

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Сибирский Федеральный Университет

Содержание курса лекций

Лекция 1. История развития компьютерного моделирования

Лекция 2. Понятие математической модели

Лекция 3. Классификация математических моделей

Лекция 4. Построение математических моделей

Лекция 5. Методы исследования математических моделей

Лекция 6. Вычислительный эксперимент

Лекция 7. Представление о языках программирования высокого уровня

Лекция 8. Инструментальные среды и пакеты прикладных программ

Лекция 9. Численные методы

Лекция 10. Численные методы решения систем дифференциальных уравнений

Лекция 11. Методика проведения исследований

Лекция 12. Методы построения и анализа дискретных моделей

Лекция 13. Моделирование колебательных процессов

Лекция 14. Моделирование распространения тепла в стержне

Лекция 15. Моделирование распространения тепла в пространстве

Лекция 16. Обобщённые криволинейные координаты

Лекция 17. Методы построения расчётных сеток для обобщённых криволинейных координат

Лекция 18. Моделирование движения жидкости. Основные уравнения

Лекция 19. Моделирование фильтрации несжимаемой жидкости

Лекция 20. Задача о движении грунтовых вод. Уравнение Буссинеска

Лекция 21. Методы расчёта уравнений в переменных вихрь – функция тока

Лекция 22. Методы расчёта уравнений в переменных давление-скорость

Лекция 23. Моделирование неустановившихся течений воды в системах речных русел и каналов

Лекция 24. Уравнения Сен-Венана. Численные методы решения

Лекция 25. Теория упругости. Закон Гука

Лекция 26. Моделирование упругой деформации однородной балки

Лекция 27. Модели частиц в задачах взаимодействия N тел

Лекция 28. Движение гранулированной среды

Лекция 29. Метод вихрей в ячейках для моделирования несжимаемой жидкости

Лекция 30. Моделирование электростатической плазмы

Лекция 31. Классификация биологических моделей

Лекция 32. Модели биологических систем, описываемые одним дифференциальным уравнением

Лекция 33. Модели роста популяции. Модель Мальтуса

Лекция 34. Модели биологических систем, описываемые двумя дифференциальными уравнениями. Модели взаимодействия двух видов

Лекция 35. Гипотезы Вольтера. Модель хищник – жертва

Лекция 36. Классификация экономических моделей. Особенности применения метода математического моделирования в социально-экономических исследованиях

Лекция 37. Модель рекламной компании

Лекция 38. Модель равновесия рыночной экономики. Модель экономического роста

Лекция 1. История развития компьютерного моделирования

Невозможно представить себе современную науку без широкого применения математического моделирования. Сущность этой методологии состоит в замене исходного объекта его «образом» - математической моделью - и дальнейшем изучении модели с помощью реализуемых на компьютерах вычислительно-логических алгоритмов. Этот «третий метод» познания, конструирования, проектирования сочетает в себе многие достоинства как теории, так и эксперимента. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его моделью дает возможность безболезненно, относительно быстро и без существенных затрат исследовать его свойства и поведение в любых мыслимых ситуациях (преимущества теории). В то же время вычислительные (компьютерные, симуляционные, имитационные) эксперименты с моделями объектов позволяют, опираясь на мощь современных вычислительных методов и технических инструментов информатики, подробно и глубоко изучать объекты в достаточной полноте, недоступной чисто теоретическим подходам (преимущества эксперимента). Неудивительно, что методология математического моделирования бурно развивается, охватывая все новые сферы — от разработки технических систем и управления ими до анализа сложнейших экономических и социальных процессов.

Элементы математического моделирования использовались с самого начала появления точных наук, и не случайно, что некоторые методы вычислений носят имена таких корифеев науки, как Ньютон и Эйлер, а слово «алгоритм» происходит от имени средневекового арабского ученого Аль-Хорезми. Второе «рождение» этой методологии пришлось на конец 40-х - начало 50-х годов XX века и было обусловлено по крайней мере двумя причинами. Первая из них - появление ЭВМ (компьютеров), хотя и скромных по нынешним меркам, но тем не менее избавивших ученых от огромной по объему рутинной вычислительной работы. Вторая - беспрецедентный социальный заказ - выполнение национальных программ СССР и США по созданию ракетно-ядерного щита, которые не могли быть реализованы традиционными методами. Математическое моделирование справилось с этой задачей: ядерные взрывы и полеты ракет и спутников были предварительно «осуществлены» в недрах ЭВМ с помощью математических

моделей и лишь затем претворены на практике. Эффективные численные методы и программы, разработанные для многих классов задач, позволили уже на ЭВМ второго поколения решить многие практически важные задачи. Этот успех во многом определил дальнейшие достижения методологии, без применения которой в развитых странах ни один крупномасштабный технологический, экологический или экономический проект теперь всерьез не рассматривается (сказанное справедливо и по отношению к некоторым социально-политическим проектам).

Сейчас математическое моделирование вступает в третий принципиально важный этап своего развития, «встраиваясь» в структуры так называемого информационного общества. Впечатляющий прогресс средств переработки, передачи и хранения информации отвечает мировым тенденциям к усложнению и взаимному проникновению различных сфер человеческой деятельности. Без владения информационными «ресурсами» нельзя и думать о решении все более укрупняющихся и все более разнообразных проблем, стоящих перед мировым сообществом. Однако информация как таковая зачастую мало что дает для анализа и прогноза, для принятия решений и контроля за их исполнением. Нужны надежные способы переработки информационного «сырья» в готовый «продукт», т. е. в точное знание. История методологии математического моделирования убеждает: она может и должна быть интеллектуальным ядром информационных технологий, всего процесса информатизации общества. Технические, экологические, экономические и иные системы, изучаемые современной наукой, больше не поддаются исследованию (в нужной полноте и точности) обычными теоретическими методами. Прямой натурный эксперимент над ними долог, дорог, часто либо опасен, либо попросту невозможен, так как многие из этих систем существуют в «единственном экземпляре». Цена ошибок и просчетов в обращении с ними недопустимо высока. Поэтому математическое (шире - информационное) моделирование является неизбежной составляющей научно-технического прогресса.

Наиболее впечатляющие успехи достигнуты при применении математического моделирования в инженерии и технологии. В настоящее время отмечается все возрастающий уровень математизации химии. Например, химическая кинетика базируется на системах обыкновенных

дифференциальных уравнений, химическая гидродинамика - на уравнениях в частных производных и т.д.

Повышается и уровень математизации биологии. В этой связи достаточно сослаться на классические работы В.Вольтерра по моделированию системы хищник - жертва, выполненные еще в начале двадцатого века.

Мы являемся свидетелями все более широкого использования математических идей в экономике, истории и других гуманитарных науках. Процесс математизации наук идет чрезвычайно быстро благодаря опыту, накопленному при математизации механики и физики, благодаря достигнутому уровню развития самой математики.

Лекция 2. Понятие математической модели

Под математическим моделированием, в узком смысле слова, понимают описание в виде уравнений и неравенств реальных физических, химических, технологических, биологических, экономических и других процессов. Для того чтобы использовать математические методы для анализа и синтеза различных процессов, необходимо уметь описать эти процессы на языке математики, то есть описать в виде системы уравнений и неравенств.

Как методология научных исследований математическое моделирование сочетает в себе опыт различных отраслей науки о природе и обществе, прикладной математики, информатики и системного программирования для решения фундаментальных проблем. Математическое моделирование объектов сложной природы – единый сквозной цикл разработок от фундаментального исследования проблемы до конкретных численных расчетов показателей эффективности объекта. Результатом разработок бывает система математических моделей, которые описывают качественно разнородные закономерности функционирования объекта и его эволюцию в целом как сложной системы в различных условиях. Вычислительные эксперименты с математическими моделями дают исходные данные для оценки показателей эффективности объекта. Поэтому математическое моделирование как методология организации научной экспертизы крупных проблем незаменимо при проработке народнохозяйственных решений (в первую очередь это относится к моделированию экономических систем).

По своей сути математическое моделирование есть метод решения новых сложных проблем, поэтому исследования по математическому моделированию должны быть опережающими. Следует заранее разрабатывать новые методы, готовить кадры, умеющие со знанием дела применять эти методы для решения новых практических задач.

Математическая модель может возникнуть тремя путями:

1. В результате прямого изучения реального процесса. Такие модели называются феноменологическими.
2. В результате процесса дедукции. Новая модель является частным случаем некоторой общей модели. Такие модели называются асимптотическими.

3. В результате процесса индукции. Новая модель является обобщением элементарных моделей. Такие модели называют моделями ансамблей.

Процесс моделирования начинается с моделирования упрощенного процесса, который с одной стороны отражает основные качественные явления, с другой стороны допускает достаточно простое математическое описание. По мере углубления исследования строятся новые модели, более детально описывающие явление. Факторы, которые считаются второстепенными на данном этапе, отбрасываются. Однако, на следующих этапах исследования, по мере усложнения модели, они могут быть включены в рассмотрение. В зависимости от цели исследования один и тот же фактор может считаться основным или второстепенным.

Математическая модель и реальный процесс не тождественны между собой. Как правило, математическая модель строится с некоторым упрощением и при некоторой идеализации. Она лишь приближенно отражает реальный объект исследования, и результаты исследования реального объекта математическими методами носят приближенный характер. Точность исследования зависит от степени адекватности модели и объекта и от точности применяемых методов вычислительной математики.

Схема построения математических моделей следующая:

1. Выделение параметра или функции, подлежащей исследованию.
2. Выбор закона, которому подчиняется эта величина.
3. Выбор области, в которой требуется изучить данное явление.

В практике математического моделирования исходным пунктом часто является некоторая эмпирическая ситуация, выдвигающая перед исследователем задачу, на которую требуется найти ответ. Прежде всего, необходимо установить, в чём именно заключается задача. Часто (но не всегда) параллельно с этой стадией постановки задачи идёт процесс выявления основных или существенных особенностей явления (слайд 1.1). В частности для физических явлений этот процесс схематизации или идеализации играет решающую роль поскольку в реальном явлении участвует множество процессов и оно чрезвычайно сложно. Некоторые черты явления представляются важными многие другие - несущественными. Возьмём к примеру движение маятника, образованного тяжёлым грузом, подвешенным на конце нити. В этом случае существенным является регулярный характер колебаний маятника, а несущественным – то, что нить

белая, а груз чёрный. После того как существенные факторы выявлены, следующий шаг состоит в переводе этих факторов на язык математических понятий и величин и постулировании соотношений между этими величинами. После построения модели её следует подвергнуть проверке. Адекватность модели до некоторой степени проверяется обычно в ходе постановки задачи. Уравнения или другие математические соотношения, сформулированные в модели, постоянно сопоставляются с исходной ситуацией. Существует несколько аспектов проверки адекватности. Во-первых, сама математическая основа модели (которая и составляет её существо) должна быть непротиворечивой и подчиняться всем обычным законам математической логики. Во-вторых, справедливость модели зависит от её способности адекватно описывать исходную ситуацию. Модель можно заставить отражать действительность, однако она не есть сама действительность.

Ситуации моделируют для разных целей. Главная из них – необходимость предсказывать новые результаты или новые свойства явления. Эти предсказания могут быть связаны с распространением существующих результатов или иметь более принципиальный характер. Часто они относятся к условиям, которые, по всей вероятности, будут иметь место в некоторый момент в будущем. С другой стороны, предсказания могут относиться к событиям, непосредственное экспериментальное исследование которых неосуществимо. Наиболее важный пример такого рода дают многочисленные прогнозы, которые делались на основе математических моделей в программе космических исследований. Однако для этой цели моделируются не все ситуации: в некоторых случаях достаточно уметь описывать математическими средствами работу системы для того, чтобы добиться более глубокого понимания явления (именно эту роль и играют многие выдающиеся физические теории, хотя на их основе делаются также и прогнозы). Обычно при таком математическом описании не учитывается элемент контроля, однако в моделях, построенных, например, для исследования работы сетей, таких как схемы движения поездов или самолётов, контроль часто является важным фактором.

Математическая модель представляет собой упрощение реальной ситуации. Ощутимое упрощение наступает тогда, когда несущественные особенности ситуации отбрасываются и сложная исходная задача сводится к

идеализированной задаче, поддающейся математическому анализу. Именно при таком подходе в классической прикладной механике возникли блоки без трения, невесомые нерастяжимые нити, невязкие жидкости, абсолютно твёрдые или чёрные тела и прочие подобные идеализированные модели. Эти понятия не существуют в реальной действительности, они являются абстракциями, составной частью идеализации, предпринятой автором модели. И тем не менее их часто можно с успехом считать хорошим приближением к реальным ситуациям. Описанный образ действий при построении математических моделей не является единственным, и этому совсем не стоит удивляться. В другом возможном подходе первым шагом является построение простой модели нескольких наиболее характерных особенностей явления. Это часто делается для того, чтобы почувствовать данную задачу, причём делается это ещё до того, как сама задача окончательно сформулирована. Затем эта модель обобщается, чтобы охватить другие факты, пока не будет найдено приемлемое или адекватное решение. Есть ещё подход, когда с самого начала вводится в рассмотрение одновременно большое число факторов. Он часто применяется в исследовании операций, и такие модели обычно изучают имитационными методами с использованием ЭВМ.

Важнейшее решение, которое часто принимается в самом начале процесса моделирования, касается природы рассматриваемых математических переменных. По существу они делятся на два класса. В один из них входят известные характеристики, т.е. величины, поддающиеся (по крайней мере теоретически) точному измерению и управлению. Такие переменные называются *детерминированными* переменными. В другой класс входят неизвестные характеристики, т.е. величины, которые никогда не могут быть точно измерены и имеют случайный характер – они называются *стохастическими* переменными. Модель, содержащая стохастические переменные, должна по определению описываться математическим аппаратом теории вероятностей и статистики. Детерминированные переменные часто, но не всегда требуют привлечения обычного математического анализа. Природа некоторых ситуаций бывает ясна не сразу, другие ситуации характеризуются переменными обоих типов. Для построения модели чрезвычайно важно, чтобы природа переменных была правильно представлена.

Лекция 3. Классификация математических моделей

Существуют всевозможные классификации математических моделей. Выделяют линейные и нелинейные модели, стационарные и динамические, модели, описываемые алгебраическими, интегральными и дифференциальными уравнениями, уравнениями в частных производных. Можно выделять классы детерминированных моделей, вся информация в которых является полностью определяемой, и стохастических моделей, то есть зависящих от случайных величин и функций. Так же математические модели различают по применению к различным отраслям науки.

Рассмотрим следующую классификацию математических моделей. Все математические модели разобьем условно на четыре группы.

I. Модели прогноза или расчетные модели без управления. Их можно разделить на стационарные и динамические. Основное назначение этих моделей: зная начальное состояние и информацию о поведении на границе, дать прогноз о поведении системы во времени и в пространстве. Такие модели могут быть и стохастическими. Как правило, модели прогнозирования описываются алгебраическими, трансцендентными, дифференциальными, интегральными, интегро-дифференциальными уравнениями и неравенствами. Примерами могут служить модели распределения тепла, электрического поля, химической кинетики, гидродинамики.

II. Оптимизационные модели. Их так же разбивают на стационарные и динамические. Стационарные модели используются на уровне проектирования различных технологических систем. Динамические – как на уровне проектирования, так и, главным образом, для оптимального управления различными процессами – технологическими, экономическими и

др. В задачах оптимизации имеется два направления. К первому относятся детерминированные задачи. Вся входная информация в них является полностью определяемой. Второе направление относится к стохастическим процессам. В этих задачах некоторые параметры носят случайный характер или содержат элемент неопределенности. Многие задачи оптимизации автоматических устройств, например, содержат параметры в виде случайных помех с некоторыми вероятностными характеристиками.

Методы отыскания экстремума функции многих переменных с различными ограничениями часто называются методами математического программирования. Задачи математического программирования – одни из важных оптимизационных задач.

В математическом программировании выделяются следующие основные разделы:

- 1) Линейное программирование. Целевая функция линейна, а множество, на котором ищется экстремум целевой функции, задается системой линейных равенств и неравенств.
- 2) Нелинейное программирование. Целевая функция нелинейная и нелинейные ограничения.
- 3) Выпуклое программирование. Целевая функция выпуклая и выпуклое множество, на котором решается экстремальная задача.
- 4) Квадратичное программирование. Целевая функция квадратичная, а ограничения – линейные равенства и неравенства.
- 5) Многоэкстремальные задачи. Задачи, в которых целевая функция имеет несколько локальных экстремумов. Такие задачи представляются весьма проблемными.
- 6) Целочисленное программирование. В подобных задачах на переменные накладываются условия целочисленности.

Как правило, к задачам математического программирования неприменимы методы классического анализа для отыскания экстремума функции нескольких переменных.

Модели теории оптимального управления – одни из важных в оптимизационных моделях. Математическая теория оптимального управления относится к одной из теорий, имеющих важные практические применения, в основном, для оптимального управления процессами.

Различают три вида математических моделей теории оптимального управления. К первому виду относятся дискретные модели оптимального управления. Традиционно такие [модели называют моделями](#) динамического программирования. Широко известен метод динамического программирования Беллмана. Ко второму типу относятся модели, описываемые задачам Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Их часто называют моделями оптимального управления системами с сосредоточенными параметрами. Третий вид моделей описывается краевыми задачами, как для обыкновенных дифференциальных уравнений, так и для уравнений в частных производных. Такие модели называют моделями оптимального управления системами с распределенными параметрами.

III. Кибернетические модели. Этот тип моделей используется для анализа конфликтных ситуаций.

Предполагается, что динамический процесс определяется несколькими субъектами, в распоряжении которых имеется несколько управляющих параметров. С кибернетической системой ассоциируется целая группа субъектов со своими собственными интересами.

IV. Вышеописанные типы моделей не охватывают большого числа различных ситуаций, таких, которые могут быть полностью формализованы. Для изучения таких процессов необходимо включение в

математическую модель функционирующего «биологического» звена – человека. В таких ситуациях используется имитационное моделирование, а также методы экспертиз и информационных процедур.

Лекция 4. Построение математических моделей

Математические модели в количественной форме, с помощью логико-математических конструкций, описывает основные свойства объекта, процесса или системы, его параметры, внутренние и внешние связи. Для построения математической модели необходимо тщательно проанализировать реальный объект или процесс

1. выделить его наиболее существенные черты и свойства;
2. определить переменные, т.е. параметры, значения которых влияют на основные черты и свойства объекта;
3. описать зависимость основных свойств объекта, процесса или системы от значения переменных с помощью логико-математических соотношений (уравнения, равенства, неравенства, логико-математические конструкций);
4. выделить внутренние связи объекта, процесса или системы с помощью ограничений, уравнений, равенств, неравенств, логико-математических конструкций;
5. определить внешние связи и описать их с помощью ограничений, уравнений, равенств, неравенств, логико-математических конструкций.

Математическое моделирование, кроме исследования объекта, процесса или системы и составления их математического описания, также включает:

1. построение алгоритма, моделирующего поведение объекта, процесса или системы;
2. проверка адекватности модели и объекта, процесса или системы на основе вычислительного и натурного эксперимента;
3. корректировка модели;
4. использование модели.

Математическое описание исследуемых процессов и систем зависит от:

1. природы реального процесса или системы и составляется на основе законов физики, химии, механики, термодинамики, гидродинамики, электротехники, теории пластичности, теории упругости и т.д.
2. требуемой достоверности и точности изучения и исследования реальных процессов и систем.

На этапе выбора математической модели устанавливаются: линейность и нелинейность объекта, процесса или системы, динамичность или статичность, стационарность или нестационарность, а также степень детерминированности исследуемого объекта или процесса. При математическом моделировании сознательно отвлекаются от конкретной физической природы объектов, процессов или систем и, в основном, сосредотачиваются на изучении количественных зависимостей между величинами, описывающими эти процессы.

Математическая модель никогда не бывает полностью тождественна рассматриваемому объекту, процессу или системе. Основанная на упрощении, идеализации она является приближенным описанием объекта. Поэтому результаты, полученные при анализе модели, носят приближенный характер. Их точность определяется степенью адекватности (соответствия) модели и объекта.

Построение математической модели обычно начинается с построения и анализа простейшей, наиболее грубой математической модели рассматриваемого объекта, процесса или системы. В дальнейшем, в случае необходимости, модель уточняется, делается ее соответствие объекту более полным.

Рассмотрим пример: исследование движения кривошипно-шатунного механизма (слайд 1.2). Для кинематического анализа этого механизма, прежде всего, необходимо построить его кинематическую модель. Для этого:

1. Заменяем механизм его кинематической схемой, где все звенья заменены жесткими связями;
2. Пользуясь этой схемой, мы выводим уравнение движения механизма;
3. Дифференцируя последнее, получаем уравнения скоростей и ускорения, которые представляют собой дифференциальные уравнения 1-го и 2-го порядка.

Запишем эти уравнения:

$$S_c = r \left(1 - \cos \varphi + \frac{\lambda}{2} \sin^2 \varphi \right),$$

$$V_c = r \left(\frac{d\varphi}{dt} \right) \left(\sin \varphi + \frac{\lambda}{2} \sin 2\varphi \right),$$

$$A_c = \gamma \left(\frac{d^2 \varphi}{dt^2} \right) (\cos \varphi + \lambda \cos 2\varphi),$$

где C_0 – крайнее правое положение ползуна C , r – радиус кривошипа AB , l – длина шатуна BC , φ – угол поворота кривошипа, $\lambda = r/l$.

Полученные трансцендентные уравнения представляют математическую модель движения плоского аксиального кривошипно-шатунного механизма, основанную на следующих упрощающих предположениях:

1. нас не интересовали конструктивные формы и расположение масс, входящих в механизм тел, и все тела механизма мы заменили отрезками прямых. На самом деле, все звенья механизма имеют массу и довольно сложную форму. Например, шатун – это сложное сборное соединение, форма и размеры которого, конечно, будут влиять на движение механизма;
2. при построении математической модели движения рассматриваемого механизма мы также не учитывали упругость входящих в механизм тел, т.е. все звенья рассматривали как абстрактные абсолютно жесткие тела. В действительности же, все входящие в механизм тела – упругие тела. Они при движении механизма будут как-то деформироваться, в них могут даже возникнуть упругие колебания. Это все, конечно, также будет влиять на движение механизма;
3. мы не учитывали погрешность изготовления звеньев, зазоры в кинематических парах A , B , C и т.д.

Таким образом, важно еще раз подчеркнуть, что, чем выше требования к точности результатов решения задачи, тем больше необходимость учитывать при построении математической модели особенности изучаемого объекта, процесса или системы. Однако, здесь важно во время остановиться, так как сложная математическая модель может превратиться в трудно разрешимую задачу.

Наиболее просто строится модель, когда хорошо известны законы, определяющие поведение и свойства объекта, процесса или системы, и имеется большой практический опыт их применения.

Более сложная ситуация возникает тогда, когда наши знания об изучаемом объекте, процессе или системе недостаточны. В этом случае при

построении математической модели приходится делать дополнительные предположения, которые носят характер гипотез, такая модель называется гипотетической. Выводы, полученные в результате исследования такой гипотетической модели, носят условный характер. Для проверки выводов необходимо сопоставить результаты исследования модели на ЭВМ с результатами натурного эксперимента. Таким образом, вопрос применимости некоторой математической модели к изучению рассматриваемого объекта, процесса или системы не является математическим вопросом и не может быть решен математическими методами.

Рассмотрим некоторые общие подходы к построению простейших математических моделей, демонстрирующие применение фундаментальных законов природы, вариационных принципов, аналогий, иерархических цепочек.

1. Фундаментальные законы природы.

Наиболее распространенный метод построения моделей состоит в применении фундаментальных законов природы к конкретной ситуации. Эти законы общепризнаны, многократно подтверждены опытом, служат основой множества научно-технических достижений. Поэтому их обоснованность не вызывает сомнений. На первый план выдвигаются вопросы, связанные с тем, какой закон (законы) следует применять в данном случае и как это делать.

а) Сохранение энергии. Этот закон известен почти двести лет и занимает, пожалуй, наиболее почетное место среди великих законов природы. Рассмотрим задачу о столкновении пули с маятником, подвешенным на легком жестком и свободно вращающемся стержне (слайд 1.3). Пуля, застрявшая в грузе, сообщит системе «пуля - груз» свою кинетическую энергию, которая в момент наибольшего отклонения стержня от вертикали полностью перейдет в потенциальную энергию системы. Эти трансформации описываются цепочкой равенств

$$\frac{mv^2}{2} = (M + m) \frac{V^2}{2} = (M + m) gl(1 - \cos \alpha).$$

Здесь $mv^2/2$ — кинетическая энергия пули массы m , имеющей скорость v , M — масса груза, V — скорость системы «пуля—груз» сразу после столкновения,

g - ускорение свободного падения, l - длина стержня, α - угол наибольшего отклонения. Искомая скорость определяется формулой

$$v = \sqrt{\frac{2(M + m)gl(1 - \cos \alpha)}{m}},$$

которая будет вполне точной, если не учитываемые нами потери энергии на разогрев пули и груза, на преодоление сопротивления воздуха, разгон стержня и т. д. невелики. Это, на первый взгляд, разумное рассуждение на самом деле неверно. Процессы, происходящие при «слипании» пули и маятника, уже не являются чисто механическими. Поэтому примененный для вычисления величины V закон сохранения механической энергии несправедлив: сохраняется полная, а не механическая энергия системы. Он дает лишь нижнюю границу для оценки скорости пули.

б) Сохранение материи.

в) Сохранение импульса.

2. Вариационные принципы.

Еще один подход к построению моделей, по своей широте и универсальности сопоставимый с возможностями, даваемыми фундаментальными законами, состоит в применении так называемых вариационных принципов. Они представляют собой весьма общие утверждения о рассматриваемом объекте (системе, явлении) и гласят, что из всех возможных вариантов его поведения (движения, эволюции) выбираются лишь те, которые удовлетворяют определенному условию. Обычно согласно этому условию некоторая связанная с объектом величина достигает экстремального значения при его переходе из одного состояния в другое.

Рассмотрим преломление лучей на границе двух сред (слайд 1.4). Свет, выходящий из точки A , движется в первой среде со скоростью v_a преломляется и, переходя через линию раздела, двигается во второй среде со скоростью v_b и попадает в точку B . Если α - угол падения луча, а $\beta(\alpha)$ - угол его преломления, то время прохождения из A в B равно

$$t(\alpha) = \frac{a}{v_a \sin \alpha} + \frac{b}{v_b \sin \beta(\alpha)}.$$

Из условия минимальности $t(\alpha)$ следует известный закон преломления света:

$$\frac{\cos \alpha}{\cos \beta} = \frac{v_a}{v_b}.$$

3. Применение аналогий при построении моделей.

Во многих случаях при попытке построить модель какого-либо объекта либо невозможно прямо указать фундаментальные законы или вариационные принципы, которым он подчиняется. Одним из плодотворных подходов к такого рода объектам является использование аналогий с уже изученными явлениями. Что, казалось бы, общего между радиоактивным распадом и динамикой популяций, в частности изменением численности населения нашей планеты? Однако на простейшем уровне такая аналогия вполне допустима, о чем свидетельствует одна из простейших моделей популяций, называемая моделью Мальтуса. В ее основу положено простое утверждение - скорость изменения населения со временем t пропорциональна его текущей численности $N(t)$, умноженной на сумму коэффициентов рождаемости $\alpha(t) \geq 0$ и смертности $\beta \leq 0$. В результате приходим к уравнению

$$\frac{dN(t)}{dt} = (\alpha(t) - \beta(t))N(t),$$

весьма похожее на уравнение радиоактивного распада.

4. Иерархический подход к получению моделей.

В редких случаях бывает удобным и оправданным построение математических моделей даже относительно простых объектов сразу во всей полноте, с учетом всех факторов, существенных для его поведения. Поэтому естествен подход, реализующий принцип «от простого - к сложному», когда следующий шаг делается после достаточно подробного изучения не очень сложной модели. При этом возникает цепочка (иерархия) все более полных

моделей, каждая из которых обобщает предыдущие, включая их в качестве частного случая.

Основным критерием истинности является эксперимент, практика в самом широком смысле этого слова.

Построение математической модели в прикладных задачах – один из наиболее сложных и ответственных этапов работы. Опыт показывает, что во многих случаях правильно выбрать модель – значит решить проблему более, чем наполовину. Трудность данного этапа состоит в том, что он требует соединения математических и специальных знаний. Поэтому очень важно, чтобы при решении прикладных задач математики обладали специальными знаниями об объекте, а их партнеры, специалисты, – определенной математической культурой, опытом исследования в своей области, знанием ЭВМ и программирования.

Лекция 5. Методы исследования математических моделей

Прежде чем применять вычислительные средства для исследования прикладных математических моделей проводится предварительное их исследование методами прикладной математики.

Качественное исследование начинается с размерностного анализа задачи. Приведение задачи к безразмерному виду позволяет сократить число определяющих параметров задачи. Выделение малых или больших безразмерных параметров дает возможность в ряде случаев существенно упростить исходную математическую модель, учесть особенности задачи при разработке численных методов ее решения.

Сама математическая модель может быть достаточно сложной, нелинейной. Это зачастую делает невозможным ее качественное исследование традиционными методами прикладной математики. Именно поэтому в громадном большинстве случаев проводится качественное исследование на более простых, но обязательно содержательных, по отношению к исходной математической модели задачах. В этом случае мы должны говорить о модельных (упрощенных) задачах для основной математической модели (моделей для модели). Так например, особенности модели потенциального течения с дозвуковыми и сверхзвуковыми подобластями течения в плане качественного исследования передаются уравнением Трикоми, которое в математической физике относится к классу уравнений смешанного типа.

Большое внимание при качественном исследовании математических моделей (или модельных задач для них) уделяется вопросам корректности. Прежде всего рассматривается проблема существования решения. Соответствующие строгие результаты (теоремы существования) дают уверенность в корректности математической модели. Кроме того, конструктивные доказательства теорем существования могут быть положены в основу приближенных методов решения поставленной задачи.

При прикладном математическом моделировании важным является вопрос об устойчивости решения относительно малых возмущений входных данных. Неустойчивость (неограниченный рост решения при малых

возмущениях) наиболее характерна для обратных задач и должна учитываться при построении приближенного решения.

Для нелинейных математических моделей может быть характерна множественность, неединственность решения. При качественном исследовании математических моделей изучаются точки ветвления, бифуркации решения, вопросы выделения нужного искомого решения и т.д.

Методы качественного исследования для различных типов математических моделей разработаны с неодинаковой полнотой. Среди моделей, где качественные методы принесли наиболее впечатляющие результаты, отметим обыкновенные дифференциальные уравнения. В теории уравнений с частными производными качественные методы также используются, хотя и не в такой большой степени. В качестве содержательного примера отметим принцип максимума для параболических и эллиптических уравнений второго порядка, который позволяет провести качественное исследование математических моделей, основанных на уравнениях с частными производными.

Точное или приближенное решение находится с использованием аналитических и численных методов. В этой связи среди классических примеров аналитических методов отметим методы разделения переменных, интегральных преобразований для линейных задач математической физики.

Для нелинейных математических моделей особое значение имеют методы линеаризации, различные варианты методов возмущений. Теория возмущений базируется на использовании асимптотических разложений по выделенному малому параметру. Особое внимание этим методам, несмотря на их ограниченность, уделяется при рассмотрении сингулярно возмущенных задач.

Качественное поведение решения нелинейной задачи может хорошо передаваться некоторыми частными решениями. Поиск частных решений нелинейных задач основывается на использовании автомодельных переменных, на результатах группового анализа уравнений, лежащих в основе математической модели. При проведении вычислительного эксперимента большое значение имеют точные решения нелинейных уравнений. Эти решения могут, в частности, использоваться для тестирования вычислительных алгоритмов.

Сложные нелинейные многопараметрические модели могут быть исследованы на компьютере численными методами. В отличие от аналитического решения, которое может давать явную параметрическую зависимость решения от тех или иных условий задачи, при численном решении требуется многократное решение задачи при изменении того или иного параметра. Но ведь численное решение может быть получено и для тех задач, для которых аналитического решения нет.

Лекция 6. Вычислительный эксперимент

В научном исследовании основой вычислительной науки служит математическая модель интересующего нас физического явления. Уравнения математической модели переводятся в дискретную алгебраическую форму, поддающуюся численному решению. Дискретные алгебраические уравнения описывают вычислительную модель, которая, если перевести её в последовательность команд на каком-нибудь языке программирования, даёт программу моделирования для компьютера. После этого компьютер и программа позволяют исследовать эволюцию модельной физической системы в вычислительных экспериментах. Методы дискретизации, используемые при создании численных моделей, включают в себя конечно-разностные методы, методы конечных и граничных элементов и методы частиц.

1. Роль вычислительного эксперимента

В научном исследовании численное моделирование становится возможным благодаря быстродействующим компьютерам. Однако сам факт возможности исследования с помощью моделирования не всегда означает, что это наилучший метод. Как и при теоретическом и экспериментальном исследованиях, необходимо выяснить, каковы ограничения и преимущества вычислительного эксперимента. Для того чтобы получить представление о значении моделирования, рассмотрим традиционную картину развития науки и возможные применения вычислительного эксперимента в этом развитии.

Экспериментальная работа связана в основном с накоплением опытных данных. Теоретическая работа направлена главным образом на приведение такой информации в логически последовательную систему для того, чтобы

вывести законы описывающие то или иное явление. В своём развитии как теория, так и эксперимент проверяют и обогащают друг друга. В непосредственном воздействии теории на эксперимент можно выделить три момента. Теория ведёт к экспериментам с целью:

- 1) определить те факты, которые, согласно математической модели, основанной на некоторой системе принципов, существенны для описания конкретных явлений;
- 2) проверить теоретические предсказания и предположения, и
- 3) определить эмпирические величины, которых требует теория

Точно также и экспериментальная работа оказывает воздействие на теорию: её модифицируют в соответствии с экспериментом, и используют для предсказания наиболее существенных опытных данных. Обычная практика науки состоит в сопоставлении теории с опытом. Существенные различия оказываются в центре внимания как теории, так и эксперимента, и их разрешение приводит либо к обобщению существующих теорий, либо к пересмотру основных принципов с целью построения более совершенных теорий.

Потребности технологии послужили дополнительным стимулом перейти к исследованию задач для которых невозможно построить аналитическое решение, а постановка прямых экспериментов вызывает большие трудности. Чтобы преодолеть возникающие затруднения, широко используются компьютеры, как новое средство проведения экспериментов, вычислительных экспериментов, которые ликвидируют разрыв между теорией и опытом.

Вычислительные эксперименты можно грубо подразделить на три категории. К первой относятся эксперименты, предназначенные для

моделирования работы сложных устройств с тем, чтобы оценить большое количество вариантов, прежде чем создавать оптимальную модель с применением дорогостоящей технологии. Вторая группа вычислительных экспериментов направлена на получение информации в ситуациях, когда имеется большой разрыв между возможностями теории и эксперимента. Лабораторные эксперименты сталкиваются со всей сложностью природы: условия могут с трудом поддаваться контролю, измерения не всегда можно легко осуществить, и, как следствие, результаты зачастую трудно интерпретировать однозначно. Например, так обстоит дело при моделировании галактик, землетрясений или субмикронных электронных приборов, когда рассматриваются очень большие или очень малые пространственные и временные масштабы. И наконец, имеется группа вычислительных экспериментов, «теоретические эксперименты», которые дают ценные рекомендации для развития теории.

Объединение вычислительного эксперимента, теории и натурного эксперимента оказывается гораздо более эффективным для получения полезных результатов, чем любой из этих методов по отдельности или сочетание любых двух из них. Недостатки каждого метода исследования компенсируются достоинствами других методов. Роль вычислительного эксперимента определяется его сильными сторонами: возможностью дополнить теоретические исследования, когда математическая модель очень сложна и нелинейна, а также дополнить экспериментальные исследования, когда приборы дороги, данные недоступны для непосредственного измерения или явления очень сложны.

2. Принципы проведения вычислительного эксперимента

Отправным пунктом всех вычислительных экспериментов является некоторое физическое явление и их цель состоит в получении физически полезных результатов. Между этими двумя пунктами можно выделить ряд этапов, показанных на слайде 2.1.

Слайд 2.1. Постановка вычислительного эксперимента.

Каждый этап вносит свои ограничения. Как всегда, математическая формулировка представляет собой лишь приближённое описание физического явления. Поэтому учёный-вычислитель должен знать, какие упрощающие предположения сделаны, чтобы определить те случаи, когда справедливы эти уравнения, а следовательно, и его вычислительная модель.

Более строгие ограничения возникают на этапе перехода к дискретной алгебраической аппроксимации, на котором непрерывные дифференциальные или интегральные уравнения математической модели заменяются алгебраическими аппроксимациями для того, чтобы сделать возможным численное решение на компьютере. На этом этапе возникают вопросы о влиянии конечного временного шага, дискретных пространственных сеток и, в случае моделей частиц, конечного числа частиц. Метод дискретизации зависит от каждой конкретной задачи. Он должен учитывать все основные особенности точного решения математической модели, при минимальных вычислительных затратах.

В результате дискретизации возникают алгебраические системы уравнений (линейные или нелинейные), вид которых зависит от способа дискретизации. Хотя объём информации, который можно обработать с помощью компьютеров, велик, он тем не менее ограничен. Поэтому этот фактор должен всегда учитываться при построении вычислительных моделей. В настоящее время существует множество надёжных численных алгоритмов для решения систем уравнений. Во многих случаях можно воспользоваться библиотеками стандартных программ. Необходимо только

выбрать соответствующую процедуру с учётом свойств и структуры решаемой системы.

После того, как все вопросы, связанные с построением алгоритма решены, можно строить “прибор” – программу моделирования. При этом необходимо уделить достаточно внимания созданию правильно функционирующей программы. Качественно разработанная программа должна быть удобочитаемой, несложной в использовании и легко модифицируемой. Она должна иметь модульную структуру и встроенную диагностику и должна собираться только из проверенных программных компонентов. Полная программа должна быть испытана на известных задачах как для проверки алгоритма и кода, так и для определения параметров дискретизации, которые обеспечивают компромисс между качеством численного решения и вычислительными затратами.

Только когда испытания и “калибровка” завершены, “установку” можно считать готовой для проведения вычислительных экспериментов.

3. Пример: Моделирование движения тела под действием переменной силы

Лекция 7. Представление о языках программирования высокого уровня

В настоящее время, существует множество языков программирования. Наиболее популярными, в научно-технических и инженерных приложениях, являются языки Фортран и С. В этой лекции мы кратко рассмотрим возможности языка Фортран. Это обусловлено тем, что Фортран изначально был создан для научных и численных расчётов и всё его последующее развитие ориентировано прежде всего на подобные приложения.

Разработчики Фортран-программ имеют не только современные средства программирования, но и получают доступ к огромному фонду написанного на Фортране программного обеспечения. Созданные на Фортране математические, статистические, графические и иные библиотеки интенсивно используются в различных областях науки и техники.

1. Программирование на Фортране

1.1. Элементы языка

Операторы.

Объекты данных.

Имена.

Выражения и операции.

Присваивание.

Простой ввод-вывод.

1.2. Элементы программирования

Ветвление.

Цикл.

Цикл «с параметром».

Циклы «пока» и «до».

Использование функций.

Использование подпрограмм.

Использование модулей.

1.3. Организация данных

1.4. Массивы

Объявление массива.

Элементы массива.

Присваивание массивам значений.

Динамические массивы.

Атрибуты POINTER и ALLOCATABLE.

Операторы ALLOCATE и DEALLOCATE.

Умножение векторов и матриц.

1.5. Выражения, операции и присваивание

1.6. Встроенные процедуры

1.7. Управляющие операторы и конструкции

Оператор и конструкции IF.

Конструкция SELECT CASE.

DO-циклы. Операторы EXIT и CYCLE.

1.8. Программные единицы

Использование программных единиц в проекте.

Головная программа.

Внешние процедуры.

Внутренние процедуры.

Модули.

Оператор USE.

1.9. Форматный ввод-вывод

1.10. Файлы Фортрана

Лекция 8. Инструментальные среды и пакеты прикладных программ

В настоящее время научное программирование претерпевает серьезную трансформацию: развиваются интегрированные среды, основанные на алгоритмических языках, и растет применение универсальных математических систем (Maple, Mathematica, MATLAB, MatCad и др.). Эти системы имеют дружественный интерфейс, реализуют множество стандартных и специальных математических операций, снабжены мощными графическими средствами и обладают собственными языками программирования. Все это предоставляет широкие возможности для эффективной работы специалистов разных профилей, о чем говорит активное применение математических пакетов в научных исследованиях и в преподавании.

1. Система Maple

Пакет Maple – интерактивная программа, позволяющая проводить аналитические выкладки и вычисления, снабженная средствами двумерной и трехмерной графики, имеющая мощный язык программирования и богатую библиотеку математических формул и сведений. Работа с Maple заключается в том, что пользователь вводит математические выражения и инструкции (команды), а система пытается их выполнить и представить ответ. Получив (или не получив) ответ, пользователь вводит новые инструкции и так далее – взаимодействие с пакетом происходит в диалоговом режиме.

1.1. Основные объекты

Синтаксис и выражения.

Константы.

Переменные.

Переменные среды.

Строки и символы.

Команды.

Возможные ошибки.

Типы переменных.

Последовательность выражений – `exprseq`.

Список – `list`.

Множество – `set`.

Массив – `array`.

Таблица – table.

1.2. Аналитические преобразования в Maple

Структура выражений.

Операции с формулами.

1.3. Математический анализ в Maple

Пределы, суммы, ряды.

Исследование, разложение и приближение функций.

Дифференцирование и интегрирование.

1.4. Решение уравнений в Maple

Решение алгебраических уравнений и неравенств.

Обыкновенные дифференциальные уравнения.

Уравнения в частных производных.

1.5. Алгебра в Maple

Линейная алгебра.

Матрицы и векторы.

Работа со структурой матрицы и вектора.

Основные матричные и векторные операции.

Решение задач линейной алгебры.

Векторный анализ.

1.6. Графика Maple

Двумерная графика.

1.7. Программирование в Maple

Условные операторы.

Операторы цикла.

Функции, процедуры и модули.

Команды ввода/вывода.

2. Среда MATLAB

В настоящее время MATLAB фактически является стандартным расчётным средством и инструментом для многочисленных инженерных и технических разработок. Этому способствует богатая библиотека команд и свой язык программирования, дающий пользователю возможности автоматизации вычислений, в частности через добавление новых команд (функций) – *m*-файлов и подключение своих программ на языке C.

В состав MATLAB входят интерпретатор команд, графическая оболочка, редактор-отладчик, профилиёр, библиотеки команд, компилятор, символьное ядро пакета Maple для проведения аналитических вычислений, математические библиотеки MATLAB на C/C++, Web-сервер, генератор отчётов и богатый инструментарий (Toolboxes). По-прежнему поддерживая диалоговый режим для простых вычислений, MATLAB превратился в среду программирования математических и инженерных задач, включая разработку сложных программ с развитым графическим интерфейсом.

2.1. Элементы языка MATLAB

Синтаксис и данные.

- Задание матриц.

- Обращение к элементам матрицы.

- Арифметические операции.

- Логические операции.

- Текстовые строки.

- Многомерные массивы.

- Массивы ячеек.

- Структуры.

Элементы программирования.

- Условные операторы и циклы.

- Функции и файлы-источники.

2.2. Матричные вычисления

Операции над матрицами.

Линейная алгебра.

Решение систем линейных уравнений.

Спектр и сингулярное разложение.

Работа с разреженными матрицами.

2.3. Графика MATLAB

Двумерная графика.

Трёхмерная графика.

Специализированная графика.

2.4. Численный анализ в MATLAB

Работа с полиномами.

Решение уравнений и минимизация.

Численное дифференцирование и интегрирование.

Интерполяция и приближение функций.

Анализ и обработка данных.

Интегрирование дифференциальных уравнений.

Решение краевых задач.

Решение начально-краевых задач параболического типа.

2.5. Расширения MATLAB

Пакет Symbolic Math

SIMULINK.

Пакет PDE.

3. Библиотеки подпрограмм

Библиотека подпрограмм LAPACK для задач линейной алгебры

LAPACK (Linear Algebra PACKage) представляет собой библиотеку подпрограмм для решения наиболее часто встречающихся задач линейной алгебры. Имеются две версии этой библиотеки: на языках Fortran 77(90) и C. Библиотека LAPACK не является коммерческим продуктом и может быть загружена из архива Netlib (www.netlib.org/lapack). Она включает в себя подпрограммы для

- решения систем линейных уравнений;
- нахождения решения переопределённых систем линейных уравнений

в смысле наименьших квадратов;

- решения задач на собственное значение.

