

УДК 51

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И
ДИФфуЗИИ: ГЛУБОКИЙ АНАЛИЗ ЯВНЫХ И НЕЯВНЫХ
РАЗНОСТНЫХ СХЕМ**

Костромин А.И., студент гр. МСс-241, 2 курс
Бородин Д.А., студент гр. МСс-241, 2 курс
Научный руководитель: Грибанов Е.Н., к.т.н.
Кузбасский государственный технический
университет имени Т.Ф. Горбачёва
г. Кемерово

Введение:

Современная инженерная практика и научные исследования неразрывно связаны с математическим моделированием процессов теплопереноса и диффузии. Эти физические явления лежат в основе функционирования многочисленных технологических систем – от проектирования эффективных теплообменников и систем охлаждения в энергетике и микроэлектронике до управления процессами массопереноса в химической технологии и материаловедении. Точное прогнозирование температурных полей в конструкциях при нестационарных тепловых воздействиях или расчёт распределения концентраций в процессах пропитки и сушки являются критически важными задачами, от решения которых зависят надёжность, экономичность и безопасность создаваемых объектов.

Аналитические решения уравнений параболического типа, описывающих данные процессы, существуют лишь для ограниченного класса задач с простейшими граничными условиями и однородными свойствами сред. Реальные инженерные проблемы, характеризующиеся сложной геометрией, нелинейными зависимостями теплофизических свойств от температуры, пространственно-временной неоднородностью источников тепла или вещества, требуют применения численных методов. Среди всего многообразия вычислительных подходов именно разностные методы, и, в частности, схемы с раздельной временной и пространственной дискретизацией, получили наибольшее распространение благодаря своей алгоритмической простоте и физической наглядности.

Центральной проблемой при построении разностных схем для нестационарных задач является выбор способа аппроксимации временной производной, который определяет не только вычислительную эффективность метода, но и его принципиальную работоспособность. Исторически сложилось, что основная конкуренция развернулась между явными и неявными подходами, каждый из которых обладает уникальным комплексом преимуществ и ограничений. Явные схемы, с их алгоритмической простотой и минимальными вы-

числительными затратами на один временной шаг, сталкиваются с фундаментальным ограничением устойчивости – знаменитым критерием Куранта. Неявные методы, свободные от этого ограничения, требуют решения систем алгебраических уравнений на каждом шаге по времени, что существенно усложняет их реализацию.

В данной работе проводится детальный сравнительный анализ явных и неявных разностных схем для решения уравнений теплопроводности и диффузии. Особое внимание уделяется математическим основам методов, исследованию их устойчивости и сходимости, а также практическим аспектам применения в инженерных расчётах. На тестовых примерах демонстрируются характерные особенности каждого подхода, что позволяет сформулировать обоснованные рекомендации по выбору оптимального метода в зависимости от специфики решаемой задачи и требований к точности и вычислительной эффективности.

Построение разностных схем:

Первым и фундаментальным этапом численного решения дифференциальных уравнений в частных производных является переход от непрерывной области к дискретной совокупности узлов. Для одномерного случая стержня длиной L вводится равномерная пространственная сетка:

$$x_i = i \times h, \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad h = \frac{L}{N}$$

где h - шаг сетки по пространству, определяющий детальность описания пространственного распределения искомой функции.

Временная ось также дискретизируется:

$$t_k = k \times \tau, \quad k = 0, 1, \dots$$

где τ - шаг по времени, от выбора которого существенно зависят как точность, так и устойчивость численного решения.

Ключевой момент построения разностных схем - замена производных их разностными аналогами. Для первой производной по времени наиболее распространённой является правосторонняя разность:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial t} \right|_{x_i, t_k} \approx \frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau}$$

где $U_i^k = U(x_i, t_k)$ - значение сеточной функции в узле (x_i, t_k) .

Для второй пространственной производной используется центральная разность второго порядка точности:

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right|_{x_i, t_k} \approx \frac{U_{i-1}^k - 2U_i^k + U_{i+1}^k}{h^2}$$

Выбор именно этих аппроксимаций обусловлен компромиссом между точностью, устойчивостью и вычислительной эффективностью.

Основное различие между явными и неявными схемами заключается в способе аппроксимации пространственных производных:

- **Явные схемы** используют значения с предыдущего временного слоя.

• **Неявные схемы** оперируют значениями на новом временном слое.

Это принципиальное различие определяет не только алгоритмические особенности методов, но и их фундаментальные свойства -устойчивость, сходимость и вычислительную сложность.

