Численные методы в физике

Губкин А.С.

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

8 мая 2020 г.

$$u_t + au_x = 0$$

Явный метод Эйлера

Численное решение

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

$$
\left|\begin{array}{c|c|c}
u_t + a u_x = 0 & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} + a \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\triangle x} = 0 & \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\triangle t} + a \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\triangle x} = 0 + \text{ЭВМ} \\
\Downarrow & \Downarrow & \Downarrow \\
u = u_e\left(x, t\right) & u_i^n = \left(u_e\right)_i^n + O\left(\triangle x\right) & u_i^n = \left(u_e\right)_i^n + O\left(\triangle x\right) + \varepsilon
\end{array}\right|
$$

Дифференциальные приближения

Попробуем оценить невязку между волновым уравнением:

$$u_t + au_x = 0,$$

и разностной схемой, аппроксимирующей его:

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

Дифференциальные приближения

Для этого используем разложение функции $u(x,t)$ в ряд Тейлора в точках (x_{i-1}, t_i) и (x_i, t_{i+1}):

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

Теперь подставим эти разложения в исходную схему.

Дифференциальные приближения

$$\frac{1}{\triangle t}\left(\left[u_i^n + u_t \triangle t + \frac{u_{tt}}{2}\triangle t^2 + \frac{u_{ttt}}{6}\triangle t^3 + \ldots\right] - u_i^n\right) +$$
$$+ \frac{a}{\triangle x}\left(u_i^n - \left[u_i^n - u_x \triangle x + \frac{u_{xx}}{2}\triangle x^2 - \frac{u_{xxx}}{6}\triangle x^3 + \ldots\right]\right) = 0.$$

После преобразований это выражение приводится к виду

$$\underbrace{u_t + a u_x}_{\text{исходное уравнение}} = \underbrace{-\frac{\triangle t}{2}u_{tt} + \frac{a\triangle x}{2}u_{xx} - \frac{(\triangle t)^2}{6}u_{ttt} - \frac{a\,(\triangle x)^2}{6}u_{xxx} + \ldots}_{\text{погрешность аппроксимации}}.$$

Дифференциальные приближения

Значение членов, входящих в погрешность аппроксимации, можно лучше понять, если заменить производные по времени производными по пространству. Для этого выразим производную u_{tt} через производную по x.

$$\underbrace{\partial_t\left[u_t + a u_x = -\frac{\triangle t}{2}u_{tt} + \frac{a\triangle x}{2}u_{xx} - \frac{(\triangle t)^2}{6}u_{ttt} - \frac{a\,(\triangle x)^2}{6}u_{xxx} + \ldots\right]}_{+} \Rightarrow$$

$$\overbrace{-a\partial_x\left[u_t + a u_x = -\frac{\triangle t}{2}u_{tt} + \frac{a\triangle x}{2}u_{xx} - \frac{(\triangle t)^2}{6}u_{ttt} - \frac{a\,(\triangle x)^2}{6}u_{xxx} + \ldots\right]}$$

Дифференциальные приближения

$$u_{tt} = a^2 u_{xx} + \triangle t \left(-\frac{1}{2} u_{ttt} + \frac{a}{2} u_{ttx} + O\left(\triangle t\right) \right) + \triangle x \left(\frac{a}{2} u_{xxt} - \frac{a^2}{2} u_{xxx} + O\left(\triangle x\right) \right).$$

Аналогично можно получить следующие выражения для производных u_{ttt}, u_{ttx}, u_{xxt}:

$$u_{ttt} = -c^3 u_{xxx} + O\left(\triangle t, \triangle x\right),$$

$$u_{ttx} = c^2 u_{xxx} + O\left(\triangle t, \triangle x\right),$$

$$u_{xxt} = -c u_{xxx} + O\left(\triangle t, \triangle x\right).$$

Дифференциальные приближения

Заменим старшие производные по времени и преобразуем выражение к следующему виду:

$$u_t + au_x = \frac{a\triangle x}{2}(1-\sigma)\boxed{u_{xx}} - \frac{a\triangle x^2}{6}(2\sigma^2 - 3\sigma + 1)\boxed{u_{xxx}} +$$
$$+ O(\triangle x^3, \triangle x^2 \triangle t, \triangle x \triangle t^2, \triangle t^3).$$

Уравнение, аналогичное этому, называют **дифференциальным приближением** или **модифицированным уравнением** для разностной схемы. При использовании метода конечных разностей решается на самом деле модифицированное уравнение, а не исходное уравнение в частных производных.