Подпрограммы в библиотеке LAPACK подразделяются на три типа:

1) *подпрограммы верхнего уровня* решают некоторую задачу, как, например, нахождение решения системы линейных уравнений или собственных значений матрицы;

2) *подпрограммы верхнего уровня с дополнительными возможностями* обеспечивают больше возможностей/информации по сравнению с подпрограммами верхнего уровня. Например, они позволяют оценить точность полученного решения или сбалансировать матрицу для повышения точности;

3) *подпрограммы нижнего уровня* вызываются подпрограммами верхнего уровня и выполняют определённые вычислительные процедуры, как, например, LU-разложение или приведение вещественной симметричной матрицы к трёхдиагональной матрице

Библиотека подпрограмм IMSL®

Библиотека IMSL (International Mathematics and Statistics Libraries) широко используется на практике и включает в себя библиотеки численных алгоритмов для языков C, Fortran 90, Fortran 77 и Java.

Библиотека IMSL C (CNL)

Библиотека CNL написана на языке C на основе подпрограмм из библиотеки IMSL Fortran. Весия 4.0 этой библиотеки содержит более 300 математических и статистических алгоритмов.

Библиотека IMSL Fortran 90 MP (F90 MP)

Эта библиотека основана на алгоритмах оптимизированных для использования в многопроцессорных системах. Библиотека F90 MP включает в себя:

- функциональные модули для объектно-ориентированного программирования;
- подпрограммы, написанные на языке Fortran 90, для более эффективного выполнения программ;

- библиотеку IMSL Fortran 77.

Библиотека IMSL for Java (JNL)

Библиотека JNL включает в себя функции, отсутствующие в языке Java: класс численного типа, комплексный класс и три класса численных функций (класс специальных функций, класс линейной алгебры и класс статистики).

Библиотека IMSL Fortran 77 (FNL)

Библиотека FNL состоит из более чем 900 подпрограмм, написанных на языке Fortran 77, предназначенных для решения широкого класса задач прикладной математики и статистического анализа. Все ведущие производители компиляторов языка Fortran включают эту библиотеку в состав своих программных продуктов.

Библиотеки подпрограмм «Группы по численным алгоритмам» (NAG[®], The Numerical Algorithms Group)

Библиотека NAG f190

Библиотека NAG f190 состоит из более чем 200 основных подпрограмм, реализующих различные алгоритмы. Все подпрограммы написаны на языке Fortran 90/95, что даёт простой и эффективный инструмент для научных и инженерных расчётов.

Библиотека NAG C (Mark 5)

Библиотека The NAG C содержит около 400 процедур, предназначенных для решения различных вычислительных задач. Вычислительные функции библиотеки NAG C имеют два имени: короткое, состоящее из шести знаков, и более длинное, описательное, например, f02awc или nag_hermitian_eigenvalues. Все процедуры этой библиотеки используют вычисления с двойной точностью.

Лекция 9. Численные методы

1. Вычисления с плавающей точкой

Компьютерная арифметика отличается от привычной нам арифметики. В традиционной математике числа могут иметь бесконечное число цифр. В компьютерной арифметике – каждое допустимое число имеет конечное число цифр. Входные данные и результаты арифметических операций помещаются в оперативную память компьютера в определённой форме. Вещественные числа представляются в следующей стандартной форме (форма с плавающей точкой):

$$x = \pm b^c m_b. \quad (9.1)$$

Здесь x – вещественное число, b есть основание системы счисления (обычно используются основания 2, 8 и 16), c – характеристика, m_b – мантисса (она определяет дробную часть числа), а \pm – знак числа x . Мантисса числа $x \neq 0$ удовлетворяет условию

$$\frac{1}{b} \leq m_b < 1,$$

что обеспечивает единственность представления (9.1). Любое вещественное число можно представить в форме с плавающей точкой, и это может быть сделано в любой системе счисления с основанием $b > 0$. Однако некоторые вещественные числа (например иррациональные) невозможно записать в оперативную память компьютера точно. Все числа, которые могут быть помещены в оперативную память, представляются там в определённом виде. При этом их характеристики ограничены: $c_m \leq c \leq c_p$, а мантиссы имеют вид конечных дробей по основанию b :

$$m_b = \frac{a_1}{b} + \frac{a_2}{b^2} + \dots + \frac{a_k}{b^k},$$

где коэффициенты a_n удовлетворяют условиям $1 \leq a_1 \leq b-1$, $0 \leq a_n \leq b-1$, $n = 2, \dots, k$.

Для простоты, числа, которые могут быть помещены в оперативную память, будем называть *машинными числами*, и они образуют конечное подмножество множества вещественных чисел. Для описания машинных чисел мы ввели параметры b , c_m , c_p и k , но использовать эти параметры на практике не очень удобно. Обычно для описания машинных чисел вводится другой набор параметров: b , ε_0 , ε_1 , и ε_∞ . Эти параметры, как и предыдущие, зависят от конкретного компьютера и определяются следующим образом:

$$\varepsilon_0 = b^{c_m-1}, \quad \varepsilon_1 = b^{1-k}, \quad \varepsilon_\infty = b^{c_p}(1-b^{-k}).$$

Эти параметры имеют следующие значения: ε_∞ – максимальное машинное число, ε_0 – минимальное машинное число, ε_1 – минимальное расстояние между двумя машинными числами на интервале от 1 до b . Параметр ε_1 также называют относительной ошибкой определения единицы, так как все числа вида $1+x$ из интервала $[1, 1+\varepsilon_1]$ заменяются машинным числом 1 с ошибкой, не превосходящей ε_1 . Следовательно, интервалы $(-\infty, -\varepsilon_\infty)$, $(-\varepsilon_0, 0)$, $(0, \varepsilon_0)$, $(1-\varepsilon_1/b, 1)$, $(1, 1+\varepsilon_1)$ и $(\varepsilon_\infty, \infty)$ не содержат машинных чисел. Наряду со стандартной точностью, существует возможность более точного представления машинных чисел. Это можно осуществить, увеличив число цифр в мантиссе, и расширив область допустимых значений характеристик. Тогда машинные числа с повышенной точностью будут определяться некоторыми параметрами

$$b, c_m^*, c_p^*, k^*.$$

Например, определяющие параметры для РС представлены в таблице 9.1.

Таблица 9.1

	ОДИНАРНАЯ ТОЧНОСТЬ	ДВОЙНАЯ ТОЧНОСТЬ
	2	2
m	-125	-1021
p	128	1024
	24	53
0	2^{-126}	2^{-1022}
1	2^{-23}	2^{-52}
∞	$2^{128}(1-2^{-24})$	$2^{1024}(1-2^{-53})$

Если число $x \in [-\varepsilon_\infty, \varepsilon_\infty]$, то оно заменяется машинным числом x_m . В процессе такой замены используется какой-нибудь способ приближения (усечение или округление) и в качестве x_m выбирается ближайшее к x число. В результате такой замены возникает ошибка $x - x_m$. Для $\varepsilon_0 \leq |x| \leq \varepsilon_\infty$ эта ошибка оценивается величиной $\varepsilon_1|x|$, то есть $|x - x_m| \leq \varepsilon_1|x|$. Если $|x| \in (0, \varepsilon_0)$, тогда x_m может принимать одно из двух значений: 0 или ε_0 , и понятно, что в обоих случаях $|x - x_m| \leq \varepsilon_0|x|$. Поэтому параметр ε_0 также называют абсолютной ошибкой определения нуля. Эти оценки можно объединить в следующее выражение:

$$x_m = x(1 + \alpha) + \beta, \quad |\alpha| \leq \varepsilon_1, \quad |\beta| \leq \varepsilon_0, \quad (9.2)$$

которое справедливо для всех $x \in [-\varepsilon_\infty, \varepsilon_\infty]$.

На компьютерах арифметические операции выполняются над машинными числами. Во многих случаях результат этих операций может не быть машинным числом, или, другими словами, результат арифметической операции (машинный результат), будучи машинным числом, может не совпадать с точным результатом. Например, для точного представления частного двух машинных чисел a и b часто требуется бесконечное количество цифр мантииссы. Поэтому, машинный результат отличается от точного результата деления a на b . Для дальнейшего анализа введём следующее правило компьютерной арифметики: машинный результат арифметической операции над двумя машинными числами можно представить как результат записи точного значения этой операции в память компьютера. Для того чтобы отличать машинные операции от обычных

(точных) операций, будем обозначать их таким же знаком в угловых скобках. Тогда, согласно принятому выше правилу, можно записать

$$\begin{aligned}
 a\langle + \rangle b &= (a + b)_m, \\
 a\langle - \rangle b &= (a - b)_m, \\
 a\langle \times \rangle b &= (a \times b)_m, \\
 a\langle / \rangle b &= (a / b)_m.
 \end{aligned} \tag{9.3}$$

Формулы (9.3) имеют следующий смысл: машинный результат арифметической операции есть ближайшее к точному результату машинное число. Машинный результат также зависит от типа операции и чисел a и b . Например, если точный результат лежит вне интервала допустимых в компьютере чисел (результат не принадлежит $[-\varepsilon_\infty, \varepsilon_\infty]$), то сталкиваемся с ситуацией, называемой переполнением порядка. Эту ситуацию компьютер трактует как фатальную ошибку, и дальнейшие вычисления прекращаются. В правильно работающей программе такие ситуации должны быть исключены. Если абсолютное значение точного результата меньше чем ε_0 , то возникает ситуация, называемая исчезновением порядка, и хотя это не является фатальной ошибкой, такая ситуация также нежелательна.

Объединяя выражения (9.2) и (9.3), получим формулы для моделирования ошибок арифметических операций

$$\begin{aligned}
 a\langle + \rangle b &= (a + b)_m = (a + b)(1 + \alpha) + \beta, \\
 a\langle - \rangle b &= (a - b)_m = (a - b)(1 + \alpha) + \beta, \\
 a\langle \times \rangle b &= (a \times b)_m = (ab)(1 + \alpha) + \beta, \\
 a\langle / \rangle b &= (a / b)_m = (a / b)(1 + \alpha) + \beta.
 \end{aligned}$$

Эти формулы приводят к следующей оценке для ошибки, возникающей при выполнении операций с плавающей точкой:

$$|a\langle * \rangle b - (a * b)| \leq \varepsilon_0 + \varepsilon_1 |a * b|,$$

где $*$ обозначает любую из четырёх арифметических операций. Эта оценка может использоваться для анализа поведения ошибки при реализации различных вычислительных алгоритмов. Это очень важный вопрос, так как

часто возникает ситуация, когда при выполнении некоторого вычислительного процесса происходит накопление ошибки, что приводит к значительному искажению конечного результата. Например, если предположить, что $\beta = 0$, тогда ошибка вычисления

$$\prod_{n=1}^N a_n$$

может быть оценена как

$$\left| a_1 \langle \times \rangle a_2 \langle \times \rangle \dots \langle \times \rangle a_N - \prod_{n=1}^N a_n \right| \leq \varepsilon_1 (N-1) \prod_{n=1}^N |a_n|.$$

2. Численное решение систем уравнений

Для решения алгебраических систем уравнений, которые возникают в результате дискретизации, используются различные численные процедуры. Наиболее часто такие системы возникают при решении стационарных уравнений. В качестве примеров рассмотрим следующие уравнения:

1) неоднородное уравнение Гельмгольца с переменными коэффициентами

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(a(\mathbf{x}) \frac{\partial u}{\partial x_k} \right) + b(\mathbf{x}) u = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D, \quad (9.4)$$

здесь $\mathbf{x}^0 = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$;

2) нелинейное уравнение вида

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(a(u) \frac{\partial u}{\partial x_k} \right) = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D. \quad (9.5)$$

Пусть G есть граница области D , тогда уравнения дополняются граничными условиями

$$\left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} + \beta u \right) \Big|_{\mathbf{x} \in G} = g(\mathbf{x}).$$

Для простоты будем рассматривать двумерные задачи. После дискретизации получается следующая система уравнений:

$$c_{n,m-1}^{(1)}u_{n,m-1} + c_{n-1,m}^{(2)}u_{n-1,m} - c_{n,m}^{(3)}u_{n,m} + c_{n,m}^{(2)}u_{n+1,m} + c_{n,m}^{(1)}u_{n,m+1} = f_{n,m}, \quad (9.6)$$

$$n = 1, \dots, N-1; m=1, \dots, M-1.$$

Одним из популярных методов является метод последовательной верхней релаксации (SOR). Метод SOR можно применять только для решения определённого типа задач, для которых известно, что метод сходится и можно определить оптимальное значение параметра релаксации. Таким типом, например, являются уравнения вида (9.4) с граничными условиями Дирихле при $b(\mathbf{x}) \leq 0$. Пусть на границе задано граничное условие Дирихле. Тогда итерационная схема SOR для системы уравнений (9.6) может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} u_{0,m}^{(k+1)} &= g_1(y_m), \quad u_{N,m}^{(k+1)} = g_3(y_m), \quad m = 0, \dots, M, \\ u_{n,0}^{(k+1)} &= g_2(x_n), \quad u_{n,M}^{(k+1)} = g_4(x_n), \quad n = 0, \dots, N, \end{aligned} \quad (9.7)$$

$$\begin{aligned} u_{n,m}^{(k+1)} &= -\frac{\omega_k}{c_{n,m}^{(3)}} \left(c_{n,m-1}^{(1)}u_{n,m-1}^{(k+1)} + c_{n-1,m}^{(2)}u_{n-1,m}^{(k+1)} + c_{n,m}^{(2)}u_{n+1,m}^{(k)} + c_{n,m}^{(1)}u_{n,m+1}^{(k)} - f_{n,m} \right) + (1 - \omega_k)u_{n,m}^{(k)}, \\ n &= 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1; \quad k = 0, \dots \end{aligned}$$

Итерации начинаются с некоторого начального решения $\mathbf{u}^{(0)}$ и продолжаются до тех пор, пока не выполнится условие

$$\frac{\|\mathbf{u}^{(k+1)} - \mathbf{u}^{(k)}\|_2}{\|\mathbf{u}^{(k+1)}\|_2} \leq \varepsilon,$$

где ε — заданная точность. Напомним, что сходимость итерационного процесса определяется максимальным по модулю собственным значением (спектральным радиусом) итерационной матрицы

$$s(\mathbf{B}) = \max_p |\lambda_p(\mathbf{B})|.$$

При этом относительная ошибка

$$\frac{\|\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{(k)}\|_2}{\|\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{(0)}\|_2} \sim s^k(\mathbf{B}),$$

где \mathbf{u}^* обозначает точное решение системы уравнений. В методе SOR $s(\mathbf{B})$ зависит от параметра ω , который называется параметром релаксации. Если метод сходится, то существует такое значение $\omega = \omega_{\text{opt}}$, при котором $s(\omega)$ имеет минимум.

Рассмотрим свойства метода SOR на примере модельной задачи с $a(x,y) = \text{const}$, $b(x,y) = 0$ в квадрате $\{0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$ и граничными условиями $u(0,y) = u(1,y) = u(x,0) = u(x,1) = 0$. В этом случае параметр релаксации в схеме (9.7) задаётся как

$$\omega_k = \omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sin\left(\frac{\pi}{N}\right)}$$

и спектральный радиус –

$$s(\mathbf{B}_{\text{SOR}}) = \frac{1 - \sin\left(\frac{\pi}{N}\right)}{1 + \sin\left(\frac{\pi}{N}\right)}.$$

Это выражение показывает, что при увеличении N сходимость метода замедляется, так как $s(\mathbf{B}_{\text{SOR}})$ приближается к единице. Число итераций k , необходимое для уменьшения ошибки начального приближения в 10^p раз, при больших значениях N , когда $\pi/N \ll 1$, равно

$$k = \left\lceil \frac{p \cdot \ln(10)}{2\pi} N \right\rceil \approx \left\lceil \frac{p}{3} N \right\rceil.$$

Таким образом, если требуется точность 10^{-3} ($p = 3$), то число итераций приближённо равно количеству сеточных узлов в каждом направлении. Для достижения точности 10^{-6} необходимо удвоить это число итераций.

Применять метод SOR для решения задач, подобных рассмотренной нами модельной задаче, не имеет смысла, так как для такого сорта задач существуют более эффективные методы. Итерационные методы обычно

применяются для решения уравнений с переменными коэффициентами в областях сложной формы. Однако в этом случае получить аналитические выражения для спектрального радиуса невозможно. Тогда можно начать вычисления с некоторым значением ω , скажем $\omega = 1$, и одновременно с вычислением приближённого решения уточнять это значение, используя степенной метод для определения спектрального радиуса.

Если область определения задачи является прямоугольником или параллелепипедом, а граничные условия имеют специальный вид, то можно использовать методы, основанные на быстром преобразовании Фурье (FFT, Fast Fourier Transform). Рассмотрим, например, двумерную область $\{0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y\}$. Под специальными граничными условиями будем понимать одно из следующих условий:

$$u(0, y) = u(l_x, y) \text{ – периодическое условие,} \quad (9.8)$$

$$u(0, y) = g_1(y) \text{ и } u(l_x, y) = g_3(y) \text{ – условие Дирихле,} \quad (9.9)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, y) = g_1(y) \text{ и } \frac{\partial u}{\partial x}(l_x, y) = g_3(y) \text{ – условие Неймана,} \quad (9.10)$$

$$u(x, 0) = u(x, l_y), \quad (9.11)$$

$$u(x, 0) = g_2(x) \text{ и } u(x, l_y) = g_4(x), \quad (9.12)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x, 0) = g_2(x) \text{ и } \frac{\partial u}{\partial y}(x, l_y) = g_4(x). \quad (9.13)$$

В случае трёхмерных уравнений специальные граничные условия определяются аналогичным образом.

Пусть коэффициенты уравнения (9.4) постоянны: $a(x, y) = a$ и $b(x, y) = b$, область определения – прямоугольник $\{0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y\}$, а граничные условия имеют вид

$$u(0, y) = u(l_x, y) = 0, \\ \alpha_1 u(x, 0) + \alpha_2 \frac{\partial u}{\partial y}(x, 0) = g_2(x),$$

$$\alpha_3 u(x, l_y) + \alpha_4 \frac{\partial u}{\partial y}(x, l_y) = g_4(x).$$

Тогда система уравнений (9.6) примет вид

$$c_1 u_{n,m-1} + c_2 u_{n-1,m} - c_3 u_{n,m} + c_2 u_{n+1,m} + c_1 u_{n,m+1} = f_{n,m}, \quad (9.14)$$

$$n = 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1;$$

$$u_{0,m} = u_{N,m} = 0, \quad m = 0, \dots, M, \quad (9.15)$$

$$\begin{cases} c_2 u_{n-1,0} - \left(c_3 - \frac{2c_1 \alpha_1 h_y}{\alpha_2} \right) u_{n,0} + c_2 u_{n+1,0} + 2c_1 u_{n,1} u_{n,1} = \\ = f_{n,0} + \frac{2c_1 h_y}{\alpha_2} g_2(x_n), \quad \alpha_2 \neq 0, \\ u_{n,0} = \frac{1}{\alpha_1} g_2(x_n), \quad \alpha_2 = 0, \end{cases} \quad (9.16)$$

$$n = 1, \dots, N-1;$$

$$\begin{cases} 2c_1 u_{n,M-1} + c_2 u_{n-1,M} - \left(c_3 + \frac{2c_1 \alpha_3 h_y}{\alpha_4} \right) u_{n,M} + c_2 u_{n+1,M} = \\ = f_{n,M} - \frac{2c_1 h_y}{\alpha_4} g_4(x_n), \quad \alpha_4 \neq 0, \\ u_{n,M} = \frac{1}{\alpha_3} g_4(x_n), \quad \alpha_4 = 0, \end{cases} \quad (9.17)$$

$$m = 1, \dots, M-1.$$

Для этого типа граничных условий решение можно представить в виде конечного ряда Фурье:

$$u_{n,m} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} v_{k,m} \sin\left(\frac{\pi k n}{N}\right), \quad m = 0, \dots, M. \quad (9.18)$$

Правую часть уравнения также можно представить в виде

$$f_{n,m} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} d_{k,m} \sin\left(\frac{\pi kn}{N}\right), \quad m = 0, \dots, M, \quad (9.19)$$

и коэффициенты $d_{k,m}$ вычисляются по формуле

$$d_{k,m} = \sum_{n=1}^{N-1} f_{n,m} \sin\left(\frac{\pi kn}{N}\right), \quad m = 0, \dots, M. \quad (9.20)$$

В дальнейшем, операцию вида (7.23) мы будем обозначать как

$$d_{k,m} = F_n(f_{n,m}),$$

где n указывает на параметр, по которому происходит суммирование.

Подстановка выражений (9.18) и (9.19) в уравнения (7.17) и граничные условия (9.16) и (9.17) приводит к системе уравнений с трёхдиагональной матрицей для определения $v_{k,m}$. Эффективность данного метода определяется эффективностью вычисления преобразования $F_n(\dots)$. Рассматриваемый нами метод имеет широкое применение благодаря тому, что при $N = 2^p$ существует алгоритм, который позволяет вычислить преобразование $F_n(\dots)$ за $O(\log_2(N))$ операций. Этот алгоритм носит название быстрое преобразование Фурье (FFT, Fast Fourier Transform). В настоящее время процедура вычисления FFT является стандартной и входит в состав всех инструментальных сред и библиотек программ.

Построение метода для других типов специальных граничных условий производится аналогичным образом. Дискретное преобразование Фурье в общем виде можно представить в следующей форме

$$u_{n,m} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^N v_{k,m} \varphi_{k,n}, \quad m = 0, \dots, M,$$

где

$$\varphi_{k,n} = \sin\left(\frac{\pi kn}{N}\right) - \text{для граничных условий (9.9),}$$

$$\varphi_{k,n} = \cos\left(\frac{\pi kn}{N}\right) \begin{cases} 1/2, & k = 0, \quad k = N, \\ 1, & 0 < k < N, \end{cases} - \text{для граничных условий (9.10)}$$

и

$$\varphi_{k,n} = \exp\left(-2\pi i k n / N\right) - \text{для граничных условий (9.8)}.$$

Все эти преобразования вычисляются с использованием алгоритма FFT.

Таким образом, методы, основанные на FFT, применяются для решения двумерного уравнения (9.4) с постоянными коэффициентами, граничными условиями (9.8)–(9.10) по x и граничными условиями общего вида по y . Решение уравнения с граничными условиями (9.11)–(9.13) по y и граничными условиями общего вида по x осуществляется совершенно аналогичным образом. Рассмотренный метод можно использовать для задачи (9.4) с постоянными коэффициентами и в трёхмерном случае, выполняя двойное преобразование Фурье по тем координатам, для которых заданы граничные условия специального вида.

Решение стационарной задачи можно рассматривать как равновесное состояние, к которому приближается решение некоторой нестационарной задачи. Поэтому иногда удобнее и эффективнее, с вычислительной точки зрения, решать такую нестационарную задачу, чем непосредственно искать решение исходной стационарной задачи. Такой подход называется методом установления. Рассмотрим, например, модельную задачу

$$a\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = f(x, y), \quad \{0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y\}, \quad (9.21)$$

$$u(0, y) = g_1(y) \quad \text{и} \quad u(l_x, y) = g_3(y),$$

$$u(x, 0) = g_2(x) \quad \text{и} \quad u(x, l_y) = g_4(x).$$

Сформулируем соответствующую нестационарную задачу, которая может быть записана в следующей форме:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = a\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right) - f(x, y), \quad \{0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y\}, \quad (9.22)$$

$$v(x, y, 0) = g(x, y),$$

$$v(0, y) = g_1(y) \quad \text{и} \quad v(l_x, y) = g_3(y),$$

$$v(x, 0) = g_2(x) \quad \text{и} \quad v(x, l_y) = g_4(x),$$

где функция $g(x, y)$ задаёт произвольные начальные условия. Так как граничные условия не зависят от времени, то естественно ожидать, что решение $v(x, y, t)$ с течением времени будет меняться всё медленнее и медленнее. Поэтому в пределе $t \rightarrow \infty$ это решение будет стремиться к решению задачи (9.21), то есть

$$\lim_{t \rightarrow \infty} v(x, y, t) = u(x, y).$$

Следовательно, вместо стационарной задачи (9.21) можно решать нестационарную задачу (9.22) до некоторого момента времени t , когда решение $v(x, y, t)$ перестанет изменяться в пределах заданной точности. Это и есть основная идея метода установления.

Очень часто возникает необходимость решения систем линейных уравнений с трехдиагональной матрицей. Для этой цели существует простой и эффективный метод, называемый *методом прогонки*. Для удобства запишем систему уравнений с трехдиагональной матрицей в виде

$$\begin{aligned} b_1 x_1 + c_1 x_2 &= f_1, \\ a_n x_{n-1} + b_n x_n + c_n x_{n+1} &= f_n, \quad n = 2, \dots, N-1, \\ a_N x_{N-1} + b_N x_N &= f_N. \end{aligned} \tag{9.23}$$

Предположим, что мы можем записать следующее рекуррентное соотношение для компонент вектора решения:

$$x_n = \alpha_n x_{n+1} + \beta_n, \tag{9.24}$$

по крайней мере, это возможно для первого уравнения. Пусть коэффициенты α_{n-1} и β_{n-1} известны, тогда мы можем записать

$$\begin{aligned} x_{n-1} &= \alpha_{n-1} x_n + \beta_{n-1}, \\ a_n x_{n-1} + b_n x_n + c_n x_{n+1} &= f_n. \end{aligned}$$

После исключения x_{n-1} из этих двух соотношений получим

$$x_n = -\frac{c_n}{a_n\alpha_{n-1} + b_n}x_{n+1} + \frac{f_n - a_n\beta_{n-1}}{a_n\alpha_{n-1} + b_n}.$$

Сравнивая это соотношение с (9.24), видим, что коэффициенты α_n и β_n могут быть вычислены по формулам

$$\alpha_n = -\frac{c_n}{a_n\alpha_{n-1} + b_n}, \quad \beta_n = \frac{f_n - a_n\beta_{n-1}}{a_n\alpha_{n-1} + b_n}, \quad n = 2, \dots, N,$$

$$\alpha_1 = -\frac{c_1}{b_1}, \quad \beta_1 = \frac{f_1}{b_1}.$$

После того, как параметры α_n и β_n вычислены, решение системы (9.23) может быть легко получено. В начале запишем соотношение (9.24) для $n = N-1$ и последнее уравнение (9.23):

$$x_{N-1} = \alpha_{N-1}x_N + \beta_{N-1}, \quad a_Nx_{N-1} + b_Nx_N = f_N.$$

Исключение x_{N-1} дает

$$x_N = \frac{f_N - a_N\beta_{N-1}}{a_N\alpha_{N-1} + b_N}.$$

Остальные компоненты x_n вычисляются с использованием формулы (9.24) для $n = N-1, \dots, 1$. Метод прогонки в полной мере учитывает ленточную структуру матрицы, поэтому этот метод требует всего лишь $N_{\text{ops}} = 8N - 6$. Метод прогонки будет устойчив при выполнении условий

$$b_1 \neq 0, \quad b_N \neq 0,$$

$$a_n \neq 0, \quad c_n \neq 0, \quad n = 2, \dots, N-1,$$

$$a_n \neq 0, \quad c_n \neq 0, \quad n = 2, \dots, N-1,$$

$$|b_n| \geq |a_n| + |c_n|, \quad n = 2, \dots, N-1,$$

$$|b_1| \geq |c_1|, \quad |b_N| \geq |a_N|,$$

где по крайней мере одно из неравенств из последней строки есть строгое неравенство.

• *асимптотически устойчивым* тогда и только тогда, когда все собственные значения матрицы A имеют отрицательные вещественные части.

Для нелинейной задачи (10.2) можно провести локальный линейный анализ для того, чтобы проследить развитие малых возмущений. Если представить возмущённое решение в виде $\mathbf{u}^*(x) = \mathbf{u}(x) + \mathbf{v}(x)$, где $\mathbf{u}^*(a)$ близко к $\mathbf{u}(a)$, то можно пренебречь слагаемым более высокой степени малости $\mathbf{g}(x, \mathbf{u}, \mathbf{v})$ в разложении

$$\mathbf{f}(x, \mathbf{u}^*) = \mathbf{f}(x, \mathbf{u} + \mathbf{v}) = \mathbf{f}(x, \mathbf{u}) + F(x, \mathbf{u})\mathbf{v} + \mathbf{g}(x, \mathbf{u}, \mathbf{v}),$$

и рассматривать линейное уравнение

$$\frac{d\mathbf{v}}{dx} = \frac{d\mathbf{u}^*}{dx} - \frac{d\mathbf{u}}{dx} = \mathbf{f}(x, \mathbf{u}^*) - \mathbf{f}(x, \mathbf{u}) = F(x, \mathbf{u})\mathbf{v}$$

относительно \mathbf{v} с матрицей Якоби

$$F(x, \mathbf{u}) = \left\{ \frac{\partial f_n}{\partial x_m}(x, \mathbf{u}) \right\}.$$

Прежде чем описывать численные методы решения задачи (10.1), рассмотрим один из методов анализа устойчивости разностных схем для задачи Коши.

1. Необходимое условие устойчивости разностных схем для линейных задач

При решении задачи Коши компоненты сеточной функции $\mathbf{u}^{(a)}$ вычисляются последовательно в узлах сетки. Если оценивать рост решения после каждого такого перехода, то получим некоторую процедуру исследования устойчивости. Вначале рассмотрим метод исследования устойчивости разностных схем для модельного уравнения

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx} &= -\gamma u, \quad \gamma > 0, \quad x \geq 0, \\ u(0) &= \alpha. \end{aligned} \tag{10.3}$$

Любая разностная схема для этого уравнения может быть записана в следующей канонической форме:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{R}\mathbf{y}_n, \quad n = 0, \dots, N-1, \tag{10.4}$$

y_0 задано, y_n (в общем случае это вектор) зависит от $u^{(a)}$, и $R = R(h)$ называется оператором перехода (в общем случае это матрица). Тогда необходимое условие устойчивости разностной схемы для задачи (10.3):

$$s(R) = \max_m |\lambda_m(R)| \leq 1, \quad (10.5)$$

где $\lambda_m(R)$ – собственные значения оператора перехода R .

2. Методы Рунге-Кутты

В общем виде явные схемы Рунге-Кутты (РК) строятся следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{u_{n+1}^{(a)} - u_n^{(a)}}{h} &= b_1 k_1 + \dots + b_s k_s, \quad n = 0, \dots, N-1, \\ k_1 &= f(x_n, u_n^{(a)}), \\ k_2 &= f(x_n + c_2 h, u_n^{(a)} + a_{21} h k_1), \\ k_3 &= f(x_n + c_3 h, u_n^{(a)} + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)), \\ &\dots \\ k_s &= f\left(x_n + c_s h, u_n^{(a)} + h \sum_{m=1}^{s-1} a_{sm} k_m\right), \end{aligned} \quad (10.6)$$

где s есть число стадий и $b_1, c_1, a_{l,m}$ – некоторые вещественные параметры. Задавая число стадий, можно определить эти параметры таким образом, чтобы достичь наивысшего возможного порядка аппроксимации. Схемы Рунге–Кутты (10.6) часто представляются символически в виде таблицы Бучера (Butcher):

0	0				
c_2	$a_{2,1}$				
c_3	$a_{3,1}$	$a_{3,2}$			
\cdot	\cdot	\cdot	\cdot		
c_s	$a_{s,1}$	$a_{s,2}$	\dots	$a_{s,s-1}$	
	b_1	b_2	\dots	b_{s-1}	b_s

Существует семейство схем РК для каждого порядка аппроксимации. Теперь мы имеем четыре неизвестных, но три уравнения, поэтому один параметр можно выбрать произвольно. Примеры схем второго порядка:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 1 & 1 \\ \hline & 1/2 \quad 1/2 \end{array}, \quad \begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 2/3 & 2/3 \\ \hline & 1/4 \quad 3/4 \end{array}.$$

Пример схемы третьего порядка:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 1/2 & 1/2 \\ \hline 3/4 & 0 \quad 3/4 \\ \hline & 2/9 \quad 1/3 \quad 4/9 \end{array}.$$

Примеры схем четвёртого порядка:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 1/2 & 1/2 \\ \hline 1/2 & 0 \quad 1/2 \\ \hline 1 & 0 \quad 0 \quad 1 \\ \hline & 1/6 \quad 2/6 \quad 2/6 \quad 1/6 \end{array}, \quad \begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 1/3 & 1/3 \\ \hline 2/3 & -1/3 \quad 1 \\ \hline 1 & 1 \quad -1 \quad 1 \\ \hline & 1/8 \quad 3/8 \quad 3/8 \quad 1/8 \end{array}.$$

Явные схемы Рунге-Кутты условно устойчивы.

3. Методы Адамса.

Для того чтобы получить u_{n+1} при заданном u_n , используя схему Рунге – Кутты, необходимо вычислить функцию $f(x, u)$ s раз в некоторых промежуточных точках. Эти вычисленные значения далее больше не используются. В схемах Адамса, для вычисления следующего значения u_{n+1} используется не только значение u_n , но и несколько предыдущих значений. В дополнение, вычисление значения u_{n+1} требует только одного вычисления функции $f(x, u)$ независимо от порядка разностной схемы. Схемы Адамса могут быть построены следующим образом. Пусть $u(x)$ есть решение задачи (10.1). Введём обозначение $f(x, u(x)) = F(x)$, тогда

$$u(x_{n+1}) - u(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{du}{dx} dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} F(x) dx.$$

Известно, что существует единственный полином $P_k(x)$ степени не выше чем k , принимающий в точках $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-k}$ заданные значения $F(x_n), F(x_{n-1}), \dots, F(x_{n-k})$, соответственно. Для достаточно гладкой функции $F(x)$ такой полином отклоняется от $F(x)$ на интервале $[x_n, x_{n+1}]$ на величину порядка h^{k+1} , то есть

$$\max_x |P_k(x) - F(x)| = O(h^{k+1}).$$

Тогда явные схемы Адамса имеют следующий вид:

$$u_{n+1}^{(a)} - u_n^{(a)} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} P_k(x) dx. \quad (10.7)$$

В общем, явные схемы Адамса могут быть представлены в виде

$$\frac{u_{n+1}^{(a)} - u_n^{(a)}}{h} = \sum_{k=0}^{p-1} a_k f(x_{n-k}, u_{n-k}^{(a)}), \quad n = p-1, \dots, N-1, \quad (10.8)$$

где параметры a_k приведены в таблице 10.1.

Таблица 10.1

Коэффициенты для явных схем Адамса

ПОРЯДОК АППРОКСИМАЦИИ, P	$A_K, \quad K = 0, \dots, P-1$			
1	1			
2	3/2	-1/2		
3	23/12	-16/12	5/12	
4	55/24	-59/24	37/24	-9/24

Для того чтобы начать вычисления по схеме (10.8), когда $p \geq 2$, необходимо знать p значений

$$u_m^{(a)}, \quad m = 0, \dots, p-1,$$

но только

$$u_0^{(a)} = \alpha$$

задано. Эти недостающие значения могут быть вычислены либо по схеме Рунге – Кутта соответствующего порядка, либо разложением решения в ряд Тейлора в точке $x = a$.

Одной из особенностей методов Адамса является то, что для определения u_{n+1} , необходимо вычислить только значение $f(x_n, u_n)$, так как значения $f(x_{n-1}, u_{n-1})$, $f(x_{n-2}, u_{n-2})$, ... уже были вычислены в процессе определения u_n, u_{n-1}, \dots . Таким образом, преимущество схем Адамса над схемами Рунге – Кутта состоит в том, что они требуют меньшего количества операций на один шаг вычислительного процесса. Основные недостатки схем Адамса:

1) требуется специальная процедура для вычисления дополнительных начальных значений, вычислительная схема усложняется при неравномерном шаге разностной сетки;

2) использование переменного шага необходимо в областях резкого изменения решения;

3) условия устойчивости, что явные схемы Адамса имеют более строгие ограничения на шаг разностной сетки по сравнению со схемами Рунге-Кутта.

Если мы будем использовать точку x_{k+1} для построения полинома $P_k(x)$ в формуле (10.7), то получим неявные схемы Адамса. Они могут быть представлены в следующей форме:

$$\frac{u_{n+1}^{(a)} - u_n^{(a)}}{h} = \sum_{k=0}^{p-1} b_k f(x_{n+1-k}, u_{n+1-k}^{(a)}), \quad (10.9)$$

$$n = \begin{cases} 0, \dots, N-1, & p = 1, 2; \\ p-2, \dots, N-1, & p = 3, 4, \dots, \end{cases}$$

где параметры b_k приведены в таблице 10.2.

Таблица 10.2

Коэффициенты для неявных схем Адамса

ПОРЯДОК	$B_k, \quad K = 0, \dots, P-1$
АППРОКСИМАЦИИ,	

Р				
1	1			
2	1/2	1/2		
3	5/12	8/12	-1/12	
4	9/24	19/24	-5/24	1/24

Неявные схемы Адамса дают более точные результаты, чем явные схемы того же порядка. В дополнение, неявные схемы имеют менее строгие ограничения на шаг разностной сетки по сравнению с явными схемами.

Однако неявные схемы не эффективны с точки зрения вычислительных затрат. В общем случае невозможно выразить u_{n+1} из разностного уравнения (10.9). Вместо этого, мы должны решить нелинейное уравнение

$$u_{n+1}^{(a)} - b_0 h f(x_{n+1}, u_{n+1}^{(a)}) + \text{const} = 0$$

относительно u_{n+1} , используя тот или иной итерационный метод, а это значительно увеличивает объём вычислений. Тем не менее неявные схемы могут быть очень полезны в некоторых ситуациях, которые мы рассмотрим позднее.

Неявные схемы можно использовать для повышения точности приближённого решения, полученного явным методом. Комбинация явной и неявной схемы называется *методом предиктор-корректор*. Общая процедура вычислений может быть организована следующим образом:

1) вначале, вычислим приближённое решение $\tilde{u}_{n+1}^{(a)}$, используя явную схему Адамса порядка p в качестве предиктора:

$$\tilde{u}_{n+1}^{(a)} = u_n^{(a)} + h \sum_{k=0}^{p-1} a_k f(x_{n-k}, u_{n-k}^{(a)});$$

2) затем это приближение уточняется неявной схемой Адамса порядка p (корректор):

$$u_{n+1}^{(a)} = u_n^{(a)} + b_0 h f(x_{n+1}, \tilde{u}_{n+1}^{(a)}) + h \sum_{k=1}^{p-1} b_k f(x_{n+1-k}, u_{n+1-k}^{(a)}).$$

Из построения видно, что схемы предиктор-корректор являются явными схемами и, следовательно, они условно устойчивы; но эти схемы имеют менее строгие ограничения на шаг разностной сетки по сравнению с явными схемами Адамса.

4. Исследование устойчивости разностных схем в случае нелинейных задач

В пункте 1 мы рассмотрели метод исследования устойчивости для модельного уравнения (10.3). Можно расширить возможности этого метода и применить его для анализа устойчивости разностных схем для уравнения (10.1). Предположим, что интегральная кривая уравнения (10.1) проходит через точку с координатами $x = x^*$, $u^* = u(x^*)$. Вблизи этой точки можно записать

$$f(x) \approx f(x^*, *) + \frac{\partial f}{\partial x}(x^*, *)(x - x^*) + \frac{\partial f}{\partial u}(x^*, *)(u - u^*),$$

и, следовательно, уравнение (10.1) можно приближённо заменить уравнением

$$\frac{du}{dx} = -\gamma^* u + \varphi(x),$$

где

$$\gamma^*(x^*, u^*) = \left| \frac{\partial f}{\partial u}(x^*, u^*) \right| = \text{const},$$

$$\varphi(x) = f(x^*, *) + \frac{\partial f}{\partial x}(x^*, *)(x - x^*) - u^* \frac{\partial f}{\partial u}(x^*, u^*).$$

Здесь мы предполагаем, что дифференциальное уравнение (10.1) устойчиво, поэтому производная $\partial f / \partial u$ неположительная. Это уравнение выглядит как модельное уравнение (10.3) (функцией $\varphi(x)$ можно пренебречь, так как она не влияет на устойчивость), поэтому условия устойчивости разностных схем для модельного уравнения можно применить и для случая уравнения (10.1). Любая условно устойчивая схема для уравнения (10.3) имеет ограничение на выбор шага h : $h \leq \beta/\gamma$, $\beta = \text{const} > 0$. Естественно, что теперь значение коэффициента $\gamma = \gamma^*$ может меняться от точки к точке, поэтому необходимо модифицировать приведённое выше условие. Это значит, мы должны учитывать, что γ^* принимает не одно, а некоторое множество значений,

которое описывает изменение $\partial f / \partial u$ вдоль интегральной кривой. По сути дела, существует два способа добиться устойчивости разностной схемы, а именно:

1) производить вычисления с переменным шагом h_n , который удовлетворяет условию

$$h_n \leq \beta / \gamma_n, \quad \gamma_n = \gamma^*(x_n, u_n^{(a)});$$

2) если мы можем оценить величину $u(x)$ на интервале интегрирования, то шаг разностной сетки выбирается из условия

$$h \leq \beta / \max_{a \leq x \leq b} \gamma^*(x, u(x)),$$

и такое значение шага h обеспечивает устойчивость разностной схемы в любой точке интервала интегрирования.

В большинстве случаев, встречающихся на практике, такой подход позволяет добиться устойчивых расчётов.

5. Системы дифференциальных уравнений

На практике мы часто сталкиваемся с задачами Коши не для одного уравнения, а для системы из N дифференциальных уравнений первого порядка. Все рассмотренные выше схемы для численного решения уравнения (10.1) непосредственно обобщаются на случай системы уравнений (10.2). Следует только заменить $u_n^{(a)}$ на $\mathbf{u}_n^{(a)}$ и $f(x, u_n^{(a)})$ на $\mathbf{f}(x, \mathbf{u}_n^{(a)})$ в схемах Рунге – Кутты и Адамса. Например, система уравнений

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dx} &= (1 - cu_2)u_1, \quad x \geq 0, \\ \frac{du_2}{dx} &= (-1 + du_1)u_2, \\ u_1(0) &= \alpha_1, \\ u_2(0) &= \alpha_2 \end{aligned} \tag{10.10}$$

может быть записана в форме

$$\frac{d\mathbf{u}}{dx} = f(x, \mathbf{u}), \quad x \geq 0,$$

$$\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_{in},$$

если ввести обозначения

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \quad f(x, \mathbf{u}) = \begin{pmatrix} (1 - cu_2)u_1 \\ (-1 + du_1)u_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_{in} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}.$$

Схема Рунге-Кутты (10.6) для системы уравнений имеет вид

$$\mathbf{u}_{n+1}^{(a)} = \mathbf{u}_n^{(a)} + \frac{1}{2}h(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2),$$

$$\mathbf{k}_1 = f(x_n, \mathbf{u}_n^{(a)}),$$

$$\mathbf{k}_2 = f(x_{n+1}, \mathbf{u}_n^{(a)} + h\mathbf{k}_1)$$

и в случае системы (10.10) записывается как

$$\begin{pmatrix} u_{1,n+1}^{(a)} \\ u_{2,n+1}^{(a)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{1,n}^{(a)} \\ u_{2,n}^{(a)} \end{pmatrix} + \frac{1}{2}h \begin{pmatrix} k_{1,1} + k_{2,1} \\ k_{1,2} + k_{2,2} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} k_{1,1} \\ k_{1,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 - cu_{2,n}^{(a)})u_{1,n}^{(a)} \\ (-1 + du_{1,n}^{(a)})u_{2,n}^{(a)} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} k_{2,1} \\ k_{2,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 - c(u_{2,n}^{(a)} + hk_{1,2}))(u_{1,n}^{(a)} + hk_{1,1}) \\ -1 + d(u_{1,n}^{(a)} + hk_{1,1})(u_{2,n}^{(a)} + hk_{1,2}) \end{pmatrix}.$$

Задача Коши для дифференциального уравнения вида

$$\frac{d^m u}{dx^m} = f(x, u, \frac{du}{dx}, \dots, \frac{d^{m-1}u}{dx^{m-1}}), \quad a \leq x \leq b,$$

$$\frac{d^k u}{dx^k}(a) = \alpha_k, \quad k = 0, \dots, m-1,$$

может быть также представлена в виде системы уравнений (10.2) путём замены переменных. Следующий пример демонстрирует эту процедуру. Уравнение

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \sin(x \frac{du}{du} + u^2) = 0, \quad x \geq 0, \quad u(0) = \alpha_1, \quad \frac{du}{dx}(0) = \alpha_2,$$

можно представить в виде системы уравнений, если сделать замену

$$u_1(x) = u(x), \quad u_2(x) = \frac{du}{dx}.$$

В результате мы получим

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dx} &= u_2, \\ \frac{du_2}{dx} &= -\sin(xu_2 + u_1^2), \\ u_1(0) &= \alpha_1, \quad u_2(0) = \alpha_2. \end{aligned}$$

В пункте 1 мы рассмотрели критерий устойчивости разностных схем для модельного уравнения (10.3). Теперь, в качестве модельной системы, выбирается следующая система уравнений:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dx} = A\mathbf{u}, \quad x \geq 0,$$

где A – некоторая матрица с постоянными коэффициентами. Критерий устойчивости разностной схемы для этой модельной системы представляет собой некоторое ограничение на величину $w = h\lambda_m(A)$, где $\lambda_m(A)$ есть собственные значения матрицы A . Только теперь появляется новая особенность. В общем случае, матрица A несимметричная, тогда её собственные значения не обязательно вещественные и, следовательно, параметр w может принимать комплексные значения. Поэтому разностная схема будет устойчивой, если параметр w (для всех значений m) принадлежит определённой области на комплексной плоскости. Такие области для схем Рунге-Кутты и Адамса показаны на слайдах 10.14 – 10.16.