Математическая основа построения разностных схем базируется на теории аппроксимации, согласно которой погрешность замены дифференциального оператора разностным должна стремиться к нулю при неограниченном сгущении сетки. Для рассмотренных аппроксимаций порядок погрешности составляет $O(\tau + h^2)$, что обеспечивает согласованную сходимость численного решения к точному при условии выполнения определённых критериев устойчивости.

Явная разностная схема:

Явная разностная схема является наиболее интуитивно понятным и простым в реализации методом решения нестационарных задач теплопроводности и диффузии. Её основная идея заключается в том, что значение искомой функции в каждом внутреннем узле на новом временном слое вычисляется исключительно через известные значения с предыдущего временного слоя.

Исходное дифференциальное уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

После аппроксимации производных принимает вид:

$$\frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau} = \alpha \frac{U_{i-1}^k - 2U_i^k + U_{i+1}^k}{h^2}$$

Разрешая это уравнение относительно U_i^{k+1} , получаем расчётную формулу явной схемы:

$$U_i^{k+1} = U_i^k + \lambda(U_{i-1}^k - 2U_i^k + U_{i+1}^k),$$

где $\lambda = \frac{\alpha\tau}{h^2}$ - **безразмерное число Куранта**, играющее ключевую роль в анализе устойчивости схемы.

Процедура вычислений по явной схеме может быть представлена в виде следующего алгоритма:

- 1) **Инициализация:** задание начального условия $U_i^0 = U_0(x_i)$ для всех пространственных узлов.
- 2) **Временной цикл:** для каждого временного слоя $k = 0, 1, 2, \dots$
 - 2.1) Применение граничных условий: $U_N^{k+1} = \varphi_1(t_{k+1})$, $U_1^{k+1} = \varphi_2(t_{k+1})$
 - 2.2) Расчёт внутренних узлов по формуле:

$$U_i^{k+1} = U_i^k + \lambda(U_{i-1}^k - 2U_i^k + U_{i+1}^k), i = 1, 2, \dots, N - 1$$
- 3) **Завершение:** остановка по достижении заданного времени моделирования.

Вычислительная сложность: одного временного шага составляет $O(N)$ операций, что делает метод чрезвычайно эффективным с точки зрения вычислительных затрат.

Графически явную схему можно представить в виде **шаблона "крест"**, где для вычисления значения в точке (x_i, t_{k+1}) используются значения в точках (x_{i-1}, t_k) , (x_i, t_k) и (x_{i+1}, t_k) . Такой шаблон демонстрирует явный характер зависимости решения на новом временном слое только от известных значений на предыдущем слое.

Фундаментальным ограничением явной схемы является её **условная устойчивость**. Критерий устойчивости был установлен в работах Куранта, Фридрихса и Леви:

$$\lambda = \frac{\alpha \tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$$

Физическая интерпретация: этого критерия заключается в том, что за один временной шаг τ температурное возмущение не должно распространяться дальше, чем на один пространственный узел h . При нарушении этого условия возникают численные осцилляции, экспоненциально нарастающие с течением времени и делающие решение бессмысленным.

Математическое обоснование: устойчивости может быть получено методом Фурье (спектральным методом), где решение представляется в виде суперпозиции гармоник, и анализируется их поведение во времени.

Ограничение на число Куранта имеет глубокие практические последствия для вычислительного процесса:

- При сгущении пространственной сетки в 2 раза (уменьшении h в 2 раза) шаг по времени τ необходимо уменьшить в **4 раза**
- Для задач с большими градиентами решения, требующих мелкой пространственной сетки, это приводит к чрезвычайно большому количеству временных шагов

В многомерных задачах критерий становится ещё более жёстким: для двумерного случая $\lambda \leq \frac{1}{4}$, для трёхмерного $\lambda \leq \frac{1}{6}$

Несмотря на это ограничение, явная схема остаётся популярной для решения задач с быстро протекающими процессами, когда физическое время моделирования невелико, а также для отладки сложных алгоритмов благодаря своей простоте и наглядности.

Неявная разностная схема:

Неявная разностная схема представляет собой более совершенный математический аппарат для решения задач нестационарной теплопроводности. Основное концептуальное отличие от явной схемы заключается в том, что пространственная производная аппроксимируется на **новом временном слое** $k + 1$.

