

УДК 519.63

## Продольная схема метода прямых для численной аппроксимации краевых задач с негладкими данными для дифференциального уравнения второго порядка параболического типа

И.И. Маглеванный, Т.И. Карякина

Волгоградский государственный социально-педагогический университет

### Введение

К параболическим уравнениям приводит математическое описание многих сложных явлений в современном естествознании, экономике и технике. Кроме классических задач теплопроводности и диффузии, параболические уравнения встречаются, например, в теории тепло- и массопереноса при описании процессов сушки и охлаждения, в теории ядерных цепных реакций при изучении процесса замедления нейтронов, в теории сигналов при макроскопическом описании случайного процесса на выходе радиотехнического устройства, при изучении многих процессов в химической и биологической кинетике и в других задачах. Общая классическая постановка смешанной начально-краевой задачи для уравнения указанного типа имеет следующий вид. Пусть в полосе  $x \in [a, b]$ ,  $t \in [t_0, t_1]$  поставлена граничная задача для неизвестной функции  $u = u(x, t)$

$$K(x, t) \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ A(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + B(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} - G(x, t) u + F(x, t),$$

$$x \in [a, b] \quad (1)$$

с начальным условием

$$u(x, t) \Big|_{t=t_0} = u_0(x), \quad x \in [a, b]. \quad (2)$$

В граничных точках задаются либо линейные краевые условия третьего рода

$$C^-(t)u(a, t) - D^-(t) \frac{\partial u}{\partial x}(a, t) = E^-(t),$$

$$C^+(t)u(b, t) - D^+(t) \frac{\partial u}{\partial x}(b, t) = E^+(t), \quad (3)$$

либо краевые условия первого рода

$$C^-(t)u(a, t) = E^-(t),$$

$$C^+(t)u(b, t) = E^+(t), \quad (4)$$

либо какое-то из этих условий на каждой границе. При определенных предположениях об условиях гладкости функциональных коэффициентов задача (1) – (3) имеет

единственное классическое решение  $u(x, t) \in C^2([a, b] \times [t_0, +\infty))$  [1,2].

Стандартным подходом к численному решению задачи (1) – (3) является конечно-разностная дискретизация по пространственной переменной  $x$  и по временной переменной  $t$ , что реализуется обычно в виде чисто неявной схемы или схемы Кранка-Николсона [3,4,5].

Однако число классический подход к аппроксимации решения во многих случаях оказывается неадекватным. Так, при оценке производных финансовых инструментов в математической теории опционов одной из моделей является модель Блэка-Шоулза-Мертонна [6,7], представляющая собой параболическое уравнение в частных производных относительно стоимости опциона. Для некоторых типов опционов начальные данные являются разрывными по переменной  $x$ . Во многих случаях флуктуационная модель пространственно – однородной системы описывается стохастическим дифференциальным уравнением Ланжевена [8], которое математически эквивалентно уравнению Фоккера – Планка для эволюции плотности вероятности перехода из начального состояния в текущее [9]. Уравнение Фоккера–Планка формально является частным случаем уравнения (1) – (3), однако в общей постановке источник является сингулярным:  $f(x, t) \sim \delta(x - x_0)$ .

Некоторые задачи электронного транспорта в многослойных мишенях могут быть сведены к уравнению (1) с мгновенным сингулярным источником  $f(x, t) \sim \delta(t)\delta(x - x_0)$ , при этом функциональные коэффициенты  $K(x, t)$ ,  $A(x, t)$ ,  $G(x, t)$  претерпевают разрыв на границах слоев [15]. Приведенные примеры свидетельствуют о том, что, если коэффициенты задачи не удовлетворяют необходимым условиям гладкости, то задачу и ее решение следует трактовать в обобщенном смысле, считая коэффициенты и решение элементами обобщенных функциональных классов с соответствующим обобщенным толкованием производных.

**Обобщенная постановка задачи**

При разработке алгоритма аппроксимации решения мы используем идеи усреднения, рассмотренные в [11]. Умножим уравнение (1) на произвольную (пробную) весовую функцию  $\varphi(x)$  и проинтегрируем по промежутку  $[a, b]$ . Используя формулу интегрирования по частям, получим интегральное тождество, эквивалентное исходному уравнению (1)

$$\int_a^b \varphi(x) \left[ K(x, t) \frac{\partial u}{\partial t} \right] dx = \int_a^b \varphi(x) \left[ F(x, t) - G(x, t)u + B(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \right] dx - \int_a^b A(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx + \varphi(x) A(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=a}^{x=b}. \quad (5)$$

Тождество (5) имеет смысл и тогда, когда функциональные коэффициенты уравнения (1) являются только кусочно-непрерывными функциями, что позволяет сформулировать обобщенную постановку исходной задачи. Обобщенным решением задачи (1) – (2) будем называть функцию  $u(x, t)$ , удовлетворяющую интегральному тождеству (5) для всех  $\varphi(x)$ , а крайевые и начальные условия выполняются почти всюду.

