Liet. matem. rink., **44**, *spec. nr.*, 2004, 623–627

Trimačio parabolinio uždavinio su nelokalia kraštine sąlyga skaitinis sprendimas*

Raimondas ČIEGIS, Mečislovas MEILŪNAS, Olga SUBOČ (VGTU)
e-mail: rc@fm.vtu.lt

1. Uždavinio formulavimas

Imkime sritį $Q_T = \Omega \times [0, T]$, $\Omega = (0;1) \times (0;1) \times (0;1)$, pažymėkime $\partial\Omega$ srities Ω paviršių. Jį išskaidome į dvi dalis

$$\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2, \quad \partial\Omega_2 = \big\{X: \ (x_1, x_2, 0), \ 0 \leqslant x_j \leqslant 1, \ j = 1, 2\big\}.$$

Srityje Q_T nagrinėkime parabolinį kraštinį uždavinį ir papildomą integralinę sąlygą:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(k_\alpha(X,t)\frac{\partial u}{\partial x_\alpha}\right) - q(X,t)u + f(X,t), & (X,t) \in Q_T, \\ u(X,t) = \mu_1(X,t), & X \in \partial\Omega_1 \times (0,T], \\ u(X,t) = \mu_0(t)\mu_2(X), & X \in \partial\Omega_2 \times (0,T], \\ u(x_1,x_2,x_3,0) = u_0(x_1,x_2,x_3), & X \in \Omega \cup \partial\Omega, \end{cases} \tag{1}$$

ir papildomą integralinę sąlygą:

$$\int_0^1 \int_0^1 \int_0^{d(x_1,x_2)} \rho(X)\, u(X,t)\, dx_3\, dx_2\, dx_1 = M(t), \quad t \in [0,T]. \tag{2}$$

Čia $k_\alpha, q, d, \rho, f, u_0, M, \mu_j$, $j = 1, 2$ yra žinomos, pakankamai glodžios funkcijos, o ieškome funkcijų $u(X,t)$ ir $\mu_0(t)$.

Dvimačio uždavinio išsprendžiamumas buvo išnagrinėtas [1] darbe. Noye ir Dehghan darbe [4] išnagrinėta išreikštinė Eulerio schema ir lokaliai vienmatės schemos modifikacija. LVS kiekviename žingsnyje vienmačiai uždaviniai vėl buvo aproksimuojami išreikštine Eulerio schema, todėl ir ši schema buvo tik sąlygiškai stabili. Trimatis uždavinys spręstas panašia LVS [3] darbe. Šiuose darbuose integralai nelokalioje sąlygoje aproksmuojami didesnio tikslumo formulėmis, nei kitos uždavinio lygtys, šis pasirinkimas nėra paaiškintas.

*Šis darbas atliekamas pagal EUREKA programą (projektas OPTPAPER E!2623) ir yra remiamas Lietuvos Valstybinio mokslo ir studiju fondo (sutarties nr. V-27).

Šiame darbe ištirtas išreikštinės Eulerio schemos tikslumas trimačio uždavinio atveju, parodyta, kad integralinę sąlyga galima aproksimuoti trapecijų formule, tik papildomai reikia pakeisti pradinės sąlygos aproksimaciją. Taip pat sudaryta neišreikštinė LVS ir pateiktas jos relizavimo algoritmas.

2. Išreikštinis Eulerio metodas

Srityje Q_T apibrėžkime tolygųjį tinklą $Q_{h\tau} = \omega_h \times \omega_\tau$:

$$\omega_h = \Big\{(x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}) : \quad x_{1i} = ih,\ x_{2j} = jh,\ x_{3k} = kh,\ h = \frac{1}{J},\ 0 < i, j, k < J\Big\},$$

$$\omega_\tau = \Big\{t^n : \quad t^n = n\tau,\ n = 1, 2, \ldots, N,\ N\tau = T\Big\},$$

pažymėkime γ_h srities ω_h paviršių, kurį irgi išskaidome į dvi dalis $\gamma_h = \gamma_{1h} \cup \gamma_{2h}$. Tinklo mazguose apibrėžiame diskrečiąją funkciją $U^n_{ijk} = U(x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}, t^n)$.