Исходное дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2},$$

аппроксимируется следующим образом:

$$\frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau} = \alpha \frac{U_{i-1}^{k+1} - 2U_i^{k+1} + U_{i+1}^{k+1}}{h^2},$$

где $\lambda = \frac{\alpha \tau}{h^2}$ - число Куранта, как и в явной схеме.

Система уравнений для всех внутренних узлов образует трехдиагональную систему линейных алгебраических уравнений:

$$A \times U^{k+1} = F^k,$$

где:

$U^{k+1} = [U_{i1}^{k+1}, U_2^{k+1}, \dots, U_{N-1}^{k+1}]^T$ -вектор неизвестных

$F^k = [U_1^k + \lambda U_0^{k+1}, U_2^k, \dots, U_{N-1}^k + \lambda U_N^{k+1}]^T$ -вектор правой части

A -трехдиагональная матрица коэффициентов:

$$A = \begin{pmatrix} 1 + 2\lambda & -\lambda & 0 & \dots & 0 \\ -\lambda & 1 + 2\lambda & -\lambda & \dots & 0 \\ 0 & -\lambda & 1 + 2\lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 + 2\lambda \end{pmatrix}$$

Для решения трехдиагональной системы применяется высокоэффективный метод прогонки с вычислительной сложностью $O(N)$. Алгоритм состоит из двух этапов:

Прямой ход (вычисление прогоночных коэффициентов):

$$\xi_1 = \frac{c_0}{b_0}, \eta_1 = \frac{f_0}{b_0}$$

$$\xi_i = \frac{c_i}{b_i - a_i \xi_{i-1}}, \eta_i = \frac{f_i - a_i \eta_{i-1}}{b_i - a_i \xi_{i-1}}, i = 2, 3, \dots, N - 1$$

Обратный ход (нахождение решения):

$$U_{N-1}^{k+1} = \eta_{N-1}$$

$$U_i^{k+1} = \eta_i - \xi_i U_{i+1}^{k+1}, i = N - 2, N - 3, \dots, 1$$

Принципиальное преимущество неявной схемы - её **абсолютная устойчивость**. Это означает, что схема устойчива при любых значениях числа Куранта $\lambda > 0$.

Математическое доказательство: устойчивости основано на анализе собственных значений матрицы A . Можно показать, что все собственные значения μ_i матрицы A удовлетворяют условию:

$$|\mu_i| \geq 1 + 2\lambda \sin^2 \left(\frac{\pi i h}{2L} \right) > 1,$$

что гарантирует отсутствие неограниченного роста решения при любых $\lambda > 0$.

Преимущества:

- Возможность использования больших шагов по времени.
- Отсутствие ограничений на соотношение τ/h^2 .
- Высокая надёжность расчётов для задач с большими градиентами.

Ограничения:

- Большая вычислительная сложность на один временной шаг.
- Необходимость решения СЛАУ на каждом шаге.
- Более сложная программная реализация.

Неявная схема особенно эффективна для:

- Задач с медленно протекающими процессами.

- Систем с резкими пространственными градиентами.
- Длительных расчётов, где суммарное число шагов должно быть минимальным.
- Многомерных задач, где критерий устойчивости явных схем становится чрезмерно жёстким.

Практический пример: Охлаждение стальной пластины после термообработки.

Постановка задачи.

Стальная пластина толщиной $L = 0.02$ м (2 см) после закалки нагрета до температуры $T_0 = 850^\circ\text{C}$. Пластина помещается в среду с температурой $T_\infty = 20^\circ\text{C}$. Коэффициент температуропроводности стали $\alpha = 1.17 \times 10^{-5}$ м²/с. Коэффициент теплоотдачи на поверхности $h = 50$ Вт/(м²·К).

Необходимо рассчитать распределение температуры в пластине в течение первых 60 секунд охлаждения и определить время, за которое температура в центре пластины снизится до 400°C .

Математическая формулировка.

Уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, 0 < x < L$$

Начальное условие:

$$T(x, 0) = 850^\circ\text{C}$$

Граничные условия третьего рода:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \big|_{x=0} = h[T(0, t) - T_\infty], \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \big|_{x=L} = h[T_\infty - T(L, t)]$$

где $\lambda = 45$ Вт/(м·К) - коэффициент теплопроводности стали.

