Численные методы в физике

Губкин А.С.

Тюменский филиал Института теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН, г. Тюмень

6 марта 2020 г.

Введение

Математическое описанее многих физических процессов приводит к дифференциальным, интегральным или к интегро - дифференциальным уравнениям, аналитическое решение которых, в большинстве случаев, получить невозможно.
В этом случае на помощь исследователю приходят различные **численные методы**, которые позволяют получить **приближенное решение** рассматриваемой задачи.

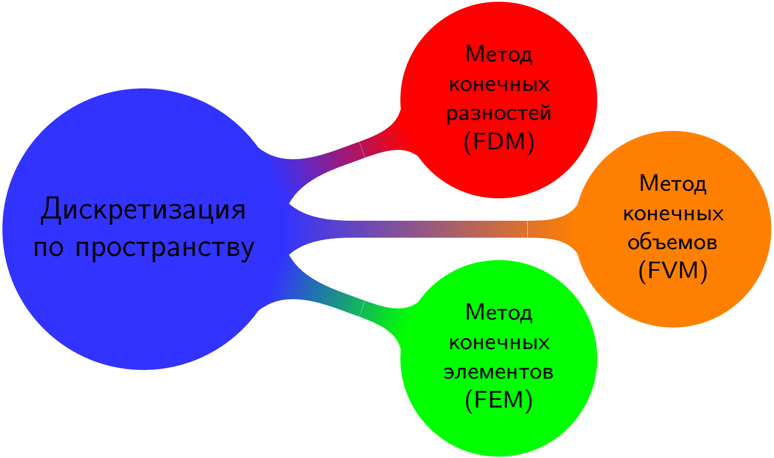
Вычислительная математика

Вычислительная математика – раздел математики, включающий круг вопросов, связанных с производством разнообразных вычислений. В более узком понимании вычислительная математика – **теория численных методов** решения типовых математических задач. Современная вычислительная математика включает в круг своих проблем изучение особенностей вычисления с применением компьютеров.

Немного истории

1917 г. Первая попытка Л.Ф. Ричардсона предсказать погоду путем численного решения (вручную!) уравнения в частных производных.
«Пока что я платил за расчет одного координатного узла лапласиана по расценке $n/18$ пенсов, где n – число цифр, с которыми производятся вычисления. Основная ошибка вычислителей состояла в том, что они путали знаки «плюс» и «минус». Что касается скорости расчетов, то один из самых быстрых работников рассчитывал за неделю в среднем 2000 узлов лапласиана с трехзначными числами; ошибочные расчеты не оплачивались.»

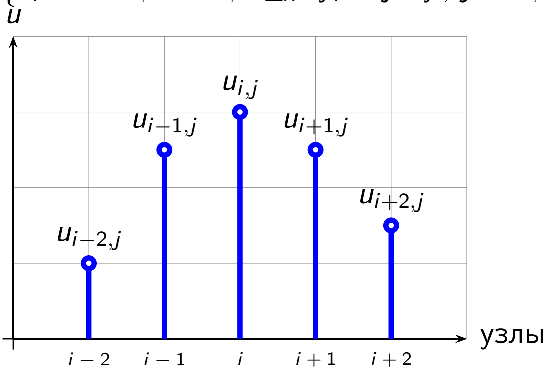
Основные способы пространственной дискретизации



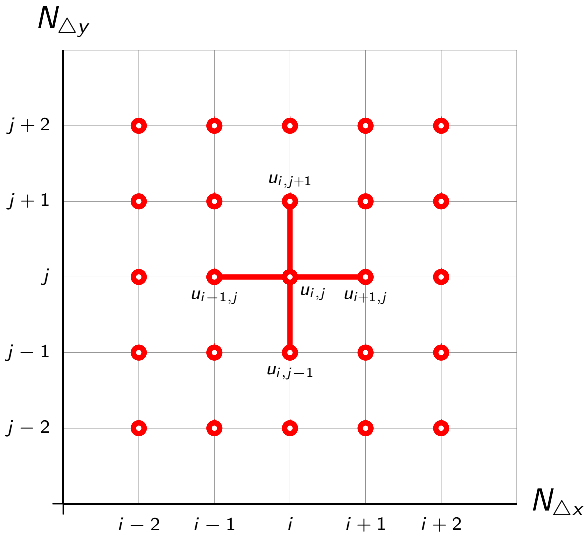
Метод конечных разностей (Finite Difference Method)