Слайд 10.14. Области устойчивости на комплексной плоскости для p -стадийных явных схем Рунге-Кутты порядка $p = 1, 2, 3, 4$. Область устойчивости лежит внутри контура

Слайд 10.15. Области устойчивости на комплексной плоскости для явных схем Адамса порядка $p = 1, 2, 3, 4$. Область устойчивости лежит внутри контура

Слайд 10.16. Области устойчивости на комплексной плоскости для неявных схем Адамса порядка $p = 3, 4$ (схемы первого и второго порядка безусловно устойчивы). Область устойчивости лежит внутри контура

В пункте 4 мы рассмотрели, как можно обобщить критерий устойчивости, полученный для линейного модельного уравнения, на случай нелинейного уравнения. Этот критерий устанавливает некоторые ограничения на величину $h\gamma^*$, где γ^* оценивает скалярную величину $\partial f/\partial u$. В случае системы уравнений (10.2), естественным аналогом производной $\partial f/\partial u$ является матрица Якоби $F(x, \mathbf{u})$. Тогда параметр w , определяемый теперь как $w = h\lambda_m(F)$, будет переменным. Разностная схема будет устойчивой, если шаг h выбирается таким образом, чтобы параметр w (для всех значений m) принадлежал определённой области на комплексной плоскости.

6. Методы решения жёстких систем дифференциальных уравнений

Во многих областях исследований возникают системы дифференциальных уравнений имеющие одно очень интересное свойство, называемое «жёсткостью». Применение рассмотренных выше методов для численного решения таких систем, с вычислительной точки зрения, будет крайне неэффективным. Рассмотрим, например, следующую задачу Коши:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dx} = A\mathbf{u}, \quad x \geq 0, \quad (10.11)$$

где

$$A = \begin{pmatrix} -21 & 19 & -20 \\ 19 & -21 & 20 \\ 40 & -40 & -40 \end{pmatrix}, \quad (10.12)$$

с начальными условиями

$$\mathbf{u}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Решение этой задачи имеет вид

$$\begin{aligned} u_1(x) &= \frac{1}{2}e^{-2x} + \frac{1}{2}e^{-40x} [\cos(40x) + \sin(40x)], \\ u_2(x) &= \frac{1}{2}e^{-2x} - \frac{1}{2}e^{-40x} [\cos(40x) + \sin(40x)], \\ u_3(x) &= -e^{-40x} [\cos(40x) - \sin(40x)]. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Графики $u_1(x)$, $u_2(x)$, и $u_3(x)$ представлены на слайде 10.17.

На интервале $0 \leq x \leq 0.1$ все три компоненты изменяются очень быстро, и при численном решении этой задачи шаг разностной сетки должен быть очень мал. Для $x > 0.1$, однако, две компоненты решения, $u_1(x)$ и $u_2(x)$, практически совпадают и изменяются довольно медленно, а третья компонента, $u_3(x)$, близка к нулю. Поэтому на этом интервале можно было бы задать и более крупный шаг разностной сетки.

Слайд 10.17. Точное решение задачи (10.11)

Матрицей Якоби $F(x, \mathbf{u})$ для уравнения (10.11) является матрица A , определённая в (10.12), и её собственные значения λ_m равны -2 , $-40 \pm 40i$. Если для решения системы (10.11) использовать какую-нибудь явную схему, то мы столкнёмся с довольно сильным ограничением на шаг h , так как последние два собственных значения имеют относительно большое по модулю значение. В то же время эти собственные значения определяют ту часть точного решения (10.13), которая пренебрежимо мала при $x \geq 0.1$. В результате, мы вынуждены задать очень маленький шаг разностной сетки на всём интервале интегрирования, что потребует большого объёма вычислений. Такая ситуация характерна для жёстких систем уравнений.

В случае нелинейной системы (10.2) жёсткость определяется собственными значениями матрицы Якоби $F(x, \mathbf{u})$, которые зависят от x . Система уравнений называется жёсткой на некотором интервале I , если

- 1) $\operatorname{Re} \lambda_m(x) < 0$, $m = 1, \dots, N$;
- 2) $\max_m |\operatorname{Re} \lambda_m(x)| \gg \min_m |\operatorname{Re} \lambda_m(x)|$, $x \in I$,

где $\lambda_m(x)$ – собственные значения матрицы $F(x, \mathbf{u})$. Отношение

$$\frac{\max_m |\operatorname{Re} \lambda_m(x)|}{\min_m |\operatorname{Re} \lambda_m(x)|}$$

называется коэффициентом жёсткости. Система уравнений (10.11) имеет коэффициент жёсткости равный 20, что вполне приемлемо, так как во многих практических задачах коэффициенты жёсткости зачастую достигают величины 10^6 .

Применение явных (условно устойчивых) схем для решения жёстких систем уравнений вызывает затруднение, так как это приводит к сильным ограничениям на величину шага разностной сетки. Единственный способ преодолеть это затруднение – применять неявные схемы, которые либо

безусловно устойчивы когда $\operatorname{Re} \lambda_m < 0$, либо имеют большую область устойчивости. Со схемами первого рода мы уже встречались – это неявные схемы Адамса первого и второго порядка.

Другим популярным методом решения жёстких задач являются формулы дифференцирования назад (BDF, Backward Differentiation Formulae). Построение схем Адамса основано на интегрировании полинома, который интерполирует предыдущие значения $f(x, u)$. Построение схем BDF основано на дифференцировании полинома, который интерполирует предыдущие значения $\mathbf{u}^{(a)}$. Полученная таким образом производная в точке x_n приравнивается затем значению $f(x_n, u_n)$. Схемы BDF порядка p для системы уравнений можно записать в следующем виде:

$$\frac{1}{h} \sum_{k=0}^p c_k \mathbf{u}_{n+1-k}^{(a)} = d_0 \mathbf{f}(x_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}^{(a)}),$$

где соответствующие коэффициенты представлены в таблице 10.3. Из этой формулы видно, что схемы BDF являются неявными схемами.

Таблица 10.3

Коэффициенты для схем BDF

ПОРЯДОК АППРОКСИМАЦИИ, P	D ₀	B _K , K=0, ... , P-1				
1	1	1	-1			
2	2/3	1	-4/3	1/3		
3	6/11	1	-18/11	9/11	-2/11	
4	12/25	1	-48/25	36/25	-16/25	3/25

Области устойчивости для схем BDF показаны на слайде 10.18. Схемы первого и второго порядка безусловно устойчивы когда $\operatorname{Re} \lambda_m < 0$, а схемы третьего и четвёртого порядка имеют небольшие области неустойчивости для малых значений $\operatorname{Re} \lambda_m$ вблизи мнимой оси.

Слайд 10.18. Области устойчивости на комплексной плоскости для схем BDF порядка $p = 1, 2, 3, 4$. Область неустойчивости лежит внутри контура

Все разностные схемы, пригодные для численного решения жёстких задач, являются неявными схемами, поэтому на каждом шаге вычислений мы должны решить систему нелинейных уравнений вида

$$\mathbf{u}_{n+1}^{(a)} = h \cdot \text{const} \cdot f(x_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}^{(a)}) + \mathbf{r},$$

где \mathbf{r} – некоторый известный вектор.

Лекция 11. Методика проведения исследований

1. Анализ размерностей и групповой анализ моделей

Одно из фундаментальных свойств природных – симметрия (подобие, повторяемость, воспроизводимость) – находит свое отражение в их математических моделях. На этом основываются широко применяемые методы упрощения математических моделей. Они состоят в понижении порядка системы уравнений, образующих модель, в уменьшении числа переменных, от которых зависят искомые величины, или числа постоянных параметров, определяющих процесс, и т. д.

Типичный подход к использованию свойств симметрии – анализ размерности величин, входящих в модель. Часть характеристик объектов измеряется в каких-либо единицах, имеющих непосредственный (механический, физический, экономический и т. д.) смысл. Например, масса в граммах, температура в градусах Кельвина. Такие величины называются размерными, их численное значение зависит от выбора единиц измерения. Среди них выделяются величины с независимой (основной) размерностью, или размерно-независимые величины. Например, размерности длины x , массы m и времени t независимы и не выражаются одна через другую. В отличие от них размерность кинетической энергии $E = mv^2/2$ определяется через размерности основных величин по формуле $[E] = [m][v]^2[t]^{-2}$, называемой формулой размерности (здесь $v = dx/dt$, через символ $[f]$ обозначается размерность величины f). Такие величины называются размерно-зависимыми.

Системы единиц измерения можно выбирать по-разному, причем связи между величинами, характеризующими объект, не должны изменяться при изменении единиц измерения. Например, второй закон Ньютона $F = ma$ (F – сила, a – ускорение) в системе СИ записывается точно так же, как и в системе СГС. Инвариантность явлений и процессов по отношению к изменению единиц измерения находит свое воплощение в так называемой П-теореме.

Пусть имеется функциональная связь

$$a = F(a_1, a_2, \dots, a_k, a_{k+1}, \dots, a_n) \quad (11.1)$$

между $n + 1$ размерными величинами a, a_1, \dots, a_n , где величины a_1, \dots, a_k имеют независимую размерность, и пусть эта связь не зависит от выбора системы единиц измерения (величина a искомая, а остальные задаваемые).

Тогда связь (1) может быть записана как

$$T = \text{const} \cdot \sqrt{l/g}.$$

С точностью до безразмерного множителя данная формула совпадает с полученной из решения уравнения колебаний маятника.

Заметим, что безразмерные параметры, характеризующие объект, при вариации единиц измерения не изменяются и поэтому в П-теореме не фигурируют.

Процедура обезразмеривания (*масштабирования*) всегда полезна при изучении математических моделей, поскольку может дать важную предварительную информацию об объекте.

Получаемые с помощью П-теоремы безразмерные величины Π_1, \dots, Π_{n-k} можно назвать *параметрами (критериями) подобия* в том смысле, что разные по своим масштабам, но одинаковые по сущности явления и процессы ведут себя качественно одинаково при заданном наборе параметров Π_1, \dots, Π_{n-k} (и одинаково изменяются при их изменении).

Инвариантность моделей по отношению к системе единиц измерения – частный случай более общих свойств их симметрии. Наиболее хорошо разработанный и широко применяемый подход, использующий подобие моделей, основан на так называемом *инвариантно-групповом* методе исследования дифференциальных уравнений. Действительно, большинство дифференциальных уравнений, представляющих собой составную часть математических моделей многих явлений, остаются неизменными (*инвариантными*) при некоторых преобразованиях входящих в них независимых переменных и искомым функций.

Среди инвариантных решений дифференциальных уравнений выделяется важный класс самоподобных, или *автомодельных* решений. К ним принято относить широко используемые решения типа бегущей волны, степенные автомодельные решения и экспоненциальные автомодельные решения.

Математические модели различных физических явлений часто формулируются в виде краевых задач для дифференциальных уравнений в частных производных, и изучение таких моделей требует решения этих уравнений. Область применимости методов качественного анализа математических моделей весьма ограничена. Поэтому получение решения в виде явных выражений нельзя рассматривать как стандартный метод решения дифференциальных уравнений. Нельзя сказать, что аналитические методы потеряли своё значение. Они остаются необходимым инструментом для решения упрощённых, так называемых, модельных задач. Исследование

модельных задач позволяет получить важную информацию о решении более сложных задач.

Лекция 12. Методы построения и анализа дискретных моделей

Единственным универсальным способом исследования моделей является применение численных методов для нахождения приближенного решения поставленной задачи с помощью средств современной вычислительной техники и информатики. Мы рассмотрим методы, основанные на конечных разностях. Основная идея этих методов состоит в том, что приближённое решение определяется на некотором множестве точек, обычно называемом *сеткой*. Для вычисления этого приближенного решения используются, например, конечно-разностные уравнения, которые приближают и заменяют дифференциальное уравнение. При численном решении краевых задач возникают вопросы о построении конечно-разностных уравнений, о методах их решения, устойчивости численных процедур их решения и точности приближённого решения.

1. Основные понятия

Основные идеи иллюстрируются на примере численного решения задачи Коши для уравнения переноса. Если $u(x, t)$ обозначает амплитуду малого возмущения в точке x в момент времени t , то распространение этого возмущения в бесконечной среде описывается следующим уравнением:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad t \geq 0, \\ u(x, 0) &= g(x), \quad -\infty \leq x \leq \infty, \end{aligned} \tag{11.4}$$

где $c = \text{const}$ – скорость волны, которую для определённости будем считать положительной. Эта задача является линейной и имеет решение $u(x, t) = g(x - ct)$, $t > 0$, то есть начальное состояние просто переносится вправо со скоростью c . Предположим, что функция $g(x)$ равна нулю при $x \leq 0$ и будем рассматривать решение при $x > 0$.

Вначале мы должны задать разностную сетку. Для одномерных нестационарных уравнений она определяется узлами (x_n, t_k) , как показано на слайде 3.1, где $x_n = nh$, $n = 0, 1, \dots$ и $t_k = k\tau$, $k = 0, 1, \dots$. Параметры $h = x_{n+1} - x_n$ и $\tau = t_{k+1} - t_k$ называются соответственно шагами по пространству и времени.

Слайд 3.1. Разностная сетка на плоскости (x, t)

Приближённое решение уравнения (11.4) определяется в узлах сетки, то есть оно представляет собой множество значений

$$\mathbf{u}^k = \{u_n^k = u^{(a)}(x_n, t_k)\}, \quad n = 0, 1, \dots; \quad k = 0, 1, \dots$$

Такое множество часто называют *сеточной функцией*. Теперь нам нужно заменить производные некоторыми разностными отношениями, определёнными на сетке. В дальнейшем будем использовать, в основном, следующие приближения для дифференциальных операторов:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx}(x_n) &\approx \frac{u(x_n + h) - u(x_n)}{h} = \frac{u_{n+1} - u_n}{h} - \text{разность вперёд,} \\ \frac{du}{dx}(x_n) &\approx \frac{u(x_n) - u(x_n - h)}{h} = \frac{u_n - u_{n-1}}{h} - \text{разность назад,} \\ \frac{du}{dx}(x_n) &\approx \frac{u(x_n + h) - u(x_n - h)}{2h} = \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} - \text{центральная разность,} \\ \frac{d^2u}{dx^2}(x_n) &\approx \frac{u(x_n + h) - 2u(x_n) + u(x_n - h))}{h^2} = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2}. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Применяя разность вперёд для приближения производной по времени в точке x_n и разность назад для приближения производной по пространству в момент времени t_k , получим вместо дифференциального уравнения (11.4) разностное уравнение в каждом узле сетки:

$$\begin{aligned} \frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau} + c \frac{u_n^k - u_{n-1}^k}{h} &= 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad k = 0, 1, \dots, \\ u_n^0 &= g(x_n), \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (11.6)$$

Набор разностных уравнений определённых на некоторой сетке называется *конечно-разностной схемой* (или просто *разностной схемой*). Для вычисления приближённого решения перепишем разностную схему (11.6) в виде

$$u_n^{k+1} = u_n^k - \frac{c\tau}{h}(u_n^k - u_{n-1}^k), \quad n = 0, 1, \dots, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (11.7)$$

$$u_n^0 = g(x_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

Из начального условия $u(x, 0) = g(x)$ следует, что значения $u_n^0 = g(x_n)$ известны для каждого $n = 0, 1, \dots$.

Разностные схемы, которые позволяют непосредственно вычислять решение в момент времени t_{k+1} через известное решение в момент времени t_k , называются явными (схема (11.6) является примером такой схемы).

Вообще говоря, можно построить бесконечное количество разностных схем для данного дифференциального уравнения. Например, модифицируем схему (11.6), приближая производную по пространству не в момент времени t_k , а в момент времени t_{k+1} . В результате получим следующую разностную схему для уравнения (11.4):

$$\frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau} + c \frac{u_n^{k+1} - u_{n-1}^{k+1}}{h} = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (11.8)$$

$$u_n^0 = g(x_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

Это выражение является примером неявной схемы. В общем случае такие схемы не позволяют непосредственно вычислить решение в момент времени t_{k+1} через известное решение в момент времени t_k , так как они образуют некоторую систему уравнений (для данной задачи мы предположили, что $g(x) = 0$ при $x \leq 0$, поэтому

$$u_{n-1}^{k+1} = 0$$

и вычисления могут быть организованы явным образом). Применяя разность вперёд для приближения производной по пространству в момент времени t_k , получим ещё одну схему:

$$\frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau} + c \frac{u_{n+1}^k - u_n^k}{h} = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (11.9)$$

$$u_n^0 = g(x_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

Естественно, что все эти схемы имеют разные свойства. Эти различия показаны на слайдах 3.2. – 3.4, которые представляют результаты вычислений для разностных схем (11.6), (11.8) и (11.9), вместе с точным решением уравнения (11.4) $u(x, t) = g(x - ct)$ при $c = 1$ и

$$g(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ x(2-x), & 0 \leq x \leq 2, \\ 0, & x > 2. \end{cases}$$

Слайд 3.2. Решение задачи (11.4); ——— — точное решение, — — — — приближённое решение (разностная схема (11.6), $t = 4$, $h = 0.1$, $\tau = 0.05$)

Слайд 3.3. Решение задачи (11.4); ——— — точное решение, — — — — приближённое решение (разностная схема (11.8), $t = 4$, $h = 0.1$, $\tau = 0.05$)

Слайд 3.4. Решение задачи (11.4); ——— — точное решение, — — — — приближённое решение (разностная схема (11.9), $t = 4$, $h = 0.1$, $\tau = 0.05$)

Сравнение результатов показывает, что при вычислении по схеме (11.9) погрешность быстро накапливается и после небольшого числа шагов увеличивается до неприемлемой величины. Это явление называется *неустойчивостью*, и оно является внутренним свойством самой системы разностных уравнений (11.9).

Данный пример демонстрирует, что построение разностных схем и решение дифференциальных уравнений с помощью этих схем не совсем простая задача. Часто возникают ситуации, когда, казалось бы, схема должна давать достоверный результат, а мы получаем приближённое решение, которое не имеет ничего общего с точным решением. Поэтому, прежде чем рассматривать методы построения разностных схем, мы должны познакомиться с требованиями, выполнение которых обязательно для любой практически пригодной схемы.

2. Основные свойства разностных схем: аппроксимация и устойчивость

В этом параграфе рассмотрим определения аппроксимации, устойчивости и сходимости разностной схемы. Для простоты мы дадим основные определения в случае одномерных нестационарных задач. Предположим, что дифференциальная задача определена в некоторой области S . Это значит, что требуется найти решение дифференциального уравнения (или системы уравнений) $u(x, t)$ в области S при дополнительных начальных и граничных условиях, налагаемых на $u(x, t)$. Далее мы будем записывать дифференциальную задачу в символической форме:

$$Du = f, \quad (11.10)$$

где D – дифференциальный оператор и f – правая часть. Например, чтобы записать задачу (11.4) в форме (11.10), мы определим

$$Du \equiv \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x}, \\ u(x, 0), \end{cases} \quad f \equiv \begin{cases} 0, & -\infty \leq x \leq \infty, \quad t \geq 0, \\ g(x), & -\infty \leq x \leq \infty. \end{cases}$$

Другой пример: краевая задача для уравнения теплопроводности

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq l, \quad t \geq 0, \\ u(x, 0) &= g(x), \quad 0 \leq x \leq l, \\ u(0, t) &= f_1(t), \quad t \geq 0, \\ u(l, t) &= f_2(t), \quad t \geq 0, \end{aligned}$$

может быть представлена в виде (11.10), если записать

$$Du \equiv \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \\ u(x, 0), \\ u(0, t), \\ u(l, t), \end{cases} \quad f \equiv \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq l, \quad t \geq 0, \\ g(x), & 0 \leq x \leq l, \\ f_1(t), & t \geq 0, \\ f_2(t), & t \geq 0. \end{cases}$$

Предположим что решение $u(x, t)$ задачи (11.10) существует в области S . Для того чтобы вычислить это решение методом конечных разностей, вводится конечное число точек (узлов) в области S . Это множество точек называется сеткой и будет обозначаться как $S_h = \{x_n, t_k\}$. Теперь мы будем искать не решение $u(x, t)$ задачи (11.10), а сеточную функцию $\mathbf{u}^{(e)}$, которая представляет собой множество значений решения в узлах S_h :

$$\mathbf{u}^{(e)} = \{\hat{u}_n^k = u(x_n, t_k)\}.$$

Сетка S_h зависит от положительных параметров $h = x_{n+1} - x_n$ и $\tau = t_{k+1} - t_k$, которые могут быть выбраны сколь угодно малыми. По мере увеличения

количества узлов сетки, $h \rightarrow 0$ и $\tau \rightarrow 0$, и сеточная функция $\mathbf{u}^{(e)}$ будет давать всё более полное представление решения. Тогда, используя интерполяцию, можно получить решение в любой точке области S . Однако точно вычислить $\mathbf{u}^{(e)}$ невозможно. Вместо сеточной функции $\mathbf{u}^{(e)}$ мы можем вычислить другую сеточную функцию

$$\mathbf{u}^{(a)} = \{u_n^k = u^{(a)}(x_n, t_k)\},$$

которая стремится к $\mathbf{u}^{(e)}$, когда число узлов сетки увеличивается. Для вычисления этого приближённого решения $\mathbf{u}^{(a)}$ используются разностные схемы. По аналогии с выражением (11.10) разностную схему можно записать в символическом виде

$$D_h \mathbf{u}^{(a)} = \mathbf{f}^{(a)}. \quad (11.11)$$

Например, разностная схема (11.6) может быть представлена в виде (11.11) если записать

$$D_h \mathbf{u}^{(a)} = \begin{cases} \frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau} + c \frac{u_n^k - u_{n-1}^k}{h}, \\ u_n^0, \end{cases} \quad \mathbf{f}^{(a)} = \begin{cases} 0, \\ g(x_n), \end{cases} \quad n = 0, 1, \dots, \quad k = 0, 1, \dots$$

Прежде чем продолжить наше обсуждение, нужно определить способ измерения сеточных функций. В дальнейшем мы будем использовать следующую норму:

$$\|\mathbf{u}^{(a)}\| = \max_k (\max_n |u_n^k|).$$

Если подставить $\mathbf{u}^{(e)}$ в разностную схему (11.11), то мы не получим точного равенства, то есть возникает некоторый вектор невязки

$$D_h \mathbf{u}^{(e)} = \mathbf{f}^{(a)} + \delta \mathbf{f}^{(a)}.$$

Мы будем говорить, что разностная схема $D_h \mathbf{u}^{(a)} = \mathbf{f}^{(a)}$ аппроксимирует дифференциальную задачу $Du = f$ на решении $u(x, t)$, если $\|\delta \mathbf{f}^{(a)}\| \rightarrow 0$, когда $h \rightarrow 0$ и $\tau \rightarrow 0$. В дополнение, если выполняется неравенство

$$\|\delta \mathbf{f}^{(a)}\| \leq C_1 h^p + C_2 \tau^q, \quad (11.12)$$

где константы $C_1 > 0$, $C_2 > 0$, $p > 0$, $q > 0$, тогда будем говорить, что имеет место аппроксимация порядка p по h и порядка q по τ .

Как было показано выше, приближённое решение $\mathbf{u}^{(a)}$, полученное с помощью разностной схемы (11.9), не отображает точного решения, хотя эта схема аппроксимирует задачу (11.4) с первым порядком по h и τ . Разностная схема должна обладать не только свойством аппроксимации, но также быть устойчивой.

Рассмотрим возмущённую разностную схему

$$D_h \mathbf{z}^{(a)} = \mathbf{f}^{(a)} + \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)}, \quad (11.13)$$

которая получается из разностной схемы (11.11) путём добавления в правую часть возмущения $\boldsymbol{\varepsilon}^{(a)}$. Мы будем называть разностную схему (11.11) *устойчивой*, если существуют числа $\tau_0 > 0$ и $\delta > 0$ такие, что для любого $\tau < \tau_0$ и $\|\boldsymbol{\varepsilon}^{(a)}\| < \delta$ разностная задача (11.13) имеет единственное решение $\mathbf{z}^{(a)}$ и это решение отличается от $\mathbf{u}^{(a)}$ на сеточную функцию $\mathbf{z}^{(a)} - \mathbf{u}^{(a)}$, которая удовлетворяет оценке $\|\mathbf{z}^{(a)} - \mathbf{u}^{(a)}\| \leq C\|\boldsymbol{\varepsilon}^{(a)}\|$, где константа C не зависит от h и τ . Это неравенство означает, что малое возмущение правой части разностной схемы (11.11) приводит к малому возмущению решения.

В случае линейной дифференциальной задачи (11.10) следующее определение эквивалентно данному выше определению. Мы будем называть разностную схему (11.10) *устойчивой*, если для любой правой части $\mathbf{f}^{(a)}$ разностная задача $D_h \mathbf{u}^{(a)} = \mathbf{f}^{(a)}$ имеет единственное решение $\mathbf{u}^{(a)}$ и выполняется оценка

$$\|\mathbf{u}^{(a)}\| \leq C\|\mathbf{f}^{(a)}\|, \quad (11.14)$$

где константа C не зависит от h и τ .

Основной вопрос, который возникает при практических вычислениях, — насколько полученное приближённое решение отличается от точного решения и как сделать это отклонение достаточно малым?

Предположим что разностная схема (11.11) аппроксимирует задачу (11.10) на решении $u(x, t)$ и устойчива. Тогда приближённое решение $\mathbf{u}^{(a)}$ сходится к точному решению $\mathbf{u}^{(e)}$, то есть $\|\mathbf{u}^{(e)} - \mathbf{u}^{(a)}\| \rightarrow 0$, когда $h \rightarrow 0$ и $\tau \rightarrow 0$. Если при этом выполняется неравенство (11.12), то будем говорить, что имеет место сходимость порядка $O(h^p + \tau^q)$ или, что разностная схема (11.11) имеет точность порядка p по h и порядка q по τ . Понятно, что чем больше значения p и q (выше порядок аппроксимации), тем быстрее

приближённое решение стремится к точному решению по мере уменьшения шагов сетки. Однако, сравнение схем по порядку точности имеет смысл проводить лишь при достаточно малых шагах расчётной сетки h и τ , при этом главный член ошибки аппроксимации зависит не только от шагов сетки, но и от производных решения. Практически же используются достаточно крупные расчётные сетки, на которых асимптотические оценки могут быть несостоятельны. Таким образом, может оказаться, что схема первого порядка точности на реальных сетках точнее схемы второго порядка точности, и т. д. Наличие сходимости является основным требованием, предъявляемым к разностным схемам, так как только в этом случае мы можем аппроксимировать точное решение $u^{(e)}$ с любой точностью, в пределах машинной арифметики, выбирая шаги по пространству и времени достаточно малыми.

3. Анализ аппроксимации

Так как точное решение исходной задачи нам неизвестно, мы можем сделать только оценку невязки. Далее мы рассмотрим пример, который демонстрирует общепринятый метод исследования аппроксимации.

Рассмотрим разностную схему (11.6) для задачи (11.4). Если вместо сеточной функции $u^{(a)}$ подставить точное решение $u(x, t)$, то выражение (11.11) примет вид

$$\frac{u(x_n, t_{k+1}) - u(x_n, t_k)}{\tau} + c \frac{u(x_n, t_k) - u(x_{n-1}, t_k)}{h} = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad k = 0, 1, \dots \quad (11.15)$$

Исследуем аппроксимацию в точке (x_n, t_k) . Предположим что все частные производные функции $u(x, t)$, до второго порядка включительно, непрерывны и ограничены. Тогда мы можем разложить $u(x_{n-1}, t_k) = u(x_n - h, t_k)$ и $u(x_n, t_{k+1}) = u(x_n, t_k + \tau)$ в окрестности точки (x_n, t_k) по степеням h и τ , используя формулу Тейлора:

$$u(x_n - h, t_k) = u(x_n, t_k) - h \frac{\partial u}{\partial x}(x_n, t_k) + \frac{1}{2} h^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_n, t_k) + O(h^3)$$

и

$$u(x_n, t_k + \tau) = u(x_n, t_k) + \tau \frac{\partial u}{\partial t}(x_n, t_k) + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_n, t_k) + O(\tau^3).$$

Подставляя эти разложения в (11.15), получим

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_n, t_k) + c \frac{\partial u}{\partial x}(x_n, t_k) = -\frac{1}{2} \tau \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_n, t_k) + \frac{1}{2} ch \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_n, t_k) + O(h^2 + \tau^2), \quad (11.16)$$

$$n = 1, 2, \dots; \quad k = 0, 1, \dots$$

Выражения такого вида называются *дифференциальными приближениями разностного уравнения*. По своей сути они занимают промежуточное место между исходным дифференциальным уравнением и аппроксимирующей его разностной схемой. Дифференциальное приближение имеет структуру дифференциального уравнения, но его коэффициенты зависят от параметров рассматриваемой схемы, что облегчает аналитическое исследование её свойств.

Выражение в правой части (11.16) представляет собой невязку, так как начальное условие задаётся точно. Оценка нормы невязки даёт

$$\begin{aligned} \|\delta f^{(a)}\| &= \max_k \left(\max_n \left| -\frac{1}{2} \tau \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_n, t_k) + \frac{1}{2} ch \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_n, t_k) \right| \right) \leq \\ &\leq \tau \left[\frac{1}{2} \max_k \left(\max_n \left| \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_n, t_k) \right| \right) \right] + h \left[\frac{c}{2} \max_k \left(\max_n \left| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_n, t_k) \right| \right) \right] = C_1 h + C_2 \tau, \end{aligned}$$

то есть разностная схема (11.6), в общем случае, аппроксимирует задачу (11.4) с первым порядком по h и τ . Анализ аппроксимации иногда позволяет получить условия на параметры сетки, при которых сходимость разностной схемы значительно ускоряется.

Погрешность аппроксимации разностной схемы возникает, в основном, при замене дифференциальных операторов на разностные операторы. Применяя рассмотренный выше подход, получим следующие выражения для главного члена ошибки аппроксимации часто используемых разностных отношений:

$$\begin{aligned} \frac{u(s_n + \Delta s) - u(s_n)}{\Delta s} &= \frac{\partial u}{\partial s}(s_n) + \frac{1}{2} \Delta s \frac{\partial^2 u}{\partial s^2}(s_n) + O((\Delta s)^2), \\ \frac{u(s_n) - u(s_n - \Delta s)}{\Delta s} &= \frac{\partial u}{\partial s}(s_n) - \frac{1}{2} \Delta s \frac{\partial^2 u}{\partial s^2}(s_n) + O((\Delta s)^2), \end{aligned}$$

(11.17)

$$\frac{u(s_n + \Delta s) - u(s_n - \Delta s)}{2\Delta s} = \frac{\partial u}{\partial s}(s_n) + \frac{1}{6}(\Delta s)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial s^3}(s_n) + O((\Delta s)^4),$$

$$\frac{u(s_n + \Delta s) - 2u(s_n) + u(s_n - \Delta s))}{(\Delta s)^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial s^2}(s_n) + \frac{1}{12}(\Delta s)^2 \frac{\partial^4 u}{\partial s^4}(s_n) + O((\Delta s)^4),$$

где s обозначает пространственные переменные или время и, соответственно, Δs обозначает шаг по пространству или по времени. В дальнейшем мы будем использовать эти готовые выражения для анализа различных разностных схем. При этом будем подразумевать, что решение обладает достаточной гладкостью и все необходимые нам для анализа производные существуют и ограничены.

4. Критерий фон Неймана для анализа устойчивости разностных схем

Рассмотрим критерий фон Неймана, который широко используется для анализа устойчивости разностных схем. Он применим для исследования устойчивости разностных схем в случае однородной задачи Коши. Вначале мы ограничимся случаем задачи с постоянными коэффициентами, а потом расширим наши результаты на случай переменных коэффициентов.

Выведем критерий фон Неймана на примере разностной схемы (11.6) для задачи (11.4). Для разностной схемы записанной в виде (11.11) имеем следующий критерий устойчивости:

$$\|\mathbf{u}^{(a)}\| \leq C\|\mathbf{f}^{(a)}\|.$$

Учитывая, что в нашем случае

$$\mathbf{f}^{(a)} = \begin{cases} 0, \\ g(x_n), \end{cases} \quad n = 1, 2, \dots,$$

и определяя нормы как

$$\|\mathbf{u}^{(a)}\| = \max_k (\max_n |u_n^k|), \quad \|\mathbf{f}^{(a)}\| = \max_n |g(x_n)|,$$

условие устойчивости примет вид

$$\max_k (\max_n |u_n^k|) \leq C \max_n |g(x_n)| = C \max_n |u_n^0|.$$

Тогда, если будет выполняться условие

$$\max_n |u_n^k| \leq C \max_n |u_n^0|, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (11.18)$$

то приведённое выше условие также выполнится. Для анализа устойчивости выберем

$$u_n^0 = \exp(i\omega x_n) = \exp(i\omega n h) = \exp(i\alpha n), \quad (11.19)$$

где α – вещественный параметр. Тогда сеточное решение, определяемое разностной схемой (11.6), имеет вид (смысл параметра λ обсудим ниже):

$$u_n^k = \lambda^k(\alpha) \exp(i\alpha n), \quad 0 \leq \alpha \leq 2\pi, \quad (11.20)$$

где $\lambda(\alpha)$ – в общем случае комплексный параметр. Тогда условие устойчивости (11.18) принимает вид

$$\max_n |u_n^k| = |\lambda^k(\alpha)| \cdot \max_n |\exp(i\alpha n)| \leq C \max_n |\exp(i\alpha n)|, \quad k = 0, 1, \dots,$$

и окончательно

$$|\lambda(\alpha)|^k \leq C, \quad k = 0, 1, \dots$$

Это условие выполнится для любых значений k , если

$$|\lambda(\alpha)| \leq 1, \quad 0 \leq \alpha \leq 2\pi. \quad (11.21)$$

Это и есть спектральный критерий устойчивости фон Неймана.

Обсудим теперь возникновение и смысл параметра λ . Запишем разностную схему (11.6) для одного шага по времени и подставим туда начальное условие вида (11.19). В результате получим

$$\frac{u_n^1 - \exp(i\alpha n)}{\tau} + c \frac{\exp(i\alpha n) - \exp(i\alpha(n-1))}{h} = 0.$$

Выразим u_n^1 из этого соотношения:

$$\begin{aligned}
u_n^1 &= \exp(i\alpha n) - \frac{c\tau}{h}(1 - \exp(-i\alpha))\exp(i\alpha n) = \\
&= \left(1 - \frac{c\tau}{h}(1 - \exp(-i\alpha))\right)\exp(i\alpha n) = \lambda(\alpha)\exp(i\alpha n) = \lambda(\alpha)u_n^0.
\end{aligned}$$

Таким образом, λ представляет собой собственное значение оператора перехода на один шаг по времени (в данном случае собственное значение совпадает с оператором перехода, в общем же случае он представляет собой некоторую матрицу). Когда α изменяется от 0 до 2π , значения $\lambda(\alpha)$ образуют спектр оператора перехода. Тогда необходимое условие устойчивости можно сформулировать следующим образом: спектр оператора перехода на один шаг по времени должен лежать внутри единичного круга на комплексной плоскости. Если оператор перехода \mathbf{S} является нормальной матрицей ($\mathbf{S}\mathbf{S}^H - \mathbf{S}^H\mathbf{S} = 0$, где символ H обозначает последовательное применение двух операций: комплексного сопряжения и транспонирования), то критерий фон Неймана (11.21) является также и достаточным условием устойчивости. В случае одного уравнения выражение для $\lambda(\alpha)$ можно получить, если подставить (11.20) непосредственно в разностную схему; это даст некоторое уравнение на $\lambda(\alpha)$.

Рассмотрим теперь устойчивость построенных выше схем. Параметр $\lambda(\alpha)$ для схемы (11.6) мы уже определили:

$$\lambda(\alpha) = 1 - r(1 - \exp(-i\alpha)) = 1 - r + r\cos(\alpha) - ir\sin(\alpha),$$

где $r = c\tau/h$. Тогда

$$|\lambda(\alpha)| = \sqrt{(1-r)^2 + 2r(1-r)\cos(\alpha) + r^2}.$$

Когда α изменяется от 0 до 2π , $|\lambda(\alpha)|$ пробегает значения от 1 до $|1 - 2r|$. Следовательно, по критерию устойчивости (11.21) эта схема будет устойчива, если

$$r \leq 1 \quad \text{или} \quad \frac{c\tau}{h} \leq 1.$$

Схема (11.6) является примером условно устойчивой схемы.

Это условие совпадает с условием Куранта – Фридрикса – Леви

$$\frac{h}{\tau} \geq c,$$

записанного для случая гиперболических уравнений. Это условие имеет простое физическое объяснение. Предположим, что начальное условие $u(x,0)$ равно нулю во всех точках пространственной сетки, кроме одной. Тогда решение в узле сетки, удалённом от этой точки на n пространственных шагов, должно оставаться нулевым по крайней мере в течение n временных шагов. Это эквивалентно условию, что шаг по времени τ должен быть меньше того промежутка времени, в течение которого волна проходит расстояние, равное пространственному шагу h , или, что скорость распространения информации на сетке, h/τ , должна быть больше скорости волны.

Если мы подставим разностное решение вида (11.20) в схему (11.8), то получим

$$\frac{\lambda^{k+1} \exp(i\alpha n) - \lambda^k \exp(i\alpha n)}{\tau} + c\lambda^{k+1} \frac{\exp(i\alpha n) - \exp(i\alpha(n-1))}{h} = 0.$$

Далее, разделим это выражение на $\lambda^k \exp(i\alpha n)$ и получим следующее уравнение для λ

$$\frac{\lambda - 1}{\tau} + c\lambda \frac{1 - \exp(-i\alpha)}{h} = 0,$$

из которого нетрудно получить, что

$$|\lambda(\alpha)| = \frac{1}{\sqrt{(1+r)^2 - 2r(1+r)\cos(\alpha) + r^2}}.$$

Так как $r \geq 0$, то $|\lambda(\alpha)|$ будет всегда меньше единицы. Это говорит о том, что разностная схема (11.8) устойчива при любых значениях параметров h и τ (безусловно устойчива). Обратимся теперь к схеме (11.9). Применяя использованный выше подход, получим следующее уравнение

$$\frac{\lambda - 1}{\tau} + c\lambda \frac{\exp(i\alpha) - 1}{h} = 0,$$

из которого следует, что

$$|\lambda(\alpha)| = \sqrt{(1+r)^2 - 2r(1+r)\cos(\alpha) + r^2}.$$

Когда α изменяется от 0 до 2π , $|\lambda(\alpha)|$ пробегает значения от 1 до $1+2r$. Так как $r \geq 0$, то $|\lambda(\alpha)|$ будет всегда больше единицы. Это говорит о том, что разностная схема (11.9) неустойчива. Неустойчивые разностные схемы обычно дают осциллирующие решения возрастающей амплитуды, подобные тому, показанному на слайде 3.4, и, естественно, такие схемы не имеют никакого практического значения.

5. Принцип замороженных коэффициентов

Теперь рассмотрим простой метод, который расширяет область применения критерия фон Неймана и даёт возможность использовать его для анализа разностных схем в случае задач с переменными коэффициентами. В качестве примера выберем следующее нелинейное уравнение переноса:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad 0 \leq t \leq t_p, \\ u(x, 0) &= g(x), \quad -\infty \leq x \leq \infty,\end{aligned}$$

По аналогии с (11.6) можем построить следующую схему:

$$\frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau} + u_n^k \frac{u_n^k - u_{n-1}^k}{h} = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (11.22)$$

$$u_n^0 = g(x_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

Для проведения вычислений по этой формуле необходимо выбрать шаг по времени, а это требует анализа устойчивости. Непосредственно применить критерий фон Неймана мы не можем. Поэтому сначала применим следующий подход: «заморозим» переменный коэффициент в некоторой точке x^* , t^* области определения задачи. В результате получим набор разностных схем

$$\begin{aligned}\frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau} + u(x^*, t^*) \frac{u_n^k - u_{n-1}^k}{h} &= 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad k = 0, 1, \dots, \\ u_n^0 &= g(x_n), \quad n = 0, 1, \dots,\end{aligned} \quad (11.23)$$

где $u(x^*, t^*)$ – некоторый постоянный коэффициент. Принцип замороженных коэффициентов можно сформулировать следующим образом: разностная

схема (11.22) будет устойчива, если схема (11.23) будет устойчива для всех значений x^*, t^* из области определения задачи. Для $c = u(x^*, t^*) = \text{const}$ условие устойчивости нам известно:

$$\frac{c\tau}{h} \leq 1.$$

Учтём теперь, что

1) в исходной задаче скорость распространения волны зависит от самого решения,

2) для обеспечения устойчивости решения во всех точках следует ориентироваться на максимальное значение сеточного решения в каждый момент времени.

В результате приходим к следующему условию:

$$\frac{\tau_k \max_n u_n^k}{h} \leq 1 \quad \text{или} \quad \tau_k \leq \frac{h}{\max_n u_n^k}.$$

Лекция 13. Моделирование колебательных процессов

1. Линейный осциллятор

Уравнения движения линейного осциллятора, описывающего его свободные колебания, имеет вид

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0. \quad (13.1)$$

Здесь x – смещение от положения равновесия для механических систем (например координата грузика на пружине), заряд в электрических системах (например заряд на пластинах конденсатора в колебательном контуре) или что-нибудь ещё в зависимости от природы осциллятора; γ – параметр, характеризующий потери (трение, сопротивление и т. п.); ω_0 – собственная частота осциллятора; $\dot{x} = dx/dt$ и $\ddot{x} = d^2x/dt^2$ – соответствующие производные по времени.

Осциллятор – частный (но очень важный) пример линейных динамических систем, поведение которых описывается функциональным линейным уравнением $\hat{L}u = 0$, где \hat{L} – линейный оператор (напомним, что если u_1 и u_2 – решения уравнения $\hat{L}u = 0$, то его решениями являются также комбинации $C_1u_1 + C_2u_2$, где C_1 и C_2 – постоянные). Уравнение (13.1) в явном виде не содержит зависимости от времени. Это результат того, что система, которую оно описывает, не испытывает действия переменных сил и её параметры постоянны во времени – система автономная. Если теперь предположить, что $\gamma = 0$ (или добротность системы $Q = \omega_0/(2\gamma)$ бесконечна), то приходим к уравнению осциллятора, совершающего гармонические колебания:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0. \quad (13.2)$$

Такой осциллятор называется консервативным, поскольку его энергия сохраняется во времени. Это утверждение легко доказать даже для более общего чем (13.2) случая – случая нелинейного осциллятора:

$$\ddot{x} = f(x). \quad (13.3)$$

Полная энергия системы (13.3) складывается из суммы кинетической и потенциальной энергий:

$$W = W_k + W_{\Pi} = \frac{\dot{x}^2}{2} - \int_{x_0}^x f(\zeta) d\zeta. \quad (13.4)$$

Зависимость потенциальной энергии от координаты

$$W_{\Pi} = - \int_{x_0}^x f(\zeta) d\zeta \quad (\text{форма потенциальной "ямы"})$$

определяет поведение системы (13.3). Выбор знака в формуле для потенциальной энергии легко понять, если вычислить W_{Π} , скажем, для уравнения (13.2): если $x_0 = 0$, то $W_{\Pi} = \omega_0^2 x^2 / 2$, т. е. знак выбран так, чтобы потенциальная энергия маятника была тем больше, чем больше он отклонён. Дифференцируя (13.4) по времени, находим, что

$$\dot{W} = \dot{x}\ddot{x} - \dot{x}f(x) = \dot{x}[\ddot{x} - f(x)] = 0.$$

Таким образом, $W(x, \dot{x})$ не зависит от времени. Полная энергия сохраняется, т. е. колебательная система, соответствующая уравнению (13.3), консервативна.