**Пространственная дискретизация обобщенной задачи Коши**

Введем в области  $x \in [a, b]$  (неравномерную) пространственную сетку

$$a = x_0 < x_1 \dots < x_n = b. \quad (6)$$

Для каждого  $x_i$  определим частичные промежутки

$$\Delta_i^- = [x_{i-1}, x_i], \quad \Delta_i^+ = [x_i, x_{i+1}], \\ \Delta_0^- = 0, \quad \Delta_n^+ = 0 \quad (7)$$

и шаги сетки по переменной  $x$

$$h_i^- = x_i - x_{i-1}, \quad h_{i0}^- = 0, \quad h_i^+ = x_{i+1} - x_i, \\ h_n^+ = 0, \quad \eta_i = \frac{1}{2}[h_i^- + h_i^+], \quad i = 1, \dots, n. \quad (8)$$

По определению  $\Delta_i^- = \Delta_i^+$ ,  $h_i^- = h_{i-1}^+$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

В окрестности узлов  $x_i$  определим функции

$$\varphi_i^-(x) = \frac{2}{(h_i^-)^2} (x - x_{i-1}) \chi(\Delta_i^-), \\ \varphi_i^+(x) = \frac{2}{(h_i^+)^2} (x_{i+1} - x) \chi(\Delta_i^+), \quad (9)$$

$$\varphi_i(x) = \frac{1}{2\eta_i} (h_i^- \varphi_i^-(x) + h_i^+ \varphi_i^+(x)). \quad (10)$$

Здесь  $\chi(A)$  – характеристическая функция множества  $A$

$$\chi(A) = \begin{cases} 1, & x \in A \\ 0, & x \notin A \end{cases} \quad (11)$$

Функции (9), (10) являются непрерывными функциями аргумента  $x$  с компактным носителем в  $R$  и имеют кусочно-гладкие производные первого порядка. Кроме того, эти функции нормированы на 1

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_i^\pm(x) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_i(x) dx = 1.$$

Определим усредняющие интегральные операторы Стеклова. Пусть  $F(x, t)$  – произвольная кусочно-непрерывная функция. Тогда по определению

$$\hat{T}_i^- \{F(x, t)\} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} F(x, t) \varphi_i^-(x) dx = \frac{2}{(h_i^-)^2} \cdot \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) F(x, t) dx, \\ \hat{T}_0^- \{F(x, t)\} = 0, \quad (13)$$

$$\hat{T}_i^+ \{F(x, t)\} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x, t) \varphi_i^+(x) dx = \frac{2}{(h_i^+)^2} \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x) F(x, t) dx, \\ \hat{T}_n^+ \{F(x, t)\} = 0, \quad (14)$$

$$\hat{T}_i \{F(x, t)\} = \frac{1}{2\eta_i} \left( h_i^- \hat{T}_i^- \{F(x, t)\} + h_i^+ \hat{T}_i^+ \{F(x, t)\} \right) \quad (15)$$

$$\hat{S}_i^- \{F(x, t)\} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} F(x, t) \frac{\partial \varphi_i^-(x)}{\partial x} dx = \frac{2}{(h_i^-)^2} \cdot \int_{x_{i-1}}^{x_i} F(x, t) dx, \\ \hat{S}_0^- \{F(x, t)\} = 0, \quad (16)$$

$$\hat{S}_i^+ \{F(x, t)\} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x, t) \frac{\partial \varphi_i^+(x)}{\partial x} dx = -\frac{2}{(h_i^+)^2} \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x, t) dx, \\ \hat{S}_n^+ \{F(x, t)\} = 0, \quad (17)$$

$$\hat{S}_i \{F(x,t)\} = \frac{1}{2\eta_i} \left( h_i^- \hat{S}_i^- \{F(x,t)\} + h_i^+ \hat{S}_i^+ \{F(x,t)\} \right) \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}_i^- \{F(x,t)\} &= \hat{T}_i^- \{ (x-x_i) F(x,t) \} = \\ &= \frac{2}{(h_i^-)^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-x_i)(x-x_{i-1}) F(x,t) dx, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}_i^+ \{F(x,t)\} &= \hat{T}_i^+ \{ (x-x_i) F(x,t) \} = \\ &= \frac{2}{(h_i^+)^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x_{i+1}-x) F(x,t) dx, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\hat{Q}\{F(x,t)\} = \frac{1}{2\eta_i} \left( h_i^- \hat{Q}_i^- \{F(x,t)\} + h_i^+ \hat{Q}_i^+ \{F(x,t)\} \right) \quad (21)$$