Искомые величины – значения переменных в узлах конечноразностной сетки:

$$\omega_{\triangle x,\,\triangle y} = \left\{x_i = i\triangle x,\ i = \overline{0, N_{\triangle x}};\ y_i = j\triangle y,\ j = \overline{0, N_{\triangle y}}\right\}$$



Конечно-разностная сетка



Теорема Лагранжа о среднем значении

Теорема о конечном приращении утверждает, что если функция f непрерывна на отрезке $[a; b]$ и дифференцируема в интервале $(a; b)$, то найдётся такая точка $c \in (a; b)$, что

$$\frac{f(b) - f(a)}{b - a} = f'(c).$$

Аппроксимация производной

Производной функции $u(x, y)$ по x в точке x_0, y_0 называется предел

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_0, y_0} = \lim_{\triangle x \to 0} \frac{u\left(x_0 + \triangle x, y_0\right) - u\left(x_0, y_0\right)}{\triangle x}.$$

Если $\triangle x$ будет мало, но конечно, то

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_0, y_0} \approx \frac{u\left(x_0 + \triangle x, y_0\right) - u\left(x_0, y_0\right)}{\triangle x}.$$

Это следует из теоремы о конечном приращении.

Точность разностной аппроксимации

Проверить точность разностной аппроксимации производной можно, разложив функцию и в ряд Тейлора или по формуле Тейлора с остаточным членом. Выразим $u\left(x_0+\triangle x, y_0\right)$ через значения функции и ее производных в точке $\left(x_0, y_0\right)$:

$$u\left(x_0+\triangle x, y_0\right)=u\left(x_0, y_0\right)+\boxed{\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_0 \triangle x}+\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_0 \frac{(\triangle x)^2}{2!}+\ldots+$$

$$+\left.\frac{\partial^{n-1} u}{\partial x^{n-1}}\right|_0 \frac{(\triangle x)^{n-1}}{(n-1)!}+\left.\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right|_{\xi} \frac{(\triangle x)^n}{(n)!}, \quad x_0 \leq \xi \leq x_0+\triangle x.$$

Точность разностной аппроксимации

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_0 = \frac{u\left(x_0 + \triangle x, y_0\right) - u\left(x_0, y_0\right)}{\triangle x} - \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_0 \frac{\triangle x}{2!} - \ldots.$$

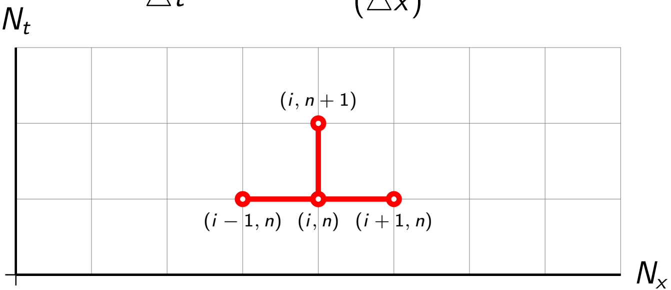
$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\triangle x} + O\left(\triangle x\right).$$

Погрешностью аппроксимации называется разность значений частной производной и ее конечно-разностного аналога.

Пример дискретизации

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} \approx \dfrac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t}; \\ \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \dfrac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\triangle x)^2}; \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\triangle x)^2}.$$



Шаблон разностной схемы

Определение

Шаблон – это мнемоническая диаграмма, которая указывает способ образования разностной схемы, показывая точки разностной сетки, участвующие в аппроксимации.

Сокращенная запись производных

Для сокращения записи производных довольно часто используют следующие обозначения:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u_t\,, \ \frac{\partial u}{\partial x} = u_x\,, \ \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = u_{tt}\,, \ \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x} = u_{tx}\,, \ \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} = u_{xt}\,, \ \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial x} = u_{xx}\,.$$

Погрешность дискретизации

Пусть u_e – точное решение исходного уравнения. Подставим в него следующие разложения:

$$\frac{\partial u_e}{\partial t} = \frac{(u_e)_i^{n+1} - (u_e)_i^n}{\triangle\ t} - \left.\frac{\partial^2 u_e}{\partial t^2}\right|_{n,i} \frac{\triangle t}{2} + \ldots,$$

$$\frac{\partial^2 u_e}{\partial x^2} = \frac{(u_e)_{i+1}^n - 2\,(u_e)_i^n + (u_e)_{i-1}^n}{(\triangle x)^2} + \left.\frac{\partial^4 u_e}{\partial x^4}\right|_{n,i} \frac{(\triangle x)^2}{12} + \ldots,$$