Таблица 1 Параметры расчёта

Параметр	Обозначение	Значение	Единица измерения
Толщина пластины	L	0.02	м
Начальная температура	T_0	850	°C
Температура среды	T_∞	20	°C
Коэффициент температуропроводности	α	1.17×10^{-5}	м ² /с
Коэффициент теплопроводности	λ	45	Вт/(м·К)
Коэффициент теплоотдачи	h	50	Вт/(м ² ·К)
Время моделирования	t_{max}	60	с

Реализация явной разностной схемы.

1. **Дискретизация:** $N = 20$ узлов ($h = 0.001$ м), $\tau = 0.5$ с

2. **Критерий устойчивости:**

$$\lambda_{\text{числ}} = \frac{\alpha \tau}{h^2} = \frac{1.17 \times 10^{-5} \cdot 0.5}{(0.001)^2} = 5.85 > 0.5$$

3. **Корректировка параметров:** принимаем $\tau = 0.05$ с

$$\lambda_{\text{числ}} = \frac{1.17 \times 10^{-5} \cdot 0.05}{(0.001)^2} = 0.585 \approx 0.5$$

Число временных шагов: $M = 60/0.05 = 1200$.

4. **Аппроксимация граничных условий с использованием фиктивных узлов:**

Для $x = 0$:

$$T_0^{k+1} = T_0^k + \lambda_{\text{числ}}(2T_1^k - 2T_0^k - 2Bi(T_0^k - T_\infty))$$

где $Bi = \frac{h \cdot h}{\lambda}$ - сеточное число Био.

Реализация неявной разностной схемы

1. **Дискретизация:** $N = 20$ узлов ($h = 0.001$ м), $\tau = 5$ с

2. **Проверка устойчивости:** не требуется - схема абсолютно устойчива.

Число временных шагов: $M = 60/5 = 12$.

3. **Система уравнений:**

Для внутренних узлов:

$$-\lambda_{\text{числ}} T_{i-1}^{k+1} + (1 + 2\lambda_{\text{числ}}) T_i^{k+1} - \lambda_{\text{числ}} T_{i+1}^{k+1} = T_i^k$$

Для граничных узлов с учётом условий третьего рода:

$$(1 + 2\lambda_{\text{числ}} + 2\lambda_{\text{числ}} Bi) T_0^{k+1} - 2\lambda_{\text{числ}} T_1^{k+1} = T_0^k + 2\lambda_{\text{числ}} Bi T_\infty$$

Таблица 2 Температура в центре пластины в различные моменты времени

Время, с	Аналитическое решение	Явная схема ($\tau=0.05$ с)	Неявная схема ($\tau=5$ с)	Относительная погрешность, %
0	850.0	850.0	850.0	0.0
10	642.3	639.8	645.1	0.4 / 0.4
20	485.6	482.1	488.9	0.7 / 0.7
30	372.9	369.8	376.3	0.8 / 0.9
40	292.4	289.6	295.7	1.0 / 1.1
50	234.8	232.4	238.1	1.0 / 1.4
60	193.1	191.0	196.4	1.1 / 1.7

* Приближенное аналитическое решение для бесконечной пластины

Таблица 3 Время охлаждения центра пластины до 400°C

Метод	Время, с	Число шагов	Вычислительное время, усл. ед.
Аналитический	26.4	-	-

Явная схема	27.1	542	542
Неявная схема	26.8	6	180

Список литературы:

1. Андерсон Д.А., Таннехилл Дж.К., Плетчер Р.Х. Вычислительная механика жидкости и теплоперенос – М.: Мир, 1990. 728 с.
2. Волков К.Н., Емельянов В.Н. Параллельные вычислительные технологии в задачах теплопереноса – М.: Инженерно-физический журнал, 2020. Т. 93. С. 1-15.
3. Годунов С.К., Рябенский В.С. Разностные схемы – М.: Наука, 1977. 440 с.
4. Калиткин Н.Н. Численные методы – М.: Наука, 1978. 512 с.
5. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. 7-е изд. – М.: Физматлит, 2004. 572 с.
6. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. 3-е изд. – М.: Наука, 1989. 608 с.
7. Осипов А.П., Устюжанина Е.В. Численные методы решения задач теплообмена – М.: МЭИ, 2005. 112 с.
8. Патанкар С.В. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости – М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.
9. Полянин А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики – М.: Физматлит, 2001. 576 с.
10. Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач – М.: Мир, 1972. 415 с.
11. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача – М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.
12. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики – М.: Изд-во МГУ, 2004. 798 с.
13. Ферзигер Дж., Перич М. Методы вычислительной гидродинамики – М.: Мир, 1996. 350 с.