Все эти операторы линейны. Т.к. носители их интегральных ядер локализованы в элементарной окрестности узла  $i$ , т.е. в множестве  $x \in [x_i - h_i^-, x_i + h_i^+]$ , то каждый оператор можно трактовать как оператор усреднения функции  $F(x,t)$  по элементарной окрестности с соответствующим ядром усреднения [11]. Нетрудно убедиться, что

$$\begin{aligned} \hat{T}_i^\pm \{1\} &= \hat{T}_i \{1\} = 1, \quad \hat{S}_i^\pm \{1\} = \mu \frac{2}{h_i^\pm}, \\ \hat{Q}_i^\pm \{1\} &= \pm \frac{h_i^\pm}{3}, \end{aligned} \quad (22)$$

и что справедливы правила сдвига

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^- \{F(x,t)\} &= -\hat{S}_{i-1}^+ \{F(x,t)\}, \\ \hat{Q}_i^- \{F(x,t)\} &= -\hat{Q}_{i-1}^+ \{F(x,t)\} \end{aligned} \quad (23)$$

### Обобщенное уравнение баланса

В интегральном соотношении (5) положим  $\varphi(x) = \varphi_i(x)$ ,  $i = 0, \dots, n$  и запишем его в операторной форме

$$\begin{aligned} \hat{T}_i \left\{ K(x,t) \frac{\partial u}{\partial t} \right\} &= \hat{T}_i \left\{ F(x,t) - G(x,t)u + B(x,t) \frac{\partial u}{\partial x} \right\} - \\ &\quad - \hat{S}_i \left\{ A(x,t) \frac{\partial u}{\partial x} \right\} + \\ &\quad + \frac{\delta_{i,n}}{\eta_i} A(x,t) \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=b} - \frac{\delta_{i,0}}{\eta_i} A(x,t) \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=a}. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь  $\delta_{i,j}$  – символ Кронекера

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (25)$$

Уравнение (24) получено в результате усреднения исходного уравнения по

элементарной окрестности узла  $x_i$  и, таким образом, имеет смысл обобщенного уравнения баланса для элементарной ячейки [11], [2]. Последние два члена характеризуют влияние краевых условий.

### Разностная аппроксимация

Пусть  $\mathcal{Y}(t) = \{y_i(t)\}_{i=0}^n$  – сеточная функция, аппроксимирующая значение  $u(x,t)$  в узлах  $x_i$ .

В окрестности узла  $x_i$  используем аппроксимации

$$\begin{aligned} u(x,t) &\approx y_i(t) + (x-x_i) \cdot \\ &\cdot \left[ \frac{y_i(t) - y_{i-1}(t)}{h_i^-} \chi(\Delta_i^-) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{y_{i+1}(t) - y_i(t)}{h_i^+} \chi(\Delta_i^+) \right] \\ \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} &\approx \left[ \frac{y_i(t) - y_{i-1}(t)}{h_i^-} \chi(\Delta_i^-) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{y_{i+1}(t) - y_i(t)}{h_i^+} \chi(\Delta_i^+) \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

Определим разностный оператор с ядром  $F(x,t)$

$$\begin{aligned} \hat{P}_i \{F(x,t), \mathcal{Y}\} &= y_i \hat{T}_i \{F(x,t)\} + \frac{1}{2h_i} \cdot \\ &\cdot \left[ (y_i - y_{i-1}) \hat{Q}_i^- \{F(x,t)\} + (y_{i+1} - y_i) \hat{Q}_i^+ \{F(x,t)\} \right] \end{aligned} \quad (28)$$

$$\hat{P}_i \{1, \mathcal{Y}\} = \frac{2}{3} y_i + \frac{1}{6\eta_i} (h_i^- y_{i-1} + h_i^+ y_{i+1}) \quad \begin{matrix} \text{В} \\ \text{частн} \\ \text{ости,} \end{matrix} \quad (29)$$

Так как оператор  $\hat{P}_i$  представляется трех-диагональной матрицей, он может быть эффективно обращен методом прогонки. Определим разностный граничный оператор  $\hat{\Gamma}_i \{\mathcal{Y}\}$ . Для краевых условий вида (3) положим

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_i \{\mathcal{Y}\} &= \frac{A(x_i,t)}{h_i} \cdot \\ &\cdot \left[ \frac{E^-(t) - C^-(t)y_i(t)}{D^-(t)} \delta_{i,0} + \frac{E^+(t) - C^+(t)y_i(t)}{D^+(t)} \delta_{i,n} \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