Особенности распространения линейных волн

Рассмотрим далее общие свойства линейных волн, распространяющихся в одномерном пространстве. В этом случае независимыми переменными являются t и x. Волновая система может описываться одной или более зависимыми переменными; рассмотрим пока одну переменную и обозначим ее u.
(Иногда употребляют оборот волны с диссипацией и дисперсией – с точки зрения физики это не верно)

Фаза и фазовая скорость

Рассмотрим волновое изменение зависимой переменной $u(x,t)$ в виде:

$$u(x,t) = u_0 \operatorname{Re}\left\{e^{i\theta}\right\} = u_0 \cos(\theta)\,.$$

θ – фаза, линейная по независимым переменным

$$\theta = kx - \omega t + \alpha,$$

k – волновое число, ω – круговая частота.
Фаза будет оставаться постоянной для наблюдателя, который движется со скоростью

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = c.$$

Действительно

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{dx}{dt}\frac{\partial\theta}{\partial x} = -\omega + \frac{\omega}{k}k = 0.$$

Дисперсионное соотношение

В общем случае для распространяющихся волн существует функциональное соотношение $f(\omega, k)$, связывающее частоту и волновое число. Обычно это соотношение имеет вид зависимости частоты от волнового числа k:

$$\omega = W(k).$$

Соотношение такого типа обычно называют дисперсионным соотношением или уравнением.

Тогда **фазовая скорость** также зависит от волнового числа:

$$c = \frac{\omega}{k} = \frac{W(k)}{k}.$$

В случае, когда фазовая скорость не зависит от волнового числа (или от частоты), говорят, что волна распространяется без дисперсии. В таком случае функция W имеет простой вид:

$$W(k) = ck.$$

Интеграл Фурье

Если начальное распределение $u(x,0)$ не гармонично, то его можно представить с помощью интеграла Фурье как суперпозицию синусоидальных функций.

$$u(x,0) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \bar{u}(p,0)\, e^{ipx} dp,$$

$$\bar{u}(p,0) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \bar{u}(x,0)\, e^{-ipx} dx.$$

Дисперсия

Поскольку система предполагается линейной, каждая из гармонических компонент изменяется как $e^{i\theta}$ с частотой $W(k) = ck$. Полное решение в любой последующий момент времени t может быть получено путем обратного преобразования Фурье.
В бездисперсионном случае этот процесс вновь приводит к начальному распределению, смещенному на расстояние ct. То есть, решение можно выразить в виде

$$u(x,t) = u(x-ct,0).$$

Если же волна распространяется с дисперсией, то рассуждения теряют силу. В этом случае каждая компонента Фурье распространяется со своей скоростью.

Групповая скорость

Производная от правой части дисперсионного соотношения имеет размерность скорости

$$C\left(k\right)=\frac{dW}{dk}.$$

Это величина называется **групповой скорость**.

Интерпретация групповой скорости

Выберем некоторое значение k и соответствующее ему значение $\omega = W(k)$ как исходные величины и допустим, что кволновому числу добавляется малое возмущение $\pm\triangle k$. Соответствующее возмущенное значение частоты может быть аппроксимировано первыми двумя членами ряда Тейлора:

$$\omega + \triangle\omega = W(k + \triangle k) \approx \omega + C\triangle k.$$

$$\omega - \triangle\omega = W(k - \triangle k) \approx \omega - C\triangle k.$$

Соответствующие фазы

$$\theta_{+} = (k + \triangle k)\, x - (\omega + \triangle\omega)\, t = \theta + \triangle k\, (x - Ct)\, .$$

$$\theta_{-} = (k - \triangle k)\, x - (\omega - \triangle\omega)\, t = \theta - \triangle k\, (x - Ct)\, .$$

Интерпретация групповой скорости

Решение, соответствующее этим двум фазам

$$
\begin{aligned}
u(x,t) &= u_+(x,t) + u_-(x,t) = u_0\left(\cos(\theta_+) + \cos(\theta_-)\right) = \\
&= u_0\left(\cos(\theta + \triangle k(x - Ct)) + \cos(\theta - \triangle k(x - Ct))\right) = \\
&= 2u_0 \cos(\theta)\cos(\triangle k(x - Ct)).
\end{aligned}
$$

Его можно рассматривать как волну с исходными волновым числом и частотой, модулированную по амплитуде множителем $\cos(\triangle k(x - Ct))$.
Другими словами, происходят биения, соответствующие медленным изменениям амплитуды. Колебания ограничены двумя кривыми

$$2u_0 \cos(\triangle k(x - Ct)),$$

которые являются огибающими решения.