2. Колебания в системе двух связанных осцилляторов

Если система обладает несколькими степенями свободы, возможен резонанс между отдельными подсистемами. В результате внутреннего резонанса отдельные подсистемы обмениваются энергией друг с другом, т. е. это уже взаимодействие подсистем.

В системах уже с двумя степенями свободы проявляются многие эффекты, характерные и для более сложных систем. Простейшая система двух связанных осцилляторов – два математических маятника длиной l_1 и l_2 с одинаковыми массами грузов $m_1 = m_2 = m$, находящиеся в поле тяготения. Маятники связаны невесомой пружиной с жёсткостью k . Движение такой консервативной системы с двумя степенями свободы в линейном приближении описывают уравнения

$$\begin{aligned}\frac{dv_1}{dt} &= -\omega_1^2 x_1 + \frac{k}{m}(x_2 - x_1), & \frac{dx_1}{dt} &= v_1, \\ \frac{dv_2}{dt} &= -\omega_2^2 x_2 + \frac{k}{m}(x_2 - x_1), & \frac{dx_2}{dt} &= v_2,\end{aligned}$$

где $\omega_{1,2}^2 = g/l_{1,2}$. Эти уравнения могут быть получены либо из выражения для энергии системы, которое для малых отклонений маятников имеет вид

$$H = \frac{m}{2}(v_1^2 + v_2^2) + \frac{m}{2}(\omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2) + \frac{k}{2}(x_1^2 - x_2^2)$$

(первое слагаемое в H очевидно, а второе и третье – соответственно потенциальная энергия грузов в поле тяжести и потенциальная энергия упругости пружины – энергия связи), либо из физических соображений, основанных на том, что ускорение маятника связано с существованием возвращающих сил гравитационного поля ($-m\omega_{1,2}^2 x_{1,2}^2$) и пружины ($k(x_{2,1} - x_{1,2}^2)$).

3. Колебания в упорядоченных структурах

Простыми примерами модели упорядоченной структуры, в которой тождественные осцилляторы связаны между собой не любым, а определённым образом, являются: линейная цепочка из одинаковых частиц, расположенных вдоль прямой на равных расстояниях друг от друга (одномерная решётка из одинаковых частиц); механическая система, состоящая из набора маятников; цепочка из LC -элементов; бесконечный ряд одинаковых акустических резонаторов; цепочка, образованная из магнитов, и др.

Весьма приближённую модель твёрдого тела можно представить как систему правильно расположенных в пространстве шариков, связанных друг с другом пружинами. Если один шарик сместить из положения равновесия, то будут смещаться и соседние – по всей упорядоченной структуре побежит волна.

Начнём с вывода уравнения движения безграничной одномерной решётки из одинаковых равноудалённых частиц (слайд 3.5). Рассмотрим продольные колебания цепочки.

Слайд 3.5. Одномерная решётка, состоящая из одинаковых равноудалённых частиц; сверху – решётка до возмущения; внизу – после возмущения (продольные возмущения)

Как видно из слайда 3.5, координата n -й частицы в данный момент времени после возмущения равна

$$x_n = na + x'_n,$$

где x'_n – отклонение от положения равновесия (будем далее предполагать, что $x'_n \ll a$). Расстояние между двумя произвольными частицами (n -й и $(n + l)$ -й) составит

$$X_{n,n+l} = x_{n+l} - x_n = la + x'_{n+l} - x'_n.$$

Если считать, что потенциальная энергия, на основании которой можно найти силу взаимодействия двух произвольных частиц, зависит только от расстояния между ними $|x_{n+l} - x_n|$ (будем обозначать её через $W(X) = W(|x_{n+l} - x_n|)$), то для потенциальной энергии решётки можно записать следующее выражение:

$$W = \sum_n \sum_{l>0} W(|x_{n+l} - x_n|). \quad (13.5)$$

Рассмотрим линейные колебания, т. е. учтём малость x'_n . Тогда, разлагая $W(|x_{n+l} - x_n|)$ в ряд Тейлора и ограничиваясь членами второго порядка малости, получаем

$$W(x_{n+l} - x_n) = W(la) + (x'_{n+l} - x'_n)W'(la) + \frac{1}{2}(x'_{n+l} - x'_n)^2 W''(la), \quad (13.6)$$

где

$$W'(la) = \left. \frac{dW}{dX} \right|_{X=la}, \quad W''(la) = \left. \frac{d^2W}{dX^2} \right|_{X=la}.$$

Подставляя (13.6) в (13.5), запишем выражение для потенциальной энергии цепочки в виде

$$W = \sum_n \sum_{l>0} \left[(x'_{n+l} - x'_n) W'(la) + \frac{1}{2} (x'_{n+l} - x'_n)^2 W''(la) \right] + W_0, \quad (13.7)$$

где $W_0 = \sum_n \sum_{l>0} W(la)$. Зная W , легко вычислить силу, действующую на p -ю частицу, поскольку $F_p = -\partial W / \partial x'_p$. Дифференцирование ведётся по смещению $\partial x'_p$ рассматриваемой частицы, поэтому вклад в F_p при суммировании по n дадут лишь слагаемые, зависящие от $\partial x'_p$, т. е. слагаемые, для которых справедливы равенства $n = p$ и $n = l = p$. Тогда из (13.7) следует, что

$$F_p = -\frac{\partial W}{\partial x'_p} = \sum_{l>0} W''(la) (x'_{p+l} + x'_{p-l} - 2x'_p). \quad (13.8)$$

Можно показать, что для модели рис. 13.1 величина $W''(la)$ аналогична жёсткости пружинок, соединяющих шарики. Если частицы в решётке имеют массу m , то согласно второму закону Ньютона $m d^2 x'_p / dt^2 = F_p$ уравнение движения p -й частицы в решётке с учетом (13.8) можно записать так:

$$m \frac{d^2 x'_p}{dt^2} = \sum_{l>0} W''(x'_{p+l} + x'_{p-l} - 2x'_p), \quad W''(l) = W''(la). \quad (13.9)$$

Предположим теперь, что в решётке каждая частица взаимодействует только с ближайшими соседними. Тогда вместо (13.9) имеем

$$m \frac{d^2 x'_p}{dt^2} = W''(x'_{p+1} + x'_{p-1} - 2x'_p). \quad (13.10)$$

4. Нелинейный осциллятор

Рассмотрим нелинейный осциллятор, уравнение которого имеет вид

$$\ddot{x} + f(x) = 0. \quad (13.11)$$

Если $f(x)$ – линейная функция, то это линейный осциллятор. Какие физические задачи приводят к уравнению (13.11), если $f(x)$ – нелинейная функция?

Уравнение (13.11) описывает, например, колебательный контур, катушка индуктивности которого содержит ферритовый сердечник, что приводит к нелинейной зависимости магнитного потока Φ от тока I . Нелинейность в контуре может быть связана и с ёмкостью, если заряд Q нелинейно зависит от напряжения U .

5. Периодические автоколебания

Большинство окружающих нас в природе и технике нелинейных динамических систем в общем случае неконсервативно. Практически в любой системе имеются потери (трение, излучение, нагрев и т. д.), и обычно система не является энергетически изолированной: на неё действуют различные внешние силы и поля, как статические, так и переменные. Какие принципиально новые (по сравнению с консервативными системами) явления возникают в диссипативных системах, в которых колебательная энергия может не только диссипировать из-за потерь, но и пополняться из-за неустойчивостей, связанных с неравновесностью системы? Самое важное и замечательное среди таких явлений – генерация незатухающих колебаний, свойства которых не зависят от того, когда и из какого начального состояния была запущена система, т. е. незатухающих колебаний, устойчивых как по отношению к внешним возмущениям, так и к изменению начальных условий. Системы, обладающие свойством генерировать такие колебания, называют автоколебательными.

Автоколебания – это незатухающие колебания, поддерживаемые внешними источниками энергии в нелинейной диссипативной системе, вид и свойства которых определяются самой системой и не зависят от начальных условий.

Автоколебания принципиально отличаются от других колебательных процессов в диссипативных системах тем, что для их поддержания, вообще говоря, не требуется периодических воздействий извне.

Уравнение Ван-дер-Поля

$$\ddot{x} - \alpha(1 - \beta x^2)\dot{x} + w_0^2 x = 0 \quad (13.12)$$

служит основной моделью автоколебаний с одной степенью свободы. Вводя безразмерные переменные и параметры $\tau = w_0 t$, $x = \beta^{1/2}$, $\mu = \alpha w_0$, получим

$$\ddot{x} - \mu(1 - x^2)\dot{x} + x = 0. \quad (13.13)$$

При $\mu = 0$ система становится линейной консервативной. Естественно ожидать, что при малом μ ($\mu \ll 1$) автоколебания будут мало отличаться от гармонических колебаний, а нелинейное трение лишь выбирает амплитуду устойчивого предельного цикла. При больших μ форма колебаний может существенно отличаться от синусоидальной.

6. Численное решение

Математические модели колебательных процессов описываются системами обыкновенных дифференциальных уравнений. Методы решения таких систем рассматривались в лекции 10. Значение шага по времени, которое следует из анализа устойчивости численного алгоритма, зависит от физических параметров систем.

Лекция 14. Моделирование распространения тепла в стержне

1. Математическая модель

Рассмотрим процесс распространения температуры в стержне. Этот процесс может быть описан функцией $u(x, t)$, представляющей температуру в сечении x в момент времени t . Сформулируем физические закономерности, определяющие процессы, связанные с распространением тепла.

1. *Закон Фурье*. Если температура тела неравномерна, то в нем возникают тепловые потоки, направленные из мест с более высокой температурой в места с более низкой температурой.

Количество тепла, протекающее через сечение x за промежуток времени $(t, t+dt)$, равно

$$dQ = qS dt, \quad (14.1)$$

где

$$q = -k(x) \frac{\partial u}{\partial x} \quad (14.2)$$

— плотность теплового потока, равная количеству тепла, протекшего в единицу времени через площадь в 1 м^2 . Закон Фурье в интегральной форме запишется так:

$$Q = -S \int_{t_1}^{t_2} k \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) dt, \quad (14.3)$$

где Q — количество тепла, протекающее за промежуток времени (t_1, t_2) через сечение x . Если стержень неоднороден, то k является функцией x .

2. Количество тепла, которое необходимо сообщить однородному телу, чтобы повысить его температуру на Δu , равно

$$Q = ct\Delta u = c\rho V \Delta u, \quad (14.4)$$

где c — удельная теплоемкость, m — масса тела, ρ — его плотность, V — объём.

Если изменение температуры имеет различную величину на разных участках стержня или если стержень неоднороден, то

$$Q = \int_{t_1}^{t_2} c \rho S \Delta u(x) dx. \quad (14.5)$$

3. Внутри стержня может возникать или поглощаться тепло (например при прохождении тока, вследствие химических реакций и т. д.). Выделение тепла может быть characterized плотностью тепловых источников $F(x, t)$ в точке x в момент t . В результате действия этих источников на участке стержня $(x, x + dx)$ за промежуток времени $(t, t + dt)$ выделится количество тепла

$$dQ = SF(x, t) dx dt, \quad (14.6)$$

или в интегральной форме

$$Q = S \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} F(x, t) dx dt, \quad (14.7)$$

где Q – количество тепла, выделяющегося на участке стержня (x_1, x_2) за промежуток времени (t_1, t_2) .

Уравнение теплопроводности получается при подсчете баланса тепла на некотором отрезке (x_1, x_2) за некоторый промежуток времени (t_1, t_2) . Применяя закон сохранения энергии и пользуясь формулами (14.3), (14.5) и (14.7), можно написать равенство

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \left[k \frac{\partial u}{\partial x}(x, \tau) \Big|_{x=x_2} - k \frac{\partial u}{\partial x}(x, \tau) \Big|_{x=x_1} \right] d\tau + \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} F(\xi, \tau) d\xi dt = \\ = \int_{x_1}^{x_2} c \rho [u(\xi, t_2) - u(\xi, t_1)] d\xi, \end{aligned} \quad (14.8)$$

которое и представляет уравнение теплопроводности в интегральной форме.

Чтобы получить уравнение теплопроводности в дифференциальной форме, предположим, что функция $u(x, t)$ имеет непрерывные производные u_{xx} и u_t .

Пользуясь теоремой о среднем, получаем равенство

$$\begin{aligned} & \left[k \frac{\partial u}{\partial x}(x, \tau) \Big|_{x=x_2} - k \frac{\partial u}{\partial x}(x, \tau) \Big|_{x=x_1} \right]_{\tau=t_3} \Delta t + F(x_4, t_4) \Delta x \Delta t = \\ & = \{ c \rho [u(\xi, t_2) - u(\xi, t_1)] \}_{\xi=x_3} \Delta x, \end{aligned} \quad (14.9)$$

которое при помощи теоремы о конечных приращениях можно преобразовать к виду

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[k \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right]_{x=x_5}^{t=t_3} \Delta t \Delta x + F(x_4, t_4) \Delta x \Delta t = \left[c \rho \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \right]_{x=x_3}^{t=t_5} \Delta x \Delta t, \quad (14.10)$$

где t_3, t_4, t_5 , и x_3, x_4, x_5 — промежуточные точки интервалов (t_1, t_2) и (x_1, x_2) . Отсюда, после сокращения на произведение $\Delta x \Delta t$, находим:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_5}^{t=t_3} + F(x, t) \Big|_{t=t_4}^{x=x_4} = c \rho \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_3}^{t=t_5}. \quad (14.11)$$

Все эти рассуждения относятся к произвольным промежуткам (x_1, x_2) и (t_1, t_2) . Переходя к пределу при $x_1, x_2 \rightarrow x$ и $t_1, t_2 \rightarrow t$, получим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) + F(x, t) = c \rho \frac{\partial u}{\partial t}, \quad (14.12)$$

называемое *уравнением теплопроводности*.

Рассмотрим некоторые частные случаи.

1. Если стержень однороден, то k, c, ρ можно считать постоянными, и уравнение обычно записывают в виде

$$\begin{aligned} u_t &= a^2 u_{xx} + f(x, t), \\ a^2 &= \frac{k}{c \rho}, \quad f(x, t) = \frac{F(x, t)}{c \rho}, \end{aligned}$$

где a^2 — постоянная, называемая *коэффициентом температуропроводности*. Если источники отсутствуют, т. е. $F(x, t) = 0$, то уравнение теплопроводности принимает простой вид:

$$u_t = a^2 u_{xx}. \quad (14.12')$$

2. Плотность тепловых источников может зависеть от температуры. В случае теплообмена с окружающей средой, подчиняющегося *закону Ньютона*, количество тепла, теряемого стержнем, рассчитанное на единицу длины и времени, равно

$$F_0 = h(u - \theta),$$

где $\theta(x, t)$ — температура окружающей среды, h — коэффициент теплообмена. Таким образом, плотность тепловых источников в точке x в момент t равна

$$F = F_1(x, t) - h(u - \theta), \quad (14.13)$$

где $F_1(x, t)$ — плотность других источников тепла.

Если стержень однороден, то уравнение теплопроводности с боковым теплообменом имеет следующий вид:

$$u_t = a^2 u_{xx} - \alpha u + f(x, t),$$

где $\alpha = h/c\rho$; $f(x, t) = \alpha\theta(x, t) + F_1(x, t)/c\rho$ — известная функция.

3. Коэффициенты k и c , как правило, являются медленно меняющимися функциями температуры. Поэтому сделанное выше предположение о постоянстве этих коэффициентов возможно лишь при условии рассмотрения небольших интервалов изменения температуры. Изучение температурных процессов в большом интервале изменения температур приводит к квазилинейному уравнению теплопроводности, которое для неоднородной среды запишется в виде

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(u, x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + F(x, t) = C(u, x) \rho(u, x) \frac{\partial u}{\partial t}.$$

Для выделения единственного решения уравнения теплопроводности необходимо к уравнению присоединить начальные и граничные условия.

Начальное условие состоит в задании значений функции $u(x, t)$ в начальный момент t_0 .

Граничные условия могут быть различны в зависимости от температурного режима на границах. Рассматривают три основных типа граничных условий.

1. На конце стержня $x = 0$ задана температура

$$u(0, t) = \mu(t),$$

где $u(t)$ – функция, заданная в некотором промежутке $t_0 \leq t \leq T$, причем T есть промежуток времени, в течение которого изучается процесс.

2. На конце $x = l$ задано значение производной

$$\frac{\partial u}{\partial x}(l, t) = \nu(t).$$

К этому условию мы приходим, если задана величина теплового потока $Q(l, t)$, протекающего через торцевое сечение стержня,

$$Q(l, t) = -k \frac{\partial u}{\partial x}(l, t),$$

откуда $\frac{\partial u}{\partial x}(l, t) = \nu(t)$, где $\nu(t)$ – известная функция, выражающаяся через заданный поток $Q(l, t)$ по формуле

$$\nu(t) = -\frac{Q(l, t)}{k}.$$

3. На конце $x = l$ задано линейное соотношение между производной и функцией

$$\frac{\partial u}{\partial x}(l, t) = -\lambda[u(l, t) - \theta(t)].$$

Это граничное условие соответствует теплообмену по закону Ньютона на поверхности тела с окружающей средой, температура которой θ известна.

Аналогично ставятся и другие краевые задачи с различными комбинациями краевых условий при $x = 0$ и $x = l$. Возможны краевые условия более сложного типа, чем те, которые были рассмотрены выше.

Если среда неоднородна и коэффициенты уравнения являются разрывными функциями, то промежуток $(0, l)$, в котором ищется решение

задачи, разбивается точками разрыва коэффициентов на несколько частей, внутри которых функция u удовлетворяет уравнению теплопроводности, а на границах – условиям сопряжения.

В простейшем случае эти условия заключаются в непрерывности температуры и непрерывности теплового потока

$$u(x_i - 0, t) = u(x_i + 0, t),$$

$$k(x_i - 0) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i - 0, t) = k(x_i + 0) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i + 0, t),$$

где x_i – точки разрыва коэффициентов.

2. Численное решение уравнения теплопроводности

Рассмотрим вначале однородную среду. Введём разностную сетку с узлами (x_n, t_k) и шагами h и τ . Аппроксимируем производную по времени разностью вперёд относительно точки (x_n, t_k) , а производную $\partial^2 u / \partial x^2$ трёхточечным разностным оператором в момент времени t_k . В результате дифференциальное уравнение (4.12') заменяется разностной схемой

$$\frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau} = a^2 \left(\gamma \frac{u_{n+1}^{k+1} - 2u_n^{k+1} + u_{n-1}^{k+1}}{h^2} + (1 - \gamma) \frac{u_{n+1}^k - 2u_n^k + u_{n-1}^k}{h^2} \right), \quad (14.14)$$

$$0 \leq \gamma \leq 1, \quad k = 0, 1, \dots; \quad n = 1, \dots, N-1,$$

+ разностная форма граничных условий,

которая включает в себя все возможные двухслойные схемы.

Рассмотрим погрешность аппроксимации схемы (14.14). В общем случае схема (14.14) аппроксимирует уравнение (4.12') с точностью до членов $O(\tau + h^2)$. Если задать параметр γ равным

$$\gamma = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12\kappa\tau}, \quad (14.15)$$

то разностная схема (14.14) аппроксимирует уравнение (4.12') с точностью до величин $O(\tau^2 + h^4)$.

Из анализа устойчивости схемы (14.14) следует, что

$$\frac{k\tau}{h^2} = \beta \leq \frac{1}{2-4\gamma}, \quad 0 \leq \gamma < \frac{1}{2},$$

$$\beta - \text{любое} > 0, \quad \frac{1}{2} \leq \gamma \leq 1.$$

Перейдём теперь к обсуждению вопроса, связанного с аппроксимацией граничных условий. В случае граничных условий первого рода, когда на границе задаётся значение температуры, представление этих условий в разностной форме не представляет особого труда. Например, заданное при $x = 0$ условие $u(0, t) = f(t)$ записывается как

$$u_0^{k+1} = f(t_{k+1}).$$

Граничные условия второго и третьего рода определяют значения теплового потока в граничных точках. В качестве примера рассмотрим условие

$$a \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = f(t), \quad (14.16)$$

Для построения второго порядка по h , следует применить метод фиктивных областей. Тогда получим следующую разностную форму граничного условия (14.16):

$$(1 + 2\beta\gamma)u_0^{k+1} - (2\beta\gamma)u_1^{k+1} = (1 - 2\beta(1 - \gamma))u_0^k + (2\beta(1 - \gamma))u_1^k -$$

$$-\frac{2\beta h}{a}(\gamma f(t_{k+1}) + (1 - \gamma)f(t_k)).$$

В случае явной схемы ($\gamma = 0$), это выражение непосредственно даёт формулу для вычисления температуры в граничном узле. В общем случае, когда $\gamma \neq 0$, разностная схема (14.14) является неявной, так как при каждом значении n разностное уравнение включает в себя неизвестные в момент времени t_{k+1} значения температуры в трёх узлах сетки. Для того чтобы вычислить решение в момент времени t_{k+1} , необходимо рассмотреть совокупность всех разностных уравнений. Это приводит к системе линейных уравнений с трёхдиагональной матрицей.

Предположение о постоянстве теплофизических свойств среды далеко не всегда приемлемо. На практике мы часто имеем дело с материалами с неоднородными физическими свойствами. Более того, теплофизические

свойства большинства материалов зависят от температуры. Поэтому встаёт необходимость решения уравнения теплопроводности с переменными коэффициентами. Вначале мы рассмотрим распространение тепла в одномерной неоднородной среде, которое описывается уравнением (14.12). На самом деле мы будем использовать интегральную форму (14.8). Проинтегрируем уравнение (14.8) по разностной ячейке:

$$\int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(\rho(x)c(x) \frac{\partial u}{\partial t} \right) dt dx = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right) dx dt,$$

а затем, аппроксимируя выражение для теплового потока центральной разностью относительно точки $x_{n+1/2}$, получим

$$\begin{aligned} (\rho c)_n \frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau} = & \gamma \left(a_{n+1/2} \frac{u_{n+1}^{k+1} - u_n^{k+1}}{h^2} - a_{n-1/2} \frac{u_n^{k+1} - u_{n-1}^{k+1}}{h^2} \right) + \\ & + (1 - \gamma) \left(a_{n+1/2} \frac{u_{n+1}^k - u_n^k}{h^2} - a_{n-1/2} \frac{u_n^k - u_{n-1}^k}{h^2} \right), \end{aligned} \quad (14.17)$$

где

$$(\rho c)_n = \frac{1}{h} \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \rho(x)c(x) dx, \quad a_{n+1/2} = k(x_{n+1/2}).$$

В случае уравнения с переменными коэффициентами аналитическое исследование аппроксимации не всегда возможно. Допустим, что $k(x)$ является дважды непрерывно дифференцируемой функцией. Тогда можно показать, что в общем случае разностная схема (14.17) аппроксимирует дифференциальное уравнение (14.12) с точностью до членов $O(\tau + h^2)$, а если положить $\gamma = 1/2$, то с точностью до членов $O(\tau^2 + h^2)$. В случае кусочно-непрерывной функции $k(x)$ о порядке аппроксимации нельзя ничего сказать заранее, так как он будет зависеть от решения конкретной задачи.

Для анализа устойчивости применим принцип замороженных коэффициентов и получим следующее условие:

$$\begin{aligned} \beta = \frac{\tau}{h^2} \max_n \left(\frac{a_{n-1/2} + a_{n+1/2}}{(\rho c)_n} \right) & \leq \frac{1}{1 - 2\gamma}, \quad 0 \leq \gamma < 1/2, \\ \beta - \text{любое} > 0, & \quad 1/2 \leq \gamma \leq 1. \end{aligned} \quad (14.18)$$

Для нелинейной задачи

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho(u)c(u) \cdot u) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad 0 \leq t \leq T, \quad 0 \leq x \leq l,$$

разностная схема строится аналогичным образом. Только для данной задачи следует использовать явную аппроксимацию с переменным шагом по времени, так как неявная схема требует решения системы нелинейных уравнений на каждом временном шаге, что может потребовать неоправданно большого объёма вычислений. Учитывая это замечание, преобразуем схему (14.17) к следующему виду:

$$\rho_n^k c_n^k \frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\tau_k} = a_{n+1/2}^k \frac{u_{n+1}^{k+1} - u_n^{k+1}}{h^2} - a_{n-1/2}^k \frac{u_n^{k+1} - u_{n-1}^{k+1}}{h^2}, \quad (14.19)$$

где

$$\rho_n^k = \rho(u_n^k), \quad c_n^k = c(u_n^k), \quad a_{n+1/2}^k = k \left(\frac{1}{2} (u_{n+1}^k + u_n^k) \right).$$

Условие устойчивости для данной схемы следует из условия (14.18) при $\gamma = 0$:

$$\frac{\tau_k}{h^2} \max_n \left(\frac{a_{n-1/2}^k + a_{n+1/2}^k}{\rho_n^k c_n^k} \right) \leq 1.$$

Лекция 15. Моделирование распространения тепла в пространстве

1. Распространение тепла в пространстве

Процесс распространения тепла в пространстве может быть characterized температурой $u(x, y, z, t)$, являющейся функцией x, y, z и t .

Если температура непостоянна, то возникают тепловые потоки, направленные от мест с более высокой температурой к местам с более низкой температурой.

Пусть $d\sigma$ – некоторая площадка в точке $P(\xi, \eta, \zeta)$ с нормалью \mathbf{n} . Количество тепла, протекающее через $d\sigma$ в единицу времени, согласно закону Фурье, равно

$$W_n d\sigma = (\mathbf{W} \mathbf{n}) d\sigma = -k \frac{\partial u}{\partial n} d\sigma,$$

где k – коэффициент теплопроводности, $\partial u / \partial n$ – производная по направлению нормали \mathbf{n} к $d\sigma$, равная

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial u}{\partial x} \cos(n, x) + \frac{\partial u}{\partial y} \cos(n, y) + \frac{\partial u}{\partial z} \cos(n, z) = (\text{grad } u, \mathbf{n}).$$

Закон Фурье часто записывают в форме

$$\mathbf{W} = -k \text{grad } u,$$

где \mathbf{W} – вектор плотности теплового потока.

Если среда изотропная, то k есть скаляр. В случае анизотропной среды k есть тензор, а вектор теплового потока \mathbf{W} представляет собой произведение тензора k на вектор – $\text{grad } u$. Мы будем рассматривать изотропные среды.

Перейдем к выводу уравнения теплопроводности в пространстве.

Рассмотрим некоторый объем V , ограниченный поверхностью S . Уравнение баланса тепла для объема V за время $\Delta t = t_2 - t_1$ имеет вид

$$\iiint_V c\rho[u(P, t_2) - u(P, t_1)] dV_P = - \int_{t_1}^{t_2} dt \iint_S W_n d\sigma + \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\iiint_V F(P, t) dV_P \right), \quad (15.1)$$

где $P = P(\xi, \eta, \zeta)$ – точка интегрирования, $dV_p = d\xi d\eta d\zeta$ – элемент объема, $c\rho$ – теплоемкость единицы объема, W_n – нормальная составляющая плотности теплового потока. Это уравнение выражает закон сохранения тепла в объеме V за время Δt : изменение количества тепла в объеме V за время $\Delta t = t_2 - t_1$ (левая часть в (15.1)) обусловлено потоком тепла через граничную поверхность S (первое слагаемое в правой части равенства (15.1)), а также количеством тепла, выделившимся в объеме V за время Δt в результате действия тепловых источников.

Чтобы перейти от интегрального уравнения баланса к дифференциальному уравнению, предположим, что $u(M, t) = u(x, y, z, t)$ дважды дифференцируема по x, y, z и один раз по t и что эти производные непрерывны в рассматриваемой области. Тогда можно воспользоваться формулой Остроградского

$$\iint_S W_n d\sigma = \iiint_V \operatorname{div} \mathbf{W} dV$$

и преобразовать уравнение баланса к виду

$$\iiint_V c\rho [u(P, t_2) - u(P, t_1)] dV_P = - \int_{t_1}^{t_2} \iiint_V \operatorname{div} \mathbf{W} dV_P dt + \int_{t_1}^{t_2} \iiint_V F(P, t) dV_P dt.$$

(Будем предполагать $F(P, t)$ непрерывной функцией своих аргументов.)

Применяя теорему о среднем и теорему о конечных приращениях для функций многих переменных, получим

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} \bigg|_{\substack{t=t_3 \\ P=P_1}} \Delta t \cdot V = - \operatorname{div} \mathbf{W} \bigg|_{\substack{t=t_4 \\ P=P_2}} \Delta t \cdot V + F \bigg|_{\substack{t=t_5 \\ P=P_3}} \Delta t \cdot V,$$

где t_3, t_4, t_5 – промежуточные точки на интервале Δt , а P_1, P_2, P_3 – точки в объеме V . Фиксируем некоторую точку $M(x, y, z)$ внутри V и будем стягивать V в эту точку, а Δt устремим к нулю. После сокращения на $\Delta t V$ и указанного предельного перехода получим

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t}(x, y, z, t) = -\operatorname{div} \mathbf{W}(x, y, z, t) + F(x, y, z, t).$$

Заменяя \mathbf{W} по формуле $\mathbf{W} = -k \operatorname{grad} u$, получим дифференциальное уравнение теплопроводности

$$c\rho u_t = -\operatorname{div}(k \operatorname{grad} u) + F.$$

Если среда однородна, то это уравнение обычно записывают в виде

$$u_t = a^2(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) + \frac{F}{c\rho},$$

где $a^2 = k/c\rho$ – коэффициент температуропроводности, или

$$u_t = a^2 \Delta u_{xx} + f \quad \left(f = \frac{F}{c\rho} \right), \quad (15.2)$$

где

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \text{оператор Лапласа.}$$

2. Численное решение уравнения теплопроводности

Рассмотрим основные методы решения многомерных задач на примере построения разностных схем для двумерного уравнения теплопроводности (15.2).

Чтобы применить метод конечных разностей в этой ситуации, поступим совершенно так же, как и в одномерном случае. С этой целью построим множество равноотстоящих точек x_n ($n = 0, \dots, N$) на отрезке $0 \leq x \leq l_x$ с $x_0 = 0$, $x_N = l_x$, $x_{n+1} - x_n = h$, а также множество равноотстоящих точек y_m ($m = 0, \dots, M$) на отрезке $0 \leq y \leq l_y$ с $y_0 = 0$, $y_M = l_y$, $y_{m+1} - y_m = h$. После этого область, где ищется решение, покрывается прямоугольной пространственной сеткой: через каждую точку x_n проводятся прямые, параллельные оси y , а через каждую точку y_m – прямые, параллельные оси x . В дополнение введём множество точек по времени t_k ($k = 0, 1, \dots$) с $t_{k+1} - t_k = \tau$. Тогда типичная точка разностной сетки имеет координаты вида (x_n, y_m, t_k) . После этого входящие в уравнение (15.2) частные производные заменяются соответствующими конечно-разностными аппроксимациями.

Для более компактной записи разностных схем, примем следующие обозначения для разностных операторов аппроксимирующих вторые производные по x и y

$$\Delta_x u_{n,m}^k = \frac{1}{h^2} (u_{n+1,m}^k - 2u_{n,m}^k + u_{n-1,m}^k),$$

$$\Delta_y u_{n,m}^k = \frac{1}{h^2} (u_{n,m+1}^k - 2u_{n,m}^k + u_{n,m-1}^k).$$

Тогда двумерный аналог схемы (14.14) записывается как

$$\frac{u_{n,m}^{k+1} - u_{n,m}^k}{\tau} = a^2 \gamma (\Delta_x u_{n,m}^{k+1} + \Delta_y u_{n,m}^{k+1}) + a^2 (1 - \gamma) (\Delta_x u_{n,m}^k + \Delta_y u_{n,m}^k) + f(x_n, y_m, t_k), \quad k = 0, 1, \dots; \quad n = 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1. \quad (15.3)$$

Если $\gamma > 0$, то схема (15.3) неявная; для каждого значения k необходимо решать разностное уравнение вида

$$u_{n,m}^{k+1} + \kappa \gamma \tau (\Delta_x u_{n,m}^{k+1} + \Delta_y u_{n,m}^{k+1}) = d_{n,m}$$

относительно неизвестных значений в момент времени t_{k+1} . Эффективное решение такого уравнения возможно только для довольно узкого класса задач (см. лекцию 9). С другой стороны, явная схема (15.3) имеет довольно сильное ограничение на шаг по времени (для квадратной сетки $\beta \leq 1/4$), что также может потребовать большого объёма вычислений. Поэтому мы не будем останавливаться на подробном анализе этой схемы, а перейдём к рассмотрению более экономичных разностных схем, построенных на основе метода расщепления.

Существуют различные способы построения схем расщепления. Мы рассмотрим лишь несколько примеров. Явная схема расщепления имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{v_{n,m} - u_{n,m}^k}{\tau} &= a^2 \Delta_x u_{n,m}^k + f(x_n, y_m, t_k), \\ n &= 1, \dots, N-1; \quad m = m_s, \dots, m_e; \\ \frac{u_{n,m}^{k+1} - v_{n,m}}{\tau} &= a^2 \Delta_y v_{n,m}, \\ n &= n_s, \dots, n_e; \quad m = 1, \dots, M-1; \\ u_{n,m}^0 &= g(x_n, y_m) \\ &+ \text{разностная форма граничных условий.} \end{aligned} \quad (15.4)$$

Параметры n_s , n_e , m_s , m_e зависят от типа граничных условий:

$$n_s = \begin{cases} 1 & \text{для граничных условий 1-го рода при } x = 0, \\ 0 & \text{для граничных условий 2-го рода при } x = 0, \end{cases}$$

$$n_e = \begin{cases} N - 1 & \text{для граничных условий 1-го рода при } x = l_x, \\ N & \text{для граничных условий 2-го рода при } x = l_x, \end{cases}$$

$$m_s = \begin{cases} 1 & \text{для граничных условий 1-го рода при } y = 0, \\ 0 & \text{для граничных условий 2-го рода при } y = 0, \end{cases}$$

$$m_e = \begin{cases} M - 1 & \text{для граничных условий 1-го рода при } y = l_y, \\ M & \text{для граничных условий 2-го рода при } y = l_y. \end{cases}$$

Вычисления по схеме (15.4) производятся следующим образом. На первом шаге при каждом значении m решаются одномерные задачи по x , что даёт промежуточное решение $\mathbf{v} = \{v_{n,m}\}$. Затем, решая при каждом значении n одномерные задачи по y , мы получаем сеточную функцию \mathbf{u}^{k+1} , которая и считается приближённым решением в момент времени t_{k+1} . Схема (15.4) аппроксимирует дифференциальную задачу (15.2) с первым порядком по τ и со вторым порядком по h .

Процедура исследования устойчивости схемы (15.4) аналогична процедуре, которую мы использовали для анализа одномерных задач. Только в двумерном случае мы зададим решение в виде

$$u_{n,m}^k = \lambda^k \exp(i\alpha_1 n + i\alpha_2 m). \quad (15.5)$$

Для выполнения критерия фон Неймана необходимо $|1 - 4\beta| \leq 1$, откуда следует условие устойчивости $\beta \leq 1/2$. Это говорит о том, что мы можем выбрать вдвое больший шаг по времени по сравнению с явной схемой (15.3).

Неявная схема расщепления имеет вид

$$\frac{v_{n,m} - u_{n,m}^k}{\tau} = a^2 \Delta_x v_{n,m} + f(x_n, y_m, t_k),$$

$$n = 1, \dots, N-1; \quad m = m_s, \dots, m_e,$$

$$\frac{u_{n,m}^{k+1} - v_{n,m}}{\tau} = a^2 \Delta_y u_{n,m}^{k+1}, \quad (15.6)$$

$$n = n_s, \dots, n_e; \quad m = 1, \dots, M-1,$$

$$u_{n,m}^0 = g(x_n, y_m),$$

+ разностная форма граничных условий.

Подстановка решения (15.5) в уравнение (15.6) даёт следующее выражение для собственных значений оператора перехода:

$$\lambda(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{\left(1 + 4\beta \sin^2\left(\frac{1}{2}\alpha_1\right)\right)\left(1 + 4\beta \sin^2\left(\frac{1}{2}\alpha_2\right)\right)}.$$

Тогда $|\lambda(\alpha_1, \alpha_2)| \leq 1$ для всех значений α_1, α_2 и значит схема (15.6) устойчива при любых значениях $\beta > 0$.

Вообще говоря, рассмотренный нами способ расщепления не является единственно возможным. Например, уравнение (15.2) можно представить в следующей форме

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right).$$

На основе такого расщепления можно записать следующую схему:

$$\frac{v_{n,m} - u_{n,m}^k}{\tau} = \frac{a^2}{2} \left(\Delta_x v_{n,m} + \Delta_y u_{n,m}^k \right) + \frac{1}{2} f(x_n, y_m, t_k),$$

$$n = 1, \dots, N-1; \quad m = m_s, \dots, m_e,$$

$$\frac{u_{n,m}^{k+1} - v_{n,m}}{\tau} = \frac{a^2}{2} \left(\Delta_x v_{n,m} + \Delta_y u_{n,m}^{k+1} \right) + \frac{1}{2} f(x_n, y_m, t_k), \quad (15.7)$$

$$n = n_s, \dots, n_e; \quad m = 1, \dots, M-1,$$

$$u_{n,m}^0 = g(x_n, y_m)$$

+ разностная форма граничных условий.

Эта схема получила название метода переменных направлений (ADI, Alternating Direction Implicit). Так как эта схема является неявной, то процедура расчёта по этой схеме аналогична процедуре расчёта по неявной схеме расщепления (15.6).

В заключение обсудим расчёт граничных условий. Разностная форма граничных условий первого рода практически одинакова для всех рассмотренных нами схем. Например, условие $u(0, y, t) = f(y, t)$ в случае явной схемы (15.3) записывается как

$$u_{0,m}^{k+1} = f(y_m, t_{k+1}), \quad m = 1, \dots, M-1.$$

В случае схем расщепления (15.4) и (15.6) граничное условие имеет вид

$$v_{0,m} = f(y_m, t_{k+1}), \quad m = 1, \dots, M-1.$$

и так как на втором шаге расчёта по данным схемам это значение не изменяется, то можно положить

$$u_{0,m}^{k+1} = v_{0,m}.$$

В случае граничных условий второго рода, их разностная форма зависит от вида основной разностной схемы. В качестве примера рассмотрим граничное условие

$$k \frac{\partial u}{\partial x}(0, y, t) = f(y, t).$$

Для явной схемы (15.3) применение метода фиктивных областей даёт следующую разностную форму этого граничного условия:

$$\begin{aligned} u_{0,m}^{k+1} = & (1 - 2\beta)u_{0,m}^k + 2\beta u_{1,m}^k + \beta(u_{0,m+1}^k - 2u_{0,m}^k + u_{0,m-1}^k) + \\ & + \frac{2\beta h}{k} f(y_m, t_k) + \tau f(x_0, y_m, t_k), \quad m = 1, \dots, M-1. \end{aligned}$$

Представление граничных условий для схемы расщепления (15.4) можно записать в виде

$$\begin{aligned} v_{0,m} = & (1 - 2\beta)u_{0,m}^k + 2\beta u_{1,m}^k + \frac{2\beta h}{a} f(y_m, t_k) + \tau f_s(x_0, y_m, t_k), \\ & m = m_s, \dots, m_e. \end{aligned}$$

Аналогично, для схемы (15.6) получим

$$(1 + 2\beta)v_{0,m} - 2\beta v_{1,m} = u_{0,m}^k + \frac{2\beta h}{a} f(y_m, t_k) + \tau f_s(x_0, y_m, t_k),$$

$$m = m_s, \dots, m_e.$$

Лекция 16. Обобщённые криволинейные координаты

1. Преобразование координат

Очень часто области, в которых происходят некоторые физические явления, имеют сложную геометрическую форму. Один из методов построения математических моделей в такой ситуации – это записать исходные уравнения в криволинейных координатах. Область в обобщённых криволинейных координатах строится таким образом, чтобы границы в физическом пространстве совпадали с координатными линиями в пространстве обобщённых координат.

Счетную область Ω на плоскости переменных x, y удобно представлять как четырехугольник с криволинейными границами, которые для наглядности назовем нижней, верхней, левой и правой. Каждая из этих четырех границ может состоять из нескольких участков различного физического типа, и все узлы на каждой из них занумерованы подряд. Число узлов на противоположных границах одинаково: индекс $n = 0, 1, \dots, N$ - на нижней и верхней, $m = 0, 1, \dots, M$ - на левой и правой. Будем полагать, что нами уже получено положение узлов на границах области Ω и угловые точки, конечно, совпадают. Ставится задача расчета координат «внутренних» узлов

$$\{(x, y)_{n, m}; n = 1, \dots, N - 1; m = 1, \dots, M - 1\}$$

с тем, чтобы два семейства линий, из которых одно получается соединением соседних узлов по индексу n при фиксированном значении индекса m , а другое - соединением узлов, отвечающих последовательным значениям индекса m при фиксированном индексе n , разрешили расчетную область на ячейки, которые не должны иметь наложений, самопересечений и выходить за пределы счетной области, заполняя ее без зазоров. Другими словами, линии вертикального и горизонтального семейств, рассматриваемые как координатные, должны образовывать невырождающуюся систему координат.

Поставленную задачу можно трактовать как разностный аналог задачи об отыскании функций $x(\xi, \eta)$, $y(\xi, \eta)$, обеспечивающих однолистное отображение на счетную область Ω некоторой параметрической области D на

плоскости ξ, η , например, прямоугольника $0 \leq \xi \leq l_1$, $0 \leq \eta \leq l_2$, $l = l_1/l_2$ (слайд 3.6). Граничные значения этих функций заданы.

Очевидно, что в такой формулировке задача о построении сетки весьма неопределенна и остается широкий простор для различных предположений.

Метод 1.

Он заключается в том, чтобы два семейства линий сетки отыскивать как линии уровня функций $\xi(x, y)$, $\eta(x, y)$, удовлетворяющих уравнениям Лапласа

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = 0 \quad (16.1)$$

с граничными условиями, определяемыми требованием соответствия точек на контуре области Ω и контуре параметрической области D . Уравнения (16.1) можно обратить в уравнения для функций $x(\xi, \eta)$, $y(\xi, \eta)$:

$$\alpha \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} = 0 \quad (16.2)$$

$$\alpha \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = 0$$

где

$$\alpha = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2, \quad \beta = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta}, \quad \gamma = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2.$$

В такой постановке существование однолистного отображения обеспечено.

Метод 2.

Он связан с привлечением конформных отображений. Как уже упоминалось, счетную область, которую удобно представлять как четырехугольник с криволинейными границами, можно конформно отобразить на прямоугольник D : $\{0 \leq \xi \leq l_1, 0 \leq \eta \leq l_2\}$, с определенным отношением сторон $l = l_1/l_2$ так, чтобы при этом четырем углам области Ω соответствовали четыре угла D .

Пусть отображение описывается функциями $x(\xi, \eta)$, $y(\xi, \eta)$. Задачу об отыскании этих функций и параметра l можно сформулировать как вариационную задачу о минимизации функционала

$$\Phi = \frac{1}{2} \iint_D \left[l \left(\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \right) + \frac{1}{l} \left(\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \right) \right] d\xi d\eta \quad (16.3)$$

на классе функций, обладающих следующими свойствами:

- 1) $x(\xi, \eta)$, $y(\xi, \eta)$ определены на прямоугольнике D ;
- 2) на каждой из его сторон они определены так, что устанавливают некоторое взаимно однозначное соответствие между точками стороны прямоугольника D и точками соответствующей границы области Ω ;
- 3) $x(\xi, \eta)$, $y(\xi, \eta)$ продолжаются внутрь прямоугольника D произвольным образом, но так, чтобы существовал интеграл (16.3).