Для краевых условий вида (4) положим

$$\hat{\Gamma}_i \{y\} = \frac{A(x_i, t)}{h_i} \cdot \left[ \frac{E^-(t) - C^-(t)y_{i+1}(t)}{h_i^+ C^-(t)} \delta_{i,0} + \frac{E^+(t) - C^+(t)y_{i-1}(t)}{h_i^- C^+(t)} \delta_{i,n} \right] \quad (31)$$

Используем аппроксимации (26) и запишем уравнение баланса (24) в виде

$$\hat{P}_i \left\{ K(x, t), \frac{\partial y(t)}{\partial t} \right\} = \hat{L}_i \{y(t)\} + \hat{\Gamma}_i \{y(t)\}. \quad (32)$$

Здесь разностный оператор  $\hat{L}_i \{y\}$  определяется выражением

$$\begin{aligned} \hat{L}_i \{y\} = & \hat{T}_i \{F(x, t)\} - \hat{P}_i \{G(x, t), y\} + \\ & + \frac{1}{2h_i} (y_i - y_{i-1}) \left[ \hat{T}_i^- \{B(x, t)\} - \hat{S}_i^- \{A(x, t)\} \right] + \\ & + \frac{1}{2h_i} (y_{i+1} - y_i) \left[ \hat{T}_i^+ \{B(x, t)\} - \hat{S}_i^+ \{A(x, t)\} \right]. \quad (33) \end{aligned}$$

### Решение эволюционной задачи

Чтобы свести решение задачи (32) к задаче эволюционного типа, определим квадратную трех-диагональную  $(n+1) \times (n+1)$  - матрицу

$$\hat{M}(t)$$

$$\begin{aligned} \hat{M}_{ij}(t) = & a_i \delta_{i,j} + b_i \delta_{i,j-1} + c_i \delta_{i,j+1}, \\ i, j = & 0, \dots, n, \end{aligned} \quad (34)$$

где

$$\begin{aligned} a_i(t) = & \hat{T}_i \{K(x, t)\} + \frac{1}{2\eta_i} \left[ \hat{Q}_i^- \{K(x, t)\} - \hat{Q}_i^+ \{K(x, t)\} \right], \\ i = & 0, \dots, n, \end{aligned} \quad (35)$$

$$b_i(t) = \frac{1}{2\eta_i} \hat{Q}_i^+ \{K(x, t)\},$$

$$c_i(t) = -\frac{1}{2\eta_i} \hat{Q}_i^- \{K(x, t)\}, \quad i = 0, \dots, n. \quad (36)$$

Тогда соотношение (32) можно представить в виде эволюционного уравнения

$$\begin{aligned} \frac{dy(t)}{dt} = & (\hat{M})^{-1} \cdot (\hat{L}_i \{y(t)\} + \hat{\Gamma}_i \{y(t)\}), \\ t \in & \{t_0, t_1\} \end{aligned} \quad (37)$$

с начальным условием

$$y_i(t_0) = \hat{T}_i \{u_0(x, t)\}, \quad i = 0, \dots, n, \quad (38)$$

Решение начальной задачи (37), (38) производится вложенным методом Рунге-Кутты, основанным на формулах Дормана и Принса с автоматическим управлением длиной шага и контролируемой точностью [12]. Обращение

матрицы  $\hat{M}(t)$  осуществляется методом прогонки [1] по следующему алгоритму.

Вычисление вектора  $\hat{x} = (\hat{M})^{-1} \hat{z}$  сводится к решению линейной системы

$$\hat{x} = (\hat{M})^{-1} \hat{z} \Leftrightarrow \hat{M} \hat{x} = \hat{z}. \quad (39)$$

Для решения систем линейных уравнений с трех-диагональной матрицей разработана модификация метода Гаусса, использующая нули в матрице системы. Эта процедура, называемая прогонкой и предложенная Томасом в 1949 г., состоит в следующем. Первый шаг (прямая прогонка) – исключение неизвестных  $x_0, \dots, x_{n-1}$  из второго и последующих уравнений. В результате чего приходим к системе

$$x_i = v_i x_{i+1} + u_i, \quad i = 0, \dots, n-1, \quad x_n = u_n, \quad (40)$$

где

$$v_i = -\frac{b_i}{a_i + c_i v_{i-1}}, \quad u_i = \frac{g_i - c_i u_{i-1}}{a_i + c_i v_{i-1}}, \quad i = 0, \dots, n. \quad (41)$$

Второй шаг – обратная прогонка. Здесь  $x_n = u_n$ .

Остальные неизвестные находятся по формулам (40). Для реализации алгоритма требуется  $8n$  арифметических операций.