тогда

$$\frac{\partial u_e}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_e}{\partial x^2} = \frac{(u_e)_i^{n+1} - (u_e)_i^n}{\triangle t} - \frac{(u_e)_{i+1}^n - 2\,(u_e)_i^n + (u_e)_{i-1}^n}{(\triangle x)^2}$$

$$- \left.\frac{\partial^2 u_e}{\partial t^2}\right|_{n,i} \frac{\triangle t}{2} + \left.\frac{\partial^4 u_e}{\partial x^4}\right|_{n,i} \frac{(\triangle x)^2}{12} + \ldots.$$

Ошибки

$$\left| \begin{array}{c|c|c} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\triangle x)^2} & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\triangle x)^2} + \text{ЭВМ} \\ \Downarrow & \Downarrow & \Downarrow \\ u = u_e(x, t) & u_i^n = (u_e)_i^n + O(\triangle x) & u_i^n = (u_e)_i^n + O(\triangle x) + \varepsilon \end{array} \right|$$

Согласованность

После дискретизации получаем систему алгебраических уравнений (как правило линейных - СЛАУ), которая затем решается на ЭВМ. Говорят, что такая система алгебраических уравнений **согласуется** с исходным дифференциальным уравнением в частных производных, если в пределе, при стремлении размеров ячеек сетки к нулю, система алгебраических уравнний эквивалентна дифференциальному уравнению в каждом узле разностной сетки.

Согласованность

Пусть дана система уравнений:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \hat{\mathbf{L}}\mathbf{u},$$

где в общем случае $\hat{\mathbf{L}}$ – нелинейный оператор.
После дискретизации имеем:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \hat{\mathbf{T}}(\triangle t, \triangle x)\mathbf{u}^{n},$$

где $\hat{\mathbf{T}}$ – дискретный оператор (перехода/эволюционный).

Согласованность

Пусть $\mathbf{u}_e$ – точное решение исходной системы.

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} \approx \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\triangle t} \equiv \frac{\hat{\mathbf{T}}(\triangle t, \triangle x)\mathbf{u}_e - \mathbf{u}_e}{\triangle t}$$

Говорят, что численная схема **аппроксимирует уравнение** (или согласована с уравнением), если:

$$\lim_{\triangle t \to 0} \lim_{\triangle x \to 0} \left(\frac{\hat{\mathbf{T}}(\triangle t, \triangle x) - \mathbf{I}}{\triangle t} \right) \mathbf{u}_e = \hat{\mathbf{L}}\mathbf{u}_e, \quad \left(\frac{\triangle t}{\triangle x} \right) \to \beta.$$

Пример

Условие безусловно выполняется, если погрешность аппроксимации убывает при измельчении сетки, т. е. если погрешность аппроксимации имеет порядок $O\left(\triangle x, \triangle t\right)$ и т.д. Однако если порядок погрешности аппроксимации равен, например, $O\left(\frac{\triangle t}{\triangle x}\right)$, то схема будет согласованной лишь в том случае, когда измельчение сетки проводится в соответствии с условием $O\left(\frac{\triangle t}{\triangle x}\right) \to 0$.

Пример

В качестве примера рассмотрим схему Дюфорта – Франкела [DuFort, Frankel, 1953] для уравнения теплопроводности:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}}{2\triangle t} = \frac{u_{i+1}^n - u_i^{n+1} - u_i^{n-1} + u_{i-1}^n}{(\triangle x)^2}.$$

Главный член погрешности аппроксимации этой схемы, вычисленный с использованием ряда Тейлора, равен

$$\left.\frac{\partial^4 u_e}{\partial x^4}\right|_{n,i} \frac{(\triangle x)^2}{12} - \left.\frac{\partial^2 u_e}{\partial t^2}\right|_{n,i} \left(\frac{\triangle t}{\triangle x}\right)^2 - \left.\frac{\partial^3 u_e}{\partial x^3}\right|_{n,i} \frac{(\triangle x)^2}{6}.$$

Пример

При $\left(\frac{\triangle t}{\triangle x}\right) \to \beta$ имеем

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Гиперболическое уравнение!