Diferencialinį uždavinį aproksimuojame išreikštine baigtinių skirtumų schema [2]

$$\begin{cases} \dfrac{U^{n+1} - U^n}{\tau} = \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{3} A_\alpha U^n + f^n, & X \in \omega_h, \\ U^{n+1} = \mu_1(X, t^{n+1}), & X \in \gamma_{1h}, \\ U^{n+1} = \mu_0^{n+1} \mu_2(X, t^{n+1}), & X \in \gamma_{2h}, \end{cases} \tag{3}$$

čia pažymėjome baigtinių skirtumų operatorius

$$A_\alpha U = \big(a_\alpha U_{\bar{x}_\alpha}\big)_{x_\alpha} - \frac{1}{3} q(X, t^n) U, \quad \alpha = 1, 2, 3,$$

$$a^n_{\alpha ij} = k_\alpha\Big(x_{1i} - \frac{h}{2}\delta_{1\alpha},\ x_{2j} - \frac{h}{2}\delta_{2\alpha},\ x_{3k} - \frac{h}{2}\delta_{3\alpha}\Big),$$

čia $\delta_{i\alpha}$ yra Kronekerio simbolis.

Pradinės sąlygos aproksimavimas yra svarbus diskrečiojo uždavinio formulavimo etapas. Paprasčiausią diskrečiąją pradinę sąlygą gauname imdami funkcijos $u_0(X)$ reikšmę tinklo mazge (žr. [4])

$$U^0 = u_0(X), \quad X \in \omega_h \cup \gamma_h. \tag{4}$$

Funkcijos μ_0^{n+1} reikšmę apskaičiuojame panaudodami diskrečiąją integralinę sąlygą

$$\mu_0^{n+1} = \frac{M(t^{n+1}) - S_h \tilde{U}^{n+1}}{S_h B}, \tag{5}$$

o trimatį intergralą aproksimuojame trapecijų metodu [2]

$$S_h V = \sum_{i,j=0}^{J} c_i c_j F(x_{1i}, x_{2j}) h^2, \tag{6}$$

$$c_0=\frac{1}{2},\quad c_l=1,\ l=1,\dots,J-1,\quad c_J=\frac{1}{2},$$

$$F_{ij}=\sum_{k=1}^{K}\frac{\rho_{ijk}V_{ijk}+\rho_{i,j,k-1}V_{i,j,k-1}}{2}h+\frac{\tilde\rho_{ij}\tilde V_{ij}+\rho_{ijK}V_{ijK}}{2}(d_{ij}-x_{3K}),$$

$$\tilde\rho_{ij}\tilde V_{ij}=\rho(x_{1i},x_{2j},d_{ij})V(x_{1i},x_{2j},d_{ij}).$$

Funkcijos $\tilde U$, B apibrėžtos taip:

$$\tilde U_{ijk}=\begin{cases}U_{ijk}, & 0<k\leqslant J,\\ 0, & k=0,\end{cases}\qquad B_{ijk}=\begin{cases}0, & 0<k\leqslant J,\\ \mu_2(x_{1i},x_{2j}), & k=0.\end{cases}$$

Uždavinio (3)–(5) pakankamoji išsprendžiamumo sąlyga yra $S_hB\neq 0$.

Aproksimacijos tikslumo analizė

Nelokaliosios ir pradinės sąlygų aproksimavimo paklaida turi didelį poveikį diskrečiojo sprendinio tikslumui. Priminsime, kad diskrečioji pradinė sąlyga tinklo taškuose sutampa su tiksliaja diferencialinio uždavinio pradine sąlyga, o integralas aproksimuojamas antrosios tikslumo eilės trapecijų formule, todėl $S_hU^0=M(t^0)+O(h^2)$. Tačiau sekančiame žingsnyje reikalaujame, kad būtų išpildyta sąlyga $S_hU^1=M(t^1)$. Kadangi $S_hB=O(h)$ ir $\tau=\mathcal{O}(h^2)$, tai kraštinę sąlygą apskaičiuojame tik tokiu tikslumu