### Особенности программной реализации

Описанный алгоритм был реализован на языке C++. Отметим особенности программы, позволяющие достаточно гибко реализовать различные сценарии расчетов.

1. Функции, осуществляющие расчет функциональных коэффициентов задачи, являются входными параметрами программы.

2. Пространственная сетка  $\{x_i\}_{i=0}^n$  не обязана быть эквидистантной и должна быть явно задана пользователем. При этом те точки, в которых имеются особенности, желательно включать в множество  $\{x_i\}_{i=0}^n$ , что повысит точность аппроксимации.

3. Для осуществления операций усреднения в формулах (13)-(21) использовались квадратурные формулы Гаусса [13, 14]. Данный подход исключает из квадратурной формулы концевые точки промежутка интегрирования, в которых интегрируемая функция может быть разрывна.

4. Решение задачи Коши (37,38) осуществляется с помощью вложенного явного метода Рунге-Кутты пятого порядка, основанного на формулах Дормана и Принса с автоматическим управлением длиной шага и контролируемой точностью, задаваемой пользователем. Текст программы на C++ основан

на фортранной версии данной программы – программы Dorgi5 [12].

5. Выходными данным  $u(x_i, t_j)$  и программы являются массивы узловых значений функции  $u(x_i, t_j)$  и временной производной  $u_t(x_i, t_j)$ .

6. Приводятся интегральные характеристики решения задачи с целью проверка точности аппроксимации решения. Проинтегрируем соотношение (1) по переменным  $x \in [a, b]$ ,  $t \in [t_0, t_1]$ , Определим функции параметра  $t$

$$u^{ab}(t) = \int_{t_0}^t d\tau \int_a^b dx K(x, \tau) \frac{\partial u}{\partial t}(x, \tau),$$

$$u^{bs}(t) = \int_{t_0}^t d\tau A(a, \tau) \frac{\partial u}{\partial x}(a, \tau), \quad (42)$$

$$u^{tr}(t) = - \int_{t_0}^t d\tau A(b, \tau) \frac{\partial u}{\partial x}(b, \tau),$$

$$u^s(t) = \int_{t_0}^t d\tau \int_a^b dx F(x, \tau), \quad (43)$$

$$u^{ad}(t) = \int_{t_0}^t d\tau \int_a^b dx \left[ B(x, \tau) \frac{\partial u}{\partial t}(x, \tau) - G(x, \tau) u(x, \tau) \right]. \quad (44)$$

В результате исходная задача (1)-(4) эквивалентна тождеству

$$\delta u(t) = u^{ab}(t) + u^{bs}(t) + u^{tr}(t) - u^{ad}(t) - u^s(t) = 0. \quad (45)$$

Величина невязки  $\delta u(t)$  является выходным параметром и может использоваться в качестве индикатора удачного выбора пространственной и временной сетки. Массивы  $u^{ab}(t_j)$ ,  $u^{bs}(t_j)$ ,  $u^{tr}(t_j)$ ,  $u^{ad}(t_j)$ ,  $u^s(t_j)$ ,  $\delta u(t_j)$  также являются выходными параметрами программы.

### Тестирование программы

Сначала рассмотрим задачу с гладкими данными. Для тестирования рассмотрим уравнение (1) с функциональными коэффициентами

$$K(x, t) = t^2 + x^2, \quad A(x, t) = t^2 x^2, \\ B(x, t) = 2xt(t+1), \quad G(x, t) = xt^2 + x^2, \\ F(x, t) = t^5 x^3(x-18) - 3t^4 x^3 + t^3 x(x^4 + x - 4) + t^2 x(3x^4 - 1) + 7tx^3 + x^3.$$

Сформулируем граничную задачу в полосе  $x \in [1, 2]$ ,  $t \geq 1$  с линейными крайевыми условиями третьего рода

$$\left\{ u - \frac{\partial u}{\partial x} \right\} \Big|_{x=1} = -2t^3, \quad \left\{ u + \frac{\partial u}{\partial x} \right\} \Big|_{x=2} = 20t^3 + 3t$$

и начальным условием

$$u(x, t) \Big|_{t=1} = x^3 + x, \quad x \in [1, 2].$$

Точным решением этой задачи является функция  $u(x, t) = x^3 t^3 + xt$ . При решении начальной задачи (37), (38) методом Рунге-Кутты число обращений к функции для вычисления правой части уравнения 37 равно 1817. Поточечные оценки погрешности аппроксимации в узловых точках по пространству дается выражениями

$$\delta_i(x_i, t) = \left| 1 - \frac{\tilde{u}_i}{u_i} \right|, \quad \delta'_i(x_i, t) = \left| 1 - \frac{\partial \tilde{u}_i / \partial t}{\partial u_i / \partial t} \right|,$$