Интерпретация групповой скорости

Огибающая движется в пространстве со скоростью C. Каждый участок огибающей длиной $\pi/\triangle k$ можно интерпретировать как группу (пакет) волн, а скорость C – как скорость этой группы.

Интерпретация групповой скорости

В дисперсионном случае групповая скорость отличается от фазовой и может быть как больше, так и меньше фазовой скорости (и даже иметь обратный знак).

Пример №1

$$\boxed{\begin{aligned} &u(x,t) = u_0 e^{i(\omega t - kx)} \\ &u_t = i\omega u \\ &u_x = -iku \end{aligned}} \Rightarrow \boxed{u_t + a u_x = 0};$$

$$i\omega - aik = 0;$$

$$\omega = W(k) = ak;$$

$$\frac{\omega}{k} = \frac{dW}{dk} = a.$$

Точное решение – волна без дисперсии.

Пример №2

$$\boxed{\begin{aligned} & u(x,t) = u_0 e^{i(\omega t - kx)} \\ & u_t = i\omega u \\ & u_x = -iku \\ & u_{xx} = -k^2 u \end{aligned}} \Rightarrow \boxed{u_t + au_x = \mu u_{xx}};$$

$$i\omega - iak = -\mu k^2 \Rightarrow \omega = W(k) = ak + \boxed{i\mu k^2};$$

$$c = \frac{\omega}{k} = a + \boxed{i\mu k},\ C = \frac{dW}{dk} = a + \boxed{2i\mu k};$$

Пример №2

$$\omega = ak + i\mu k^2 \Rightarrow u(x,t) = u_0 e^{i(\omega t - kx)};$$

$$u(x,t) = u_0 e^{i\left(\left(ak + i\mu k^2\right)t - kx\right)} = e^{-\mu k^2 t} e^{i(akt - kx)} = e^{\mathbb{I}\mathrm{m}\{\omega\}t} e^{i(\mathbb{R}\mathrm{e}\{\omega\}t - kx)}.$$

$\mathbb{I}\mathrm{m}\{\omega\} = \beta$ – коэффициент затухания.

Точное решение – затухающая волна без дисперсии.

Пример №3. Уравнение КдВ

$$\boxed{\begin{aligned} &u(x,t) = u_0 e^{i(\omega t - kx)} \\ &u_t = i\omega u \\ &u_x = -iku \\ &u_{xxx} = ik^2 u \end{aligned}} \Rightarrow \boxed{u_t + au_x + bu_{xxx} = 0};$$

$$i\omega - iak + ibk^3 = 0 \Rightarrow \omega = W(k) = ak - \boxed{bk^3};$$

$$c = \frac{\omega}{k} = a - \boxed{bk^2},\ C = \frac{dW}{dk} = a - \boxed{3bk^2};$$

Точное решение – волна с дисперсией.

$u_t + au_x = 0$	$u_t + au_x = \boxed{\mu u_{xx}}$	$u_t + au_x + \boxed{bu_{xxx}} = 0$
$\Downarrow$	$\Downarrow$	$\Downarrow$
$W(k) = ak$	$W(k) = ak + \boxed{i\mu k^2}$	$W(k) = ak - \boxed{bk^3}$
$c = a$	$c = a + \boxed{i\mu k}$	$c = a - \boxed{bk^2}$
$C = a$	$C = a + \boxed{2i\mu k}$	$C = a - \boxed{3bk^2}$
$\beta = 0$	$\beta = \mu k^2$	$\beta = 0$