Пример

Схема с разностями против потока для линейного уравнения переноса:

$$u_t + au_x = 0 \Rightarrow \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} + a\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\triangle x} = 0.$$

Подставим вместо u_i^{n+1} и u_{i-1}^n их выражения в виде ряда Тейлора:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + u_t\triangle t + \frac{u_{tt}}{2}\triangle t^2 + \frac{u_{ttt}}{6}\triangle t^3 + O(\triangle t^4),$$
$$u_{i-1}^n = u_i^n - u_x\triangle x + \frac{u_{xx}}{2}\triangle x^2 - \frac{u_{xxx}}{6}\triangle x^3 + O(\triangle x^4).$$

Главный член погрешности аппроксимации этой схемы $\left(\left(\frac{\triangle t}{\triangle x}\right) \to \beta\right)$:

$$-\frac{u_{tt}}{2}\triangle t + a\frac{u_{xx}}{2}\triangle x \to 0$$

Аппроксимация

Под порядком аппроксимации понимают показатель степени главного члена погрешности аппроксимации.
Локальная ошибка аппроксимации записывается как:

$$u_e^{n+1} - \hat{\mathsf{T}} u_e^n = O\left(\triangle t \sum_{p,q\geq 0, p+q=l} \triangle t^p \triangle x^q\right),$$

где $u_e(x,t)$ – точное решение.
В этом случае порядок локальной ошибки аппроксимации равен $l+1$, а порядок схемы l.

Устойчивость

Обозначим вектор ошибки, появляющейся на n - м шагу, через $\varepsilon^n = \mathbf{u}^n - \mathbf{u}_e^n$.
Матрица перехода G определяется как $\varepsilon^{n+1} = G\varepsilon^n$.
Для линейного уравнения матрица перехода G эквивалентна оператору перехода $\hat{\mathbf{T}}$.
В общем случае:

$$G = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}}\left(\hat{\mathbf{T}}\mathbf{u}\right), \; G_{\mu\nu} = \frac{\partial u_\mu^{n+1}}{\partial u_\nu^n}.$$

Устойчивость

Условие устойчивости

Метод устойчив, если $\| \varepsilon^{n+1} \| = \| u^{n+1} - u_e^{n+1} \|$ может быть ограничена величиной $\| \varepsilon^n \|$, умноженной на константу, независящую как от u^n, так и от u_e^n:

$$\| \varepsilon^{n+1} \| \leq (1 + K \triangle t) \| \varepsilon^n \| .$$

Должно быть K = 0!

Устойчивость

Если уравнение перехода приведено к диагональному виду $\varepsilon_\mu^{n+1} = g_\mu \varepsilon_\mu^n$, тогда для устойчивости надо потребовать, чтобы норма каждого собственного вектора ошибки не возрастала,

$$\| \varepsilon^{n+1} \| \leq \| \varepsilon^n \|,$$

откуда получаем:

$$|g_\mu| = \sqrt{g_\mu g_\mu^*} < 1 \text{для всех } \mu.$$

Анализ устойчивости по фон Нейману

Пусть оператор перехода $\hat{\mathbf{T}}(\triangle t, \triangle x)$ равен постоянной величине. Тогда можно рассмотреть устойчивость фурье-моды зависимой переменной

$$u_j^n = \hat{u}_j^n e^{ikx_j} = \hat{u}_j^n \left(\cos\left(kx_j\right) + \sin\left(kx_j\right)\right)$$

и потребовать ограниченности ее амплитуды.
Для устойчивости множитель перехода g (или для системы уравнений собственные значения матрицы перехода g_μ) должен не превосходит по модулю единицу $|g| \leq 1$, для всех фурье-мод.

Пример №1

Разности против потока:

$$u_t + au_x = 0,\ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} + a\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\triangle x} = 0,$$
$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma\left(u_i^n - u_{i-1}^n\right),\ \sigma = a\triangle t/\triangle x,$$
$$\hat{u}_k^{n+1} = \hat{u}_k^n - \sigma\left(\hat{u}_k^n - e^{-ik\triangle x}\hat{u}_k^n\right) \Rightarrow$$
$$\Rightarrow g = 1 - \sigma + \sigma e^{-ik\triangle x}$$
$$\Rightarrow |g| = \left((1 - \sigma + \sigma\cos k\triangle x)^2 + \sigma^2\sin^2 k\triangle x\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Условие устойчивости: $\sigma = a\frac{\triangle t}{\triangle x} \leq 1$.