где  $u_i = u(x_i, t)$ ,  $\tilde{u}_i(x_i, t)$  – результаты численной аппроксимации решения исходной задачи в точке  $(x_i, t)$ . Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Поточечные оценки погрешности аппроксимации

$x_i$	1	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2
$t = 1.1 \quad \delta u(t) = -0.09954 \quad  \delta u(t) / u^s(t)  = 2.3\%$											
$u_i$	2.431	2.982	3.62	4.354	5.192	6.142	7.212	8.409	9.742	11.22	12.85
$\tilde{u}_i$	2.43	2.979	3.617	4.351	5.188	6.138	7.207	8.404	9.736	11.21	12.84
$\delta_i$ (%)	0.0435	0.0702	0.0769	0.0764	0.0736	0.0703	0.0671	0.0641	0.0611	0.0581	0.0548
$t = 1.3 \quad \delta u(t) = -0.4061 \quad  \delta u(t) / u^s(t)  = 1.5\%$											
$u_i$	3.497	4.354	5.356	6.517	7.849	9.365	11.08	13	15.15	17.54	20.18
$\tilde{u}_i$	3.488	4.343	5.344	6.503	7.834	9.35	11.06	12.99	15.14	17.52	20.16
$\delta_i$ (%)	0.253	0.251	0.231	0.206	0.182	0.16	0.14	0.123	0.108	0.094	0.082

Продолжение табл. 1

$t = 1.5 \quad \delta u(t) = -0.9008 \quad \left  \frac{\delta u(t)}{u^s(t)} \right  = 1\%$											
$u_i$	4.875	6.142	7.632	9.365	11.36	13.64	16.22	19.13	22.38	26	30
$\tilde{u}_i$	4.857	6.121	7.609	9.341	11.34	13.61	16.2	19.11	22.36	25.97	29.97
$\delta_i$ (%)	0.361	0.338	0.298	0.257	0.22	0.188	0.161	0.137	0.118	0.101	0.087

Рассмотрим теперь задачу с негладкими данными, которая является вычислительно сложной. Распределение плотности энерговыделения электронов  $(F(x,t))$  средних энергий при нормальном падении точечного пучка на многослойную мишень определяется уравнением [15]

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\lambda(x,t)}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{F}{\varepsilon(x,t)} \right) \right] + 2\delta(t)\delta(x-x_d),$$

$$x \in [0, x_{\max}], \quad t \in [0, t_{\max}] \quad (46)$$

с мгновенным точечным источником единичной мощности, начальным условием  $F(x,0) = 0$  и граничными условиями

$$F(0,t) = \frac{2\lambda(t)}{3} \frac{\partial F}{\partial x}(0,t),$$

$$F(x_{\max},t) = -\frac{2\lambda(t)}{3} \frac{\partial F}{\partial x}(x_{\max},t) \quad (47)$$

Параметр  $t$  имеет смысл относительной остаточной энергии электронов.

Определим функцию  $u(x,t) = F(x,t)/\varepsilon(t)$ , для нее получим каноническую задачу типа (1)

$$\varepsilon(x,t) \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\lambda(x,t)}{3} \frac{\partial u}{\partial x} \right] - \left( \frac{\partial \varepsilon(x,t)}{\partial t} \right) + 2\delta(t)\delta(x-x_d) \quad (48)$$

с начальным условием  $u(x,0) = 0$  и граничными условиями

$$\left( u - \frac{2\lambda}{3} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} = 0, \quad \left( u + \frac{2\lambda}{3} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_{\max}} = 0 \quad (49)$$

Здесь

$$\varepsilon(x,t) = \frac{(1-t)^{1-\alpha(x)}}{\alpha(x)},$$

$$\frac{\partial \varepsilon(x,t)}{\partial t} = \frac{(\alpha(x)-1)(1-t)^{-\alpha(x)}}{\alpha(x)},$$

$$\lambda(x,t) = \frac{(1-t)^{\alpha(x)}}{d(x)}. \quad (50)$$

Функции  $\alpha$  и  $d$  являются кусочно-постоянными

$$\alpha(x) = \begin{cases} \alpha_1, & x \in [0, x^{(1)}) \\ \alpha_2, & x \in [x^{(1)}, x^{(2)}) \\ \alpha_3, & x \in [x^{(2)}, x_{\max}] \end{cases},$$

$$d(x) = \begin{cases} d_1, & x \in [0, x^{(1)}) \\ d_2, & x \in [x^{(1)}, x^{(2)}) \\ d_3, & x \in [x^{(2)}, x_{\max}] \end{cases} \quad (51)$$

