

УДК 531.19

Г. С. Бокун, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);
Д. В. Гапанюк, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)

АЛГОРИТМ ПРОГОНКИ ДЛЯ РАСЧЕТА ИМПЕДАНСА ТВЕРДОГО ЭЛЕКТРОЛИТА

Предложен новый метод прогонки, пригодный, в отличие от известного, для решения систем линейных алгебраических уравнений с матрицами, имеющими ненулевые элементы на $2n + 1$ диагоналях. Суть метода состоит в том, что выбираются пробные значения n неизвестных и по невязкам последних n уравнений системы находится ее точное решение. Показано, что новый алгоритм решения систем уравнений содержит ряд преимуществ, реализованных на примере построения программы расчета электрического импеданса токопроводящей керамики.

A new method suitable, in contrast to the known, to solve systems of linear algebraic equations with matrices consisting of $2n + 1$ diagonals is suggested. The method consists in that the selected test values of n unknowns are chosen, and discrepancies of the last n equations of the system are used to find the exact solution of the system. It is shown that a new algorithm for solving systems of equations contains a number of advantages realized by constructing the program for calculating the electrical impedance of the conductive ceramics.

Введение. При решении многих задач приходится иметь дело с системами линейных уравнений, матрицы коэффициентов которых имеют ленточную структуру. Хотя методы численного решения линейных уравнений общего вида хорошо развиты [1–3], в некоторых частных случаях можно существенно сократить количество выполняемых математических операций и, соответственно, затраты машинного времени. Например, если матрица системы уравнений трехдиагональная, используется метод прогонки [2], заключающийся в двукратном пересчете коэффициентов матрицы при переходе от предыдущей ее строки к последующей.

Алгоритм прогонки. Здесь предлагается другой вариант прогонки, пригодный не только для случая трех диагоналей, но и пяти-, семи- и т. д. диагональной матрицы A . Суть подхода рассмотрим для случая трехдиагональной матрицы, когда система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} A_{i,i+1}x_{i+1} + A_{i,i}x_i + A_{i,i-1}x_{i-1} &= B_i; \\ i &= 1, \dots, N; \quad A_{1,0} = 0; \quad A_{N,N+1} = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Последовательно положив $x_1 = 0$ и $x_1 = 1$, из (1) находим

$$x_{i+1} = \frac{B_i - A_{i,i}x_i - A_{i,i-1}x_{i-1}}{A_{i,i+1}}, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (2)$$

и величину невязки последнего уравнения системы

$$\Delta(x_1) = B_N - A_{N,N}x_N - A_{N,N-1}x_{N-1}. \quad (3)$$

Полученные по соотношению (3) величины невязок $\Delta(0)$ и $\Delta(1)$ используем для определения значения x_1 , удовлетворяющего исходной системе уравнений. Действительно, из линейности системы уравнений (1) следует, что невязка является линейной функцией x_1 .

$$\Delta(x_1) = ax_1 + b. \quad (4)$$

В уравнении (4) a и b – инварианты, зависящие только от коэффициентов расширенной матрицы системы уравнений. Согласно (4),

$$b = \Delta(0); \quad a = \Delta(1) - \Delta(0). \quad (5)$$

Формулы (5) определяют значение

$$x_1 = \frac{\Delta(0)}{\Delta(0) - \Delta(1)}, \quad (6)$$

обращающее условие (4) в ноль и являющееся соответственно корнем исходной системы уравнений. Найденное значение x_1 используем в итерационном уравнении (2) для расчета остальных корней исходной системы.

Из сказанного следует, что предложенный подход по количеству операций эквивалентен стандартному, но реализуется с помощью очень простого алгоритма, выражаемого формулой (2). Кроме того, очевидно, как предложенный алгоритм переносится на решение задач с большей размерностью матрицы A . Например, в случае матрицы A с пятью диагоналями для реализации метода прогонки необходимо задаваться двумя пробными значениями для x_1 и x_2 . Соответственно два последних уравнения системы при x_1 и x_2 , не являющихся ее корнями, будут приводить к невязкам

$$\begin{aligned} \Delta_1(x_1, x_2) &= a_1x_1 + b_1x_2 + c_1; \\ \Delta_2(x_1, x_2) &= a_2x_1 + b_2x_2 + c_2. \end{aligned} \quad (7)$$