Пример №2

Разности по потоку:

$$u_t + au_x = 0, \ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} + a\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\triangle x} = 0,$$

Пример №2

Разности по потоку:

$$u_t + au_x = 0, \; \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} + a\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\triangle x} = 0,$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma\left(u_{i+1}^n - u_i^n\right), \; \sigma = a\triangle t/\triangle x,$$
$$\hat{u}_k^{n+1} = \hat{u}_k^n - \sigma\left(e^{ik\triangle x}\hat{u}_k^n - \hat{u}_k^n\right) \Rightarrow$$
$$\Rightarrow g = 1 + \sigma - \sigma e^{ik\triangle x} \Rightarrow$$
$$\Rightarrow |g| = \left((1 + \sigma - \sigma\cos k\triangle x)^2 + \sigma^2\sin^2 k\triangle x\right)^{\frac{1}{2}} > 1.$$

Схема всегда неустойчива!

Пример №3

Центральные разности:

$$u_t + au_x = 0, \ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} + a\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\triangle x} = 0,$$

Пример №3

Центральные разности:

$$u_t + au_x = 0, \ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} + a\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\triangle x} = 0,$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma/2\left(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n\right), \ \sigma = a\triangle t/\triangle x,$$

$$\hat{u}_k^{n+1} = \hat{u}_k^n - \sigma/2\left(e^{ik\triangle x}\hat{u}_k^n - e^{-ik\triangle x}\hat{u}_k^n\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow g = 1 - i\sigma/2\sin k\triangle x \Rightarrow |g| = \left(1 + \sigma^2/4\sin^2 k\triangle x\right)^{\frac{1}{2}} > 1.$$

Схема всегда неустойчива!

Пример №4

Схема Лакса:

$$
\begin{gathered}
u_t + a u_x = 0, \\
\frac{u_i^{n+1} - (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n)/2}{\triangle t} + a\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\triangle x} = 0 \Rightarrow
\end{gathered}
$$

Пример №4

Схема Лакса:

$$u_t + au_x = 0,$$
$$\frac{u_i^{n+1} - (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n)/2}{\triangle t} + a\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\triangle x} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow g = \cos k\triangle x - i\sigma \sin k\triangle x$$
$$\Rightarrow |g| = \left(\cos^2 k\triangle x + \sigma^2 \sin^2 k\triangle x\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Схема устойчива при: $\sigma = a\frac{\triangle t}{\triangle x} \leq 1$.

Пример №5

Метод с перешагиванием (метод «чехарда»):

$$
\begin{aligned}
&u_t + au_x = 0,\\
&\frac{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}}{2\triangle t} + a\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\triangle x} = 0 \Rightarrow\\
&\Rightarrow g = \pm(1 - \sigma^2 \sin^2 k\triangle x)^{\frac{1}{2}} - i\sigma \sin k\triangle x\\
&\Rightarrow |g| = 1.
\end{aligned}
$$

Схема устойчива при: $\sigma = a\frac{\triangle t}{\triangle x} \leq 1$.

Пример №6

Метод Лакса – Вендроффа:

$$
\begin{aligned}
& u_t + a u_x = 0, \\
& u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{a\triangle t}{2\triangle x}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \\
& + \frac{a^2\triangle t^2}{2\triangle x^2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \Rightarrow \\
& \Rightarrow g = 1 - \sigma^2(1 - \cos k\triangle x) - i\sigma \sin k\triangle x \\
& \Rightarrow |g| = \left(1 - \sigma^2(1 - \cos k\triangle x)\right)^2 + \sigma^2 \sin^2 k\triangle x\Big)^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned}
$$

Схема устойчива при: $\sigma = a\frac{\triangle t}{\triangle x} \leq 1$.

Пример №7

Метод Мак-Кормака (разности против потока):

$$
\begin{aligned}
&u_t + a u_x = 0,\\
&\bar{u}_i^{n+1} = u_i^n - \frac{a\triangle t}{\triangle x}(u_i^n - u_{i-1}^n),\\
&u_i^{n+1} = \left[u_i^n + \bar{u}_i^{n+1} - \frac{a\triangle t}{\triangle x}(\bar{u}_i^{n+1} - \bar{u}_{i-1}^{n+1})\right.\\
&\left.-\frac{a\triangle t}{2\triangle x}(u_i^n - 2u_{i-1}^n + u_{i-2}^n)\right] \Rightarrow
\end{aligned}
$$

Пример №7

$$\Rightarrow g = 1 - 2\sigma\left[\sigma + 2(1-\sigma)\sin^2\frac{k\triangle x}{2}\right]\sin^2\frac{k\triangle x}{2} -$$

$$- i\sigma\sin k\triangle x\left[1 + 2(1-\sigma)\sin^2\frac{k\triangle x}{2}\right].$$

Схема устойчива при: $\sigma = a\frac{\triangle t}{\triangle x} \leq 2$.