Таким образом, имеем задачу в гетерогенной среде, точки  $x^{(1)}$  и  $x^{(2)}$  являются границами слоев и должны быть включены в множество узлов  $\{x_i\}_{i=0}^n$ , так же, как и точка  $x_d$ . Параметры задачи

$$t_{\max} = 0.99, \quad x_{\max} = 0.3, \quad x_d = 0.1,$$

$$x^{(1)} = 0.15, \quad x^{(2)} = 0.2, \quad (52)$$

$$\alpha_1 = 1.68533, \quad \alpha_2 = 0.8, \quad \alpha_3 = 3,$$

$$d_1 = 15.5343, \quad d_2 = 20, \quad d_3 = 10. \quad (53)$$

При численном решении используем аппроксимацию  $\delta$ -функции гауссианом

$$\delta(t) = \frac{1}{\sigma_t \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{t^2}{2\sigma_t^2}\right), \quad \sigma_t = 0.01 \quad (54)$$

и разностную аппроксимацию  $\delta$ -функции [13]

$$\delta(x-x_i) \approx \phi_i(x) = \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \cdot \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}, & x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0, & x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}] \end{cases} \quad x_i = x_d. \quad (55)$$

В табл. 2 представлены результаты проверки условия баланса (45), которое в данном случае имеет вид

$$u^{ab}(t) + u^{bs}(t) + u^{tr}(t) - u^{ad}(t) = u^s(t) = 1. \quad (56)$$

Таблица 2. Проверка условия баланса

$t$	0.0009	0.0031	0.0065	0.0101	0.0163	0.023	0.03	0.0379	0.0469	0.057	0.07
$u^s$	0.072	0.245	0.484	0.724	0.896	0.976	1	1	1	1	1
$ \delta u $	0.0004	0.0007	0.0024	0.003	0.0005	0.008	0.013	0.0142	0.0143	0.014	0.014

На рис. 1 представлены линии уровня функции  $u(x,t)$ , которые демонстрируют распространение начального возмущения в плоскости  $(x,t)$ .

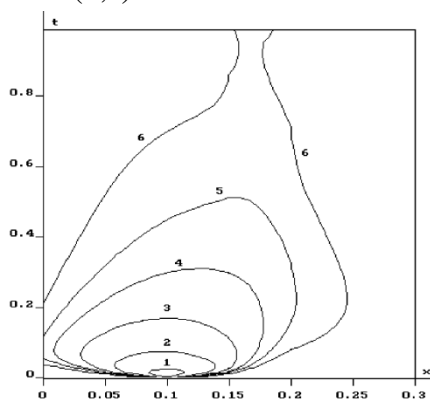


Рисунок 1 – Линии уровня 1)  $u = 19.45$ ;  
2)  $u = 9.3$ ; 3)  $u = 5.7$ ; 4)  $u = 3.85$ ;  
5)  $u = 2.77$ ; 6)  $u = 1.67$

На рис. 2 представлены профили функции  $F(x,t) = \varepsilon(x,t)u(x,t)$  при различных значениях параметров, которые демонстрируют скачки плотности энерговыделения на границах слоев. Как видим, предложенный алгоритм позволяет получить качественную аппроксимацию решения даже при наличии сингулярных данных.

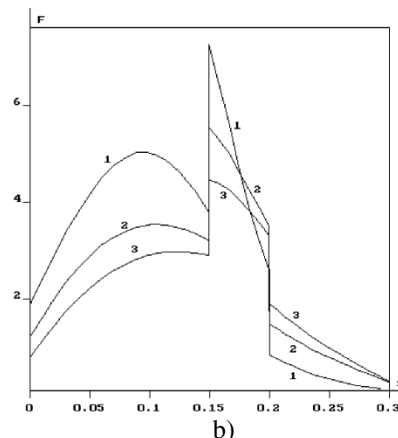
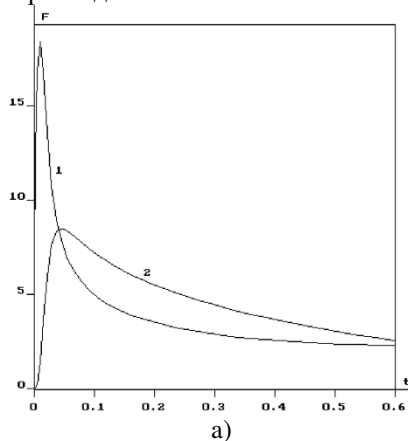


Рисунок 2 – а) Профили функции  $F(x,t)$  в зависимости от переменной  $t$ . Кривые соответствуют значениям: 1)  $x=0.1$ ; 2)  $x=0.15$ ;  
б) Профили функции  $F(x,t)$  в зависимости от переменной  $x$ . Кривые соответствуют значениям: 1)  $t=0.1$ ; 2)  $t=0.2$ ; 3)  $t=0.3$ .