$$|\mu_0^1-\mu_0(t^1)|=\frac{Ch^2}{S_hB}=Ch.$$

Taigi, nors aproksimavimo paklaida yra antrosios tikslumo eilės, diskrečiojo sprendinio tikslumas yra tik pirmosios eilės. Viena iš galimybių, kaip pagerinti schemos tikslumą, yra naudoti didesnio tikslumo skaitinio integravimo metodą, pvz. Simpsono algoritmą. Tačiau toks būdas netinka, kai integravimo srities paviršius yra sudėtingas. Todėl siūlome pakeisti pradinės sąlygos aproksimaciją taip, kad ir pradiniu laiko momentu būtų tiksliai išpildyta diskrečioji nelokalioji sąlyga:

$$U^0=\frac{M(t^0)u_0(X)}{S_hu_0},\qquad X\in\omega_h\cup\gamma_h. \tag{7}$$

Tada $|U^0-u_0(X)|=\mathcal{O}(h^2)$, tačiau dabar jau neatsiranda skaitinės prigimties masės šaltinis, kuris iškreipdavo kraštinės sąlygos tikslumą.

1 pavyzdys. Spręskime dvimatį (1) uždavinį, kai nelokalioji sąlyga formuluojama plokštumoje $x_2=0$, o kiti koeficeintai yra tokie:

$$\begin{aligned}&k_\alpha=1,\quad q=0,\quad f=0,\\ &\mu_0(t)=\exp(2t),\quad d(x_1)=\exp(x_1)/4,\end{aligned} \tag{8}$$

tada tiksliu uždavinio sprendiniu yra funkcija $u(X,t)=\exp(x_1+x_2+2t)$.

2 pavyzdys. Šiame pavyzdyje pasikeitė tik koeficientai

$$\mu_0(t) = \exp(t), \quad d(x_1) = x_1(1 - x_1).$$

Tiksliu uždavinio sprendiniu yra funkcija $u(X,t) = (1 - x_2)\exp(x_1 + t)$.

1 lentelėje pateiktos sprendinio U^1 paklaidų reikšmės $L_\infty(\omega_h)$ normoje, kai $t^1 = \tau$. Palygintos pradinės sąlygos aproksimavimo formulės (4) ir (7).

3. Lokaliai vienmatė schema (LVS)

Išreikštinė Eulerio schema yra tik sąlygiškai stabili, todėl ji nėra ekonomiška skaičiavimo apimties atžvilgiu. Šiame poskyryje sukonstruosime nesąlygiškai stabilią ir ekonomišką LVS, aproksimuojančią trimatį parabolinį uždavinį ir nelokaliąją sąlygą:

$$\begin{cases} \dfrac{U^{n+1/3} - U^n}{\tau} = A_1 U^{n+1/3} + f^{n+1}, \ X \in \omega_h, \\ \dfrac{U^{n+j/3} - U^{n+(j-1)/3}}{\tau} = A_j U^{n+j/3}, \ X \in \omega_h, \ j = 2, 3, \\ U_{ijk}^{n+1/2} = \mu_1^{n+1} - \tau A_2 \mu_1^{n+1}, \qquad U_{ijk}^{n+1/2} = \mu_1^{n+1} - \tau A_3 \mu_1^{n+1}, \ X \in \gamma_{1h}, \\ U_{ijk}^{n+1} = \mu_0^{n+1}\mu_2, \qquad X \in \gamma_{1h}, \ U_{ijk}^{n+1} = \mu_1^{n+1}, \ X \in \gamma_{1h}, \\ S_h U^{n+1} = M(t^{n+1}). \end{cases} \tag{9}$$

Algoritmo realizavimas. Pirmieji du diskretieji uždaviniai yra standartiniai: sprendžiame po J^2 tiesinių lygčių sistemų, kurių matrica yra triįstrižainė. Bendra skaičiavimų apimtis yra $\mathcal{O}(J^3)$ veiksmų.