Исходя из требования минимизации функционала (16.3), подберем l локально в каждой точке. Очевидно, что это достигается при

$$l = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2} / \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2}.$$

Подставляя полученное l в (16.3), приходим к функционалу следующего вида:

$$\Phi = \frac{1}{2} \iint_D \sqrt{\left(\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \right) \left(\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \right)} d\xi d\eta. \quad (16.4)$$

Этот функционал не является выпуклым, в связи с чем можно построить примеры неединственности решения соответствующей системы уравнений Эйлера—Лагранжа для этого функционала. Это обстоятельство не препятствует, однако, созданию численного алгоритма расчета сеток на основе функционала (16.4). Для обеспечения его большей гибкости с точки зрения свойств получаемой разностной сетки можно рассматривать и более общий функционал:

$$\Phi = \frac{1}{2} \iint_D \omega \sqrt{\left(\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \right) \left(\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \right)} d\xi d\eta,$$

где ($\omega > 0$ - некоторая весовая функция. В частности, хорошие разностные сетки получаются при использовании в качестве такой функции

$$\omega = \left| \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right|.$$

2. Метрический тензор

Метрический тензор, определяющий преобразование координат, имеет вид

$$g = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 & \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} & \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \end{bmatrix},$$

$$\Delta s_\eta = g_{22}^{1/2} \Delta \eta, \quad \Delta s_\xi = g_{11}^{1/2} \Delta \xi - \text{физические длины сторон (слайд 3.7).}$$

Площадь ячейки

$$|g|^{1/2} = \Delta \xi \Delta \eta.$$

Ориентация расчетной сетки

$$\cos \alpha = \frac{x_\xi}{(g_{11})^{1/2}}.$$

Соотношение сторон сетки

$$AP = \frac{\Delta s_\eta}{\Delta s_\xi} = \left(\frac{g_{22}}{g_{11}} \right)^{1/2}.$$

Локальная деформация сетки θ

$$\cos \theta = \frac{g_{12}}{(g_{11}g_{22})^{1/2}}.$$

То есть, эти характеристики – локальные (для каждого узла) – показывают свойства сетки в криволинейных координатах.

Использование криволинейных обобщённых координат позволяет строить произвольные геометрии. Однако точность решения уменьшается

при увеличении деформации сетки. Для получения высокой точности сетка должна быть ортогональной (или почти ортогональной). Кроме того, ортогональность сетки приводит к упрощению уравнений. Условие ортогональности: $\theta = 90^\circ$, тогда $\cos 90^\circ = 0 \rightarrow g_{12} = 0 = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta = 0$, т. е. метрический тензор содержит только диагональные элементы.

3. Дифференциальные уравнения в системе обобщённых криволинейных координат

Вид уравнений (вид дифференциальных операторов) в криволинейных координатах меняется. Пусть $\xi(x, y)$, $\eta(x, y)$ – обобщённые криволинейные координаты, и

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{pmatrix}, \quad J^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix}$$

$$J^{-1} = [a_{ik}]^{-1} \equiv \left[\frac{A_{ki}}{|J|} \right],$$

A_{ki} – транспонированное алгебраическое дополнение элемента a_{ki} .

$$J = [a_{ik}] \equiv \left[\frac{A_{ki}^{-1}}{|J|^{-1}} \right],$$

тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial x} &= \frac{1}{|J|^{-1}} \frac{\partial y}{\partial \eta}, & \frac{\partial \xi}{\partial y} &= -\frac{1}{|J|^{-1}} \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} &= -\frac{1}{|J|^{-1}} \frac{\partial y}{\partial \xi}, & \frac{\partial \eta}{\partial y} &= -\frac{1}{|J|^{-1}} \frac{\partial x}{\partial \xi}. \end{aligned} \tag{16.5}$$

Рассмотрим уравнение с производными первого порядка

$$q_t + F_x + G_y = 0, \tag{16.6}$$

где

$$F_x \equiv \frac{\partial F}{\partial x} - \text{частная производная.}$$

Запишем уравнение (16.6) в координатах ξ, η

$$\frac{\partial}{\partial x} = \xi_x \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \xi_y \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial}{\partial \eta}.$$

Тогда (16.6) можно представить в виде

$$q_t^* + F_\xi^* + G_\eta^* = 0, \quad (16.7)$$

где

$$q^* = \frac{q}{J}, \quad F^* = \frac{\xi_x F + \xi_y G}{J}, \quad G^* = \frac{\eta_x F + \eta_y G}{J},$$

таким образом, структуры уравнений (16.6), (16.7) совпадают.

Рассмотрим уравнение в частных производных второго порядка

$$q_t = R_{xx} + S_{yy} = (R_x)_x + (S_y)_y. \quad (16.8)$$

Его можно записать в виде

$$q_t^* + F_\xi^{**} + G_\eta^{**} = R_{\xi\xi}^* + S_{\eta\eta}^* + T_{\eta\xi}^*, \quad (16.9)$$

где

$$\begin{aligned} q^* &= \frac{q}{J}, \quad F^{**} = \frac{\xi_{xx}R + \xi_{yy}S}{J}, \quad G^{**} = \frac{\eta_{xx}R + \eta_{yy}S}{J}, \\ R^* &= \frac{\xi_x^2 R + \xi_y^2 S}{J}, \quad S^* = \frac{\eta_x^2 R + \eta_y^2 S}{J}, \quad T^* = \frac{2\xi_x\eta_x R + 2\xi_y\eta_y S}{J}. \end{aligned}$$

Тогда, например, уравнение теплопроводности в координатах ξ, η можно представить в виде

$$\begin{aligned} &\frac{T_t}{J} + \left(\frac{\nabla^2 \xi T}{J} \right)_\xi + \left(\frac{\nabla^2 \eta T}{J} \right)_\eta = \\ &= \left[\left(\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2)T}{J} \right)_{\xi\xi} + \left(\frac{2(\xi_x\eta_x + \xi_y\eta_y)T}{J} \right)_{\xi\eta} + \left(\frac{(\eta_x^2 + \eta_y^2)T}{J} \right)_{\eta\eta} \right], \end{aligned} \quad (16.10)$$

$$\nabla^2 \xi = \Delta \xi = \xi_{xx} + \xi_{yy}.$$

Здесь есть как вторые, так и первые производные по пространству. Преобразуем равенство (16.10), используя метрический тензор g :

$$g = \begin{pmatrix} (x_\xi^2 + y_\xi^2) & (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta) \\ (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta) & (x_\eta^2 + y_\eta^2) \end{pmatrix} = \frac{1}{|J|^2} \begin{pmatrix} (\eta_x^2 + \eta_y^2) & -(\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y) \\ -(\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y) & (\xi_x^2 + \xi_y^2) \end{pmatrix}.$$

Тензор устанавливает связь малых изменений обобщённых координат $\Delta \xi$ с расстоянием ΔS . Тогда (16.10) можно записать в виде

$$\frac{T_t}{J} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{g_{22}}{g^{1/2}} \frac{\partial T}{\partial \xi} - \frac{g_{12}}{g^{1/2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(-\frac{g_{12}}{g^{1/2}} \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{g_{11}}{g^{1/2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right), \quad (16.11)$$

$$g^{1/2} = |g|^{1/2} = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi.$$

Если система координат ортогональная, то $g_{12} = 0$ и уравнение (16.11) потеряет часть слагаемых. Метрический тензор становится диагональной матрицей:

$$|g| = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} = a_1 a_2, \text{ т. к. } g_{12} = g_{21} = 0.$$

Тогда

$$|g|^{1/2} = (g_{11} g_{22})^{1/2}.$$

Введём обозначение

$$h_1 = (g_{11})^{1/2}, \quad h_2 = (g_{22})^{1/2}.$$

Уравнение (16.8) можно записать в виде

$$\frac{T_t}{J} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{h_2}{h_1} \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{h_1}{h_2} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right), \quad (16.12)$$

Запишем уравнение (16.12) для ортогональной системы координат. При этом h_1, h_2 рассматриваются как некоторые скалярные множители

$$\Delta S_i = h_i \Delta \xi^i,$$

где $\Delta \xi^i$ – шаг сетки. Из условия ортогональности имеем

$$g_{12} = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta = 0.$$

Можно показать, что

$$x_\eta = -y_\xi \Delta R; \quad y_\eta = x_\xi \Delta R; \quad \Delta R = \left(\frac{g_{22}}{g_{11}} \right)^{1/2},$$

где ΔR – соотношение сторон сетки. В случае $\Delta R \equiv 1$ – сетка конформная, т. е. выполняются два условия: 1) сохраняются углы; 2) растяжение остаётся постоянным. Для конформной сетки $h_1 = h_2$ и уравнение (16.12) будет иметь вид

$$\frac{T_t}{J} = T_\xi + T_\eta.$$

Таким образом, сетки следует строить ортогональными и конформными. Это позволяет сократить число слагаемых и упростить уравнения.

Лекция 17. Методы построения расчётных сеток для обобщённых криволинейных координат

Как уже было указано в предыдущей лекции, под словами «построить разностную сетку в счетной области Ω » мы подразумеваем расчет координат «внутренних» узлов по заданным координатам узлов на границах области. Алгоритм их вычисления должен удовлетворять по крайней мере следующим требованиям:

1. Узлы сетки $\{(x,y)_{n,m}\}$ лежат внутри контура области Ω ,
2. При малом перемещении границ счетной области координаты узлов сетки меняются мало,
3. Два семейства линий сетки, построенные по ее узлам, должны образовывать невырождающуюся систему координат.

Для отыскания координат $\{(x,y)_{n,m}\}$ составляется система разностных уравнений исходя из тех или иных дифференциальных уравнений или вариационных функционалов, примеры которых были рассмотрены в предыдущей лекции. Уравнения эти довольно сложны, поскольку аппроксимируют систему нелинейных уравнений в частных производных эллиптического типа. Для их решения нужно разрабатывать специальные итерационные алгоритмы. Поэтому остановимся на описании только самых простых из таких алгоритмов, основанных на явных итерациях. Скорость их сходимости весьма медленная. Ситуация облегчается тем, что нас интересует только разностная сетка, а вовсе не решение системы уравнений, которая была специально придумана, чтобы сетку построить. Поэтому, как правило, итерационный процесс можно обрывать довольно рано, не заботясь о доведении его до сходимости. Следует, однако, заметить, что при расчете нестационарных задач с подвижными границами нужно заботиться о том, чтобы такая «недоитерированность» уравнений для сетки не приводила к неправомерному искусственному завышению скоростей ее узлов по сравнению со скоростями границ.

При изложении алгоритмов для расчета сеток сразу встает вопрос о начальном приближении. На исходном шаге, когда имеются только контуры границ, в качестве начального приближения можно взять сетку, рассчитанную интерполяцией.

Обратимся теперь к изложению алгоритмов, позволяющих численно реализовать построение разностной сетки.

1. Численная реализация метода 1

Сначала рассмотрим алгоритм, основанный на аппроксимации дифференциальных уравнений (16.2). Аппроксимацию производных, входящих в эти уравнения, можно осуществлять посредством простейших разностных соотношений, например таких:

$$\begin{aligned}\frac{\partial x}{\partial \xi} &\approx \frac{1}{2\Delta\xi}(x_{n+1,m} - x_{n-1,m}) = d_{\xi}x_{n,m}, \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} &\approx \frac{1}{2\Delta\eta}(x_{n,m+1} - x_{n,m-1}) = d_{\eta}x_{n,m}, \\ \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} &\approx \frac{1}{(\Delta\xi)^2}(x_{n+1,m} - 2x_{n,m} + x_{n-1,m}) = d_{\xi\xi}x_{n,m}, \\ \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} &\approx \frac{1}{(\Delta\eta)^2}(x_{n,m+1} - 2x_{n,m} + x_{n,m-1}) = d_{\eta\eta}x_{n,m}, \\ \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} &\approx \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta}(x_{n+1,m+1} - x_{n-1,m+1} + x_{n+1,m-1} - x_{n-1,m-1}) = d_{\xi\eta}x_{n,m},\end{aligned}\tag{17.1}$$

и так далее.

Разностные уравнения выписываются в каждом из внутренних узлов $n=1, \dots, N-1$; $m=1, \dots, M-1$. Граничные значения заданы. Для решения полученной системы уравнений применяется простейший явный итерационный процесс:

$$\begin{aligned}x_{n,m}^{(k+1)} &= x_{n,m}^{(k)} + \theta_{n,m}^{(k)}(\alpha_{n,m}^{(k)}d_{\xi\xi}x_{n,m}^{(k)} - 2\beta_{n,m}^{(k)}d_{\xi\eta}x_{n,m}^{(k)} + \gamma_{n,m}^{(k)}d_{\eta\eta}x_{n,m}^{(k)}), \\ y_{n,m}^{(k+1)} &= y_{n,m}^{(k)} + \theta_{n,m}^{(k)}(\alpha_{n,m}^{(k)}d_{\xi\xi}y_{n,m}^{(k)} - 2\beta_{n,m}^{(k)}d_{\xi\eta}y_{n,m}^{(k)} + \gamma_{n,m}^{(k)}d_{\eta\eta}y_{n,m}^{(k)}),\end{aligned}$$

где

$$\theta_{n,m}^{(k)} = \frac{\theta}{2(\alpha_{n,m}^{(k)} + \gamma_{n,m}^{(k)}) + |\beta_{n,m}^{(k)}|}.$$

Здесь k - номер итерации, θ - обычный релаксационный параметр, который, вообще говоря, может изменяться в процессе итераций. По линейной теории (с «замороженными» коэффициентами уравнений) процесс устойчив, если $0 < \theta < 2$. Процесс сходится медленно, но с учетом сделанных выше замечаний вполне пригоден для построения сетки.

2. Численная реализация метода 2

Рассмотрим применение метода установления к задаче построения разностных сеток по методу 2, основанному на использовании вариационного функционала (16.4) с весовой функцией. Уравнения для искомых функций $x(\xi, \eta)$, $y(\xi, \eta)$ возьмем в виде

$$\frac{\partial}{\partial \xi} A \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} B \frac{\partial x}{\partial \eta} = 0, \quad (17.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} A \frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} B \frac{\partial y}{\partial \eta} = 0,$$

где

$$A = \left| \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right| \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2} / \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2}, \quad (17.3)$$

$$B = \left| \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right| \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2} / \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2}.$$

Фактически эти уравнения являются уравнениями Эйлера — Лагранжа для вариационного функционала в предположении, что l и ω , зависящие от искомых функций x и y , не варьируются, но мы будем пользоваться ими, чтобы не усложнять алгоритма расчета.

При составлении разностных уравнений для системы (17.2) используются разностные операторы

$$\frac{\partial}{\partial \xi} A \frac{\partial x}{\partial \xi} \approx \frac{1}{2(\Delta \xi)^2} [A_{n+1,m} (x_{n+2,m} - x_{n+1,m}) - A_{n,m} (x_{n+1,m} - x_{n,m})],$$

$$\frac{\partial}{\partial \eta} B \frac{\partial x}{\partial \eta} \approx \frac{1}{2(\Delta \eta)^2} [B_{n,m+1}(x_{n,m+2} - x_{n,m+1}) - B_{n,m}(x_{n,m+1} - x_{n,m})].$$

Коэффициенты $A_{n,m}$ и $B_{n,m}$ вычисляются на основании формул (17.3), в которых производные x_ξ , x_η , y_ξ , y_η можно вычислять с помощью простейших разностных выражений, аналогичных (17.1).

При вычислении коэффициентов $A_{n,m}$ и $B_{n,m}$ задаются некоторые ограничения, препятствующие появлению слишком малых или больших их значений.

Итерационный процесс для решения полученной системы разностных уравнений состоит в последовательном выполнении нескольких циклов, каждый из которых состоит из двух этапов. На первом этапе по имеющейся сетке $\{(x,y)_{n,m}\}$, полученной на предыдущем цикле, вычисляются коэффициенты разностных уравнений $\{A_{n,m}\}$ и $\{B_{n,m}\}$, а также значения двух итерационных параметров d_1 , d_2 . На втором этапе при фиксированных значениях коэффициентов $A_{n,m}$ и $B_{n,m}$ выполняется несколько итераций по пересчету сетки. Каждая из итераций организована следующим образом.

Сначала при фиксированном индексе m решаются системы «трехточечных» уравнений по индексу n для величин

$$x_{n,m}^*, y_{n,m}^*, n = 1, \dots, N-1,$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \xi} A \frac{\partial x^*}{\partial \xi} \right]_{n,m} + \left[\frac{\partial}{\partial \eta} B \frac{\partial x}{\partial \eta} \right]_{n,m} = d_1 (x_{n,m}^* - x_{n,m}), \quad (17.4)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \xi} A \frac{\partial y^*}{\partial \xi} \right]_{n,m} + \left[\frac{\partial}{\partial \eta} B \frac{\partial y}{\partial \eta} \right]_{n,m} = d_1 (y_{n,m}^* - y_{n,m}),$$

с заданными граничными значениями определяющими положение граничных узлов сетки. Выражения в (17.4), заключенные в квадратные скобки, обозначают соответствующие разностные аппроксимации, описанные выше. Такие системы уравнений решаются последовательно для значений индекса $m = 1, \dots, M-1$ помощью метода прогонки.

После этого при фиксированном индексе n решаются системы «трех-точечных» уравнений по индексу m для величин

$$x_{n,m}^{**}, y_{n,m}^{**}, m = 1, \dots, M-1,$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \xi} A \frac{\partial x^*}{\partial \xi} \right]_{n,m} + \left[\frac{\partial}{\partial \eta} B \frac{\partial x^{**}}{\partial \eta} \right]_{n,m} = d_2 (x_{n,m}^{**} - x_{n,m}^*), \quad (17.5)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \xi} A \frac{\partial y^*}{\partial \xi} \right]_{n,m} + \left[\frac{\partial}{\partial \eta} B \frac{\partial y^{**}}{\partial \eta} \right]_{n,m} = d_2 (y_{n,m}^{**} - y_{n,m}^*),$$

с заданными граничными значениями. Такие системы уравнений решаются последовательно для значений индекса $n = 1, \dots, N-1$. Полученная сетка

$$\{ x_{n,m}^{**}, y_{n,m}^{**} \}$$

является исходной для следующей итерации.

На скорость сходимости применяемого итерационного процесса очень сильное влияние оказывает выбор итерационных параметров d_1, d_2 . Теория выбора этих параметров разработана только для простейших случаев, когда одномерные операторы, на которые осуществляется расщепление в ходе выполнения итерации, перестановочны. В этом случае можно вычислять последовательности итерационных параметров d_1, d_2 , которые обеспечивают высокую скорость сходимости.

В общем случае можно применить следующий подход: использовать на всех итерациях одного цикла постоянных значений параметров d_1, d_2 , выбирая их значения на основе информации о границах спектра одномерных самосопряженных операторов. Такими операторами для систем (17.4), (17.5) являются трёхдиагональные матрицы. Обозначим эти границы $[a_{\min}, a_{\max}]$ для оператора

$$\left[\frac{\partial}{\partial \xi} A \frac{\partial x^*}{\partial \xi} \right]_{n,m}, n = 1, \dots, N-1$$

и $[b_{\min}, b_{\max}]$ для оператора

$$\left[\frac{\partial}{\partial \eta} B \frac{\partial x^{**}}{\partial \eta} \right]_{n,m}, m = 1, \dots, M-1.$$

Тогда оптимальные значения параметров d_1, d_2 определяются по формулам

$$\begin{aligned} d_1 &= \alpha - \beta, \quad d_2 = \alpha + \beta, \\ \beta &= \frac{a_{\min} a_{\max} - b_{\min} b_{\max}}{a_{\min} + a_{\max} + b_{\min} + b_{\max}}, \\ \alpha &= \sqrt{(a_{\min} - \beta)(a_{\max} - \beta)}. \end{aligned}$$

При этом скорость сходимости будет не медленнее, чем по экспоненте с показателем

$$\gamma = \ln \frac{(a_{\max} - d_2)(b_{\max} - d_2)}{(a_{\max} - d_1)(b_{\max} - d_1)}.$$

Лекция 18. Моделирование движения жидкости. Основные уравнения

В этой лекции рассмотрим основные уравнения механики жидкости. Эти уравнения выводятся из законов сохранения массы, количества движения и энергии. Мы начнём с простейших предположений, приводящих к уравнениям Эйлера для идеальной жидкости. Далее, ограничения, вносимые этими предположениями, делаются менее строгими, что позволяет включить вязкостные эффекты, которые возникают из-за молекулярного переноса импульса.

1. Уравнения Эйлера

Пусть D представляет собой двумерную или трёхмерную область, заполненную жидкостью. Наша цель состоит в описании движения этой жидкости. Пусть $\mathbf{x} \in D$ есть точка в D , и рассмотрим частицу жидкости, проходящую через эту точку в момент времени t . В соответствии со стандартной евклидовой пространственной системой координат, мы запишем $\mathbf{x} = (x, y, z)$. Представим некоторую частицу (например частичку пыли), находящуюся в жидкости; эта частица проходит определённую траекторию. Пусть $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ обозначает скорость частицы жидкости, проходящей через точку \mathbf{x} в момент времени t . Таким образом, в каждый фиксированный момент времени \mathbf{u} есть векторное поле в D , как показано на слайде 3.8. Мы назовём \mathbf{u} *пространственным полем скоростей жидкости*.

Слайд 3.8. Частица жидкости движется в области D

Предположим, что в каждый момент времени t жидкость имеет определённую массовую плотность $\rho(\mathbf{x}, t)$. Тогда, если W представляет собой некоторую подобласть области D , то масса жидкости, заключённой в W в момент времени t , определяется как

$$m(W, t) = \int_W \rho(\mathbf{x}, t) dV,$$

где dV – элемент объёма.

В дальнейшем мы будем предполагать, что функции \mathbf{u} и ρ (а также другие функции, которые будут определены позже) обладают достаточной гладкостью, так что операции дифференциального и интегрального

исчисления могут быть к ним применены. К более детальному анализу этого предположения мы вернёмся позже.

Предположение, что ρ существует, является условием *сплошной среды*. Ясно, что это предположение не выполняется, если принять во внимание молекулярную структуру вещества. Однако для большинства макроскопических явлений, возникающих в природе, это предположение выполняется с высокой точностью.

Наш вывод уравнений основывается на трёх основных принципах:

- i масса не возникает и не исчезает;
- ii изменение импульса элемента жидкости равно силе приложенной к этому элементу (второй закон Ньютона);
- iii энергия не возникает из ниоткуда и нигде не исчезает.

Рассмотрим эти три принципа подробно.

1.1 Сохранение массы

Пусть W – фиксированная подобласть области D (W не изменяется со временем). Скорость изменения массы в W

$$\frac{d}{dt}m(W, t) = \frac{d}{dt} \int_W \rho(\mathbf{x}, t) dV = \int_W \frac{d\rho}{dt}(\mathbf{x}, t) dV.$$

Пусть ∂W обозначает границу W , которая предполагается гладкой; вектор \mathbf{n} – единичную внешнюю нормаль, определённую в точках ∂W , и dA – элемент площади на ∂W . Объём жидкости, прошедший через единицу площади ∂W за единицу времени, равен $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ и скорость потока массы на единицу площади составляет $\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ (слайд 3.9).

Слайд 3.9. Масса, пересекающая границу ∂W за единицу времени, равна поверхностному интегралу от $\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ по ∂W

Принцип сохранения массы более точно можно сформулировать следующим образом: скорость увеличения массы в области W равна скорости, с которой масса втекает в эту область через границу ∂W , то есть

$$\frac{d}{dt} \int_W \rho dV = - \int_{\partial W} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA.$$

Это соотношение называется *интегральной формой закона сохранения массы*. По теореме Остроградского – Гаусса оно эквивалентно

$$\int_W \left[\frac{d\rho}{dt} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) \right] dV = 0.$$

Так как это соотношение справедливо для любой области W , то оно, в свою очередь, эквивалентно уравнению

$$\frac{d\rho}{dt} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0.$$

Это уравнение называется *дифференциальной формой закона сохранения массы*. Часто также его называют *уравнением неразрывности*. Если ρ и \mathbf{u} не являются достаточно гладкими функциями и дифференциальные уравнения не имеют смысла, то следует использовать интегральную форму закона сохранения массы.

1.2 Баланс количества движения

Пусть $\mathbf{x}(t) = (x(t), y(t), z(t))$ описывает траекторию движения частицы жидкости, так что поле скоростей задаётся как

$$\mathbf{u}(x(t), y(t), z(t), t) = (\dot{x}(t), \dot{y}(t), \dot{z}(t)),$$

то есть

$$\mathbf{u}(x(t), t) = \frac{d\mathbf{x}}{dt}(t).$$

Здесь и далее используется пространственная декартова система координат (в случае плоских течений координата z исключается).

Ускорение частицы жидкости описывается выражением

$$\mathbf{a}(t) = \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{x}(t) = \frac{d}{dt} \mathbf{u}(x(t), y(t), z(t), t).$$

По правилу дифференцирования сложной функции получим

$$\mathbf{a}(t) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \dot{z} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}.$$

Используя обозначения

$$\mathbf{u}_x = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \quad \mathbf{u}_t = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \quad \text{etc.},$$

и

$$\mathbf{u}(x, y, z, t) = (u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t)),$$

получим соотношение

$$\mathbf{a}(t) = u\mathbf{u}_x + v\mathbf{u}_y + w\mathbf{u}_z + \mathbf{u}_t,$$

которое также можно записать в виде

$$\mathbf{a}(t) = \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}.$$

где

$$\mathbf{u} \cdot \nabla = u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}.$$

Назовём

$$\frac{D}{Dt} = \partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla$$

материальной производной; эта производная учитывает тот факт, что при движении жидкости положения частиц жидкости меняются со временем. Действительно, если $f(x, y, z, t)$ – некоторая функция координат и времени (скалярная или векторная), тогда по правилу дифференцирования сложной функции

$$\frac{d}{dt} f(x(t), y(t), z(t), t) = \partial_t f + \mathbf{u} \cdot \nabla f = \frac{Df}{Dt}(x(t), y(t), z(t), t).$$

Можно выделить два типа сил, действующих на элемент среды. Силы первого типа, силы напряжения, возникают, когда окружающая среда действует на этот элемент по нормали к его поверхности. Силы второго типа, внешние или массовые силы, такие как гравитация или магнитное поле, действуют на единицу объёма среды. Строгое выделение поверхностных сил напряжения обычно приписывается Коши.

Позже мы рассмотрим напряжения в более общем виде, а сейчас определим *идеальную жидкость* как жидкость со следующими свойствами: для любого движения жидкости существует функция $p(\mathbf{x}, t)$, называемая давлением, такая, что если S – некоторая поверхность в жидкости с вектором нормали \mathbf{n} , то сила на единицу площади, действующая по нормали к этой поверхности в точке $\mathbf{x} \in S$ в момент времени t , равна $p(\mathbf{x}, t) \mathbf{n}$, то есть

$$\text{сила на единицу площади по нормали к } S = p(\mathbf{x}, t) \mathbf{n}.$$

Заметим, что сила действует ортогонально поверхности S , то есть касательные силы отсутствуют (слайд 3.10).

Слайд 3.10. Силы давления, действующие по нормали к S

Концепция идеальной жидкости как математической модели не подвергается сомнению. Однако соответствие этой модели физике явлений (или справедливость математических теорем, которые мы выведем из этой модели) должны быть проверены экспериментально. Как мы увидим позже, идеальные жидкости не учитывают многие реальные физические явления, но тем не менее они являются важной отправной точкой для построения более полной теории.

Если W – область в жидкости в заданный момент времени t , то результирующая поверхностных сил, действующая на жидкость внутри W , равна

$$\mathbf{S}_{\partial W} = \{\text{сила на } W\} = - \int_{\partial W} p \mathbf{n} dA$$

(результирующая сила отрицательна, поскольку \mathbf{n} – внешняя нормаль). Если \mathbf{e} – произвольный фиксированный вектор в пространстве, то по теореме Гаусса – Остроградского

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{S}_{\partial W} = - \int_{\partial W} p \mathbf{e} \cdot \mathbf{n} dA = - \int_W \operatorname{div}(p \mathbf{e}) dV = - \int_W (\operatorname{grad} p) \cdot \mathbf{e} dV.$$

Следовательно,

$$\mathbf{S}_{\partial W} = - \int_W \operatorname{grad} p dV.$$

Если $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$ обозначает заданную массовую силу *на единицу массы*, результирующая массовая сила равна

$$\mathbf{B} = \int_W \rho \mathbf{b} dV.$$

Таким образом, для любой материальной частицы жидкости

$$\text{сила на единицу объёма} = -\text{grad } p + \rho \mathbf{b}.$$

Следуя второму закону Ньютона (сила = масса \times ускорение), приходим к дифференциальной форме *уравнения, описывающего закон сохранения количества движения*:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\text{grad } p + \rho \mathbf{b}.$$

1.3 Сохранение энергии

К этому моменту мы получили уравнения сохранения импульса

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\text{grad } p + \rho \mathbf{b},$$

и уравнение сохранения массы

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \text{div } \mathbf{u} = 0.$$

Всего имеем четыре уравнения в случае трехмерного пространства (или $n + 1$ уравнений в случае n -мерного пространства), так как уравнение для $D\mathbf{u}/Dt$ представляет собой векторное уравнение, состоящее из трёх скалярных уравнений. Однако, число неизвестных функций равно пяти: \mathbf{u} , ρ и p . Естественно, что для того чтобы полностью описать движение жидкости, необходимо ещё одно уравнение. Условие сохранения энергии и даёт это уравнение. В общем случае это довольно сложный вопрос, который требует обсуждения общих принципов термодинамики. Здесь ограничимся двумя специальными случаями, а позже рассмотрим ещё один случай идеального газа.

Для жидкости, двигающейся в некоторой области D со скоростью \mathbf{u} , кинетическая энергия, содержащаяся в области $W \subset D$, равна

$$E_{\text{kinetic}} = \frac{1}{2} \int_W \rho \|\mathbf{u}\|^2 dV,$$

где $\|\mathbf{u}\|^2 = (u^2 + v^2 + w^2)$ – квадрат скорости. Предположим, что полная энергия жидкости может быть записана в виде

$$E_{\text{total}} = E_{\text{kinetic}} + E_{\text{internal}},$$

где E_{internal} – внутренняя энергия, которую мы не можем «увидеть» на макроскопическом уровне, и источником её являются межмолекулярное взаимодействие и вибрация молекул. Если энергия передаётся жидкости, или мы позволяем жидкости совершать работу, то E_{total} будет изменяться.

Скорость изменения кинетической энергии движущегося элемента жидкости W_t вычисляется на основе теоремы переноса следующим образом:

$$\frac{d}{dt} E_{\text{kinetic}} = \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} \int_{W_t} \rho \|\mathbf{u}\|^2 dV \right] = \frac{1}{2} \int_{W_t} \rho \frac{D \|\mathbf{u}\|^2}{Dt} dV = \int_{W_t} \rho \left[\mathbf{u} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) \right] dV.$$

Здесь использовалось следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{D}{Dt} \|\mathbf{u}\|^2 &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (u^2 + v^2 + w^2) + \frac{1}{2} \left(u \frac{\partial}{\partial x} (u^2 + v^2 + w^2) + v \frac{\partial}{\partial y} (u^2 + v^2 + w^2) + \right. \\ &\quad \left. + w \frac{\partial}{\partial z} (u^2 + v^2 + w^2) \right) = u \frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial t} + w \frac{\partial w}{\partial t} + u \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \\ &\quad + v \left(u \frac{\partial u}{\partial y} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial y} \right) + w \left(u \frac{\partial u}{\partial z} + v \frac{\partial v}{\partial z} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}. \end{aligned}$$

Более общее обсуждение сохранения энергии требует дополнительных сведений из термодинамики. Мы ограничимся только двумя примерами сохранения энергии.

2. Течение несжимаемой жидкости

Предположим, что *вся энергия является кинетической и что скорость изменения кинетической энергии в элементе жидкости равна мощности силы давления и внешних сил*:

$$\frac{d}{dt} E_{\text{kinetic}} = - \int_{\partial W_t} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dA + \int_{W_t} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \, dV.$$

Из теоремы Гаусса-Остроградского и предыдущих формул следует

$$\int_{W_t} \rho \left\{ \mathbf{u} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) \right\} dV = - \int_{W_t} (\operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) - \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{b}) dV = - \int_{W_t} (\mathbf{u} \cdot \nabla \rho - \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{b}) dV,$$

так как $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$. Предыдущее уравнение также является следствием сохранения импульса. В дополнение, эти выкладки показывают, что *если мы предполагаем $E = E_{\text{kinetic}}$, то жидкость должна быть несжимаема* (иначе $p = 0$). В случае несжимаемой жидкости уравнения Эйлера имеют вид

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\operatorname{grad} p + \rho \mathbf{b},$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0,$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$$

с граничными условиями

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{на } \partial D.$$

3. Изэнтропическое течение

Сжимаемая жидкость будет называться *изэнтропической*, если существует функция w , называемая *энтальпией*, такая что

$$\operatorname{grad} w = \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p.$$

Терминология следует из термодинамики.

Термодинамическое состояние жидкости описывается следующими основными величинами, каждая из которых есть функция x, t :

p = давление,

ρ = плотность,

T = температура,

s = энтропия,

w = энтальпия (на единицу массы),

$\varepsilon = w - (p/\rho)$ = внутренняя энергия (на единицу массы).

Эти величины связаны *первым законом термодинамики*:

$$dw = T ds + \frac{1}{\rho} dp. \quad (23.1)$$

Первый закон утверждает сохранение энергии. Легко проверить, что его можно записать в другой форме, которая эквивалентна (23.1):

$$d\varepsilon = T ds + \frac{p}{\rho^2} d\rho. \quad (23.2)$$

Если давление зависит только от ε , то течение является изэнтропическим, то есть s постоянна (отсюда и термин *изэнтропическое*) и

$$w = \int \frac{p' \lambda}{\lambda} d\lambda,$$

что есть просто интеграл от выражения $dw = dp/\rho$ (см. (23.1)). Тогда внутренняя энергия $\varepsilon = w - (p/\rho)$ удовлетворяет соотношению $d\varepsilon = (pd\rho)/\rho^2$ (см. (23.2)), или как функция от ρ

$$p = \rho^2 \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho},$$

или

$$\varepsilon = \int \frac{p \lambda}{\lambda^2} d\lambda.$$

Для изэнтропических течений, когда p есть функция ε , условие сохранения энергии в интегральной форме можно сформулировать следующим образом: *скорость изменения энергии в элементе жидкости равна мощности силы давления и внешних сил*:

$$\frac{d}{dt} E_{\text{total}} = \frac{d}{dt} \int_{W_t} \left(\frac{1}{2} \rho \|\mathbf{u}\|^2 + \rho \varepsilon \right) dV = \int_{W_t} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} dV - \int_{\partial W_t} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (23.3)$$

Это выражение следует из условия сохранения импульса с использованием введённого выше соотношения для $(d/dt) E_{\text{kinetic}}$, теоремы о переносе и соотношения $p = \rho^2 \partial \varepsilon / \partial \rho$. Можно поступить и другим способом. Предположим, что p есть функция ε . Тогда из (23.3) и условий сохранения массы и импульса следует, что $p = \rho^2 \partial \varepsilon / \partial \rho$, и это эквивалентно $dw = dp/\rho$.

Уравнения Эйлера для изэнтропического течения имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\nabla w + \mathbf{b}, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= 0 \end{aligned}$$

в D и

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$$

на ∂D (или $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}$, если ∂D движется со скоростью \mathbf{V}).

Эти уравнения приводят к хорошо обусловленной задаче Коши, только если $p'(\rho) > 0$. Это согласуется с нашим опытом, что при увеличении окружающего давления на некоторый объём жидкости этот объём уменьшается и, следовательно, плотность жидкости увеличивается.

В рассмотренных примерах жидкости ведут себя различным образом. Например, для несжимаемой жидкости плотность постоянна, и понятно, что p не может быть обратимой функцией от ρ . Однако случай $\rho = \text{const}$ можно рассматривать в смысле предела $p'(\rho) \rightarrow \infty$. Для изэнтропической жидкости p является явной функцией ρ (и, следовательно, зависит от \mathbf{u} , так как ρ и \mathbf{u} связаны уравнением неразрывности). В случае несжимаемой жидкости p неявно определяется условием $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$.

В заключение заметим, что в рассмотренных примерах возможность потери кинетической энергии в результате трения не учитывается.

4. Уравнения Навье – Стокса

Мы определили идеальную жидкость как жидкость, в которой силы, действующие на некоторую поверхность, являются нормальными к этой поверхности. Теперь рассмотрим более общие модели жидкостей. Для того чтобы понять необходимость такого обобщения, рассмотрим ситуацию, показанную на слайде 3.11. Здесь поле скоростей \mathbf{u} параллельно поверхности S , но величина его изменяется либо скачкообразно, либо достаточно быстро при переходе через S . Если учитывать только силы, действующие по нормали к S , то тогда не будет передачи импульса между объёмами жидкости, обозначенными как B и B' на слайде 3.11. Однако если вспомнить кинетическую теорию вещества, то такая ситуация выглядит на самом деле неправдоподобно. Более быстрые молекулы, движущиеся выше поверхности S , будут диффундировать через S и передавать импульс лежащей ниже жидкости, и, аналогично, более медленные молекулы, движущиеся ниже поверхности S , будут диффундировать через S и замедлять жидкость выше поверхности S . Когда происходит относительно быстрое изменение скорости в небольших пространственных областях, этот эффект имеет важное значение.

Слайд 3.11. Более быстрые молекулы в области B' могут диффундировать через S и передавать импульс области B

Поэтому изменим наше предыдущее определение. Вместо предположения что

$$\text{сила, действующая на единицу площади } S = -p(\mathbf{x}, t)\mathbf{n},$$

где \mathbf{n} – вектор нормали к поверхности S , мы теперь предположим что

$$\text{сила, действующая на единицу площади } S = -p(\mathbf{x}, t)\mathbf{n} + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)\mathbf{n}, \quad (23.4)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений (матрица), о структуре которого необходимо сделать некоторые предположения. Новая особенность состоит в том, что $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}$ необязательно должен быть параллелен \mathbf{n} . Разделение сил в (23.4) на давление и другие силы несколько неопределённо, так как $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}$ может содержать компоненту, параллельную \mathbf{n} . Это затруднение будет разрешено позже, когда мы определим функциональную форму тензора $\boldsymbol{\sigma}$.

Как и раньше, второй закон Ньютона утверждает, что скорость изменения любого элемента жидкости W_t равна силе, действующей на этот элемент (баланс количества движения):

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho \mathbf{u} dV = - \int_{\partial W_t} (\rho - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) dA.$$

Таким образом, видим, что $\boldsymbol{\sigma}$ изменяет перенос импульса через границу W_t . Задаём $\boldsymbol{\sigma}$ так, что этот перенос разумным образом приближает перенос импульса, который осуществляется движением молекул жидкости.

Правомерно возникает вопрос: почему сила (23.4), действующая на S , должна быть линейной функцией \mathbf{n} . В действительности, если предположить, что сила есть непрерывная функция \mathbf{n} , то, используя условие баланса количества движения, можно доказать, что сила линейно зависит от \mathbf{n} (теорема Коши).

Введём следующие предположения о тензоре $\boldsymbol{\sigma}$.

- 1) тензор $\boldsymbol{\sigma}$ зависит линейно от градиентов скорости $\nabla \mathbf{u}$ так, что $\boldsymbol{\sigma}$ соотносится с \mathbf{u} посредством некоторого линейного преобразования в каждой точке;
- 2) тензор $\boldsymbol{\sigma}$ инвариантен относительно вращений как целое, то есть если \mathbf{U} есть некоторая ортогональная матрица, то

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{U}^{-1}) = \mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{U}^{-1}.$$

Это предположение вполне естественно потому, что когда жидкость претерпевает вращение как целое, то диффузии импульса быть не должно;

- 3) тензор $\boldsymbol{\sigma}$ является симметричным. Это свойство следует из условия сохранения момента количества движения.

В силу симметричности $\boldsymbol{\sigma}$, из свойств 1 и 2 следует, что $\boldsymbol{\sigma}$ может зависеть только от симметричной части $\nabla \mathbf{u}$, то есть от деформации \mathbf{D} . Так как $\boldsymbol{\sigma}$ есть линейная функция \mathbf{D} , $\boldsymbol{\sigma}$ и \mathbf{D} коммутируют и могут быть одновременно приведены к диагональному виду. Тогда собственные значения $\boldsymbol{\sigma}$ линейно зависят от собственных значений \mathbf{D} . Согласно свойству 2, они также должны быть симметричными, так как можно задать такую матрицу \mathbf{U} , которая переставляет два собственных значения \mathbf{D} (путём вращения на угол $\pi/2$ вокруг собственного вектора), и это должно приводить к перестановке соответствующих собственных значений $\boldsymbol{\sigma}$. Единственная линейная функция, которая является симметричной в этом смысле, имеет вид

$$\sigma_i = \lambda(d_1 + d_2 + d_3) + 2\mu d_i, \quad I = 1, 2, 3,$$

где σ_i – собственные значения $\boldsymbol{\sigma}$, d_i – собственные значения \mathbf{D} . Отсюда следует определение постоянных λ и μ . Учитывая, что $d_1 + d_2 + d_3 = \operatorname{div} \mathbf{u}$, мы можем использовать свойство 2 для того, чтобы преобразовать σ_i обратно в исходный базис и получить

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda (\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{D} \quad (23.5)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица. Мы можем переписать это соотношение, выделив след матрицы правой части в отдельное слагаемое:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \left[\mathbf{D} - \frac{1}{2} (\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] + \zeta (\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I}, \quad (23.5')$$

где μ есть *первый коэффициент вязкости*, $\zeta = \lambda + 2/3 \mu$ – *второй коэффициент вязкости*. Если применить теорему о переносе и теорему Гаусса – Остроградского, условие сохранения количества движения даёт *уравнения Навье – Стокса*,

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + (\lambda + \mu) \nabla (\operatorname{div} \mathbf{u}) + \mu \Delta \mathbf{u}, \quad (23.6)$$

где

$$\Delta \mathbf{u} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \mathbf{u}$$

есть оператор Лапласа для \mathbf{u} . Вместе с уравнением неразрывности и уравнением энергии, (23.6) полностью описывает течение сжимаемой вязкой жидкости.

В случае несжимаемого однородного течения с $\rho = \rho_0 = \text{const}$, предыдущие уравнения преобразуются в *уравнения Навье – Стокса для несжимаемого течения*

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{u}}{Dt} &= -\operatorname{grad} p' + \nu \Delta \mathbf{u}, \\ \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \end{aligned} \quad (23.7)$$

где $\nu = \mu/\rho_0$ - коэффициент кинематической вязкости и $p' = p/\rho_0$.

Эти уравнения дополняются граничными условиями. В случае уравнений Эйлера для идеальной жидкости мы используем $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$, то есть, жидкость не пересекает границу, а движется по касательной к ней. В случае уравнений Навье – Стокса дополнительное слагаемое $\nu \Delta \mathbf{u}$ включает в себя вторые производные от \mathbf{u} . Это приводит к увеличению числа граничных условий. Например, на жёсткой неподвижной стенке мы добавляем условие того, что тангенциальная составляющая скорости также равна нулю (условие отсутствия «проскальзывания»). Тогда граничные условия принимают вид

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ на жёсткой неподвижной стенке.}$$

С математической точки зрения, дополнительные граничные условия необходимы для доказательства того, что уравнения хорошо обусловлены, то есть, что единственное решение существует и непрерывно зависит от начальных данных. В трёхмерном случае известно, что гладкие решения уравнений несжимаемого течения существуют, по крайней мере, в течение короткого промежутка времени и непрерывно зависят от начальных данных. Одна из основных нерешённых проблем гидромеханики и состоит в том, чтобы доказать или опровергнуть утверждение, что трёхмерные решения уравнений несжимаемого течения существуют в любой момент времени. В двумерном случае известно, что решения существуют в любой момент времени как для вязкого, так и для невязкого течения. В любом случае, необходимо включение граничного условия для тангенциальной скорости при течении вязкой жидкости.