Для определения коэффициентов в системе (7) удобно выполнить три прогонки соответственно, положив $(x_1 = 0, x_2 = 0)$, $(x_1 = 1, x_2 = 0)$, $(x_1 = 0, x_2 = 1)$. В результате находим

$$c_1 = \Delta_1(0, 0); \quad c_2 = \Delta_2(0, 0);$$

$$a_1 = \Delta_1(1, 0) - \Delta_1(0, 0); \quad b_1 = \Delta_1(0, 1) - \Delta_1(0, 0); \quad (8)$$

$$a_2 = \Delta_2(1, 0) - \Delta_2(0, 0); \quad b_2 = \Delta_2(0, 1) - \Delta_2(0, 0).$$

Привлекая (8), из (7) при $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$ находим величины x_1 и x_2 , являющиеся корнями исходной системы с ленточной пятидиагональной матрицей.

Физический пример. Рассмотрим среду, состоящую из частиц двух сортов, совершающих термоактивированные прыжки по узлам соответствующих подрешеток, приводящую к системе линейных уравнений с пятидиагональной матрицей.

Выражение для химического потенциала в единицах kT частиц сорта α ($\alpha = a, b$) в приближении среднего поля с учетом взаимодействия с ближайшими соседями имеет вид [4, 5]

$$\begin{aligned} \mu_i^\alpha = \varepsilon_i^\alpha + \ln \frac{\rho_{li}^\alpha}{\rho_{0i}^\alpha} + J_\beta \times \\ \times (4\rho_i^\beta + \rho_{i+1}^\beta + \rho_{i-1}^\beta) + \sum_{k=1}^{i-1} \Delta\theta_k^\alpha; \end{aligned} \quad (9)$$

$$\Delta\theta_i^\alpha = 2\varphi_q \sum_{k=1}^i (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta).$$

Здесь ε_i^α – глубина одночастичной потенциальной ямы на i -м узле α -подрешетки; $\rho_{li}^\alpha, \rho_{0i}^\alpha$ – средняя концентрация частиц и вакансий на i -м узле; φ_q – коэффициент, переводящий в потенциальную энергию электровзаимодействие заряда частицы со средой,

$$\varphi_q = \frac{q^2}{kT\varepsilon\varepsilon_0 h}, \quad (10)$$

где q – величина эффективного заряда частицы; $\varepsilon, \varepsilon_0$ – величины относительной и абсолютной электрических постоянных; h – параметр решетки.

Для определения равновесного состояния системы необходимо найти величины ρ_i^α из условия равенства химических потенциалов $\mu_i^\alpha = \mu_{eq}^\alpha$ с учетом сохранения числа частиц каждого сорта.

Для решения этой задачи используем разработанный ранее метод «диффузионного» решения системы уравнений [3]. Для этого вводим потоки числа частиц в соответствии с законом Фика:

$$\Delta^* I_i^\alpha = +K_i^\alpha (\mu_{i+1}^\alpha - 2\mu_i^\alpha + \mu_{i-1}^\alpha). \quad (11)$$

В состоянии равновесия в силу равенства химических потенциалов для различных узлов выражение в скобках (11) равно нулю, так что K_i^α при поиске равновесного распределения

выбирается из дополнительных соображений, ускоряющих сходимость к решению.

Для удобства преобразований обозначим

$$\Delta^2 \mu_i^\alpha = (\mu_{i+1}^\alpha - 2\mu_i^\alpha + \mu_{i-1}^\alpha) K_i^\alpha. \quad (12)$$

Далее, разбив, в свою очередь, $\Delta^2 \mu_i^\alpha$ на три слагаемых и приняв для сокращения записей $K_i^\alpha = 1$, запишем

$$\begin{aligned} \Delta^2 \mu_i^\alpha = \Delta^2 \mu_{\varepsilon_i}^\alpha + \Delta^2 \mu_{\rho_i}^\alpha + \\ + \Delta^2 \mu_{\mu_i}^\alpha + \Delta^2 \mu_{\varphi_i}^\alpha, \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\Delta^2 \mu_{\varepsilon_i}^\alpha = (\varepsilon_{i-1}^\alpha - 2\varepsilon_i^\alpha + \varepsilon_{i+1}^\alpha); \quad (14)$$

$$\Delta^2 \mu_{\rho_i}^\alpha = \ln \frac{\rho_{li+1}^\alpha \rho_{li-1}^\alpha (\rho_{0i}^\alpha)^2}{\rho_{0i+1}^\alpha \rho_{0i-1}^\alpha (\rho_{li}^\alpha)}. \quad (15)$$

