Численные методы в физике

Губкин А.С.

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

26 февраля 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.

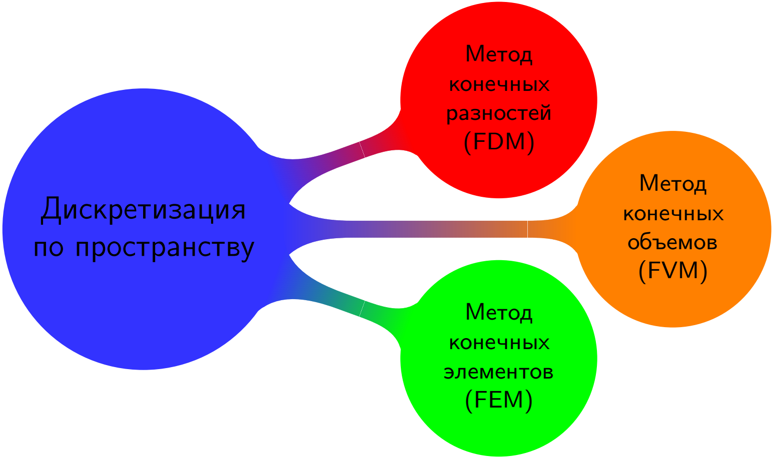
Вычислительная математика

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.»

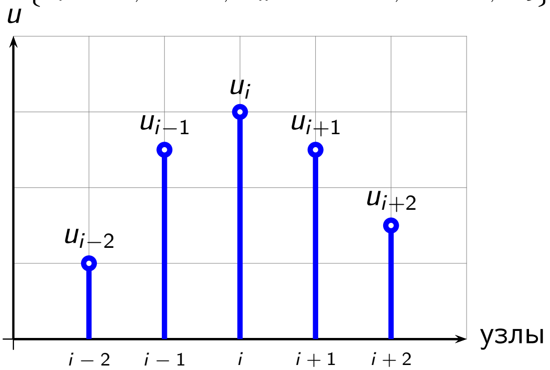
Основные способы пространственной дискретизации



Метод конечных разностей (Finite Difference Method)

Искомые величины – значения переменных в узлах конечноразностной сетки:

$$\omega_{h,\,\tau} = \left\{x_i = ih,\ i = \overline{0,\, N_h};\ t^n = n\tau,\ n = \overline{0,\, N_t}\right\}$$



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 $u(x,t)$ по x в точке x_0, t_0 называется предел

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_0,t_0} = \lim_{\triangle x \to 0} \frac{u\left(x_0 + \triangle x, t_0\right) - u\left(x_0, t_0\right)}{\triangle x}.$$

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

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_0,t_0} \approx \frac{u\left(x_0 + \triangle x, t_0\right) - u\left(x_0, t_0\right)}{\triangle x}.$$

Это следует из теоремы о конечном приращении.

Пример дискретизации

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\triangle t}; \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\triangle x^2}; \end{array} \right. \Rightarrow$$

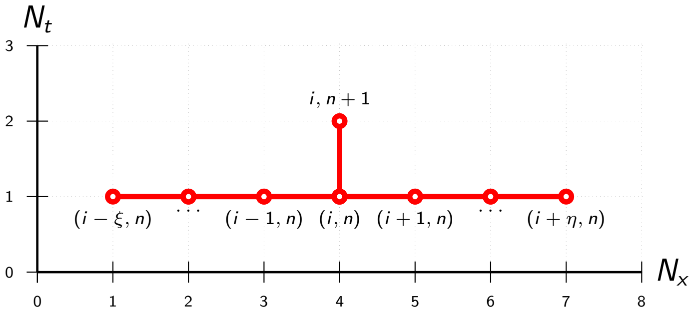
$$\Rightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\triangle\ t} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\triangle\ x^2}.$$

Шаблон разностной схемы

Определение

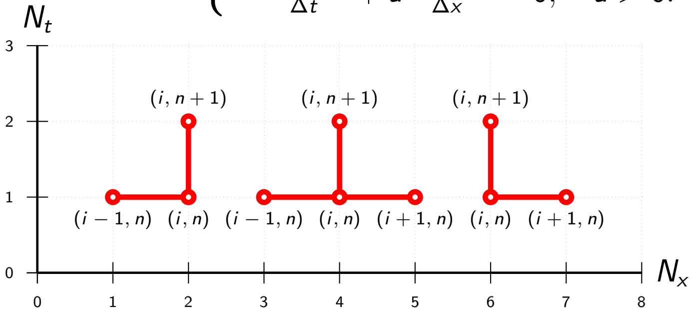
Шаблон – это мнемоническая диаграмма, которая указывает способ образования разностной схемы, показывая точки разностной сетки, участвующие в аппроксимации.

Шаблон в общем одномерном случае



Пример шаблона

$$u_t + au_x = 0 \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a\dfrac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0, \quad a > 0, \\ \dfrac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a\dfrac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0, \quad a > 0, \\ \dfrac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a\dfrac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} = 0, \quad a > 0. \end{cases}$$



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:

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

Пример

Схема с разностями против потока для линейного уравнения переноса:

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

Аппроксимация

Пусть $u_e(x,t)$ – точное решение. Тогда локальная ошибка аппроксимации записывается как:

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

В этом случае порядок локальной ошибки аппроксимации равен $l+1$, а порядок схемы l.

Пример

Схема с разностями против потока для линейного уравнения переноса $u_t + au_x = 0$:

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

$$\left(\hat{\mathbf{T}} u_e^n\right)_j = u_{e,j}^n - \sigma\left(u_{e,j}^n - u_{e,j-1}^n\right), \; \sigma = a\triangle t/\triangle x,$$

$$LTE = u_e^{n+1} - \hat{\mathbf{T}} u_e^n = \left(u_{e,t} + au_{e,x}\right)\triangle t +$$

$$+ O\left(\triangle t \triangle x + \triangle t^2\right) = \triangle t O\left(\triangle x + \triangle t\right).$$

Устойчивость

Обозначим вектор ошибки, появляющейся на n - м шагу, через $\varepsilon^n = u^n - u_e^n$.
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 $\| \varepsilon^n \|$, 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!

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, 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 $u_j^n = \hat{u}_j^n e^{ikx_j}$ 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:

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

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»):

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

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):

$$u_t + au_x = 0,$$

$$\bar{u}_i^{n+1} = u_i^n - \frac{a\triangle t}{\triangle x}(u_i^n - u_{i-1}^n),$$

$$u_i^{n+1} = \Bigg[u_i^n + \bar{u}_i^{n+1} - \frac{a\triangle t}{\triangle x}(\bar{u}_i^{n+1} - \bar{u}_{i-1}^{n+1})$$

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

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