С физической точки зрения, необходимость дополнительных граничных условий следует из простых экспериментов, включающих течение вблизи твёрдой стенки. Например, если впрыснуть краситель в жидкость, текущую в трубе, и наблюдать его поведение вблизи границы, то можно увидеть, что вблизи границы скорость стремится к нулю. Условие отсутствия проскальзывания также приемлемо и с точки зрения физического механизма, ответственного за вязкость, а именно, молекулярной диффузии. Пример, рассмотренный в начале этой части, показывает, что взаимодействие молекул с твёрдой стенкой, имеющей нулевую тангенциальную скорость (или нулевую среднюю скорость на молекулярном уровне) должно передавать это условие и прилегающей жидкости.

Ещё одно важное свойство граничного условия $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ состоит в том, что оно обеспечивает механизм, с помощью которого граница может создавать завихрённость в жидкости.

Далее мы обсудим безразмерный вид уравнений Навье – Стокса и введём некоторый параметр (число Рейнольдса), который количественно характеризует влияние вязкости на течение.

Пусть для данной проблемы L будет некоторой *характерной длиной* и U – *характерной скоростью*. Эти величины выбираются некоторым произвольным образом. Например, если мы рассматриваем течение около сферы, то L может быть или радиусом, или диаметром сферы, и U можно задать равной скорости набегающего потока. L и U представляют собой некоторые масштабы длины и скорости рассматриваемого течения. Их выбор определяет масштаб времени $T = L/U$.

Мы можем измерять \mathbf{x} , \mathbf{u} и t относительно этих параметров, делая замену переменных и вводя следующие безразмерные величины

$$\mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u}}{U}, \quad \mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x}}{L} \quad \text{и} \quad t' = \frac{t}{T}.$$

Уравнение Навье – Стокса, описывающее движение по оси x , имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right].$$

Замена переменных даёт

$$\begin{aligned} \frac{\partial(u'U)}{\partial t'} \frac{\partial t'}{\partial t} + Uu' \frac{\partial(u'U)}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial x} + Uv' \frac{\partial(u'U)}{\partial y'} \frac{\partial y'}{\partial y} + Uw' \frac{\partial(u'U)}{\partial z'} \frac{\partial z'}{\partial z} = \\ = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial x} + \nu \left[\frac{\partial^2(u'U)}{\partial (Lx')^2} + \frac{\partial^2(u'U)}{\partial (Ly')^2} + \frac{\partial^2(u'U)}{\partial (Lz')^2} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{U^2}{L} \right] \left[\frac{\partial u'}{\partial t'} + u' \frac{\partial u'}{\partial x'} + v' \frac{\partial u'}{\partial y'} + w' \frac{\partial u'}{\partial z'} = \right. \\ \left. = - \left[\frac{U^2}{L} \right] \frac{\partial(p/(\rho_0 U^2))}{\partial x'} + \left[\frac{U}{L^2} \right] \nu \left[\frac{\partial^2 u'}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 u'}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2 u'}{\partial z'^2} \right]. \right. \end{aligned}$$

Аналогичные уравнения справедливы и для уравнений движения по осям y и z . Если мы объединим все три уравнения и разделим их на U^2/L , то получим

$$\frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial t'} + (\mathbf{u}' \cdot \nabla') \mathbf{u}' = -\text{grad } p' + \frac{\nu}{LU} \Delta' \mathbf{u}', \quad (23.8)$$

где $p' = p/(\rho_0 U^2)$. Условие неразрывности, как и прежде, имеет вид

$$\text{div } \mathbf{u}' = 0.$$

Уравнения (23.8) представляют собой уравнения Навье – Стокса, записанные в безразмерном виде. Мы определим **число Рейнольдса** как следующий безразмерный параметр

$$R = \frac{LU}{\nu}.$$

Рассмотрим два примера течения жидкости около сферы. В первом примере жидкость со скоростью $U_\infty = 10$ км/ч обтекает сферу радиуса 10 м, а во втором примере скорость жидкости $U_\infty = 100$ км/ч и радиус сферы – 1 м. Если в качестве L выберем радиус сферы и в качестве U – скорость U_∞ , то эти два течения будут иметь одинаковое число Рейнольдса. Тогда эти два течения описываются одинаковыми безразмерными уравнениями.

Лекция 19. Моделирование фильтрации несжимаемой жидкости

Фильтрация – движение жидкости в пористой среде.

Среда считается *пористой*, если содержит значительное число пустот, размеры которых малы по сравнению характерными размерами рассматриваемой жидкости. Возьмем некоторый образец пористой среды объема $V_{\text{общ}}$. Пусть объем всех пор в этом образце будет $V_{\text{пор}}$. Отношение

$$m = \frac{V_{\text{пор}}}{V_{\text{общ}}},$$

называется пористостью грунта.

1. Скорость фильтрации.

Под скоростью фильтрации понимают расход жидкости, т. е. объем жидкости, протекающей в единицу времени через единицу площади, выделенную в пористой среде. Величина

$$\Phi_0 = \frac{p}{\rho g} + h$$

называется напором, где p - давление, h - высота. В гидравлике рассматривают величину J , которую называют градиентом напора, и она определяется как:

$$J = -\frac{\partial \Phi_0}{\partial x}.$$

Эксперименты показывают, что скорость фильтрации является функцией от градиента напора:

$$v = f(J)$$

Такой характер рассматриваемых движений вызывается тем, что при фильтрации в пористой среде жидкость испытывает, вследствие влияния вязкости, большое сопротивление. Для многих грунтов (пески, глины, торфяные грунты, мелкотрещиноватые скальные грунты и т. д.) имеет место линейная зависимость скорости фильтрации от градиента напора:

$$v = \kappa J = -\kappa \frac{\partial \Phi_0}{\partial x},$$

где коэффициент пропорциональности κ называется коэффициентом фильтрации. Коэффициент фильтрации имеет размерность скорости; он равен скорости фильтрации при градиенте напора равном единице. Это

равенство называется законом Дарси. Часто это соотношение удобнее записывать в виде

$$v = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad \Phi = p + \rho gh$$

или для многомерного случая

$$\mathbf{v} = -\frac{k}{\mu} \text{grad } \Phi,$$

где коэффициент k зависит только от свойств среды и называется проницаемостью, μ - вязкость.

Линейный закон Дарси имеет определенные пределы применимости. За пределами линейного закона фильтрации, например для крупнозернистых грунтов или при больших скоростях движения, принимают иные зависимости между v и J . Так, рассматривают полином второй степени

$$J = Av + Bv^2,$$

или одночленную зависимость вида

$$v = J^n.$$

2. Уравнения движения жидкости в пористой среде

Вода в пористых породах может находиться в различных состояниях. Мы будем рассматривать движение воды под действием силы тяжести. В каждой из пор грунта происходит сложное движение с изменением скорости и ускорения по величине и направлению от точки к точке. Пory имеют различное направление и различную форму стенок, а потому в каждом выделенном объеме грунта должны иметься самые разнообразные по величине и направлению скорости. Поэтому невозможно рассматривать скорости отдельных частиц. Правильнее было бы рассматривать средние значения скоростей в некотором объеме. Если средняя скорость частиц некоторого объема есть \mathbf{v} , то мы можем отнести ее к центру тяжести этого объема, координаты которого обозначим через (x, y, z) . Примем вектор \mathbf{v} имеющим составляющие (v_x, v_y, v_z) .

В гидродинамике при выводе уравнений движения рассматривают ускорения частиц жидкости, которые выражаются через скорости следующим образом:

$$\frac{dv_x}{dt} = \frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \text{ и т. д.}$$

Уравнения движения отдельных частиц жидкости в порах можно написать таким образом:

$$\begin{aligned}\frac{dv_x}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + f_x, \\ \frac{dv_y}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + f_y, \\ \frac{dv_z}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + f_z - g.\end{aligned}\tag{19.1}$$

Здесь p - давление жидкости, ρ - плотность, g — ускорение силы тяжести, ось z направлена вверх. Через f_x, f_y, f_z обозначены составляющие условных сил сопротивления, которые как бы испытывает частица жидкости в поре. Эти силы сопротивления зависят от внутреннего трения жидкости. Считая скорости v_x, v_y, v_z и их производные по координатам малыми, произведениями их пренебрегают, оставляя в выражениях составляющих ускорения лишь члены $\partial v_x / \partial t, \partial v_y / \partial t, \partial v_z / \partial t$. При этом уравнения (19.1) становятся линейными.

Теперь нетрудно произвести их осреднение по некоторому объему, достаточно малому, чтобы учесть изменения скорости от одного места движения к другому, но достаточно большому по сравнению с размерами пор. Тогда можно будет под $v_x, v_y, v_z, p, f_x, f_y, f_z$ понимать их средние значения по объему. При этом под f_x, f_y, f_z будем понимать составляющие сил сопротивления, полученные из опыта. Таким образом, закон Дарси можно истолковать как линейный закон сопротивления, т. е. такой закон, при котором сопротивление пропорционально первой степени скорости фильтрации. Запишем эту зависимость в виде

$$f_x = -\frac{\nu}{k} v_x, \quad f_y = -\frac{\nu}{k} v_y, \quad f_z = -\frac{\nu}{k} v_z.$$

Уравнения (19.1) содержат четыре неизвестные функции: v_x, v_y, v_z и p . Присоединим к этим уравнениям уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0.$$

Лекция 20. Задача о движении грунтовых вод. Уравнение Буссинеска

Пусть пористая среда представляет собой некоторый водопроницаемый материал (песок), ограниченный снизу грунтом, не пропускающим воду (гранит), а сверху – земляной поверхностью (слайд 3.12). Из-за интенсивной работы артезианских скважин или в результате осадков уровень слоя воды изменяется, и под действием силы тяжести начинается движение жидкости, которое выравнивает её свободную поверхность.

Для описания процесса введём предположения:

1) вода рассматривается как несжимаемая жидкость с постоянной плотностью ρ , хотя $\rho = \rho(T, c, p)$, но очень слабая зависимость с учётом $T \sim \text{const}$, $c \sim \text{const}$ (солёность), p должны быть очень большими;

2) толщина пласта много меньше его длины и ширины – течение жидкости двумерное и все характеристики течения не зависят от z ;

3) подстилающая поверхность не имеет разрывов и изломов, $H(x, y)$ – гладкая функция;

4) свободная поверхности воды $h(x, y, t)$ – гладкая функция;

5) грунтовые воды нигде не выходят на поверхность; на свободной поверхности давление постоянно;

6) грунт однороден, т. е. $m = \text{const}$.

Найдём баланс массы в элементе грунта с объёмом $(H+h)\Delta x \Delta y$. Составляющие вектора скорости – $u(x, y, t)$, $v(x, y, t)$. Определим количество жидкости, входящей и выходящей из параллелепипеда за время dt .

Суммарное изменение массы равно

$$-\left(\frac{\partial}{\partial x}(\rho u(H+h)) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v(H+h)) \right) dx dy dt. \quad (20.1)$$

Общее количество жидкости в параллелепипеде $m\rho(H+h)dx dy$; $m < 1$ – пористость.

Изменение массы воды в элементе за время dt

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho m(H+h)dx dy) \right) dt = m\rho \frac{\partial h}{\partial t} dx dy dt, \quad (20.2)$$

так как $\partial H / \partial t \equiv 0$, $\partial \rho / \partial t \equiv 0$. Приравнявая (20.1) и (20.2), получим уравнение неразрывности, которое характеризует закон сохранения массы в рассматриваемом процессе:

$$m\rho\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho u(H+h)) - \frac{\partial}{\partial y}(\rho v(H+h)),$$

или с учётом $\partial\rho/\partial x \equiv 0$, $\partial\rho/\partial y \equiv 0$

$$m\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(u(H+h)) - \frac{\partial}{\partial y}(v(H+h)). \quad (20.3)$$

Уравнение (20.3) содержит три неизвестных величины: h , u , v . Для замыкания модели используют закон Дарси:

$$u = -\frac{\kappa}{\mu} \frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad v = -\frac{\kappa}{\mu} \frac{\partial \Phi}{\partial y}, \quad \Phi = p + \rho g L,$$

κ – коэффициент проницаемости, μ – коэффициент динамической вязкости. Поскольку течение медленное и почти горизонтальное, то динамической составляющей пренебрегают. Тогда остаётся только гидростатическая составляющая давления

$$\Phi(x, y, z, t) = \rho g(h(x, y, t) - z) + \text{const},$$

где const – давление на поверхности жидкости (атмосферное), $\rho g(h(x, y, t) - z)$ – давление, создаваемое столбом жидкости.

Тогда

$$u = -\frac{\kappa}{\mu} \rho g \frac{\partial h}{\partial x}, \quad v = -\frac{\kappa}{\mu} \rho g \frac{\partial h}{\partial y}.$$

Подставляя последнее выражение в (20.3), приходим к уравнению движения грунтовых вод

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial x} \left((H(x, y) + h) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \gamma \frac{\partial}{\partial y} \left((H(x, y) + h) \frac{\partial h}{\partial y} \right), \quad (20.4)$$

где $\gamma = \kappa \rho g / (\mu m)$, или уравнению Буссинеска, которое определяет одну неизвестную $h(x, y, t)$ – координату свободной поверхности.

Свойства уравнения Буссинеска:

- нестационарное,
- двумерное,
- параболического типа,
- неоднородное,
- нелинейное.

Решение уравнения (20.4) проводится численно. Аналитические решения ищутся только для упрощённых моделей.

Рассмотрим начальные данные и граничные условия. Необходимо знать форму подстилающей поверхности $H(x, y)$, коэффициент $\gamma(\kappa, \rho, g, \mu, m)$, функцию h при $t = 0$. Граничные условия: $h = \text{const}$ – поддерживаемый уровень (большой подземный водоём), $h_x = \text{const}$ – регулируемый приток либо отток подземных вод.

Рассмотрим упрощённые модели.

1) стационарный процесс (решение не зависит от t):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left((H + h) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((H + h) \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0$$

– уравнение эллиптического типа (уравнение Лапласа);

2) подстилающая поверхность горизонтальна, т. е. $H(x, y) = H_0 = \text{const}$.

Тогда уравнение становится однородным:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma \left(\frac{\partial}{\partial x} \left((H_0 + h) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((H_0 + h) \frac{\partial h}{\partial y} \right) \right);$$

3) одномерное течение – распространение течение одинаково во всех направлениях:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial x} \left((H(x) + h) \frac{\partial h}{\partial x} \right);$$

4) при малых изменениях уровня жидкости по сравнению с толщиной пласта ($H_0 \gg h$):

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma H_0 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}.$$

Более сложная модель:

- неоднородный грунт, $m = m(x, y)$, $k = k(x, y)$;
- учёт поступления в грунт жидкости за счёт осадков ($q(x, y, t)$ – мощность осадков),

$$\frac{\mu}{\rho g} m(x, y) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x, y) (H + h) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(x, y) (H + h) \frac{\partial h}{\partial y} \right) + q(x, y, t).$$

Итак, применение фундаментального закона сохранения массы позволило получить разнообразные модели.

Численное решение задачи рассмотрим на примере одномерного уравнения

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial x} \left((H(x) + h) \frac{\partial h}{\partial x} \right).$$

Это уравнение представляет собой нелинейное уравнение параболического типа. Метод решения таких уравнений мы рассматривали в лекции 14. Выбор шага по времени производится на основе принципа замороженных коэффициентов.

Лекция 21. Методы расчёта уравнений в переменных вихрь – функция тока

Модель несжимаемой вязкой жидкости описывает самые разнообразные явления, такие как, например, волны в океане, движение атмосферы, обтекание тел при малых скоростях набегающего потока и т.д. Широкое применение эта модель имеет и в различных инженерных приложениях. Движение несжимаемой вязкой жидкости описывается уравнениями Навье – Стокса в предположении, что плотность жидкости постоянна. Это предположение, с одной стороны, упрощает уравнения, а с другой стороны, создаёт некоторые новые особенности, которые затрудняют решение этих уравнений.

1. Уравнения Навье – Стокса в переменных функция тока – завихрённость

Уравнения Навье – Стокса для несжимаемой жидкости, записанные в безразмерном виде, имеют вид

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\nabla p + \frac{1}{\operatorname{Re}} \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}_e(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in D, \quad t \geq 0, \quad (21.1) \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) &= \mathbf{g}_0(\mathbf{x}) - \text{граничные условия,} \end{aligned}$$

или в развёрнутом виде

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_k} &= 0, \\ \frac{\partial u_n}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 u_k \frac{\partial u_n}{\partial x_k} &= -\frac{\partial p}{\partial x_n} + \frac{1}{\operatorname{Re}} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 u_n}{\partial x_k^2} + f_{e,n}(x_1, x_2, x_3, t), \quad n = 1, 2, 3. \end{aligned}$$

Здесь

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

– скорость частиц жидкости в точке $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ в момент времени t ,
 ρ – плотность жидкости, $p = p(\mathbf{x}, t)$ – давление, Re – число Рейнольдса
и $\mathbf{f}_e(\mathbf{x}, t)$ – внешние силы.

Характер течения определяется величиной числа Рейнольдса. Можно выделить три основных режима течения:

- 1) $Re \gg 1$. В этом случае вязкие силы значительно меньше инерционных сил, что приводит к очень сложной картине течения из-за возникновения турбулентности;
- 2) $Re = O(1)$. В этом режиме вязкие силы сравнимы с инерциальными;
- 3) $Re \ll 1$. Этот режим характерен для течения очень вязких жидкостей. В этом случае уравнения (21.1) можно заменить линейным стационарным уравнением.

Мы будем рассматривать методы решения задач, для которых реализуются первый и второй режимы течения.

Одной из трудностей в решении уравнений (21.1) является то, что отсутствует эволюционное уравнение для давления. Для несжимаемой жидкости, давление не имеет своего обычного термодинамического смысла, а является следствием несжимаемости.

Если течение не содержит свободных поверхностей, то можно исключить давление, взяв операцию rot от уравнения движения (21.1). Учитывая, что $\text{rot}(\text{grad}(p)) = 0$, можно получить

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\omega} - (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{1}{Re} \Delta \boldsymbol{\omega} + \text{rot}(\mathbf{f}_e(\mathbf{x}, t)), \quad (21.2)$$

$$\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}, 0) = \text{rot}(\mathbf{g}_0(\mathbf{x})), \quad \mathbf{x} \in D, \quad t \geq 0,$$

где $\boldsymbol{\omega} = \text{rot}(\mathbf{u})$ – завихрённость. Левая часть уравнения описывает перенос завихрённости вместе с жидкостью. Определим скорость через функцию тока ψ следующим образом:

$$\mathbf{u} = \text{rot}(\boldsymbol{\psi}). \quad (21.3)$$

Так как $\text{div}(\text{rot}(\boldsymbol{\psi})) = 0$, то условие неразрывности выполняется. Для того чтобы замкнуть наши уравнения нам необходимо соотношение между завихрёностью и функцией тока. Для этого возьмём операцию rot от (21.3) и получим

$$\operatorname{rot}(\mathbf{u}) = \boldsymbol{\omega} = \operatorname{rot}(\operatorname{rot}(\mathbf{u})) = -\Delta\psi + \operatorname{grad}(\operatorname{div}(\psi)).$$

Функция тока определяется из уравнения (21.3) неединственным образом. Поэтому нам необходимо некоторое дополнительное условие. Удобнее всего положить $\operatorname{div}(\psi) = 0$. Тогда связь между $\boldsymbol{\omega}$ и ψ выражается уравнением Пуассона

$$\Delta\psi = -\boldsymbol{\omega}. \quad (21.4)$$

Таким образом, мы получили замкнутый набор уравнений для описания движения несжимаемой жидкости: эволюционное уравнение для завихрённости, уравнение Пуассона (21.4) для функции тока, из которой определяется поле скоростей, согласно уравнению (21.3). Граничные условия для $\boldsymbol{\omega}$ и ψ следуют из граничных условий для \mathbf{u} . Уравнения (21.2)–(21.4) называются уравнениями Навье – Стокса в переменных функция тока – завихрённость. Эта форма особенно удобна в случае двумерных задач, когда

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u(x, y, t) \\ v(x, y, t) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \mathbf{f}_e = \begin{pmatrix} f_{e,1}(x, y, t) \\ f_{e,2}(x, y, t) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Тогда нетрудно получить, что

$$\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \psi = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi \end{pmatrix}.$$

Система уравнений (21.2)–(21.4) при этом значительно упрощается и принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} &= \frac{1}{\operatorname{Re}} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) + f_s(x, y, t), \\ \omega(x, y, 0) &= \left(\frac{\partial g_{0,2}}{\partial y} - \frac{\partial g_{0,1}}{\partial x} \right), \quad x \in D, \quad t \geq 0; \end{aligned} \quad (21.5)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega(x, y, t); \quad (21.6)$$

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial \psi / \partial y \\ -\partial \psi / \partial x \end{pmatrix}, \quad (21.7)$$

где

$$f_s(x, y, t) = \left(\frac{\partial f_{2,e}}{\partial y} - \frac{\partial f_{1,e}}{\partial x} \right).$$

Обычно граничные условия задаются на u и v . Тогда из уравнения (21.3) мы получим граничные условия для ψ , которые используются при решении уравнения (21.4).

2. Разностные схемы в переменных функция тока – завихрённость

Перейдём к построению разностных схем для уравнений (21.5)–(21.7) в прямоугольной области $\{0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y\}$. Предположим, что $f_e = \text{const}$. Граничные условия примем в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \Big|_{(0,y)} = \begin{pmatrix} 0 \\ g_1(y,t) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \Big|_{(l_x,y)} = \begin{pmatrix} 0 \\ g_3(y,t) \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \Big|_{(x,0)} = \begin{pmatrix} g_2(x,t) \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \Big|_{(x,l_y)} = \begin{pmatrix} g_4(x,t) \\ 0 \end{pmatrix},$$

которые, согласно (21.5), преобразуются в

$$\begin{pmatrix} \psi \\ \partial \psi / \partial x \end{pmatrix} \Big|_{(0,y)} = \begin{pmatrix} 0 \\ -g_1(y,t) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \psi \\ \partial \psi / \partial x \end{pmatrix} \Big|_{(l_x,y)} = \begin{pmatrix} 0 \\ -g_3(y,t) \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \psi \\ \partial \psi / \partial y \end{pmatrix} \Big|_{(x,0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ g_2(x,t) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \psi \\ \partial \psi / \partial y \end{pmatrix} \Big|_{(x,l_y)} = \begin{pmatrix} 0 \\ g_4(x,t) \end{pmatrix}.$$

Введём разностную сетку с узлами (x_n, y_m, t_k) и шагами $h_x = l_x/N$, $h_y = l_y/M$ и τ_k . Для построения разностной схемы для уравнения (21.5)

применим метод расщепления. Производная по времени аппроксимируется разностью вперёд, первые производные по пространству – центральной разностью и вторые производные – обычным трёхточечным разностным отношением. В результате получим

$$\begin{aligned} \frac{\omega_{n,m}^{k+1/2} - \omega_{n,m}^k}{\tau_k} &= -u_{n,m}^k \frac{\omega_{n+1,m}^k - \omega_{n-1,m}^k}{2h_x} + \frac{\omega_{n+1,m}^k - 2\omega_{n,m}^k + \omega_{n-1,m}^k}{\text{Re} \cdot h_x^2}, \\ n &= 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1; \\ \frac{\omega_{n,m}^{k+1} - \omega_{n,m}^{k+1/2}}{\tau_k} &= -v_{n,m}^k \frac{\omega_{n,m+1}^{k+1/2} - \omega_{n,m-1}^{k+1/2}}{2h_y} + \frac{\omega_{n,m+1}^{k+1/2} - 2\omega_{n,m}^{k+1/2} + \omega_{n,m-1}^{k+1/2}}{\text{Re} \cdot h_y^2}, \\ n &= 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1; \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (21.8)$$

Уравнение (21.6) представляет собой уравнение Пуассона с постоянными коэффициентами. Поэтому для аппроксимации этого уравнения можно использовать схему (9.14) с $a = 1$ и $b = 0$, левую часть которой мы обозначим как $P(u_{n,m})$. Тогда разностная схема для определения ψ в момент времени t_{k+1} имеет вид

$$\begin{aligned} P(\psi_{n,m}^{k+1}) &= -\omega_{n,m}^{k+1}, \\ n &= 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (21.9)$$

Аппроксимируя уравнения (21.7), получим формулы для вычисления скоростей в момент времени t_{k+1} :

$$\begin{aligned} u_{n,m}^{k+1} &= \frac{\psi_{n,m+1}^{k+1} - \psi_{n,m-1}^{k+1}}{2h_y}, \\ v_{n,m}^{k+1} &= -\frac{\psi_{n+1,m}^{k+1} - \psi_{n-1,m}^{k+1}}{2h_x}, \\ n &= 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (21.10)$$

Нам осталось сформулировать граничные условия для уравнений (21.5) и (21.6). Для примера рассмотрим граничные условия при $x = 0$. Первое условие в разностной форме имеет простой вид:

$$\psi_{0,m}^{k+1} = 0, \quad m = 0, \dots, M. \quad (21.11)$$

Для аппроксимации второго условия применим метод фиктивных областей и получим

$$\frac{\psi_{1,m}^{k+1} - \psi_{-1,m}^{k+1}}{2h_x} = -g_1(y_m, t_{k+1}).$$

Как обычно, запишем уравнения (21.14) при $n = 0$:

$$\frac{1}{h_x^2} (\psi_{1,m}^{k+1} - 2\psi_{0,m}^{k+1} + \psi_{-1,m}^{k+1}) + \frac{1}{h_y^2} (\psi_{0,m+1}^{k+1} - 2\psi_{0,m}^{k+1} + \psi_{0,m-1}^{k+1}) = -\omega_{0,m}^{k+1}.$$

Далее, выражая фиктивное значение из предыдущего соотношения и учитывая условие (21.11), окончательно получим

$$\begin{aligned} \omega_{0,m}^{k+1} &= -\frac{2}{h_x^2} (\psi_{1,m}^{k+1} + h_x g_1(y_m, t_{k+1})), \\ m &= 1, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (21.12)$$

Это соотношение определяет граничное условие для завихрённости при $x = 0$, так как $\psi_{1,m}$ в момент времени t_{k+1} нам известно из решения уравнения (21.9). Вычисление граничных условий на других границах осуществляется совершенно аналогичным способом.

Так как схема (21.8) является явной, то естественно возникает вопрос об устойчивости этой схемы и выборе шага по времени. В схемах расщепления устойчивость всей схемы обуславливается устойчивостью одномерных схем. Поэтому, применяя принцип «замороженных» коэффициентов, получим

$$\tau_k \leq \min(\tau_1, \tau_2), \quad (21.13)$$

где

$$\tau_1 \leq \min \left(\frac{4 \operatorname{Re} \cdot h_x^2}{4 + \left(\max_{n,m} (u_{n,m}^k)^2 \right) \operatorname{Re}^2 h_x^2}, \frac{1}{2} \operatorname{Re} \cdot h_x^2 \right),$$

$$\tau_2 \leq \min \left(\frac{4 \operatorname{Re} \cdot h_y^2}{4 + \left(\max_{n,m} (v_{n,m}^k)^2 \right) \operatorname{Re}^2 h_y^2}, \frac{1}{2} \operatorname{Re} \cdot h_y^2 \right).$$

Это условие показывает, что при больших числах Рейнольдса возникает сильное ограничение на шаг по времени. Применение неявной схемы не решает этой проблемы, так как в этом случае уравнения (21.8) и (21.9) становятся связанными через граничное условие (21.12), что приводит к крайне неэффективному алгоритму для нахождения $(\omega^{k+1}, \psi^{k+1})$. Решение этой проблемы требует изменения процедуры интегрирования по времени. Схему расщепления можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{ds_{0,m}}{dt} &= 0, \quad \frac{ds_{N,m}}{dt} = 0, \\ \frac{ds_{n,m}}{dt} &= -u_{n,m}^k \frac{s_{n+1,m} - s_{n-1,m}}{2h_x} + \frac{s_{n+1,m} - 2s_{n,m} + s_{n-1,m}}{\operatorname{Re} \cdot h_x^2}, \end{aligned} \quad (21.14)$$

$$\begin{aligned} t_k \leq t \leq t_k + \tau_k; \quad n &= 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1, \\ s_{n,m}(t_k) &= \omega_{n,m}^k; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dq_{n,0}}{dt} &= 0, \quad \frac{dq_{n,M}}{dt} = 0, \\ \frac{dq_{n,m}}{dt} &= -v_{n,m}^k \frac{q_{n,m+1} - q_{n,m-1}}{2h_y} + \frac{q_{n,m+1} - 2q_{n,m} + q_{n,m-1}}{\operatorname{Re} \cdot h_y^2}, \end{aligned} \quad (21.15)$$

$$\begin{aligned} t_k \leq t \leq t_k + \tau_k; \quad n &= 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1, \\ q_{n,m}(t_k) &= s_{n,m}(t_k + \tau_k). \end{aligned}$$

То есть мы аппроксимировали разностными отношениями только производные по пространству и получили при каждом значении (n, m) системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

Последовательное решение этих систем даёт нам

$$\omega_{n,m}^{k+1} = q_{n,m}(t_k + \tau_k).$$

Схемы (21.14), (21.15) можно записать в матричном виде

$$\begin{aligned}\frac{ds_m}{dt} &= A_m s_m, \quad t_k \leq t \leq t_k + \tau_k, \\ s_m(t_k) &- \text{задано}, \\ m &= 1, \dots, M-1;\end{aligned}\tag{21.16}$$

$$\begin{aligned}\frac{dq_n}{dt} &= B_n q_n, \quad t_k \leq t \leq t_k + \tau_k, \\ q_n(t_k) &- \text{задано}, \\ n &= 1, \dots, N-1,\end{aligned}\tag{21.17}$$

где

$$s_m = \{s_{0,m}, \dots, s_{N,m}\}^T, \quad q_n = \{q_{n,0}, \dots, q_{n,M}\}^T$$

и A_m, B_n – трёхдиагональные матрицы. Устойчивость того или иного метода решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений вида $ds/dt = As$ зависит от собственных значений матрицы A , а именно: параметр $\rho = \tau_k \lambda_j(A)$ должен принадлежать некоторой области на комплексной плоскости для всех $j = 1, \dots, J$, где J – число уравнений. Форма области зависит от метода (см. лекцию 10). На основе принципа «замороженных» коэффициентов можно заключить, что при $\text{Re} \rightarrow \infty$ собственные значения матрицы A_m в момент времени t_k принадлежат отрезку

$$\lambda_j(A_m) \in \left[-\frac{i}{h_x} \max_{n,m} |u_{n,m}^k|, \frac{i}{h_x} \max_{n,m} |u_{n,m}^k| \right], \quad j = 1, \dots, N,\tag{21.18}$$

и аналогично для матрицы B_n

$$\lambda_j(B_n) \in \left[-\frac{i}{h_y} \max_{n,m} |v_{n,m}^k|, \frac{i}{h_y} \max_{n,m} |v_{n,m}^k| \right], \quad j = 1, \dots, M.\tag{21.19}$$

Эти результаты говорят о том, что для интегрирования систем (21.16) и (21.17) необходимо применять метод, область устойчивости которого включает мнимую ось. Наиболее подходящими являются методы Рунге – Кутты порядка выше второго (см. лекцию 10). Возьмём трёхстадийный метод третьего порядка. На слайде 3.13 показана часть области устойчивости этого метода вблизи мнимой оси. Схема

Рунге – Кутта 3-го порядка будет устойчива для систем (21.16) и (21.17), если параметр p для собственных значений (21.18) и (21.19) будет принадлежать отрезку $[-i a, i a]$, где $a \approx 1.6$. Учитывая, что при конечном значении числа Рейнольдса члены со второй пространственной производной также влияют на устойчивость, приходим к условию

$$\tau_k \leq \min(\tau_1, \tau_2),$$

где

$$\tau_1 = \frac{1.6 \min(h_x, h_y)}{\max\left(\max_{n,m} |u_{n,m}^k|, \max_{n,m} |v_{n,m}^k|\right)}, \quad \tau_2 = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\left(\min(h_x, h_y)\right)^2,$$

которое накладывает более слабое ограничение на шаг по времени, чем условие (21.13), при том же шаге по пространству.

Слайд 3.13. Область устойчивости метода Рунге – Кутта 3-го порядка вблизи мнимой оси. Область устойчивости находится слева от кривой

В качестве примера можно привести схему Рунге– Кутта 3-го порядка, которая задаётся следующей таблицей Бучера:

0			
1/2	1/2		
3/4	0	3/4	
	2/9	1/3	4/9

Тогда процедура решения системы (21.21) строится следующим образом:

$$\frac{s_m^{k+1} - s_m^k}{\tau_k} = \frac{1}{9} (2d_1 + 3d_2 + 4d_3),$$

где

$$d_1 = A_m s_m^k, \quad d_2 = A_m \left(s_m^k + \frac{1}{2} \tau_k d_1 \right), \quad d_3 = A_m \left(s_m^k + \frac{3}{4} \tau_k d_2 \right).$$

Аналогичная процедура применяется затем к системе (21.22).

Суммируя всё изложенное выше, делаем вывод, что процедура вычисления одного шага по времени организуется следующим образом:

- 1) по известному в момент времени t_k полю скоростей вычисляется шаг по времени τ_k ;
- 2) во всех внутренних точках области вычисляется завихрённость в момент времени t_{k+1} . Для этого используется либо схема (21.8), либо схема (21.16), (21.17);
- 3) функция тока в момент времени t_{k+1} определяется из решения уравнения (21.9) с граничными условиями вида (21.11). Так как коэффициенты этого уравнения постоянны, то можно применить методы на основе FFT;
- 4) по известной функции тока вычисляется завихрённость в граничных узлах и поле скоростей в момент времени t_{k+1} по формулам (21.10).

Лекция 22. Методы расчёта уравнений в переменных давление-скорость

1. Уравнения Навье – Стокса в переменных давление-скорость

Применение переменных функция тока – завихрённость бывает не всегда удобно для решения задач о течении вязкой несжимаемой жидкости. Так, в течениях со свободными поверхностями использование этих переменных сильно затрудняет постановку граничных условий. Уравнения Навье – Стокса для несжимаемой жидкости, записанные в безразмерном виде, можно записать в виде

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_x(\mathbf{u})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{f}_y(\mathbf{u})}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{f}_z(\mathbf{u})}{\partial z} = -\nabla p + \frac{1}{\operatorname{Re}} \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}_e(x, t). \quad (22.1)$$

Здесь

$$\mathbf{f}_x(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} u^2 \\ u \cdot v \\ u \cdot w \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_y(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} v \cdot u \\ v^2 \\ v \cdot w \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_z(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} w \cdot u \\ w \cdot v \\ w^2 \end{pmatrix},$$

то есть конвективный член записывается в дивергентной форме.

2. Метод маркеров и ячеек

Использование в качестве неизвестных функций давления и компонентов скорости позволяет избежать многих сложностей, особенно в трёхмерных задачах. Поэтому в дальнейшем мы будем работать с уравнениями (22.1). Одним из часто используемых методов является метод маркеров и ячеек (MAC, Marker and Cell).

Первоначальная идея была предложена Харлоу и Уэлчем, которая затем получила дальнейшее развитие в различных модификациях метода MAC. В этом методе производится интегрирование уравнений движения несжимаемой вязкой жидкости с одновременным рассмотрением маркеров-частиц, перемещающихся со скоростью жидкости. Мы обсудим основные особенности этого подхода на примере решения двумерных задач в прямоугольной области.

Введём разностную сетку с шагами $h_x = x_{n+1} - x_n$ и $h_y = y_{m+1} - y_m$. Параметры жидкости будут определяться в «смещённых» точках, как показано на слайде 3.14.

Слайд 3.14. Расчётная ячейка в методе MAC. В точках «●» вычисляется компонента скорости u ; в точках «×» – компонента v ; давление вычисляется в точках «□»

Предполагая, что давление в момент времени t_k известно, на первом этапе вычисляется промежуточное поле скоростей на основе следующей аппроксимации уравнений (22.1):

$$\begin{aligned} & \frac{u_{n,m+1/2}^{k+1/2} - u_{n,m+1/2}^k}{\tau_k} + \frac{(u^2)_{n+1/2,m+1/2}^k - (u^2)_{n-1/2,m+1/2}^k}{h_x} + \\ & + \frac{(u \cdot v)_{n,m+1}^k - (u \cdot v)_{n,m}^k}{h_y} = - \frac{p_{n+1/2,m+1/2}^k - p_{n-1/2,m+1/2}^k}{h_x} + \\ & + \frac{1}{\text{Re}} (\Delta_x u_{n,m+1/2}^k + \Delta_y u_{n,m+1/2}^k) + f_{e,1}(x_n, y_{m+1/2}, t_k), \end{aligned} \quad (22.2)$$

$$n = 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1;$$

$$\begin{aligned} & \frac{v_{n+1/2,m}^{k+1/2} - v_{n+1/2,m}^k}{\tau_k} + \frac{(v^2)_{n+1/2,m+1/2}^k - (v^2)_{n+1/2,m-1/2}^k}{h_y} + \\ & + \frac{(u \cdot v)_{n+1,m}^k - (u \cdot v)_{n,m}^k}{h_x} = - \frac{p_{n+1/2,m+1/2}^k - p_{n+1/2,m-1/2}^k}{h_y} + \\ & + \frac{1}{\text{Re}} (\Delta_x v_{n+1/2,m}^k + \Delta_y v_{n+1/2,m}^k) + f_{e,2}(x_{n+1/2}, y_m, t_k), \end{aligned} \quad (22.3)$$

$$n = 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1,$$

где

$$(u^2)_{n+1/2,m+1/2}^k = u_{n+1,m+1/2}^k \cdot u_{n,m+1/2}^k, \quad (v^2)_{n+1/2,m+1/2}^k = v_{n+1/2,m+1}^k \cdot v_{n+1/2,m}^k,$$

$$(u \cdot v)_{n,m}^k = \frac{1}{4} (u_{n,m+1/2}^k + u_{n,m-1/2}^k) (v_{n+1/2,m}^k + v_{n-1/2,m}^k),$$

$$\Delta_x \begin{pmatrix} u_{n,m+1/2}^k \\ v_{n+1/2,m}^k \end{pmatrix} = \frac{1}{h_x^2} \begin{pmatrix} u_{n+1,m+1/2}^k - 2u_{n,m+1/2}^k + u_{n-1,m+1/2}^k \\ v_{n+3/2,m}^k - 2v_{n+1/2,m}^k + v_{n-1/2,m}^k \end{pmatrix},$$

$$\Delta_y \begin{pmatrix} u_{n,m+1/2}^k \\ v_{n+1/2,m}^k \end{pmatrix} = \frac{1}{h_y^2} \begin{pmatrix} u_{n,m+3/2}^k - 2u_{n,m+1/2}^k + u_{n,m-1/2}^k \\ v_{n+1/2,m+1}^k - 2v_{n+1/2,m}^k + v_{n+1/2,m-1}^k \end{pmatrix}.$$

Соотношения (22.2) и (22.23) необходимо ещё дополнить граничными условиями, записанными в разностной форме. Рассмотрим, например, расчёт граничных условий, заданных на вертикальной границе $x = 0$. Тогда вектор нормали $\mathbf{n} = (1, 0)$, вектор касательной $\mathbf{k} = (0, 1)$ и граничные условия принимают вид

$$u(0, y) = g_n(y, t); \quad (22.4)$$

$$v(0, y) = g_k(y, t), \quad (22.5)$$

или

$$\frac{\partial v}{\partial x}(0, y) = 0. \quad (22.6)$$

Разностная форма условия (22.4) записывается очень просто:

$$u_{0,m+1/2}^{k+1/2} = g_n(y_{m+1/2}, t_{k+1}), \quad m = 0, \dots, M-1.$$

Условие (22.5) или (22.6) используется для определения скорости v в точке $(1/2, m)$ через расчёт величин

$$(u \cdot v)_{0,m}^k \quad \text{и} \quad \Delta_x v_{1/2,m}^k.$$

Эти величины включают в себя мнимое значение $v_{-1/2,m}$. Для исключения этого значения в случае условия (22.5) можно положить

$$\frac{1}{2} (v_{1/2,m}^k + v_{-1/2,m}^k) = g_k(y_m, t_k) \Rightarrow v_{-1/2,m}^k = 2g_k(y_m, t_k) - v_{1/2,m}^k,$$

а в случае условия (22.6) –

$$\frac{v_{1/2,m}^k - v_{-1/2,m}^k}{h_x} = 0 \Rightarrow v_{-1/2,m}^k = v_{1/2,m}^k.$$

Расчёт условий на других границах производится аналогичным образом.

Исследование устойчивости схем (22.2), (22.3) проводится так же, как и для схемы (25.8). В результате получим следующее условие

$$\tau_k \leq \min \left(\frac{4(\gamma_3 + \gamma_4)}{4(\gamma_3 + \gamma_4)^2 + (\gamma_1 + \gamma_2)^2}, \frac{1}{2(\gamma_3 + \gamma_4)} \right),$$

где

$$\gamma_1 = \frac{1}{h_x} \max_{n,m} |u_{n,m}^k|, \quad \gamma_2 = \frac{1}{h_y} \max_{n,m} |v_{n,m}^k|,$$

$$\gamma_3 = \frac{1}{\text{Re} \cdot h_x^2}, \quad \gamma_4 = \frac{1}{\text{Re} \cdot h_y^2}.$$

Вычисленные промежуточные значения скорости могут не удовлетворять условию неразрывности, записанному для каждой расчётной ячейки, то есть

$$d_{n+1/2,m+1/2}^{k+1/2} = \frac{u_{n+1,m+1/2}^{k+1/2} - u_{n,m+1/2}^{k+1/2}}{h_x} + \frac{v_{n+1/2,m+1}^{k+1/2} - v_{n+1/2,m}^{k+1/2}}{h_y} \neq 0,$$

$$n = 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1.$$

Поэтому эти промежуточные значения необходимо скорректировать для того, чтобы условие неразрывности выполнялось для каждой расчётной ячейки. Для этого введём некоторую потенциальную функцию φ и окончательные значения скоростей будем вычислять по формулам

$$\begin{aligned}
u_{n,m+1/2}^{k+1} &= u_{n,m+1/2}^{k+1/2} - \frac{\varphi_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} - \varphi_{n-1/2,m+1/2}^{k+1}}{h_x}, \\
v_{n+1/2,m}^{k+1} &= v_{n+1/2,m}^{k+1/2} - \frac{\varphi_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} - \varphi_{n+1/2,m-1/2}^{k+1}}{h_y}.
\end{aligned}
\tag{22.7}$$

Тогда

$$\begin{aligned}
d_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} &= d_{n+1/2,m+1/2}^{k+1/2} - \frac{\varphi_{n+3/2,m+1/2}^{k+1} - 2\varphi_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} + \varphi_{n-1/2,m+1/2}^{k+1}}{h_x^2} - \\
&\quad - \frac{\varphi_{n+1/2,m+3/2}^{k+1} - 2\varphi_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} + \varphi_{n+1/2,m-1/2}^{k+1}}{h_y^2}.
\end{aligned}$$

Из требования

$$d_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} = 0$$

следует разностное уравнение Пуассона для вычисления функции φ :

$$\begin{aligned}
&\frac{\varphi_{n+3/2,m+1/2}^{k+1} - 2\varphi_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} + \varphi_{n-1/2,m+1/2}^{k+1}}{h_x^2} + \\
&\frac{\varphi_{n+1/2,m+3/2}^{k+1} - 2\varphi_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} + \varphi_{n+1/2,m-1/2}^{k+1}}{h_y^2} = d_{n+1/2,m+1/2}^{k+1/2}
\end{aligned}
\tag{22.8}$$

Граничные условия для этого уравнения следуют из граничных условий для нормальной к границе компоненты скорости. Так как промежуточные и окончательные значения скоростей удовлетворяют граничным условиям, то из (22.3) следует, что

$$(\nabla_h \varphi, \mathbf{n}) = 0$$

во всех точках границы, здесь ∇_h – разностная форма оператора ∇ .