Найдем последнее выражение

$$\begin{aligned} \Delta^2 \mu_{\rho_i}^\alpha &= \left(\sum_{k=1}^i \Delta\theta_k - \sum_{k=1}^{i-1} \Delta\theta_k - \sum_{k=1}^{i-1} \Delta\theta_k - \sum_{k=1}^{i-2} \Delta\theta_k \right) = \\ &= (\Delta\theta_i - \Delta\theta_{i-1}) = \\ &= 2\varphi_q \left(\sum_{k=1}^i (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta) - \sum_{k=1}^{i-1} (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta) \right) = \\ &= 2\varphi_q (\rho_i^\alpha - \rho_i^\beta). \end{aligned} \quad (16)$$

Для вычисления $\Delta^2 \mu_{\mu_i}^\alpha$ составим диаграмму взаимодействий, в соответствии с которой находим

$$\Delta^2 \mu_{\mu_i}^\alpha = J_\beta (\rho_{i-2}^\beta + 2\rho_{i-1}^\beta - 6\rho_i^\beta + 2\rho_{i+1}^\beta + \rho_{i+2}^\beta). \quad (17)$$

С учетом (11)–(16) запишем уравнения для вычисления изменения плотности $\Delta\rho_{li}^\alpha$ в узле i ($i = 4, \dots, N-3$);

$$\Delta\rho_i^\alpha = +\Delta I_i^\alpha \Delta\tau, \quad (18)$$

где $\Delta\tau$ – шаг по времени.

Для замыкания системы уравнений (18) используем распределение токов, соответствующее случаю блокирующих электродов:

$$\Delta\rho_3^\alpha = -I_3^\alpha; \quad \Delta\rho_{N-3}^\alpha = -I_{N-3}^\alpha. \quad (19)$$

Теперь запишем выражение для величины токов на произвольном узле:

$$\begin{aligned} I_i^\alpha = \mu_i^\alpha - \mu_{i+1}^\alpha = \varepsilon_i^\alpha - \varepsilon_{i+1}^\alpha + \\ + J_\beta (4\rho_i^\beta + \rho_{i+1}^\beta + \rho_{i-1}^\beta - 4\rho_{i+1}^\beta - \rho_{i+2}^\beta - \rho_i^\beta) + \\ + \ln \frac{\rho_{li}^\alpha \rho_{0i+1}^\alpha}{\rho_{0i}^\alpha \rho_{li+1}^\alpha} + \sum_{k=1}^{i-1} \Delta\theta_k - \sum_{k=1}^i \Delta\theta_k, \end{aligned} \quad (20)$$

Таким образом,

$$I_i^\alpha = \varepsilon_i^\alpha - \varepsilon_{i+1}^\alpha + J_\beta^\alpha \left(3\rho_i^\beta - 3\rho_{i+1}^\beta + \rho_{i-1}^\beta - \rho_{i+2}^\beta \right) + \ln \frac{\rho_{1i}^\alpha \rho_{0i+1}^\alpha}{\rho_{0i}^\alpha \rho_{1i+1}^\alpha} - \Delta\theta_i^\alpha - \Delta U_i^\alpha. \quad (21)$$

Входящее в (21) $\Delta\theta_i$ определено в (9) и может быть упрощено путем учета условия электронеutrальности.

Соответственно,

$$\Delta\theta_{N-3}^\alpha = 2\varphi_q \left(\sum_{k=1}^{N-3} (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta) \right). \quad (22)$$

Однако

$$\sum_{k=1}^{N-3} (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta) + (\rho_{N-2}^\alpha - \rho_{N-2}^\beta) = 0. \quad (23)$$

Поэтому

$$\Delta\theta_{N-3}^\alpha = 2\varphi_q (\rho_{N-2}^\beta - \rho_{N-2}^\alpha); \quad (24)$$

$$\Delta\theta_3^\alpha = 2\varphi_q (\rho_3^\alpha - \rho_3^\beta). \quad (25)$$

Для построения модели электрохимического импеданса вычислим вариации выражений, полученных выше.

