

Численные методы в физике

Губкин А.С.

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

2 марта 2020 г.



Математическое описание многих физических процессов приводит к дифференциальным, интегральным или к интегро - дифференциальным уравнениям, аналитическое решение которых, в большинстве случаев, получить невозможно.

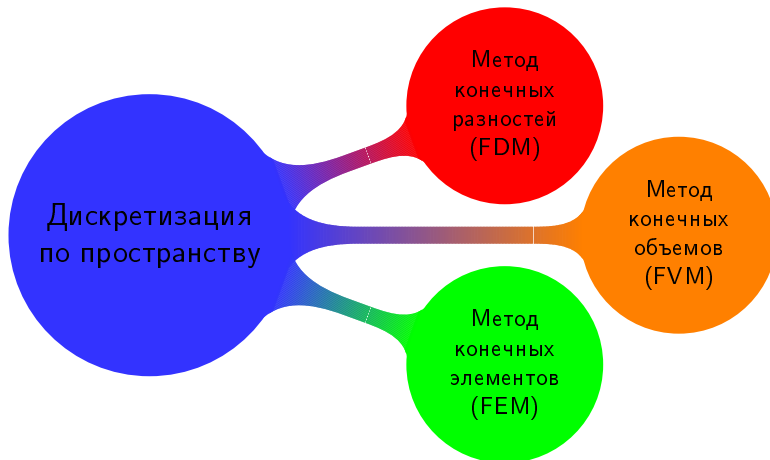
В этом случае на помощь исследователю приходят различные численные методы, которые позволяют получить **приближенное решение** рассматриваемой задачи.

Вычислительная математика – 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.

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.»

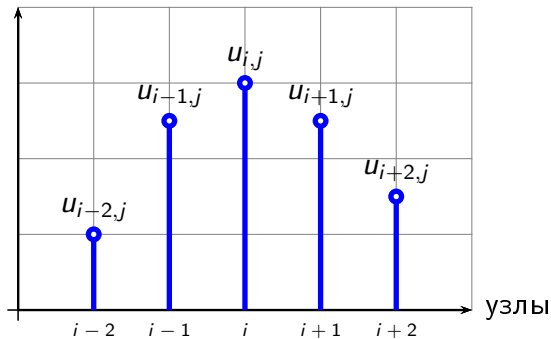
Основные способы пространственной дискретизации



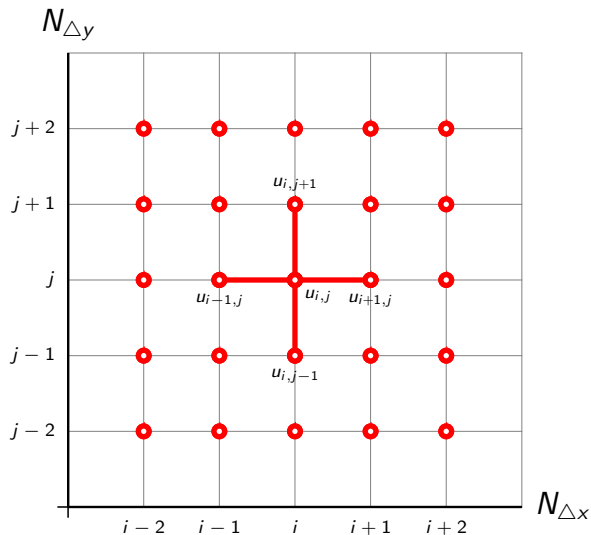
Метод конечных разностей (Finite Difference Method)

Искомые величины – значения переменных в узлах конечноразностной сетки:

$$\omega_{\Delta x, \Delta y} = \left\{ \underset{u}{x_i = i\Delta x, i = \overline{0, N_{\Delta x}}; y_j = j\Delta y, j = \overline{0, N_{\Delta y}}} \right\}$$



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

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

Если Δx будет мало, но конечно, то

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

Это следует из теоремы о конечном приращении.