Давление в момент времени t_{k+1} вычисляется по известным значениям функции φ . Так соотношение (22.2) можно представить в виде

$$u_{n,m+1/2}^{k+1/2} = u_{n,m+1/2}^k + \tau_k(\dots) - \tau_k \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{n,m+1/2}^k.$$

Корректировку (22.7) можно трактовать как введение некоторого дополнительного поля давления, то есть

$$\begin{aligned} u_{n,m+1/2}^{k+1} &= u_{n,m+1/2}^{k+1/2} - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_{n,m+1/2}^{k+1} = \\ &= u_{n,m+1/2}^k + \tau_k(\dots) - \tau_k \left[\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{n,m+1/2}^k + \left(\frac{\partial p^*}{\partial x} \right)_{n,m+1/2}^{k+1} \right]. \end{aligned}$$

Тогда

$$-\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) = -\tau_k \left(\frac{\partial p^*}{\partial x} \right) \Rightarrow p^* = \frac{\varphi}{\tau_k}$$

и давление в момент времени t_{k+1} вычисляется как

$$p_{n+1/2,m+1/2}^{k+1} = p_{n+1/2,m+1/2}^k + \frac{\varphi_{n+1/2,m+1/2}^{k+1}}{\tau_k}, \quad n = 1, \dots, N-1; \quad m = 1, \dots, M-1.$$

Если в задаче отсутствуют свободные поверхности, то вычислительный процесс на этом заканчивается, в противном случае вводятся частицы-маркеры. Эти частицы не участвуют в вычислении движения жидкости непосредственным образом, а служат для выделения свободной поверхности и визуализации течения. В начальный момент времени предполагается, что положение маркеров известно. Дальнейшее их перемещение определяется движением жидкости и описывается уравнениями

$$\begin{aligned} \frac{dx_p}{dt} &= u(x_p, y_p, t), \quad \frac{dy_p}{dt} = v(x_p, y_p, t), \\ p &= 1, \dots, N_p, \\ x_p(0), y_p(0) &- \text{заданы;} \end{aligned} \tag{22.9}$$

(x_p, y_p) – координаты маркера в декартовой системе координат.

Для получения разностной формы уравнений (22.9) используется линейная интерполяция скорости как по пространству, так и по времени для каждой разностной ячейки. Пусть, например, маркер с

номером p находится в момент времени t_k в ячейке $\{x_n \leq x \leq x_{n+1}, y_m \leq y \leq y_{m+1}\}$ и значения скорости в узлах $(n, m+1/2)$, $(n+1, m+1/2)$, $(n+1/2, m)$ и $(n+1/2, m+1)$ известны как в момент времени t_k , так и в момент времени t_{k+1} . Тогда положение этого маркера в момент времени t_{k+1} вычисляется по формулам

$$\begin{aligned} x_p^{k+1} &= x_p^k + \frac{\tau_k}{2h_x} \left[\left(u_{n,m+1/2}^{k+1} + u_{n,m+1/2}^k \right) (x_{n+1} - x_p^k) + \right. \\ &\quad \left. + \left(u_{n+1,m+1/2}^{k+1} + u_{n+1,m+1/2}^k \right) (x_p^k - x_n) \right], \\ y_p^{k+1} &= y_p^k + \frac{\tau_k}{2h_y} \left[\left(v_{n+1/2,m}^{k+1} + v_{n+1/2,m}^k \right) (y_{m+1} - y_p^k) + \right. \\ &\quad \left. + \left(v_{n+1/2,m+1}^{k+1} + v_{n+1/2,m+1}^k \right) (y_p^k - y_m) \right]. \end{aligned}$$

Положение жидкости определяется распределением маркеров по ячейкам разностной сетки. При этом выделяется три типа ячеек: пустая ячейка (E), которая не содержит маркеров; поверхностная ячейка (S), которая содержит частицы-маркеры и граничит с пустыми ячейками, и ячейки жидкости (F) (слайд 3.15).

Слайд 3.15. Частицы-маркеры определяют ячейки занятые жидкостью

Давление в пустых ячейках равно $p_{\text{внеш}}$, которое для простоты будем считать равным нулю, поскольку мы всегда можем этого добиться путём замены $p \rightarrow p - p_{\text{внеш}}$. Тогда граничным условием на свободной поверхности будет отсутствие нормального и касательного напряжений. Если $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ есть вектор нормали к свободной поверхности в некоторой точке, то эти условия имеют вид

$$\begin{aligned} p - \frac{2}{\text{Re}} \left[\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 \right] &= 0, \\ \frac{1}{\text{Re}} \left[2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) n_x n_y + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_x^2 - n_y^2) \right] &= 0. \end{aligned} \tag{22.10}$$

Расчёт давления и компонент скорости в поверхностных ячейках осуществляется специальным образом и основывается на граничных

условиях (22.10) и условии неразрывности. При этом выделяется четыре типа поверхностных ячеек, а именно:

- 1) ячейки, граничащие с одной пустой ячейкой;
- 2) ячейки, граничащие с двумя пустыми ячейками;
- 3) ячейки, граничащие с тремя пустыми ячейками;
- 4) ячейки, окружённые пустыми ячейками и представляющие собой изолированные капли.

Наличие свободной поверхности вносит свои коррективы и в вычисление потенциальной функции φ . Для ячеек, занятых жидкостью, справедливо уравнение (22.8) с граничным условием $\varphi = 0$ в поверхностных ячейках. При этом область определения уравнений (22.8) задаётся положением частиц жидкости, а значит, зависит от времени. Если эти уравнения дополнить соотношением $\varphi = 0$ в пустых ячейках, то получим систему уравнений с переменными коэффициентами и с постоянной областью определения, которая совпадает с областью определения задачи. Для решения полученных уравнений обычно применяются итерационные методы. Так как поле скоростей меняется незначительно в течение одного шага по времени, то в качестве хорошего начального условия для вычисления φ в момент времени t_{k+1} можно взять значение этой функции в момент времени t_k .

С учётом вышеизложенного расчёт одного шага по времени для течения со свободными границами производится следующим образом:

- 1) по известному в момент времени t_k полю скоростей определяется шаг по времени τ_k ;
- 2) по известным в момент времени t_k координатам маркеров выделяются ячейки жидкости (F) и поверхностные ячейки (S);
- 3) вычисляются промежуточные скорости в ячейках F ;
- 4) решается уравнение Пуассона для определения функции φ ;
- 5) в ячейках F вычисляются скорости и давление в момент времени t_{k+1} ;
- 6) вычисляются скорости и давление в ячейках S ;
- 7) определяются новые положения маркеров в момент времени t_{k+1} .

3. Пример

С помощью моделирования методом маркеров и ячеек можно изучать широкий круг физических явлений. На слайде 26.3 показан всплеск от падения капли жидкости в мелкий бассейн, видна характерная расширяющаяся корона.

Слайд 3.16. Всплеск от падения капли жидкости в мелкий бассейн

Лекция 23. Моделирование неустановившихся течений воды в системах речных русел и каналов

В некоторых случаях решение полных уравнений Навье – Стокса нецелесообразно. Прежде всего это касается задач, где достаточна только качественная оценка процесса динамики жидкости. В таких задачах используются упрощённые одномерные модели.

Рассмотрим явление течения жидкости в канале (русле) (слайд 3.17). Необходимо оценить два параметра: скорость $v(x,t)$ и уровень жидкости $y(x,t)$. Предполагается, что скорость постоянна в пределах каждого поперечного течения, а свободная поверхность в каждом поперечном сечении горизонтальна (нет волновых явлений на поверхности).

Канал предполагается достаточно прямым (при движении воды по окружности даже при постоянной скорости возникает нормальное ускорение v^2/R , что приводит к появлению центробежных сил инерции).

Пусть $z(x)$ – координата дна канала, $h(x,t)$ – координаты свободной поверхности. Тогда

$$y = z + h.$$

Уклон канала считаем положительным, т. е. z увеличивается вниз по течению. Пусть $B(y)$ – ширина свободной поверхности в любом сечении потока (слайд 3.18). Дифференциальные уравнения, которые описывают такое течение, следуют из законов сохранения массы и количества движения. При этом используются следующие допущения:

- 1) давление в воде подчиняется гидростатическому закону $p = \rho gy$,
- 2) уклон русла мал,
- 3) влияние трения (вязкость, турбулентность) учитывается введением силы сопротивления $F_{\text{сопр}}(v^2, y)$.

Выведем уравнение неразрывности. Пусть $\rho A \Delta x$ – масса слоя воды толщиной Δx и поперечным сечением A . Эта масса при перемещении потока вдоль берега изменяется только за счёт возможного притока воды с берегов с расходом ρq на единицу длины. Тогда полное изменение объёма слоя $A \Delta x$ равно количеству воды, втекающей через вертикальные грани,

$$\rho \frac{\partial(Av)}{\partial x} \Delta x$$

+ количество $\rho B h_t \Delta x$ – за счёт изменения уровня, здесь B – ширина канала, h_t – изменение уровня, $B h_t = A_t$. Тогда полное уравнение потока равно

$$\left[\frac{\partial(Av)}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial t} \right] \Delta x = q \cdot \Delta x$$

или

$$\frac{\partial(Av)}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial t} = q. \quad (23.1)$$

Здесь $A(y, x)$ – заданная функция, определяющая геометрию канала, т. е. зная $y(x, t)$, можно всегда найти A ; $q(x, t)$ – заданная функция.

В случае канала прямоугольного ширины B имеем $A = By$ и уравнение (23.1) примет вид

$$\frac{\partial y}{\partial t} + g \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{q}{B}.$$

Рассмотрим уравнение движения

$$\rho \frac{d}{dt}(Av \cdot \Delta z) = H \cdot \Delta x - F_1 \Delta x \cdot \cos \varphi + \rho g A \Delta x \cdot \sin \varphi,$$

где H – неуровновешенная горизонтальная сила давления на поверхность элемента, φ – угол наклона, F_1 – сила трения вдоль стенок и дна канала, $\rho g A \Delta x \cdot \sin \varphi$ – действие силы тяжести. При $\varphi = 0$ сила тяжести не действует. Так как угол φ очень мал по предположению, то $\sin \varphi \rightarrow S = dz/dx$, $\cos \varphi \rightarrow 1$.

Силу сопротивления полагаем из эмпирического закона Маннинга

$$F_1 = \frac{\rho g A v |v|}{\gamma R^{4/3}},$$

т. е. сила сопротивления $\sim v^2$ и направлена противоположно скорости. Здесь R – гидравлический радиус, γ – коэффициент шероховатости. Так для прямоугольника $R = By/(B+2y)$, для очень широкого канала ($B \gg 2y$) $R = y$.

Найдём

$$\rho \frac{d}{dt}(Av \cdot \Delta x).$$

При этом с учётом подвижности среды

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}.$$

Тогда уравнение неразрывности

$$\frac{d}{dt}(A \cdot \Delta x) = q \cdot \Delta x,$$

$$\frac{d}{dt}(Av \cdot \Delta x) = v \frac{d}{dt}(A \cdot \Delta x) + A \cdot \Delta x \frac{dv}{dt} = qv \cdot \Delta x + A \cdot \Delta x \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} \right).$$

Найдём полную результирующую сил давления на поверхность слоя (слайд 3.19). Полное давление на вертикальную грань слоя:

$$\int_0^y \rho g(y(x,t) - \xi) b(x, \xi) d\xi.$$

Давление на часть поверхности слоя, который находится в соприкосновении с берегами,

$$\left(\int_0^y \rho g(y - \xi) \frac{\partial b}{\partial x} d\xi \right) \Delta x.$$

Тогда получаем выражение для $H \Delta x$:

$$\begin{aligned}
 H \Delta x &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\int_0^y \rho g (y - \xi) b d\xi \right) \Delta x + \left(\int_0^y \rho g (y - \xi) \frac{\partial b}{\partial x} d\xi \right) \Delta x = \\
 &= -\int_0^y \rho g \frac{\partial y}{\partial x} b d\xi = -\rho g A \frac{\partial y}{\partial x}.
 \end{aligned}$$

Тогда, подставляя все найденные величины, получим уравнение импульса

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{q}{A} v &= Sg - S_1 g - g \frac{\partial y}{\partial x}. \quad (23.2) \\
 S_1 &= \frac{1}{\rho g A} F_1 - \text{уклон трения.}
 \end{aligned}$$

Система уравнений (23.1)–(23.2) называется уравнениями Сен-Венана.

Лекция 24. Уравнения Сен-Венана. Численные методы решения

В предыдущей лекции были получены уравнения Сен-Венана:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial(Av)}{\partial x} = q. \quad (24.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{q}{A} v = Sg - S_1 g - g \frac{\partial y}{\partial x}. \quad (24.2)$$

Рассмотрим численное решение этих уравнений. Для простоты положим $S=0$, $S_1=0$ и $q=0$.

Сначала запишем уравнения (24.1), (24.2) в дивергентной форме, то есть в виде законов сохранения. Тогда уравнения (24.1), (24.2) примут вид

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{s})}{\partial x} = \mathbf{o}, \quad (24.3)$$

где \mathbf{s} и $\mathbf{f}(\mathbf{s})$ - векторы определённые равенствами

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} A \\ v \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{s}) = \begin{pmatrix} Av \\ \frac{1}{2} v^2 + gy \end{pmatrix}.$$

Так как

$$A = A(y, x),$$

то $\mathbf{f}(\mathbf{s})$ действительно является функцией от \mathbf{s} .

Введём разностную сетку с узлами (x_n, t_k) , где $x_n = nh$, $n=0, 1, \dots$ и $t_{k+1} = t_k + \tau_k$. Для аппроксимации уравнений (24.3) удобнее использовать двухшаговую схему Лакса-Вендроффа. Сначала в центрах прямоугольных ячеек на плоскости (x, t) (слайд 3.20) вычисляются промежуточные значения:

$$\mathbf{s}_{n+1/2}^{k+1/2} = \frac{1}{2} (\mathbf{s}_{n+1}^k + \mathbf{s}_n^k) - \frac{\tau_k}{2h} (\mathbf{f}_{n+1}^k - \mathbf{f}_n^k),$$

$$n=1, \dots, N-1,$$

где

$$f_n^k = f(s_n^k).$$

Окончательное решение вычисляется затем по схеме

$$s_n^{k+1} = s_n^k - \frac{\tau_k}{h} (f_{n+1/2}^{k+1/2} - f_{n-1/2}^{k+1/2}). \quad (24.4)$$

Эта схема имеет второй порядок аппроксимации по h и τ .

Непосредственное исследование устойчивости схемы (24.4) невозможно, из-за нелинейности системы (24.3) которую эта схема аппроксимирует. Поэтому применим принцип замороженных коэффициентов. Сначала линеаризуем систему (24.3). Для этого представим решение в виде $s=s_0+w$, где s_0 – постоянный вектор вида

$$s_0 = \begin{pmatrix} A_0 \\ v_0 \end{pmatrix},$$

а вектор w – малое возмущение. Тогда

$$f(s)=f(s_0+w)\approx f(s_0)+A(s_0)w+\dots,$$

где

$$A(s_0) = \{a_{ij}(s_0)\} = \left\{ \frac{\partial f_i}{\partial s_j}(s_0) \right\}.$$

Подставляя это разложение в (24.3), мы получим линейную систему уравнений с постоянной матрицей $A_0=A(s_0)$ вида

$$\frac{\partial w}{\partial t} + A_0 \frac{\partial w}{\partial x} = o. \quad (24.5)$$

Тогда для анализа схемы (24.4) для системы (24.5) уже можно применить критерий фон Неймана. Следуя процедуре, рассмотренной в лекции 12, можно получить следующее выражение для собственных значений оператора перехода

$$\lambda_j(\alpha) = 1 - i \left(\frac{\omega_j \tau_k}{h} \right) \sin(\alpha) - \left(\frac{\omega_j \tau_k}{h} \right)^2 (1 - \cos(\alpha)),$$

$$j=1, 2, 3,$$

где ω_j есть собственные значения матрицы A_0 . Из критерия фон Неймана следует, что схема для линеаризованного уравнения (25.5) будет устойчива если

$$\frac{\tau_k \max_j |\omega_j|}{h} \leq 1.$$

Тогда шаг по времени выбирается из условия

$$\tau_k \leq \frac{h}{\max_j |\omega_j|}.$$

Это условие можно использовать для вывода условия устойчивости схемы (24.4). Учитывая, что собственные значения ω_j зависят от n , значит являются функциями координаты и времени, мы приходим к условию устойчивости схемы (24.4):

$$\tau_k \leq \frac{h}{\max_n \left(\max_j |\omega_j(A_n^k, v_n^k)| \right)} = \tau_{\max}.$$

Величина

$$\max_n \left(\max_j |\omega_j(A_n^k, v_n^k)| \right), \quad (24.6)$$

оценивает наибольшую скорость волны в заданной области в момент времени $t=t_k$. Данная оценка получена из анализа устойчивости линеаризованной системы (24.5), поэтому в некоторых случаях величина (24.6) будет давать заниженное значение наибольшей скорости волны. Тогда вычисления с шагом по времени τ_k близким к τ_{\max} могут быть неустойчивыми. Поэтому шаг по времени задаётся как

$$\tau_k = r \tau_{\max},$$

где r – параметр Куранта ($0 < r < 1$) и на практике часто выбирается $r=0.9$. Для более надёжного достижения устойчивости можно использовать следующий подход. Расчёт первых нескольких временных шагов производить с малым параметром Куранта. Это позволит течению сформироваться и оценка (24.6) станет более надёжной. Тогда последующие вычисления можно производить с большим параметром Куранта.

Для расчёта граничных условий вводятся фиктивные слои, что позволяет не нарушать единообразия вычислений для граничных ячеек. Мы рассмотрим два вида граничных условий: твёрдая стенка (или ось

симметрии) и открытая граница расчётной области. В качестве примера рассмотрим расчёт этих условий на левой границе расчётной области. Пусть граничным точкам отвечают индексы $(0, k)$, а соответствующим фиктивным узлам – индексы $(-1, k)$. Тогда граничное условие на твёрдой стенке

$$u(0, t) = 0, \quad t > 0$$

запишется как

$$0.5(v_{-1}^k + v_1^k) = v_0^k = 0,$$

$$A_{-1}^k = A_1^k$$

или

$$\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}_{-1}^k = \begin{pmatrix} s_1 \\ -s_2 \end{pmatrix}_1^k.$$

Далее рассчитываются величины

$$s_{-1/2}^{k+1/2} \text{ и } s_0^{k+1}$$

по приведённым выше формулам. Через открытые границы газ (жидкость) может втекать или вытекать из области, и здесь должны быть обеспечены условия непрерывности движения. Пусть, например, жидкость втекает в область с левой стороны. Тогда в фиктивных узлах задаются параметры набегающего потока (помечены знаком « ∞ »):

$$\begin{pmatrix} A \\ v \end{pmatrix}_{-1}^k = \begin{pmatrix} A \\ v \end{pmatrix}_{\infty}.$$

В случае когда вытекает слева из области, наиболее естественно представить вытекающий поток однородным. В простейшем случае значения параметров потока в фиктивных узлах $(-1, k)$ должны быть такими же как и в узлах $(0, k)$:

$$\begin{pmatrix} A \\ v \end{pmatrix}_{-1}^k = \begin{pmatrix} A \\ v \end{pmatrix}_{\infty}.$$

При расчётах по схеме Лакса-Вендроффа возникают нефизические осцилляции приближённого решения в областях быстрого изменения параметров течения, что вообще говоря, характерно для схем второго порядка аппроксимации.

Введение искусственной вязкости приводит к затуханию высокочастотных компонент решения в процессе вычислений, что можно

использовать для подавления нефизических осцилляций разностного решения. Включение вязкости можно осуществить с помощью специальных членов, которые добавляются к системе уравнений. Так если (24.3) есть исходная система уравнений, то модифицированную систему можно записать в виде

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial f(s)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu B(s) \frac{\partial s}{\partial x} \right), \quad (24.7)$$

где $B(s)$ – квадратная матрица; μ – коэффициент искусственной вязкости. Матрица $B(s)$ должна быть подобрана таким образом, чтобы решение $s(x, t)$ системы (24.7) обладало достаточной гладкостью и при $\mu \rightarrow 0$ приближалось к решению исходной системы (24.3). Аппроксимируя систему (24.7) соответствующей разностной схемой, мы получим разностные уравнения с диссипативными членами, которые и определяют вязкостные эффекты схемы. Следует отметить, что введение искусственной вязкости имеет смысл только для схем второго и выше порядков аппроксимации. Схемы первого порядка обладают аппроксимационной вязкостью, которая порождается самой структурой разностной схемы.

Рассмотрим включение искусственной вязкости в схему Лакса-Вендроффа. В простейшем случае можно положить $B(s) = I$ и для сохранения второго порядка аппроксимации $\mu = \mu_a(t)h^2$. Тогда вязкостный член примет вид

$$\mu_a(t)h^2 \frac{\partial^2 s}{\partial x^2}.$$

Аналогичные выражения описывают вязкие силы при движении вязкой жидкости, но в отличие от реальной вязкости, искусственная вязкость исчезает при $h \rightarrow 0$. Аппроксимируя вторую производную в момент времени t_k , получим схему Лакса-Вендроффа для системы (24.7):

$$s_n^{k+1} = s_n^k - \frac{\tau_k}{h} (f_{n+1/2}^{k+1/2} - f_{n-1/2}^{k+1/2}) + \mu_a^k \tau_k (s_{n+1}^k - 2s_n^k + s_{n-1}^k), \quad (24.8)$$

$$n=1, \dots, N-1$$

где

$$v = \mu_a^k \tau_k$$

постоянный малый параметр. Величина параметра ν подбирается экспериментально, так как она зависит от конкретной задачи и шага разностной сетки.

Введение искусственной вязкости иногда бывает необходимым для получения устойчивого процесса вычислений. Дело в том, что анализ устойчивости схемы (24.4) проводился для уравнений линеаризованных в окрестности течения с постоянными параметрами и не учитывал нелинейных эффектов, которые в ряде случаев являются источником неустойчивости. Такая неустойчивость называется нелинейной. Для предотвращения этого явления в некоторых задачах оказалось необходимым введение в разностную схему дополнительных слагаемых, определяющих искусственную вязкость. Так нетрудно получить, что схема (24.8) требует более строгого ограничения на шаг по времени:

$$\tau_k \leq \tau_{\max} \sqrt{1 - 2\nu}.$$

Когда $S_1 \neq 0$, то есть присутствует некоторый диссипативный процесс, нефизические осцилляции будут проявляться в меньшей степени.

Лекция 25. Теория упругости. Закон Гука

1. Основные соотношения и уравнения теории упругости

Теория упругости представляет собой раздел механики, изучающий деформации в твердом теле, вызванные физическими воздействиями, и возникающие при этом внутренние силы. Классическая теория упругости все свои выводы строит на некоторой модели деформируемого твердого тела. Такой моделью является идеально упругое тело, которое обладает следующими свойствами. Идеально упругое тело предполагается вполне упругим, т. е. тело полностью восстанавливает первоначальную форму и объем после устранения внешних физических воздействий. Первоначальное состояние тела предполагается естественным, т. е. при отсутствии нагрузок в теле не возникает никаких напряжений. При идеальной упругости предполагается линейная зависимость между нагрузкой тела и его деформацией, что позволяет установить однозначную зависимость между напряжениями и деформациями. Идеально упругое тело предполагается сплошным, т. е. любой микрообъем тела не имеет пустот, что дает возможность рассматривать деформации и перемещения точек тела как непрерывные функции координат. Реальные тела несколько отличаются от рассматриваемой модели идеально упругого тела. Поэтому погрешность решений, получаемых в теории упругости, зависит от того, насколько реальные тела можно считать вполне упругими. Основные принципы теории упругости состоят в следующем. Принимается, что перемещения тела малы по сравнению с его линейными размерами, а относительные удлинения и углы сдвига малы по сравнению с единицей. Малость деформаций и линейная зависимость между напряжениями и деформациями позволяет применять принцип независимости действия сил. Этот принцип дает возможность подсчитать результат воздействия на тело системы сил сложением результатов воздействия каждой силы в отдельности. При

решении ряда инженерных задач используется принцип Сен-Венана, согласно которому система взаимно уравновешенных нагрузок, приложенных к малой части тела, вызывает напряжения, быстро убывающие от места приложения нагрузки. Все внешние силы, действующие на тело, разбиваются на две группы: поверхностные и объемные. Поверхностные силы возникают в результате контакта тел. Они распределены по поверхности тела. Если размеры площади, на которой действует сила, малы по сравнению с размерами тела, то в этом случае такую силу называют сосредоточенной. Объемные силы действуют в каждой точке тела (например, вес тела, силы инерции).

Напряженное состояние в каждой точке тела описывается шестью компонентами напряжений: σ_x , σ_y , σ_z - нормальные напряжения и τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yz} - касательные напряжения. При этом векторы напряжений σ_x , σ_y , σ_z направлены соответственно вдоль осей x , y , z , а напряжения τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yz} лежат в плоскостях (проходящих через данную точку), которые параллельны соответственно плоскостям xOz , xOy , yOx . Первый индекс означает направление касательного напряжения, второй – нормаль к плоскости (сечению). Компоненты напряжений в окрестности ($dV = dxdydz$) точки показаны на слайде 3.21. При этом имеем $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ (закон парности касательных напряжений). Деформации в окрестности каждой точки тела описываются линейными деформациями ε_x , ε_y , ε_z и угловыми γ_{xy} , γ_{xz} , γ_{yz} .

Пусть упругое однородное тело в декартовой системе координат x, y, z занимает область V . Пусть тело закреплено на границе S_1 , в области V нагружено объемными силами $\vec{p} = \{p_x, p_y, p_z\}^T$ и на границе S_2

поверхностными силами $\vec{q} = \{q_x, q_y, q_z\}^T$, $S = S_1 + S_2$, S - граница тела. На слайде 3.22 граница крепления тела заштрихована.

Тогда, как известно, равновесное состояние упругого тела в теории упругости описывается следующими уравнениями.

1. *Статические уравнения.* Дифференциальные уравнения равновесия

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} = p_x, \quad \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} = p_y, \\ \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = p_z, \end{aligned} \quad (25.1)$$

где $\{\sigma\} = \{\sigma_x, \dots, \sigma_z\}^T$, $\{\tau\} = \{\tau_{xy}, \dots, \tau_{zy}\}^T$ - векторы функций напряжений тела.

2. *Геометрические уравнения.* Соотношения Коши

$$\begin{aligned} \varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \varepsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z}, \quad \gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \\ \gamma_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}, \quad \gamma_{zx} = \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial x}, \end{aligned} \quad (25.2)$$

где u, v, w - функции перемещений тела.

3. *Физические уравнения.* Закона Гука

$$\{\sigma\} = [D]\{\varepsilon\}, \quad (25.3)$$

где $[D]$ - матрица, размерности 6×6 , $[D] = [C_{ij}]$, $C_{ij} = C_{ji}$, $i, j = 1, \dots, 6$; C_{ij} - модули упругости тела, $\{\varepsilon\} = \{\varepsilon_x, \dots, \gamma_{xz}\}^T$ - вектор функций деформаций тела.

Условия (статические) на поверхности S_1

$$\begin{aligned} q_x = \sigma_x l + \tau_{xy} m + \tau_{xz} n, \quad q_y = \tau_{yx} l + \sigma_y m + \tau_{yz} n, \\ q_z = \tau_{zx} l + \tau_{zy} m + \sigma_z n, \end{aligned} \quad (25.4)$$

$$\text{кинематические на } S_2: u = v = w = 0, \quad (25.5)$$

где m, n, l - направляющие косинусов нормали \vec{n} к поверхности S_2 .

Итак, имеем 15 уравнений, которые содержат 15 неизвестных функций:

шесть составляющих напряжений, шесть составляющих деформаций и три составляющие перемещения. С математической точки зрения задача может быть решена и сводится к интегрированию указанных 15 уравнений при удовлетворении условий (1,4) и условий на поверхности S_2 .

Применяют два подхода к решению данных уравнений.

1. Решение в перемещениях, когда за неизвестные приняты три составляющих перемещения: $u(x, y, z)$, $v(x, y, z)$, $w(x, y, z)$.
2. Решение в напряжениях, когда за неизвестные приняты шесть составляющих напряжений: $\sigma_x(x, y, z)$, $\sigma_y(x, y, z)$, $\sigma_z(x, y, z)$, $\tau_{xy}(x, y, z)$, $\tau_{yz}(x, y, z)$, $\tau_{zx}(x, y, z)$; в этом случае используются уравнения неразрывной деформации

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y}, & \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_z}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial z \partial y}, & \frac{\partial^2 \varepsilon_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial z^2} &= \frac{\partial^2 \gamma_{xz}}{\partial x \partial z}, \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} - \frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} \right) &= 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial y \partial z}, & \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \gamma_{zy}}{\partial z} + \frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} - \frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} \right) &= 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial x \partial z}, \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} - \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} \right) &= 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_z}{\partial y \partial x}. \end{aligned} \quad (25.5)$$

3. Решение в смешанной форме, когда за неизвестные приняты некоторые составляющие перемещений и некоторые составляющие напряжений.

2. Вариационная постановка трехмерной задачи упругости

Пусть упругое тело в декартовой системе координат x, y, z занимает область V с кусочно-гладкой границей S . Пусть данное тело нагружено объемными силами $\vec{p} = \{p_x, p_y, p_z\}^T$ в области V , на границе S_2 поверхностными силами $\vec{q} = \{q_x, q_y, q_z\}^T$, на границе S_1 тело закреплено. Как известно, равновесное состояние упругого тела в теории упругости описывается уравнениями (25.1)-(25.4) с учетом условий (25.5).

Сформулируем данную задачу в постановке метода перемещений, в котором неизвестными являются функции u, v, w . Обозначим $\vec{u} = \{u \ v \ w\}^T$. Пусть L_2 -векторное пространство со скалярным произведением:

$$(\vec{u}_*, \vec{v}_*) = \int_V \vec{u}_* \vec{v}_* dV, \quad \vec{u}_*, \vec{v}_* \in L_2, \quad (25.6)$$

где $\vec{u}_* = \{u_1 \ u_2 \ u_3\}^T$, $\vec{v}_* = \{v_1 \ v_2 \ v_3\}^T$.

Для элемента $\vec{u}_* \in L_2$ норма определяется по формуле

$$\|\vec{u}_*\|_{L_2} = \sqrt{\|u_1\|^2 + \|u_2\|^2 + \|u_3\|^2}, \quad \|u_i\|^2 = \int_V u_i^2 dV. \quad (25.7)$$

Элементами L_2 являются трехмерные векторы, компоненты которых есть квадратично-суммируемые в области V вещественные функции. Подставляя (25.2) в (25.3), а затем (25.3) в (25.1) и (25.4), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_x(\vec{u})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}(\vec{u})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}(\vec{u})}{\partial z} + p_x &= 0, & \frac{\partial \tau_{xy}(\vec{u})}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y(\vec{u})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}(\vec{u})}{\partial z} + p_y &= 0, \\ \frac{\partial \tau_{xz}(\vec{u})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}(\vec{u})}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z(\vec{u})}{\partial z} + p_z &= 0, \end{aligned} \quad (25.8)$$

$$\begin{aligned} \sigma_x(\vec{u})l + \tau_{xy}(\vec{u})m + \tau_{xz}(\vec{u})n &= q_x, & \tau_{xy}(\vec{u})l + \sigma_y(\vec{u})m + \tau_{yz}(\vec{u})n &= q_y, \\ \tau_{xz}(\vec{u})l + \tau_{yz}(\vec{u})m + \sigma_z(\vec{u})n &= q_z. \end{aligned} \quad (25.9)$$

Полученную систему уравнений (25.8) запишем в операторной форме

$$A\vec{u} = \vec{p}, \quad \vec{u}, \vec{p} \in L_2. \quad (25.10)$$

Вначале рассмотрим основные задачи теории упругости с однородными граничными условиями:

1) первая основная задача

$$\vec{u} = 0 \quad (\text{т. е. } u = v = w = 0) \text{ на } S; \quad (25.11)$$

2) вторая основная задача

$$\vec{q} = 0 \text{ на } S; \quad (25.12)$$

3) смешанная задача

$$\vec{u} = 0 \text{ на } S_1, \quad \vec{q} = 0 \text{ на } S_2, \quad S = S_1 + S_2. \quad (25.13)$$

Пусть M - линеал таких векторов из L_2 , компонентами которого являются функции, непрерывные в области V со своими частными производными до второго порядка включительно. Обозначим: M_1, M_2, M_3 – линеалы векторов из M , удовлетворяющие соответственно граничным условиям (25.11) – (25.13), при этом $M_i \in C^2(V)$. В силу однородных граничных условий следует, что множества M_1, M_2, M_3 плотны в L_2 . Обозначим через A_1, A_2, A_3 дифференциальный оператор A , рассматриваемый соответственно на M_1, M_2, M_3 . Введем на M скалярное произведение

$$\forall \vec{u}, \vec{v} \in M: \quad (A\vec{u}, \vec{v}) = \int_V A\vec{v} \cdot \vec{u} dV. \quad (25.14)$$

Используя (25.8) в правой части (25.14) и интегрируя по частям, получим

$$(A\vec{u}, \vec{v}) = 2 \int_V W(\vec{u}, \vec{v}) dV - \int_S \vec{v} \cdot \vec{q}(\vec{u}) dS, \quad (25.15)$$

где

$$\begin{aligned} W(\vec{u}, \vec{v}) = & [\varepsilon_x(\vec{u})\sigma_x(\vec{v}) + \varepsilon_y(\vec{u})\sigma_y(\vec{v}) + \varepsilon_z(\vec{u})\sigma_z(\vec{v}) + \\ & + \gamma_{xy}(\vec{u})\tau_{xy}(\vec{v}) + \gamma_{xz}(\vec{u})\tau_{xz}(\vec{v}) + \gamma_{zy}(\vec{u})\tau_{zy}(\vec{v})]. \end{aligned} \quad (25.16)$$

Используя (25.2), (25.3) в (25.16) с учетом, что $C_{ij} = C_{ji}$, получаем

$$W(\vec{u}, \vec{v}) = W(\vec{v}, \vec{u}). \quad (25.17)$$

Отметим, что $W(\vec{u}, \vec{u})$ есть удельная потенциальная энергия деформации тела для вектора перемещений \vec{u} , которую обозначим $W(\vec{u})$. Для векторов, принадлежащих линеалам M_1, M_2, M_3 , в силу граничных условий (25.11)-(25.13) имеем

$$\int_S \vec{v} \cdot \vec{q}(\vec{u}) dS = 0, \quad (25.18)$$

так как на границе S либо $\vec{v} = 0$, либо $\vec{q} = 0$. Следовательно, согласно (25.18) из (25.15) получаем

$$\forall \vec{u}, \vec{v} \in M_i: \quad (A_i \vec{u}, \vec{v}) = 2 \int_V W(\vec{u}, \vec{v}) dV, \quad i = 1, 2, 3. \quad (25.19)$$

Отсюда с учетом (25.17) вытекает симметричность операторов A_i , т. е.

$$\forall \vec{u}, \vec{v} \in M_i: (\vec{u}, A_i \vec{v}) = (\vec{v}, A_i \vec{u}), \quad i = 1, 2, 3. \quad (25.20)$$

Докажем, что оператор A_i является положительно определенным на M_i .

При этом используем следующие неравенства:

а) неравенство Корна

$$\begin{aligned} & \int_V \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] dV + \\ & + \int_V \left[\left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] dV \leq k_i \int_V (\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 + \varepsilon_z^2 + \gamma_{xy}^2 + \gamma_{xz}^2 + \gamma_{zy}^2) dV; \end{aligned} \quad (25.21)$$

б) неравенства Фридриха

$$\begin{aligned} \|u\|^2 & \leq C_1 \int_V \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 \right] dV + C_2 \int_S u^2 dS, \\ \|v\|^2 & \leq C_1 \int_V \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] dV + C_2 \int_S v^2 dS, \\ \|w\|^2 & \leq C_1 \int_V \left[\left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] dV + C_2 \int_S w^2 dS; \end{aligned} \quad (25.22)$$

в) неравенства Пуанкаре

$$\begin{aligned} \|u\|^2 & \leq C_3 \int_V \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 \right] dV + C_4 \left[\int_V u dV \right]^2, \\ \|v\|^2 & \leq C_3 \int_V \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] dV + C_4 \left[\int_V v dV \right]^2, \\ \|w\|^2 & \leq C_3 \int_V \left[\left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] dV + C_4 \left[\int_V w dV \right]^2, \end{aligned} \quad (25.23)$$

где k_i , $C_i = \text{const}$, $\vec{u} = \{u \ v \ w\}^T$; $\vec{u} \in M_i$, S – кусочно-гладкая граница области V ;

C_3 , C_4 – зависят от данной области V , и не зависят от функций u , v , w .

Из (25.19) и свойства эллиптичности компонент деформации, т. е.

$$W(\vec{u}) \geq k(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 + \varepsilon_z^2 + \gamma_{xy}^2 + \gamma_{xz}^2 + \gamma_{zy}^2), \quad (25.24)$$

и с учетом (25.21), получаем цепочку неравенств

$$\begin{aligned} \forall \vec{u} \in M_1: (A_1 \vec{u}, \vec{u}) &= 2 \int_V W(\vec{u}) dV \geq 2k \int_V (\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 + \varepsilon_z^2 + \gamma_{xy}^2 + \gamma_{xz}^2 + \gamma_{zy}^2) dV \geq \\ &\geq \frac{2k}{k_1} \int_V \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] dV + \\ &+ \frac{2k}{k_1} \int_V \left[\left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] dV. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Используя в (25.25) неравенства (25.22) с учетом (25.11), (25.7), имеем

$$\forall \vec{u} \in M_1: (A_1 \vec{u}, \vec{u}) \geq \frac{2k}{C_1 k_1} (\|u\|^2 + \|v\|^2 + \|w\|^2) = C^2 \|\vec{u}\|_{L_2}^2, \quad (2.26)$$

где $C^2 = 2k/(C_1 k_1)$.

Отсюда, согласно определению положительной определенности оператора и поскольку множество M_1 плотно в L_2 следует, что оператор A_1 является положительно определенным. Можно показать, что операторы A_2 , A_3 так же являются положительно определенными соответственно на множествах M_2 , M_3 . Поскольку оператор A для краевых задач: (25.10), (25.11); (25.10), (25.12) и (25.10), (25.13) является положительно определенным, то решение этих задач эквивалентно нахождению минимума квадратичного функционала вида

$$\forall \vec{u} \in H_A: F(\vec{u}) = (A\vec{u}, \vec{u}) - 2(\vec{u}, \vec{p}) \quad (25.27)$$

в энергетическом пространстве H_A , построенным на множестве M со скалярным произведением $(\vec{u}, \vec{u})_A$, определяемым по формуле $\forall \vec{u}, \vec{v} \in M: (\vec{u}, \vec{v})_A = (A\vec{u}, \vec{v})$, и с нормой $\|\cdot\|_A = \sqrt{(*, *)_A}$. Отметим, что оператор A положительно определен для основных задач упругости и с неоднородными граничными условиями:

- 1) первая основная задача

$$\vec{u} = \vec{u}_s \text{ на } S, \quad (25.28)$$

2) вторая основная задача

$$\vec{q} = \vec{q}_s \text{ на } S, \quad (25.29)$$

3) третья основная задача

$$\vec{u} = \vec{u}_s \text{ на } S_1, \quad \vec{q} = \vec{q}_s \text{ на } S_2, \quad (25.30)$$

где \vec{u}_s, \vec{q}_s - заданные векторы перемещений и усилий.

Обобщенное решение задачи (25.6), (25.30) находится как вектор, минимизирующий в H_A функционал $F(\vec{u})$ вида

$$F(\vec{u}) = \int_V W(\vec{u}) dV - \int_V (\vec{u}, \vec{p}) dV - \int_{S_E} (\vec{u}, \vec{q}_s) dV \quad (25.31)$$

Минимизация функционала (25.31) на соответствующем множестве возможных перемещений отвечает в теории упругости принципу минимума потенциальной энергии упругого тела. При построении приближенных решений задач упругости широко используют метод Ритца. Кратко опишем процедуру метода Ритца в энергетических пространствах. Пусть система $\{\phi_k\} \subset H_A$ полна в H_A . Пусть

$$u_n = \sum_{k=1}^n \alpha_k \phi_k, \quad \alpha_k = \text{const}. \quad (25.32)$$

Подставляя в (25.27) представление (25.32), из условия $\partial F(u_n) / \partial \alpha_k = 0$, $k=1, \dots, n$, получаем следующую систему уравнений метода Ритца

$$\sum_{k=1}^n (A\phi_i, \phi_k) \alpha_k = (p, \phi_i), \quad i=1, \dots, n. \quad (25.33)$$

Решая (25.33), определяем коэффициенты α_k . При этом отметим, что

$$\|u_n - u_0\|_A \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty,$$

где u_0, u_n – приближенное (обобщенное) решение данной задачи.

Пусть $\{\psi_k\}$ ортонормированный базис пространства H_A . Тогда

$$\{\psi_k, \psi_i\}_A = \begin{cases} 0 & \text{при } k \neq i \\ 1 & \text{при } k = i \end{cases},$$

и для системы (25.33) имеем $\alpha_k = (f, \psi_k)$. Следовательно, приближенное решение u_n имеет вид

$$u_n = \sum_{k=1}^n (f, \psi_k) \psi_k. \quad (25.34)$$

Лекция 26. Моделирование упругой деформации однородной балки

Метод конечных элементов (МКЭ) активно применяется при решении задач теории упругости. Основные достоинства МКЭ заключаются в следующем. Во-первых, в основе МКЭ лежит принцип минимума потенциальной энергии упругого тела, который является наиболее общим в теории упругости. Во-вторых, МКЭ имеет матричную формулировку и поэтому удобно реализуется на ЭВМ. В-третьих, мощное развитие возможностей ЭВМ резко повышает эффективность применения МКЭ при решении инженерных задач. Конечноэлементная постановка краевой задачи упругости по сути сводится к дискретной формулировке вариационной постановки (в форме метода Ритца) задачи упругости, т. е. сводится к дискретной формулировке принципа минимума потенциальной энергии упругого тела. Основные этапы реализации МКЭ состоят в следующем.

1. Разбиение области на конечные элементы

Пусть область V тела представлена конечными элементами: V_1, V_2, \dots, V_{N_0} ; N_0 – общее число конечных элементов (КЭ). Обозначим: V^h – дискретная модель, т. е. $V^h = \bigcup_{e=1}^{N_0} V_e$. Геометрическая форма КЭ выбирается в зависимости от формы заданной области. Например, для областей формы прямоугольной призмы обычно используют КЭ аналогичной формы, для областей с криволинейной границей целесообразно применять изопараметрические (криволинейные) КЭ. Тип КЭ (лагранжевый, эрмитовые) определяются типом краевой задачи. Например, при решении задач изгиба балок, пластин используют только эрмитовые КЭ. Порядок КЭ определяет размерность модели V^h , значит, выбор порядка КЭ (т. е. порядка аппроксимирующих функций КЭ) зависит от возможностей данной ЭВМ (объема оперативной памяти и скорости вычислений). На практике обычно

применяют неравномерное разбиение, т. е. в окрестностях приложения сосредоточенных сил КЭ имеют более малые характерные размеры, чем вдали от нагружения. Однако в этом случае глобальная матрица жесткости может быть плохо обусловленной. Для исключения такой ситуации рекомендуется использовать регулярное разбиение, т. е. когда КЭ имеют одинаковую форму и почти равные характерные размеры во всей области. Нумерация узловых неизвестных дискретной модели выполняется так, чтобы ширина ленты глобальной матрицы жесткости была минимальной из всех возможных вариантов. Существуют программы автоматического разбиения областей на КЭ и оптимальной нумерации неизвестных МКЭ. Для прямоугольных пластин или тел формы прямоугольной призмы процедуры разбиения и нумерации неизвестных не вызывают трудностей.

2. Определение аппроксимирующих функций конечного элемента

Аппроксимирующие функции u_e, v_e, w_e соответственно перемещений u, v, w на элементе V_e , согласно МКЭ, имеют вид

$$u_e = [N_1 \dots N_n] \{\delta_u\}, \quad v_e = [N_1 \dots N_n] \{\delta_v\}, \quad w_e = [N_1 \dots N_n] \{\delta_w\} \quad (26.1)$$

где $\{\delta_u\}, \{\delta_v\}, \{\delta_w\}$ - векторы узловых перемещений u_e, v_e, w_e элемента V_e , N_i – функции формы элемента (базисные функции).

