← 0)
      |   | (b0 ← (2 · A2 / h + h / τ - (2 · A2 · β(t)) / α) c0 ← (-2 · A2 / h) d0 ← (h · U0,k - φ0(t) · 2 · A2) / τ - f(t) · h)
      |   | (aN ← (-2 · A2 / h) bN ← (2 · A2 / h + h / τ + (2 · A2 · δ) / γ) dN ← (2 · A2 · φL(t) / γ + (h · UN,k - f(t) · h) / τ)
      |   for j ∈ 1..N - 1
      |     | (aj ← (-A2 / h2) bj ← (1 / τ + (2 · A2 / h2) cj ← (-A2 / h2) dj ← (Uj,k + f(t) / τ)
      |     for i ∈ 0..N
      |       for j ∈ 0..N
      |         Ri,j ← 0
      |         (R0,0 ← b0 R0,1 ← c0 RN,N-1 ← aN RN,N ← bN)
      |         for p ∈ 1..N - 1
      |           (Rp,p-1 ← ap Rp,p ← bp Rp,p+1 ← cp)
      |         F ← Isolve(R, d)
      |         for p ∈ 0..N
      |           Up,k+1 ← Fp
      | return U
  
```

Рис. 1. Програма різницевої неявної схеми (MathCad)

Зауважимо, що реалізація неявної схеми, обумовила використання квадратної сітки ( $N = M$ ), що не впливає на збіжність та стійкість алгоритму. Збільшення кількості кроків сітки збільшує точність отримуваного результату. Надамо пояснення використаним (рис.1) позначенням:  $N$  – число кроків сітки по просторовій координаті (довжині);  $M$  – число кроків сітки по часовій координаті ( $N = M$ );  $L$  – межа області по просторовій координаті ( $x = L$ );  $T$  – максимальне значення часу ( $t \leq T < \infty$ );  $A$  – коефіцієнт  $a$  в рівнянні дифузії (визначається властивостями середовища);  $\tau = T/M$  – постійний часовий крок сітки;  $f(t)$  – функція правої частини рівняння (1);  $S(t)$  – функція вільної лівої межі;  $\psi(x)$  – функція початкової умови (4);  $\phi_0(t)$  – функція  $\varphi_0(t)$  правої частини умови на вільній межі (2);  $\phi L(t)$  – функція  $\varphi_L(t)$  правої частини умови на правій межі (3);  $\alpha, \beta$  – відповідні коефіцієнти граничних умов (2);  $\gamma, \delta$  – відповідні коефіцієнти граничних умов (3).

#### 4. ПРИКЛАД ЗАСТОСУВАННЯ ПРОГРАМИ

У якості приклада, розв'язуватимемо наступну задачу:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial t} = 0, s(t) < x < 1, t > 0;$$

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = \pm (u_1 - u) \frac{ds}{dt}, x = s(t), s(t) = 0.5 - t^2/8, t > 0, u_1 = 1;$$

$$\frac{\partial u(1, t)}{\partial x} = 0, x = 1, t > 0; u(x, 0) = 0, s(0) \leq x \leq 1, t = 0.$$

У відповідності з позначеннями у програмі, для цього прикладу матимемо:

$$f(t) = 0, L = 1, T = 2, A = 1, \psi(x) = 0,$$

$$S(t) = 0.5 - t^2/8, \alpha = 1, \beta = \beta(t) = dS(t)/dt, \phi_0(t) = dS(t)/dt,$$

$$\gamma = 1, \delta = 0, \phi_L(t) = 0.$$

На рис.2 наведено результати розрахунків з урахуванням нормалізації значень для просторової сітки. Слід зауважити, що можливості системи MathCad дозволяють побудувати комбінацію ліній рівня та просторової сітки, що підвищує наглядність подання отриманих результатів. Крім наведених залежностей, вбудовані можливості MathCad дозволяють побудувати відповідні поверхні та функціональні залежності. Програма дозволяє швидко змінювати функцію, що визначає характер вільної межі, отримувати відповідні розподіли та контролювати збіжність отриманого розв'язку. Наведена на рис.1 програма, може бути реалізована будь якою мовою програмування, за умови програмної реалізації функції розв'язання системи рівнянь.

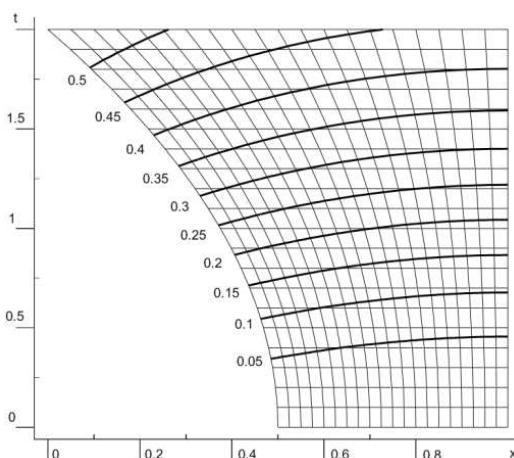


Рис. 2. Ліній рівня на різницевій сітці

## Висновки

Кінцево-різницеву схему для задачі Стефана побудовано так, що порядок апроксимації рівняння зберігається і для апроксимації граничних умов. Такий підхід не тільки вирівнює та підвищує порядок апроксимації (однорідна апроксимація), але й робить кінцево-різницеву схему консервативною. Таким чином, враховуються усі види енергії, що використовувалися під час отримання рівняння. Побудований алгоритм, дозволяє знаходити розв'язок для різних функцій, що визначають вільну границю. Результати обчислень легко візуалізувати для будь-яких залежностей. Зазначимо додатково, що викладений метод може бути застосований до рівняння (1) за наявності конвективних членів (пропорційних похідній  $\partial u / \partial x$ ) та членів пропорційних шуканій функції.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *B.A. Кудинов, Э.М. Карташов, В.В. Калашников.* Аналитические решения задач тепломассопереноса и термоупругости для многослойных конструкций: учебное пособие.- М.: Высшая школа, 2005.– 429с.
2. *Гурский Д.А., Турбина Е.С.* Вычисления в Mathcad 12. — СПб.: Питер, 2006. — 544 с.
3. *Формалев В.Ф., Ревизников Д.Л.* Численные методы. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 400с.

*Статья поступила в редакцию 30.11.2008*