Точность разностной аппроксимации

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

$$u(x_0 + \Delta x, y_0) = u(x_0, y_0) + \boxed{\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0 \Delta x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_0 \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \dots + \\ + \frac{\partial^{n-1} u}{\partial x^{n-1}} \Big|_0 \frac{(\Delta x)^{n-1}}{(n-1)!} + \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \Big|_{\xi} \frac{(\Delta x)^n}{(n)!}, \quad x_0 \leq \xi \leq x_0 + \Delta x.$$

Точность разностной аппроксимации

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

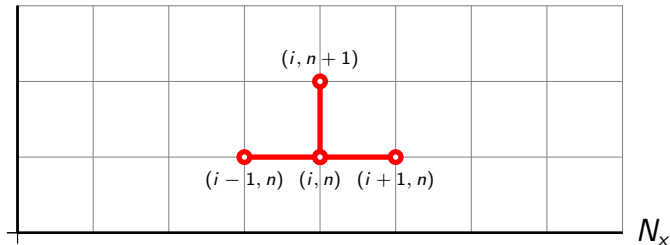
$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x).$$

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

Пример дискретизации

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

N_t



Шаблон разностной схемы

Определение

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

Погрешность дискретизации

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

$$\frac{\partial u_e}{\partial t} = \frac{(u_e)_i^{n+1} - (u_e)_i^n}{\Delta t} - \frac{\partial^2 u_e}{\partial t^2} \Big|_{n,i} \frac{\Delta t}{2} + \dots,$$

$$\frac{\partial^2 u_e}{\partial x^2} = \frac{(u_e)_{i+1}^n - 2(u_e)_i^n + (u_e)_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\partial^4 u_e}{\partial x^4} \Big|_{n,i} \frac{(\Delta x)^2}{12} + \dots,$$

тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_e}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_e}{\partial x^2} &= \frac{(u_e)_i^{n+1} - (u_e)_i^n}{\Delta t} - \frac{(u_e)_{i+1}^n - 2(u_e)_i^n + (u_e)_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \\ &\quad - \frac{\partial^2 u_e}{\partial t^2} \Big|_{n,i} \frac{\Delta t}{2} + \frac{\partial^4 u_e}{\partial x^4} \Big|_{n,i} \frac{(\Delta x)^2}{12} + \dots \end{aligned}$$

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

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 уравнений эквивалентна дифференциальному уравнению в каждом узле разностной сетки.

Пусть дана система уравнений:

$$\frac{du}{dt} = \hat{L}u,$$

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

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

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

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

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

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

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

Пример

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

Пример

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

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

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

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

Пример

При $\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \rightarrow \beta$ 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:

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

Аппроксимация

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

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

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

Пример

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

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

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

$$\begin{aligned} LTE &= u_e^{n+1} - \hat{\mathbf{T}} u_e^n = (u_{e,t} + au_{e,x}) \Delta t + \\ &+ O(\Delta t \Delta x + \Delta t^2) = \Delta t O(\Delta x + \Delta t). \end{aligned}$$

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{T} .

В общем случае:

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

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 :

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

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 $\hat{T}(\Delta t, \Delta x)$ 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 превосходить по модулю единицу $|g| \leq 1$, для всех фурье-мод.

Пример №1

Разности против потока:

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

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma (u_i^n - u_{i-1}^n), \quad \sigma = a\Delta t / \Delta x,$$

$$\hat{u}_k^{n+1} = \hat{u}_k^n - \sigma (\hat{u}_k^n - e^{-ik\Delta x} \hat{u}_k^n) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow g = 1 - \sigma + \sigma e^{-ik\Delta x}$$

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

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

Пример №2

Разности по потоку:

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

Пример №2

Разности по потоку:

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

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma (u_{i+1}^n - u_i^n), \quad \sigma = a\Delta t / \Delta x,$$

$$\hat{u}_k^{n+1} = \hat{u}_k^n - \sigma (e^{ik\Delta x} \hat{u}_k^n - \hat{u}_k^n) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow g = 1 + \sigma - \sigma e^{ik\Delta x} \Rightarrow$$

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

Схема всегда неустойчива!

Пример №3

Центральные разности:

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

Пример №3

Центральные разности:

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

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

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

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

Схема всегда неустойчива!

Пример №4

Схема Лакса:

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

Пример №4

Схема Лакса:

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

$$\Rightarrow g = \cos k\Delta x - i\sigma \sin k\Delta x$$

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

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

Пример №5

Метод с перешагиванием (метод «чехарда»):

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

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

Пример №6

Метод Лакса – Вендроффа:

$$u_t + au_x = 0,$$

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

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

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

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

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

Пример №7

Метод Мак-Кормака (разности против потока):

$$u_t + au_x = 0,$$

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

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

Пример №7

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

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