Варьирование (21) дает

$$\delta I_i^\alpha = J_\beta^\alpha \left(3\delta\rho_i^\beta - 3\delta\rho_{i+1}^\beta + \delta\rho_{i-1}^\beta - \delta\rho_{i+2}^\beta \right) + \frac{\delta\rho_i^\alpha}{\rho_i^\alpha (1 - \rho_i^\alpha)} - \frac{\delta\rho_{i+1}^\alpha}{\rho_{i+1}^\alpha (1 - \rho_{i+1}^\alpha)} - \delta\Delta\theta_i^\alpha - \delta\Delta U_i^\alpha. \quad (26)$$

Из (9), в свою очередь, следует

$$\delta\Delta\theta_i^\alpha = 2\varphi_q \sum_{k=1}^i (\delta\rho_k^\alpha - \delta\rho_k^\beta). \quad (27)$$

Уравнения (26) и (27) используем для построения выражений для граничных токов δI_3^α и δI_{N-3}^α , учитывая, что $\delta\rho_1^\alpha = \delta\rho_2^\alpha = 0$. Из условия сохранений зарядов находим, что

$$\delta\Delta\theta_3^\alpha = 2\varphi_q (\rho_3^\alpha - \rho_3^\beta); \quad (28)$$

$$\delta\Delta\theta_3^\alpha = 2\varphi_q (\delta\rho_3^\alpha - \delta\rho_3^\beta);$$

$$\Delta\theta_{N-3}^\alpha = 2\varphi_q (\delta\rho_{N-2}^\beta - \delta\rho_{N-2}^\alpha). \quad (29)$$

В результате получим

$$\bar{j} \omega \delta\rho_3^\alpha = -\delta I_3^\alpha; \quad (30)$$

$$\bar{j} \omega \delta\rho_{N-2}^\alpha = \delta I_{N-3}^\alpha. \quad (31)$$

Соответственно, для $i = 4, \dots, N-3$ уравнения для $\delta\rho_i^\alpha$ записываются в общем виде на основании (18) и (26):

$$\bar{j} \omega \delta\rho_i^\alpha = -\delta\Delta I_i^\alpha \Delta\tau; \quad (32)$$

$$\delta\Delta I_i^\alpha = -K_i^\alpha \left(\frac{\delta\rho_{i+1}^\alpha}{\rho_{i+1}^\alpha (1 - \rho_{i+1}^\alpha)} + \frac{\delta\rho_{i-1}^\alpha}{\rho_{i-1}^\alpha (1 - \rho_{i-1}^\alpha)} - 2 \frac{\delta\rho_i^\alpha}{\rho_i^\alpha (1 - \rho_i^\alpha)} + 2\varphi_q (\delta\rho_i^\alpha - \delta\rho_i^\beta) + J_\beta (\delta\rho_{i-2}^\beta + 2\delta\rho_{i-1}^\beta - 6\delta\rho_i^\beta + 2\delta\rho_{i+1}^\beta + \delta\rho_{i+2}^\beta) \right). \quad (33)$$

Соотношения (28)–(33) образуют замкнутую систему линейных уравнений относительно неизвестных величин $\delta\rho_i^\alpha$. В свою очередь, из (33) следует, что матрица A – пятидиагональная.

Заключение. Таким образом, как видно из уравнений (30)–(33), для определения вариаций $\delta\rho_i^\alpha$ необходимо решать систему линейных уравнений, в которой матрица коэффициентов при неизвестных содержит пять диагоналей. Коэффициенты матрицы определяются по равновесному профилю распределения концентраций по объему среды. Для решения указанной задачи удобно использовать предложенный в данной работе алгоритм.

Литература

1. Форсфайт Дж., Молер К. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений. М.: Мир, 1969. 168 с.
2. Крылов В. И., Бобков В. В., Моностырный П. И. Вычислительные методы: в 2 т. М.: Наука, 1977. Т. 2. 399 с.
3. Годунов С. К. Решение систем линейных уравнений. М.: Наука, 1980. 177 с.
4. Ласовский Р. Н., Бокун Г. С., Вихренко В. С. Концентрационная кинетика интеркаляционных систем // Электрохимия. 2010. Т. 46, № 4. С. 411–422.
5. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds // Solid State Ionics. 2011. Vol. 188. P. 15–20.

Поступила 01.04.2014