НТПМ
ТюмФ

Явный метод Эйлера

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

Дифф. приближение

$$u_t + au_x =$$

$$= \frac{a\triangle x}{2}(1-\sigma)\boxed{u_{xx}} -$$

$$\frac{a\triangle x^2}{6}(2\sigma^2 - 3\sigma + 1)\boxed{u_{xxx}} + \dots.$$

Численное решение

Схема Лакса [Lax, 1954]

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

Дифф. приближение

$$u_t + au_x =$$
$$= \frac{a\triangle x}{2}\left(\frac{1}{\sigma} - \sigma\right)\boxed{u_{xx}} +$$
$$+ \frac{a\triangle x^2}{3}(1-\sigma^2)\boxed{u_{xxx}} + \dots$$

Численное решение

Метод с перешагиванием (метод «чехарда»)

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

Дифф. приближение

$$u_t + au_x =$$
$$= \frac{a\triangle x^2}{6}\left(\sigma^2 - 1\right)\boxed{u_{xxx}} +$$
$$- \frac{a\triangle x^4}{120}(9\sigma^4 - 10\sigma^2 + 1)\boxed{u_{xxxxx}} + \dots$$

Численное решение

Метод Лакса – Вендроффа [Lax, Wendroff, 1960]

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

Дифф. приближение

$$u_t + au_x =$$
$$= -\frac{a\triangle x^2}{6}\left(1-\sigma^2\right)\boxed{u_{xxx}}$$
$$- \frac{a\triangle x^3}{8}\sigma(1-\sigma^2)\boxed{u_{xxxx}} + \dots$$

Численное решение

Метод Мак - Кормака [MacCormack, 1969] (разности против потока [Warming, Beam, 1975])

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

$$u_i^{n+1} = \left[u_i^n + \bar{u}_i^{n+1} - \frac{a\triangle t}{\triangle x}(\bar{u}_i^{n+1} - \bar{u}_{i-1}^{n+1}) - \frac{a\triangle t}{2\triangle x}(u_i^n - 2u_{i-1}^n + u_{i-2}^n)\right]$$

Дифф. приближение

$$u_t + au_x = \\ = \frac{a\triangle x^2}{6}(1-\sigma)(2-\sigma)\boxed{u_{xxx}} - \\ - \frac{\triangle x^4}{8\triangle t}\sigma(1-\sigma)^2(2-\sigma)\boxed{u_{xxxx}} + \ldots$$

Диссипация и дисперсия сеточного решения

Анализ диссипации и дисперсии сеточного решения можно проводить на решении

$$u_i^n = u^* e^{i(\omega t_n - k x_i)}.$$

После подстановки этого решения в разностную схему, получим сеточное дисперсионное соотношение $\omega = W(k, \triangle t, \triangle x)$.

Пример

Метод с перешагиванием (метод «чехарда»):

$$\boxed{\begin{aligned} u_i^{n+1} &= u^* e^{i(\omega(t_n+\triangle t)-kx_i)} \\ u_i^{n-1} &= u^* e^{i(\omega(t_n-\triangle t)-kx_i)} \\ u_{i+1}^{n} &= u^* e^{i(\omega t_n-k(x_i+\triangle x))} \\ u_{i-1}^{n} &= u^* e^{i(\omega t_n-k(x_i-\triangle x))} \end{aligned}} \Rightarrow \frac{u_i^{n+1}-u_i^{n-1}}{2\triangle t} + a\frac{u_{i+1}^n-u_{i-1}^n}{2\triangle x};$$

$$e^{i\omega\triangle t} - e^{-i\omega\triangle t} + \sigma\left(e^{-ik\triangle x} - e^{ik\triangle x}\right) = 0;$$

$$\sin(\omega\triangle t) = \sigma\sin(k\triangle x) \Rightarrow \omega = \frac{1}{\triangle t}\arcsin(\sigma\sin(k\triangle x));$$

$$c = \frac{W}{k} = \frac{1}{k\triangle t}\arcsin(\sigma\sin(k\triangle x)),\;\; C = \frac{dW}{dk} = a\frac{\cos(k\triangle x)}{\sqrt{1-\sigma^2\sin(k\triangle x)}}.$$

Заключение

При численном решении волновых задач возникает затухание и дисперсия сеточного решения, что связано с формой разностных уравнений. Затухание прводит к уменьшению амплитуды, дисперсия – искажает форму волны.