Численные методы в физике

Губкин А.С.

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

16 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.



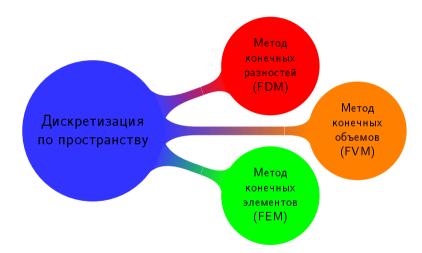
Немного истории

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:

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



Пример дискретизации

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Rightarrow \begin{cases}
\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_j^{n+2} - u_j^n}{\int_{\Delta t}^{\Delta t}}; \\
\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{j+1}^{n-2} - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\int_{\Delta x^2}}; \\
\Rightarrow \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\int_{\Delta t}^{\Delta t}} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\int_{\Delta x^2}^n}.
\end{cases}$$



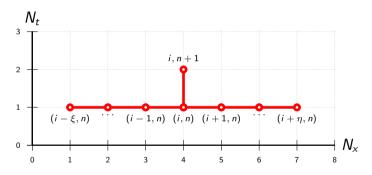
Шаблон разностной схемы

Определение

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

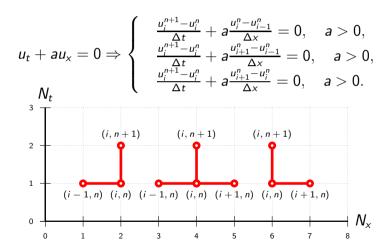


Шаблон в общем одномерном случае





Пример шаблона





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 $\hat{\mathsf{T}}$ – оператор перехода.



Согласованность

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

Разностная схема **аппроксимирует уравнение** (или согласована с уравнением), если:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \lim_{\Delta x \to 0} \left| \left| \left(\frac{\hat{\mathsf{T}}(\Delta t, \Delta x) - \mathsf{I}}{\Delta t} - \hat{\mathsf{L}} \right) \mathsf{u}_{\mathsf{e}} \right| \right| = 0, \ \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right) \to \beta.$$



Аппроксимация

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

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

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



Пример

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

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

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

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

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



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:

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



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 :

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

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:

$$|g_{\mu}|=\sqrt{g_{\mu}g_{\mu}^*}<1$$
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 фурьемод.

Разности против потока:

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

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



Разности по потоку:

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



Разности по потоку:

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

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

Схема всегда неустойчива!



Центральные разности:

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



Центральные разности:

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

$$\begin{split} u_i^{n+1} &= u_i^n - \sigma/2 \left(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n \right), \ \sigma = a \triangle t / \triangle x, \\ \hat{u}_k^{n+1} &= \hat{u}_k^n - \sigma/2 \left(e^{ik \triangle x} \hat{u}_k^n - e^{-ik \triangle x} \hat{u}_k^n \right) \Rightarrow \\ &\Rightarrow g = 1 - i\sigma/2 \sin k \triangle x \Rightarrow |g| = \left(1 + \sigma^2 / 4 \sin^2 k \triangle x \right)^{\frac{1}{2}} > 1. \end{split}$$

Схема всегда неустойчива!



Схема Лакса:

$$u_t + au_x = 0,$$

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

Схема Лакса:

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

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



Метод с перешагиванием (метод «чехарда»):

$$u_t + au_x = 0,$$

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

$$\Rightarrow g = \pm (1 - \sigma^2 \sin^2 k\triangle x)^{\frac{1}{2}} - i\sigma \sin k\triangle x$$

$$\Rightarrow |g| = 1.$$

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



Метод Лакса – Вендроффа:

$$u_{t} + au_{x} = 0,$$

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

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

$$\Rightarrow g = 1 - \sigma^{2}(1 - \cos k\triangle x) - i\sigma \sin k\triangle x$$

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

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



Метод Мак-Кормака (разности против потока):

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



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

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