### Выводы

Описанная в работе схема является численно устойчивой и не требует согласования шагов по пространственной и временной переменным. Предложенный подход, очевидно, может быть достаточно легко реализован для аппроксимации обобщенных уравнений эллиптического или гиперболического типа [3, 4].

### Литература

1. Крылов, В. И. Вычислительные методы. Том II. / В. И. Крылов, В. В. Бобков, П. И. Монастырский. // М., Наука, 1977-400 с.: ил.
2. Самарский, А. Вычислительные методы. Том II. А. Теория разностных схем. / Самарский А. // М., Наука, 1983-616 с.: ил.
3. Флетчер, К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Том I / К. Флетчер // М., Мир, 1991-504 с.: ил.
4. Андерсон, Д. Вычислительная гидромеханика и гидрообмен. Том I / Д. Андерсон, Дж. Таннехилл, Р. Плетчер // М., Мир, 1990-322с.: ил.
5. Марчук, Г.И. Методы вычислительной математики / Марчук Г.И. // М.: Наука, 1977, 456 с.
6. Black F., Scholes M. The Pricing of Options and Corporate Liabilities. - Journal of Political Economics 72, 1973, pp. 637-654.
7. Merton R.C. Theory of rational option pricing, J. Bell Econom. and Management Sci., 4, 1973, pp. 141-183.
8. Ван Кампен, Н. Г. Стохастические процессы в физике и химии / Н. Г. Ван Кампен - М.: Высшая школа, 1990.

9. Хорстхемке, В. Индуцированные шумом переходы / Хорстхемке В., Лефевр Р. // М.: Мир, 1987.

10. I Maglevanny and V Smolar. The constructive procedure for solving the problems of electron transport in the multi-layer specimens for the normally incident electron beam. 1. Solutions of the model transport equations for a point beam: energy and charge deposition. Vacuum, 46, No. 11, 1261-1269, 1995.

11. Самарский, А. А. Разностные схемы для дифференциальных уравнений с обобщенными решениями. / Самарский А.А., Лазаров Р.Д., Макаров В.Л. // М.: Высш. шк., 1987, 296с.

12. Хайрер, Э., Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие

задачи Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. // М.: Vbh. -1990.- 512 с., ил.

13. Корн, Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн // М.: Наука, 1984.

14. Абрамовиц, М. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган – // М.: Наука, 1979.

15. Маглеванный И. И., Смоляр В. А. Распределение плотности энерговыделения электронов средних энергий при нормальном падении пучка на многослойную мишень. Радиотехника и электроника. Электродинамика и распространение радиоволн, вып. 10, 1579-1589, 1995.

*Маглеванный И.И., Карякина Т.И. Продольная схема метода прямых для численной аппроксимации краевых задач с негладкими данными для дифференциального уравнения второго порядка параболического типа. Изучение краевых задач для параболических уравнений является одной из классических проблем теории дифференциальных уравнений с частными производными и вызывает постоянный интерес математиков. Причиной этому является исключительная практическая важность параболических уравнений, находящихся приложение в различных прикладных областях естествознания. Краевые задачи с негладкими данными для дифференциального уравнения второго порядка параболического типа являются трудным объектом исследования как с теоретической точки зрения, так и с точки зрения разработки численных методов аппроксимации решения таких задач. Настоящая работа посвящена построению и программной реализации численного метода прямых с использованием обобщенной постановки задачи и применением усредняющих операторов Стеклова.*

**Ключевые слова:** уравнение в частных производных параболического типа, смешанная начальнo-краевая задача, метод прямых, метод Рунге-Кутты, усредняющие операторы Стеклова.

*Malevanny I.I., Karjakin T.I. The longitudinal scheme of the method of lines for the numerical approximation of boundary value problems with nonsmooth data for a differential equation of second order of parabolic type. The study of boundary value problems for parabolic equations is one of the classic problems of the theory of differential equations with partial derivatives and causes continuing interest of mathematicians. The reason for this is the exceptional practical importance of parabolic equations, which finds application in various applied areas of science. Boundary value problems with nonsmooth data for a differential equation of second order of parabolic type are a difficult object of study both from the theoretical point of view, and from the point of view of developing numerical methods for approximating the solution of such problems. The present work describes the construction and software implementation of the numerical method of lines using the generalized formulation and application of Steklov averaging operators.*

**Keywords:** partial differential equation of parabolic type, mixed initial-boundary value problem, direct method, Runge-Kutta method, averaging Steklov operators.

Статья поступила в редакцию 22.02.2018  
Рекомендована к публикации д-ром физ.-мат. наук А.С. Миненко