Pateiksime ekonomišką trečiojo uždavinio sprendimo algoritmą. Panaudodami pirmojo tipo kraštinę sąlygą, surandame išskaidymo koeficientus $\tilde{\alpha}^{n+1}$, $\tilde{\beta}^{n+1}$ (pastebėsime, kad reikia saugoti visus koeficientus):

$$U_{ijk}^{n+1} = \tilde{\alpha}_{ijk}^{n+1} U_{i,j,k-1}^{n+1} + \tilde{\beta}_{ijk}^{n+1}, \quad i, j = 0, \dots, J, \ k = J, \dots, 1,$$

Sprendinį išreiškiame tiesiniu dariniu, priklausančiu nuo nežinomos kraštinės sąlygos:

$$U_{ijk}^{n+1} = \alpha_{ijk}^{n+1} U_{ij0}^{n+1} + \beta_{ijk}^{n+1}, \quad i, j = 0, \dots, J, \ k = 1, \dots, J, \tag{10}$$

$$\alpha_{ijk}^{n+1} = \tilde{\alpha}_{ijk}^{n+1}\alpha_{i,j,k-1}^{n+1}, \quad \beta_{ijk}^{n+1} = \tilde{\alpha}_{ijk}^{n+1}\beta_{i,j,k-1}^{n+1} + \tilde{\beta}_{ijk}^{n+1},$$

1 lentelė. Diskrečiojo sprendinio paklaida, kai $t^1 = \tau$

J	1 pvz.		2 pvz.	
	(4)	(7)	(4)	(7)
40	4.431e-2	2.455e-3	2.519e-2	2.090e-3
80	2.216e-2	6.169e-4	1.2422-2	5.243e-4
160	1.108e-2	1.546e-4	6.169e-3	1.312e-4
320	5.539e-3	3.877e-5	3.074e-3	3.280e-5

Panaudodami diskrečiąją nelokaliąją sąlygą apskaičiuojame funkciją:

$$\mu_0^{n+1} = \frac{M(t^{n+1}) - S_h \beta^{n+1}}{S_h(\alpha_{ijk}^{n+1} \mu_{2ij})}.$$

Tada imdami (10) surandame sprendinį laiko momentu t^{n+1}. Ir trečiojo etapo bendra skaičiavimų apimtis yra $\mathcal{O}(J^3)$ veiksmų, taigi LVS yra ekonomiška.

Neišreikštinio algoritmo pakankama išsprendžiamumo sąlyga yra

$$S_h(\alpha_{ij}^{n+1} \mu_{2ij}) \neq 0, \tag{11}$$

ji yra daug silpnesnė už sąlyga, kurią buvome gavę išreikštinei Eulerio schemai.

2 lentelėje pateiktos 1 pavyzdžio sprendinio paklaidų reikšmės $L_\infty(\omega_h)$ normoje, kai $t = 1$. Skaičiavimo laikai gauti sprendžiant $J = 160$ dydžio uždavinį.

2 lentelė. LVS sprendinio paklaida

τ	$J = 80$	$J = 160$	CPU (s)
0.004	1.302e-2	9.049e-3	13.4
0.001	7.425e-3	3.368e-3	49.4
0.00025	5.959e-3	1.872e-4	199

Skaičiavimo ekperimento rezultatai patvirtina išvadą, kad LVS yra $\mathcal{O}(\tau + h^2)$ tikslumo schema.

Literatūra

1. J.R. Cannon, Y. Lin, A.L. Matheson, The solution of the diffusion equation in two – space variables subject to the specification of mass, *Appl. Anal.*, **50**, 1–19 (1993).
2. R. Čiegis, *Diferencialinių lygčių skaitiniai sprendimo metodai*, Vilnius, Technika (2003).
3. M. Dehghan, Locally explicit schemes for three–dimensional diffusion with non–local boundary specification, *Applied Mathematics and Computation*, **135**, 399–412 (2002).
4. B.J. Noye, M. Dehghan, New explicit finite difference schemes for two–dimensional diffusion subject specification of mass, *Numer. Meth. for PDE*, **15**, 521–534 (1999).

REZIUMĖ

R. Čiegis, M. Meilūnas, O. Subač. Numerical schemes for 3D parabolic problem with non–local boundary condition

Two finite difference schemes are used to solve the 3D parabolic problem with a non-local boundary condition. A new approximation of the initial condition is proposed for the explicit Euler scheme. Error estimates in the maximum norm are obtained and results of some numerical experiments are presented. The second scheme is based on implicit splitting method. An efficient realization algorithm of the LOD scheme is proposed.

Keywords: finite-difference scheme, non-local boundary conditions, LOD schemes, convergence.