Для построения функций формы элемента используются следующие подходы. Первый – построение функций формы в глобальной системе координат, второй – построение функций формы в естественной системе координат, третий – построение функций формы в L – координатах. В данном случае используем лагранжевые элементы, функции формы которых определяем в глобальной системе координат. Кратко рассмотрим процедуру построения функций формы N_i для лагранжевого элемента в глобальной декартовой системе координат x, y, z . Пусть элемент $V_e \in R^3$ имеет n узлов: z_1, \dots, z_n . Пусть аппроксимирующая функция $u_e(x, y, z)$ элемента V_e имеет n

узловых параметров (узловых неизвестных МКЭ): $\delta_1^u, \dots, \delta_n^u$. Функцию u_e определим через полином $P_k(x, y, z, \{\alpha\})$ степени k в виде

$$u_e(x, y, z) = P_k(x, y, z, \{\alpha\}), \quad (26.2)$$

где α_i - коэффициенты полинома P_k , $\{\alpha\} = \{\alpha_1 \dots \alpha_n\}^T$. Полином P_k представим в форме

$$P_k(x, y, z, \{\alpha\}) = [F_1(x, y, z) \dots F_n(x, y, z)] \{\alpha\}, \quad (26.3)$$

здесь $[F_1(x, y, z) \dots F_n(x, y, z)]$ - вектор-строка.

Для конечного элемента V_e первого порядка формы прямоугольного параллелепипеда $n=8$ (слайд 3.23, узлы отмечены точками), полином $P_1(x, y, z, \{\alpha\})$ имеет следующую структуру

$$P_1 = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y + \alpha_4 z + \alpha_5 xy + \alpha_6 yz + \alpha_7 xz + \alpha_8 xyz. \quad (26.4)$$

Тогда $\{\alpha\} = \{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_8\}^T$, функции $F_i(x, y, z)$ имеют вид $F_1 = 1$, $F_2 = x$, $F_3 = y$, $F_4 = z$, $F_5 = xy$, $F_6 = yz$, $F_7 = xz$, $F_8 = xyz$. Для каждого узла z_i элемента V_e имеем

$$u_e(z_j) = \delta_j^u = P_k(z_j, \{\alpha\}), \quad j = 1, \dots, n, \quad (26.5)$$

здесь δ_j^u - значение искомой функции u в узле z_j .

Решая систему уравнений (26.5) относительно вектора $\{\alpha\}$, получаем

$$\{\alpha\} = [DH]^{-1} \{\delta_u\}, \quad (26.6)$$

$$\text{где } [DH] = \begin{bmatrix} F_1(z_1) & \dots & F_n(z_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_1(z_n) & \dots & F_n(z_n) \end{bmatrix}, \quad \{\delta_u\} = \begin{Bmatrix} \delta_1^u \\ \vdots \\ \delta_n^u \end{Bmatrix}.$$

Используя (26.3), (26.6) в (26.2), получим

$$u_e(x, y, z) = [F_1(x, y, z) \dots F_n(x, y, z)] [DH]^{-1} \{\delta_u\} = \sum_{j=1}^n N_j \delta_j^u, \quad (26.7)$$

где $N_j = \sum c_{ij}^* F_i$, c_{ij}^* - коэффициенты матрицы $[DH]^{-1}$. (26.8)

Функции перемещений v , w аппроксимируем аналогично в виде (26.2). Тогда вектор перемещений $\{U_e\}$ элемента V_e можно представить

$$\{U_e\} = [N_e] \{\delta_e\}, \quad (26.9)$$

$$\text{где } [N_e] = \begin{bmatrix} N_1 \dots N_n & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & N_1 \dots N_n & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & N_1 \dots N_n \end{bmatrix}, \quad (26.10)$$

$$\{\delta_e\} = \{\{\delta_u\}\{\delta_v\}\{\delta_w\}\}^T, \quad \{U_e\} = \{u_e v_e w_e\}^T.$$

Здесь $\{\delta_e\}$ - вектор узловых неизвестных элемента V_e ; u_e, v_e, w_e - функции перемещений V_e ; $\{\delta_u\}, \{\delta_v\}, \{\delta_w\}$ - векторы узловых значений соответственно перемещений u_e, v_e, w_e ; n - число функций формы V_e .

3. Составление выражения потенциальной энергии конечного элемента

Потенциальную энергию элемента V_e запишем в виде

$$W_e = \frac{1}{2} \int_{V_e} \{\varepsilon_e\}^T \{\sigma_e\} dV - \int_{V_e} \{U_e\}^T \{P_e\} dV - \int_{S_e} \{U_e\}^T \{q_e\} dS, \quad (26.11)$$

где $\{\varepsilon_e\}$, $\{\sigma_e\}$, $\{P_e\}$ - векторы деформаций, напряжений и объемных сил КЭ V_e ; $\{q_e\}$ - вектор сил, действующих по границе КЭ. Используя (26.9) в соотношениях Коши (1.2) с учетом (26.10), вектор деформаций $\{\varepsilon_e\}$ представим в виде

$$\{\varepsilon_e\} = [B_e] \{\delta_e\},$$

$$(26.12)$$

где $[B_e]$ - матрица деформаций, имеющая структуру

$$[B_e] = \begin{bmatrix} N_1^x \dots N_n^x & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & N_1^y \dots N_n^y & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & N_1^z \dots N_n^z \\ N_1^y \dots N_n^y & N_1^x \dots N_n^x & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & N_1^z \dots N_n^z & N_1^y \dots N_n^y \\ N_1^z \dots N_n^z & 0 \dots 0 & N_1^x \dots N_n^x \end{bmatrix}, \quad (26.13)$$

$$N_i^x = \partial N_i / \partial x, \quad N_i^y = \partial N_i / \partial y, \quad N_i^z = \partial N_i / \partial z.$$

Для изотропного однородного элемента V_e закон Гука имеет вид

$$\{\sigma_e\} = [D_e] \{\varepsilon_e\},$$

$$(26.14)$$

$$\text{где } [D_e] = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & A & A & 0 & 0 & 0 \\ A & 1 & A & 0 & 0 & 0 \\ A & A & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B \end{bmatrix}, \quad (26.15)$$

E - модуль упругости, ν - коэффициент Пуассона, $[D_e]$ - матрица модулей упругости элемента, $A = \nu/(1-\nu)$, $B = 0,5(1-2\nu)/(1-\nu)$.

Используя (26.14) с учетом (26.12) в (26.11), получим

$$\begin{aligned} W_e(\{\delta_e\}) = & \frac{1}{2} \int_{V_e} \{\delta_e\}^T [B_e]^T [D_e] [B_e] \{\delta_e\} dV - \\ & - \int_{V_e} \{\delta_e\}^T [N_e]^T \{P_e\} dV - \int_{S_e} \{\delta_e\}^T [N_e]^T \{q_e\} dS. \end{aligned} \quad (26.16)$$

4. Построение матрицы жесткости и вектора узловых сил элемента

Из условия минимизации выражения (26.16) по узловым перемещениям $\{\delta_e\}$ получаем следующую систему уравнений МКЭ для КЭ V_e

$$[K_e] \{\delta_e\} = \{F_e\},$$

(26.17)

где $[K_e]$, $\{F_e\}$ - матрица жесткости и вектор узловых сил КЭ, определяемые по формулам

$$\{F_e\} = \{F_p^e\} + \{F_q^e\}, \quad [K_e] = \int_{V_e} [B_e]^T [D_e] [B_e] dV,$$

(26.18)

$$\{F_p^e\} = \int_{V_e} [N_e]^T \{P_e\} dV, \quad \{F_q^e\} = \int_{S_e} [N_e]^T \{q_e\} dS.$$

(26.19)

После того, как определены узловые неизвестные, напряжения в любой точке элемента V_e в силу (26.12), (26.14) определяются по формуле

$$\{\sigma_e\} = [D_e] [B_e] \{\delta_e\}.$$

(26.20)

5. Сборка функционала потенциальной энергии дискретной модели

Используя (26.16), функционал потенциальной энергии $F(\vec{U})$ дискретной модели V^h представим в виде

$$F(\vec{U}) = \sum_{e=1}^{N_0} W_e(\{\delta_e\}),$$

где \vec{U} - вектор узловых неизвестных МКЭ разбиения V^h .

6. Получение основных уравнений МКЭ

Из условия минимизации функционала $F(\vec{U})$, т. е. из условия

$$\frac{\partial F(\vec{U})}{\partial \vec{U}} = 0, \quad (26.21)$$

получаем систему уравнений МКЭ для дискретной модели V^h .

7. Расчет изгибаемой балки сложной формы

В настоящий момент для анализа упругих балок используется теория Кирхгофа. В основе этой теории лежит гипотеза плоских сечений, предполагающая что, плоские до деформации поперечные сечения балки остаются после деформации плоскими и ортогональными к изогнутой оси балки. Гипотезы Кирхгофа в реальных балках не выполняются в окрестности их крепления (жесткого защемления) и в областях, имеющих сложную форму. В этом случае для расчета балок целесообразно использовать уравнения трехмерной задачи теории упругости. Рассмотрим в декартовой системе координат xuz изотропную однородную балку размерами $16h \times 24h \times 110h$ (слайд 3.24), которая работает на изгиб в плоскости yOz . На левом торце балка имеет сложную форму, т. е. имеет горизонтальный вырез размерами $16h \times 8h \times 6h$. Балка закреплена на левом торце, при $z=0$, имеем: $u=v=w=0$. На слайде 3.24 граница крепления балки отмечена мелкой штриховкой. Дискретная модель балки, состоящая из КЭ V_β^h первого порядка формы куба со стороной h , порождает узловую сетку V_h размерами $17 \times 25 \times 111$, $\beta=1, \dots, 46080$. Для узлов сетки V_h вводим целочисленную систему координат ijk (рис. 4). В узлах сетки V_h с целочисленными координатами $(i, 25, k)$, где $i=1, 9, 17$, $k=31, 51, \dots, 111$ приложены силы $q_y=1,28$. Эти силы показаны на рис. 4. Модуль Юнга балки равен 1, коэффициент Пуассона равен 0,3, $h=0,5$.

Анализы результатов расчетов представлены что в табл. 26.1 (перемещения v), табл. 26.2 (эквивалентные напряжения). Эквивалентные

напряжения σ_0 вычисляются в центре тяжести КЭ V_β^h по четвертой теории прочности. Дискретная модель балки содержит 137445 неизвестных, ширина ленты системы уравнений МКЭ равна 1356.

Таблица 26.1

Перемещения (i=9)

j\k	11	21	31	41	51	71	91	111	v
25	15,422	38,414	75,586	112,983	164,703	273,403	391,678	518,523	v _h

Таблица 26.2

Напряжения (x=-7.5h)

y\z	0,5h	2,5h	5,5h	6,5h	10,5h	20,5h	40,5h	σ_z
-11,5h	4,708	3,685	3,004	2,904	2,808	2,366	1,500	σ_h
-9,5h	2,520	2,671	2,322	2,249	2,193	1,774	1,137	σ_h
-7,5h	1,531	1,632	2,683	2,034	1,682	1,394	0,910	σ_h

Согласно теории сопротивления материалов максимальное напряжение σ_m^c возникает в сечении защемления балки и вычисляется по формуле

$$\sigma_m^c = \frac{M}{W}, \quad (26.22)$$

где M - максимальный изгибающий момент балки, W - момент сопротивления. В данном случае имеем

$$M = 3q_y h(30 + 50 + 70 + 90 + 110) = 672 \text{ кНм}, \quad W = \frac{16h(24^3 h^3 - 8^3 h^3)}{6 \cdot 24h} = 184,75$$

Подставляя данные значения в формулу (26.22), получаем $\sigma_m^c = 3,64$. Согласно табл. 2 максимальное напряжение σ_m в сечении защемления балки равно 4,708. Напряжение σ_m^c больше напряжения σ_m на 22,68%.

Лекция 27. Модели частиц в задачах взаимодействия N тел

Выделяется три основных типа вычислительной модели частиц: модель частица-частица (PP, Particle-Particle), модель частица-сетка (PM, Particle-Mesh) и модель частица-частица – частица-сетка (PPPM или P^3M). В модели PP используется формулировка закона силы дальнего действия; в модели PM сила рассматривается как полевая величина и аппроксимируется на сетке; модель P^3M является гибридом моделей PP и PM. Выбор модели диктуется частично физикой изучаемого явления и частично соображениями вычислительных затрат.

1. Метод частица-частица

Метод PP является простейшим с понятийной и вычислительной точки зрения. Мы рассмотрим реализацию этого метода в случае, когда каждая частица физической системы имеет шесть степеней свободы, то есть состояние системы описывается набором положений и скоростей частиц: $\mathbf{r}_n(t) = \{x_n(t), y_n(t), z_n(t)\}$, $\mathbf{s}_n(t) = \{u_n(t), v_n(t), w_n(t)\}$, $n = 1, \dots, N$. Сила $\mathbf{F}_n(t)$, действующая на частицу n , равна сумме сил, обусловленной остальными $N-1$ частицами и внешними силами. Выражение для силы мы запишем в следующем, довольно общем виде:

$$\mathbf{F}_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{s}_n, t) = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \mathbf{f}_{nm}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) + \mathbf{g}(\mathbf{s}_n) + \mathbf{f}_{ext}(\mathbf{r}_n, t), \quad (27.1)$$

$$\mathbf{F}_n = \begin{pmatrix} F_n^{(x)} \\ F_n^{(y)} \\ F_n^{(z)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_{nm} = \begin{pmatrix} f_{nm}^{(x)} \\ f_{nm}^{(y)} \\ f_{nm}^{(z)} \end{pmatrix} = \frac{f(r_{nm})}{r_{nm}} \begin{pmatrix} x_n - x_m \\ y_n - y_m \\ z_n - z_m \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_{ext} = \begin{pmatrix} f_{ext}^{(x)} \\ f_{ext}^{(y)} \\ f_{ext}^{(z)} \end{pmatrix},$$

$$r_{nm} = \sqrt{(x_n - x_m)^2 + (y_n - y_m)^2 + (z_n - z_m)^2},$$

где \mathbf{f}_{nm} – сила, с которой частица m действует на частицу n , а r_{nm} – расстояние между этими частицами. Хорошо знакомым примером служит закон Кулона, описывающий силу взаимодействия двух заряженных частиц в виде

$$f(r_{nm}) = \frac{q_n q_m}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r_{nm}^2}.$$

Примером силы $\mathbf{g}(\mathbf{s})$ может служить сила Лоренца, действующая на частицу с зарядом q_n , которая движется со скоростью \mathbf{s}_n , при наличии магнитного поля \mathbf{B} :

$$\mathbf{g}(\mathbf{s}_n) = q_n \cdot \mathbf{s}_n \times \mathbf{B}.$$

Динамика частиц описывается уравнением движения Ньютона

$$m_n \frac{d\mathbf{s}_n}{dt} = \mathbf{F}_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{s}_n, t), \quad (27.2)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_n}{dt} = \mathbf{s}_n, \quad (27.3)$$

$$\mathbf{r}_n(0), \mathbf{s}_n(0) - \text{заданы, } n = 1, \dots, N,$$

или в развёрнутом виде

$$m_n \frac{du_n}{dt} = F_n^{(x)}(x_n, y_n, z_n, u_n, v_n, w_n, t),$$

$$m_n \frac{dv_n}{dt} = F_n^{(y)}(x_n, y_n, z_n, u_n, v_n, w_n, t),$$

$$m_n \frac{dw_n}{dt} = F_n^{(z)}(x_n, y_n, z_n, u_n, v_n, w_n, t),$$

$$\frac{dx_n}{dt} = u_n, \quad \frac{dy_n}{dt} = v_n, \quad \frac{dz_n}{dt} = w_n,$$

где m_n – масса частицы. Описание физических систем завершается заданием начальных и граничных условий. Граничные условия определяют внешние силы и объём пространства (расчётную область), в котором движутся частицы.

С математической точки зрения уравнения движения (27.2) и (27.3) представляют собой задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Так как функция $\mathbf{F}_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{s}_n, t)$, как правило, нелинейна и система может состоять из большого числа уравнений, то аналитическое решение этой системы невозможно. Существует множество методов численного решения систем дифференциальных уравнений (см., например, ОНВ, параграф 6.3). В нашем случае выбор подходящей схемы обуславливается не только её точностью, но и эффективностью вследствие

большого числа используемых частиц. Два фактора, которые необходимо принимать во внимание при оценке эффективности той или иной схемы, – требование к памяти и время расчёта. Ограничение по памяти заставляет отдавать предпочтение схемам, которые требуют хранения как можно меньшего количества информации. Ограничение по времени требует схем с небольшим числом операций, приходящихся на частицу за шаг по времени. Чтобы достигнуть компромисса между точностью и эффективностью, можно действовать двумя способами – либо использовать схему высокого порядка точности с крупным шагом по времени, либо использовать схему низкого порядка точности с мелким шагом по времени. Первый подход вряд ли оправдан, так как

- 1) шаг по времени всё равно не может быть выбран произвольно, поскольку он ограничивается собственными частотами физической системы,
- 2) схемы высших порядков требуют либо хранения решения на нескольких временных слоях (схемы Адамса), либо многократного вычисления силы на один шаг по времени (схемы Рунге – Кутты).

Как правило, в расчётах систем многих тел наилучший компромисс между точностью и эффективностью достигается при использовании простых схем второго порядка точности. Наиболее популярной схемой этого класса является схема с перешагиванием, которая в случае линейной функции $\mathbf{g}(\mathbf{s})$ имеет следующий вид:

$$m_n \frac{\mathbf{s}_n^{k+1/2} - \mathbf{s}_n^{k-1/2}}{\tau_k} = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \mathbf{f}_{nm}(\mathbf{r}_n^k - \mathbf{r}_m^k) + \frac{1}{2} \mathbf{A}(\mathbf{s}_n^{k+1/2} + \mathbf{s}_n^{k-1/2}) + \mathbf{f}_{ext}(\mathbf{r}_n^k, t), \quad (27.4)$$

$$\frac{\mathbf{r}_n^{k+1} - \mathbf{r}_n^k}{\tau_k} = \mathbf{s}_n^{k+1/2},$$

$$n = 1, \dots, N; \quad k = 0, 1, \dots,$$

здесь индекс k соответствует моменту времени t_k , а индекс $k+1/2$ – моменту времени $t_{k+1/2} = t_k + 0.5 \tau_k$, и \mathbf{A} – некоторая матрица размером 3×3 . В этой схеме скорость частиц определяется в момент времени $t_{k+1/2}$, а координаты частиц – в момент времени t_k , откуда и следует её название. Для начала расчёта необходимо ещё задать начальное состояние системы:

$$\mathbf{r}_n^0 = \mathbf{r}_n(t=0), \quad \mathbf{s}_n^0 = \mathbf{s}_n(t=0).$$

Структура разностной схемы (27.4) требует отдельного вычисления скорости в момент времени $t = 0.5\tau_0$. Если записать схему (27.4) при $k = 0$ и положить

$$\mathbf{s}_n^0 = \frac{1}{2}(\mathbf{s}_n^{1/2} + \mathbf{s}_n^{-1/2}),$$

то можно исключить фиктивное значение с индексом $-1/2$. Окончательно приходим к следующему выражению:

$$m_n \frac{\mathbf{s}_n^{1/2} - \mathbf{s}_n^0}{\tau_0} = \mathbf{f}_{pp}(\mathbf{r}_n^0) + \frac{1}{2} \mathbf{A} \mathbf{s}_n^0 + \mathbf{f}_{ext}(\mathbf{r}_n^0, 0),$$

$$n = 1, \dots, N.$$

Схема с перешагиванием (27.4) аппроксимирует уравнения движения (27.2) и (27.3) со вторым порядком точности по τ .

Схема (27.4) является явной схемой и, следовательно, она условно устойчивая. Это значит, что шаг по времени не может быть выбран произвольным образом: он определяется характерными частотами физической системы. Стандартное исследование устойчивости схемы (27.4) основывается на анализе собственных значений матрицы Якоби для функции $\mathbf{F}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N) = \{F_1, \dots, F_N\}$ (смотри лекцию 10). В данном случае такой подход неприемлем, так как определение этой матрицы Якоби требует объёма вычислений, сравнимого с объёмом вычислений, необходимым для проведения всего вычислительного эксперимента. Поэтому мы прибегнем к более простым оценкам.

Сначала мы рассмотрим устойчивость схемы с перешагиванием для модельного уравнения гармонического осциллятора:

$$\frac{du}{dt} = -\omega^2 x, \quad t \geq 0, \quad (27.5)$$

$$\frac{dx}{dt} = u,$$

$$x(0) = x_0, \quad u(0) = u_0,$$

где $\omega = (k/m)^{1/2}$ – круговая частота колебаний, k – жёсткость пружины. Схема (27.4) для этого уравнения имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{u^{k+1/2} - u^{k-1/2}}{\tau} &= -\omega^2 x^k, \\ \frac{x^{k+1} - x^k}{\tau} &= u^{k+1/2}.\end{aligned}\tag{27.6}$$

Канонический вид схемы этой схемы:

$$\begin{pmatrix} u^{k+1/2} \\ x^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\tau\omega^2 \\ \tau & 1 - \tau^2\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^{k-1/2} \\ x^k \end{pmatrix} = \mathbf{R} \begin{pmatrix} u^{k-1/2} \\ x^k \end{pmatrix},$$

где \mathbf{R} – оператор перехода на один шаг по времени. По спектральному критерию (см. лекцию 10), разностная схема будет устойчива, если все собственные значения оператора перехода будут лежать внутри единичного круга на комплексной плоскости. В нашем случае

$$\lambda_{1,2}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \left[(2 - a^2) \pm \sqrt{(2 - a^2)^2 - 4} \right],$$

$$a = \tau\omega$$

и $|\lambda_{1,2}(\mathbf{R})| \leq 1$ при $a^2 \leq 4$, то есть, разностная схема (27.6) будет устойчива, когда

$$\tau \leq 2/\omega.$$

Выбор шага по времени диктуется не только условием устойчивости, но и точностью вычисления колебательного движения. Для оценки точности приближённого решения необходимо провести анализ аппроксимации. В результате получим

$$\frac{d^2x}{dt^2}(t_k) = -\omega^2 x(t_k) - \frac{1}{12} \tau^2 \omega^4 x(t_k) + O(\tau^3).$$

Отсюда относительная погрешность определения силы равна

$$\frac{\tau^2 \omega^4 x(t_k)}{12 \omega^2 x(t_k)} = \frac{\tau^2 \omega^2}{12}.$$

Если мы хотим сделать погрешность вычисления силы меньше некоторой заданной величины δ , то шаг по времени следует выбирать из условия

$$\tau \leq \left(\frac{12\delta}{\omega^2} \right)^{1/2}. \quad (27.7)$$

Например, при $\delta = 0.01$, $\tau\omega \leq 0.346$, что соответствует приблизительно 18 шагам по времени на один период колебаний.

Полученные выше результаты для модельного уравнения гармонического осциллятора можно применить для выбора шага по времени в случае нелинейной вычислительной модели (27.4). Для этого нам необходимо выделить в физической системе самую высокую частоту колебаний ω_{\max} и удовлетворить условию устойчивости $\tau\omega_{\max} \leq 2$.

Схема расчёта одного временного шага в методе РР представляется следующим образом:

- 1) оценить шаг по времени τ_k ,
- 2) по известному состоянию системы в момент времени t_k вычислить силу \mathbf{F}_n , действующую на каждую частицу ($n = 1, \dots, N$),
- 3) интегрируя уравнения движения (27.2) и (27.3), вычислить состояние системы в момент времени $t_k + \tau_k$.

Для слежения за развитием системы во времени используется многократное повторение пунктов 1) – 3).

Расчёт одного временного шага в методе РР выглядит довольно просто. Если же рассмотреть вычислительные затраты, то становится понятным, что такая простая схема может использоваться далеко не всегда. Так, для системы из N частиц необходимо вычислить $\sim 0.5N^2$ парных взаимодействий. Положим, что для расчёта силы взаимодействия между двумя частицами требуется 20 операций с плавающей точкой. Тогда для расчёта системы 10^6 частиц потребуется $\sim 10^{13}$ операций на один шаг по времени. Например, суперкомпьютер средней мощности с быстродействием 10^9 операций с плавающей точкой в секунду выполнит такой объём вычислений приблизительно за 3 часа. Как правило, для получения полезных результатов необходимо несколько тысяч шагов по времени. Поэтому метод РР целесообразен только для систем, содержащих относительно небольшое количество частиц, если силы дальнего действия, как, например, при изучении звёздных скоплений. Однако, если силы взаимодействия короткодействующие, то количество операций на один шаг по времени

пропорционально pN , где p – число соседних частиц, достаточно близких к выделенной частице, чтобы значительно повлиять на действующую на неё силу. Модели жидкости и кристаллического тела служат примерами систем с короткодействующими силами, для которых широко применяется метод РР.

2. Метод частица-сетка.

Силы и потенциалы можно также рассматривать как поля, то есть как величины, которые хотя и определяются характеристиками частиц, но сами частицами не являются. Поля силы потенциальной энергии заполняют всё пространство, и силовое поле равно взятому с обратным знаком градиенту поля потенциальной энергии:

$$\mathbf{F} = -\nabla\Phi.$$

Сила, действующая на частицу, и её потенциальная энергия вычисляются как

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{F}(\mathbf{r}_n), \quad \Phi_n = \Phi(\mathbf{r}_n).$$

Потенциальное поле определяется распределением частиц и может быть описано с помощью уравнения поля. Например, для системы заряженных частиц уравнением поля служит уравнение Пуассона

$$\Delta\varphi = -\rho/\varepsilon_0.$$

Здесь $\varphi(\mathbf{r})$ – электростатический потенциал, $\rho(\mathbf{r})$ – плотность заряда, определяемая распределением зарядов частиц q_n . Тогда

$$\Phi_n = q_n\varphi(\mathbf{r}_n) \quad \text{и} \quad \mathbf{F}_n = -q_n \nabla\varphi|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_n} = q_n\mathbf{E}(\mathbf{r}_n),$$

где \mathbf{E} – электрическое поле. При заданном распределении частиц рассмотренная нами формулировка (близодействие) даёт те же силы, что и формулировка дальногодействия, основанная на попарном взаимодействии частиц. Однако формализм близодействия даёт возможность вычислить силу гораздо быстрее, но обычно менее точно, чем при использовании метода РР.

Приближённое решение уравнения поля находится с помощью численных процедур. Для этого вначале вводится разностная сетка с шагами h_x , h_y и h_z . Затем уравнение поля аппроксимируется на этой сетке, что

приводит к некоторой системе сеточных уравнений (см. лекцию 9). Решение этой системы даёт нам значения потенциала в узлах разностной сетки. Расчёт движения системы частиц по методу РМ отличается от метода РР только расчётом силы. Так, схему расчёта одного временного шага в методе РМ можно представить в следующем виде:

- 1) оценить шаг по времени τ_k ;
- 2) по известному состоянию системы в момент времени t_k вычислить плотность источников поля (например зарядов) в узлах разностной сетки (слайд 3.25);
- 3) решить сеточное уравнение поля, где правая часть этого уравнения представляет собой сеточные значения плотности источника поля. Часто для этой цели используется FFT;
- 4) полученные значения потенциала используются для вычисления силы в узлах разностной сетки;
- 5) сила, действующая на каждую частицу, вычисляется с помощью интерполяции по её сеточным значениям;
- 6) интегрирование уравнений движения (27.1) и (27.2) даёт формулу для вычисления состояния системы в момент времени $t_k + \tau_k$.

Слайд 3.25. Расчёт силы в методе РМ; «●» – частицы; «x» – узлы сетки для расчёта потенциала

Количество операций на один шаг по времени в методе РМ определяется выражением

$$\text{число операций } N_{\text{ops}} = aN + b(N_s),$$

где постоянная a и функция b зависят от конкретного вида используемой схемы РМ, и N_s есть число сеточных узлов. Значительный выигрыш в скорости метода РМ по сравнению с методом РР (для которого $N_{\text{ops}} \sim O(N^2)$) достигается ценой потери разрешения в поле потенциала и силы. Только те поля, пространственные изменения которых имеют длину волны большую, чем шаг пространственной сетки, можно с хорошей точностью представить с помощью сеточных значений. Поля потенциала и силы одиночного точечного заряда (или массы) на расстояниях, меньших шага сетки $\min(h_x, h_y, h_z)$, представляются неточно. Поэтому, если сеточный шаг будет меньше, чем характерная длина волны физической системы (например дебаевская длина в плазме), и число частиц в каждой ячейке сетки будет

достаточно велико (скажем, ~ 10), то модель РМ будет достаточно точно передавать поведение этой системы.

3. Метод частица-частица - частица-сетка

Как мы уже обсудили, метод РР может быть использован для небольших систем с дальнедействующими силами или для больших систем, в которых силы взаимодействия отличны от нуля только на малых расстояниях между частицами. Метод РМ является быстрым в вычислительном отношении, но он пригоден только для гладко меняющихся сил. Метод Р³М сочетает достоинства методов РР и РМ и позволяет моделировать большие системы, в которых присутствуют дальнедействующие силы.

Основная идея метода Р³М состоит в расщеплении действующих между частицами сил на две части,

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{f}^{(s)}(\mathbf{r}_n) + \mathbf{f}^{(m)}(\mathbf{r}_n),$$

где быстроменяющаяся короткодействующая часть $\mathbf{f}^{(s)}(\mathbf{r}_n)$ отлична от нуля только на нескольких межчастичных расстояниях, а медленно меняющаяся часть $\mathbf{f}^{(m)}(\mathbf{r}_n)$ достаточно гладкая для точного представления на сетке. Такой подход позволяет более точно моделировать системы с дальнедействующими силами (например кулоновскими). Для таких систем существуют специальные процедуры для определения $\mathbf{f}^{(s)}(\mathbf{r}_n)$. В системах, где присутствуют как короткодействующие, так и дальнедействующие силы (например ионные кристаллы), расщепление результирующей силы на $\mathbf{f}^{(s)}(\mathbf{r}_n)$ и $\mathbf{f}^{(m)}(\mathbf{r}_n)$ осуществляется естественным образом.

Кратко схему метода Р³М можно представить следующим образом:

- 1) для нахождения суммарной короткодействующей силы, действующей на каждую частицу, используется метод РР;
- 2) для нахождения сеточной силы используется метод РМ;
- 3) сложение этих сил даёт результирующую силу, действующую на каждую частицу;
- 4) эта результирующая сила используется для пересчёта скоростей.

Таким образом, схема Р³М позволяет представить близкие взаимодействия с той же точностью, как в методе РР, и вычислять дальнедействующие силы с тем же быстродействием, как в методе РМ.

Лекция 28. Движение гранулированной среды

Гранулированные среды можно встретить в самых различных технологических и природных процессах. Например, многие процессы в химической промышленности и сельском хозяйстве включают в себя течение гранулированных сред. При движении гранулированных сред могут возникать различные интересные явления. Эти явления возникают из-за того, что гранулированные материалы образуют некоторую гибридную среду, которая проявляет свойства как твёрдого тела, так и жидкости. Когда плотность гранулированной среды достигает некоторого значения, она начинает сопротивляться сдвигу как твёрдое тело, а когда плотность уменьшается, её течение напоминает течение жидкости.

Гранулированную среду можно представить в виде системы твёрдых частиц, взаимодействующих посредством контакта. Такое представление даёт возможность применить метод РР для моделирования движения таких сред. С вычислительной точки зрения, моделирование динамического поведения реальных гранулированных сред представляет довольно серьёзную задачу. Это обусловливается как сложностью механизмов взаимодействия, так и разнообразием форм частиц-гранул.

1. Уравнения движения

Для простоты, мы будем рассматривать гранулированную среду, состоящую из сферических гранул. Пусть моделируемая система состоит из N частиц-гранул, которые имеют следующие физические параметры:

d_n – диаметр,

ρ_n – плотность (тогда масса частицы $m_n = (1/6)\pi(d_n)^3 \rho_n$),

E_n – модуль Юнга,

ν_n – коэффициент Пуассона,

μ_{nm} – коэффициент трения (зависит от сорта взаимодействующих частиц), $n = 1, \dots, N$.

Состояние системы описывается набором положений центров масс и скоростей частиц: $\mathbf{r}_n(t) = \{x_n(t), y_n(t), z_n(t)\}$, $\mathbf{s}_n(t) = \{u_n(t), v_n(t), w_n(t)\}$, $n = 1, \dots, N$. Мы будем учитывать следующие силы, действующие на частицы:

- 1) сила, возникающая при упругом соударении,
- 2) сила трения и
- 3) сила тяжести.

Первые две силы возникают, когда две частицы n и m перекрываются, то есть, расстояние между их центрами становится меньше суммы их радиусов. Рассмотрим теперь эти силы более подробно.

Сила упругого соударения обычно определяется из модели Герца. Согласно этой модели, сила отталкивания двух частиц с координатами \mathbf{r}_n и \mathbf{r}_m имеет вид

$$\mathbf{f}_{nm}^{(e)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_m) = \begin{cases} c_{nm}^{(e)} (\Delta r_{nm})^{3/2} \frac{\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m}{r_{nm}}, & \Delta r_{nm} > 0, \\ 0, & \Delta r_{nm} \leq 0, \end{cases} = \begin{cases} f^{(n)}(\Delta r_{nm}) \mathbf{n}, & \Delta r_{nm} > 0, \\ 0, & \Delta r_{nm} \leq 0, \end{cases} \quad (28.1)$$

$$r_{nm} = \left((x_n - x_m)^2 + (y_n - y_m)^2 + (z_n - z_m)^2 \right)^{1/2},$$

$$\Delta r_{nm} = \frac{1}{2}(d_n + d_m) - r_{nm}.$$

Константа упругости определяется как

$$c_{nm}^{(e)} = \frac{4}{3} \frac{E_n E_m}{E_n (1 - \nu_m^2) + E_m (1 - \nu_n^2)} \sqrt{\frac{d_n d_m}{2(d_n + d_m)}}.$$

Сила $f^{(n)}(\Delta r_{nm})$ действует в направлении вектора $\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m$, то есть, в направлении вектора нормали к контактной поверхности (слайд 3.26). При определённой относительной скорости соударения могут проявляться неупругие эффекты (пластическая деформация, внутреннее трение), которые приводят к диссипации энергии. В нашей модели влияние этих эффектов мы учитывать не будем.

Слайд 3.26. Соударение двух сферических частиц.

Поверхность гранул не является идеально гладкой, поэтому, когда частицы приходят в контакт, между ними возникает сила трения. Одна из моделей статического трения может быть сформулирована следующим образом. В момент контакта частицы слипаются. Тогда при их относительном движении возникает сдвиговая деформация в области контакта и появляется сила, которая противодействует движению этих частиц. Максимальное значение этой силы равно произведению силы, действующей по нормали, на коэффициент трения (закон Кулона). Сила трения действует вдоль плоскости контакта, то есть в направлении вектора $-\mathbf{k}$. Тогда выражение для силы трения можно записать в следующем виде (линейное приближение):

$$\mathbf{f}_{nm}^{(t)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_m, \mathbf{s}_n, \mathbf{s}_m) = \begin{cases} -\min(c_{nm}^{(t)} q_{nm}, \mu_{nm} f^{(n)}(\Delta r_{nm})) \mathbf{k}, & \Delta r_{nm} > 0, \\ 0, & \Delta r_{nm} \leq 0, \end{cases}$$

где q_{nm} – величина относительного смещения в направлении вектора \mathbf{k} , μ_{nm} – коэффициент трения между частицами n и m , и константа упругости определяется как

$$c_{nm}^{(t)} = \frac{8}{3} \frac{E_n E_m}{E_n (1 + \nu_m)(2 - \nu_n) + E_m (1 + \nu_n)(2 - \nu_m)} \sqrt{\frac{d_n d_m \Delta r_{nm}}{2(d_n + d_m)}}.$$

Введём вектор относительной скорости двух частиц

$$\mathbf{s}_{nm} = \mathbf{s}_n - \mathbf{s}_m.$$

Разложим этот вектор по векторам \mathbf{n} и \mathbf{k} :

$$\mathbf{s}_{nm} = \mathbf{s}_{nm}^{(n)} + \mathbf{s}_{nm}^{(t)} = (\mathbf{s}_{nm}, \mathbf{n}) \mathbf{n} + (\mathbf{s}_{nm}, \mathbf{k}) \mathbf{k} = a_{nm} \mathbf{n} + b_{nm} \mathbf{k},$$

где a_{nm} и b_{nm} – проекции относительной скорости \mathbf{s}_{nm} на векторы \mathbf{n} и \mathbf{k} . Для вычисления q_{nm} нам необходимо определить значение b_{nm} . Так как векторы \mathbf{s}_{nm} и \mathbf{n} нам известны, то

$$\mathbf{s}_{nm}^{(t)} = \mathbf{s}_{nm} - \mathbf{s}_{nm}^{(n)} = \begin{pmatrix} u_{nm}^{(t)} \\ v_{nm}^{(t)} \\ w_{nm}^{(t)} \end{pmatrix}$$

и

$$b_{nm} = \sqrt{\left(u_{nm}^{(t)}\right)^2 + \left(v_{nm}^{(t)}\right)^2 + \left(w_{nm}^{(t)}\right)^2}.$$

Тогда вектор \mathbf{k} определяется как

$$\mathbf{k} = \frac{1}{b_{nm}} (\mathbf{s}_{nm} - \mathbf{s}_{nm}^{(n)}) = \frac{1}{b_{nm}} \mathbf{s}_{nm}^{(t)}. \quad (28.2)$$

Окончательно, величину смещения q_{nm} можно вычислить как

$$q_{nm} = \int_{t_1 \geq t_0}^{t_2 \leq t_0 + t_c} b_{nm} dt, \quad (28.3)$$

где t_0 – момент времени начала контакта и t_c – длительность контакта между двумя частицами. Учитывая (28.2), силу трения запишем в виде

$$\mathbf{f}_{nm}^{(t)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_m, \mathbf{s}_n, \mathbf{s}_m) = \begin{cases} -\min \left(c_{nm}^{(t)} q_{nm}, \mu_{nm} f^{(n)}(\Delta r_{nm}) \right) \frac{\mathbf{s}_{nm}^{(t)}}{b_{nm}}, & \Delta r_{nm} > 0, \\ 0, & \Delta r_{nm} \leq 0. \end{cases} \quad (28.4)$$

Внешней силой, действующей на все частицы, является сила тяжести, которую мы запишем в виде

$$\mathbf{g}_n = -m_n \mathbf{g} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Динамика частиц описывается классическими уравнениями движения Ньютона, которые в данном случае имеют вид

$$m_n \frac{d\mathbf{s}_n}{dt} = \sum_{m \in C_n(t)} \left(\mathbf{f}_{nm}^{(e)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_m) + \mathbf{f}_{nm}^{(t)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_m, \mathbf{s}_n, \mathbf{s}_m) \right) + \mathbf{g}_n, \quad (28.5)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_n}{dt} = \mathbf{s}_n, \quad n = 1, \dots, N,$$

$$\mathbf{r}_n(0), \mathbf{s}_n(0) - \text{заданы},$$

где $C_n(t)$ представляет собой множество номеров частиц системы, которые в момент времени t находятся в контакте с частицей n .

При столкновении сферических частиц, наряду с рассмотренными нами силами, возникают также и моменты, что приводит к вращению и перекачиванию частиц. Реальные гранулы, как правило, не обладают сферической симметрией, поэтому в реальных системах эти эффекты проявляются в меньшей степени. Следовательно, в первом приближении можно ограничиться уравнениями (28.5) для описания движения частиц.

Течение гранулированных сред определяется не только межчастичным взаимодействием, но и взаимодействием с границами области, где происходит движение. Пусть граничная поверхность (стенка) имеет следующие характеристики:

E_w – модуль Юнга,

ν_w – коэффициент Пуассона,
 μ_{nw} – коэффициент трения частицы n о стенку,
 $\mathbf{s}_w(x, y, z, t)$ – скорость движения стенки.

Процесс взаимодействия частицы со стенкой можно рассматривать как процесс соударения этой частицы с некоторой фиктивной частицей. Размер области контакта много меньше характерных размеров стенки, поэтому можно не учитывать кривизну стенки и считать область контакта плоскостью. Тогда можно положить, что диаметр фиктивной частицы $d_w \rightarrow \infty$, а остальные её параметры равны параметрам стенки. При таком подходе для расчёта сил взаимодействия частицы со стенкой можно воспользоваться соотношениями (28.1) и (28.4). Сила упругого соударения примет вид

$$\mathbf{f}_{nw}^{(e)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_c) = \begin{cases} c_{nw}^{(e)} (\Delta r_{nw})^{3/2} \frac{\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_c}{r_{nw}}, & \Delta r_{nw} > 0, \\ 0, & \Delta r_{nw} \leq 0, \end{cases}$$

$$\Delta r_{nw} = \frac{1}{2} d_n - r_{nw},$$

где \mathbf{r}_c – координаты точки контакта частицы со стенкой, r_{nw} – расстояние от центра частицы до точки контакта. Учитывая, что $d_w \rightarrow \infty$, константа упругости определяется как

$$c_{nw}^{(e)} = \frac{4}{3} \frac{E_n E_w \sqrt{0.5 d_n}}{E_n (1 - \nu_w^2) + E_w (1 - \nu_n^2)}.$$

Сила трения частицы о стенку примет вид

$$\mathbf{f}_{nw}^{(t)}(\mathbf{r}_n, \mathbf{s}_n) = \begin{cases} -\min(c_{nw}^{(t)} q_{nw}, \mu_{nw} f^{(n)}(\Delta r_{nw})) \frac{\mathbf{s}_{nw}^{(t)}}{b_{nw}}, & \Delta r_{nw} > 0, \\ 0, & \Delta r_{nw} \leq 0, \end{cases}$$

$$\mathbf{s}_{nw} = \mathbf{s}_n - \mathbf{s}_w,$$

$$\mathbf{s}_{nw} = \mathbf{s}_{nw}^{(n)} + \mathbf{s}_{nw}^{(t)} = a_{nw} \mathbf{n}_w + b_{nw} \mathbf{k}_w,$$

где \mathbf{n}_w и \mathbf{k}_w – векторы нормали и касательной к поверхности стенки в точке контакта. Константа упругости определяется как

$$c_{nw}^{(t)} = \frac{8}{3} \frac{E_n E_w \sqrt{0.5 d_n \Delta r_{nw}}}{E_n (1 + \nu_w) (2 - \nu_n) + E_w (1 + \nu_n) (2 - \nu_w)}.$$

2. Интегрирование по времени.

Для численного решения уравнений (28.5) можно использовать различные схемы. В случае простейшей схемы с перешагиванием, которую мы постоянно используем, расчётная схема выглядит следующим образом:

$$m_n \frac{\mathbf{s}_n^{k+1/2} - \mathbf{s}_n^{k-1/2}}{\tau_k} = \sum_{m \in C_n(t_k)} \left(\mathbf{f}_{nm}^{(e)}(\mathbf{r}_n^k, \mathbf{r}_m^k) + \mathbf{f}_{nm}^{(t)}(\mathbf{r}_n^k, \mathbf{r}_m^k, \mathbf{s}_n^{k-1/2}, \mathbf{s}_m^{k-1/2}) \right) + \mathbf{g}_n, \\ \frac{\mathbf{r}_n^{k+1} - \mathbf{r}_n^k}{\tau_k} = \mathbf{s}_n^{k+1/2}, \quad (28.6) \\ n = 1, \dots, N; \quad k = 0, 1, \dots$$

Расчёт силы упругого соударения производится по положениям частиц в момент времени t_k из соотношений (28.1). Для расчёта силы трения нам необходима величина относительного смещения (28.3). В простейшем случае можно положить

$$q_{nm}^{k-1/2} = b_{nm}^{k-1/2} \tau_k. \quad (28.7)$$

Такое приближение имеет смысл, когда шаг по времени τ_k меньше, чем длительность контакта между частицами (более подробно этот вопрос мы обсудим ниже).

Как и прежде, сложность вычислительной модели не позволяет нам непосредственно исследовать схему (28.6) на устойчивость и получить условие для выбора шага по времени. Поэтому мы рассмотрим этот вопрос на основе анализа задач о взаимодействии двух частиц и простых геометрических соображений.

Пусть в момент времени t_k частицы имеют скорости \mathbf{s}_n^k , $n = 1, \dots, N$. Тогда относительное смещение двух частиц за время τ_k будет равно

$$|\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_m| \tau_k.$$

Понятно, что это смещение должно быть много меньше размеров частиц, иначе может возникнуть ситуация, когда они будут проходить сквозь друг друга. Учитывая, что

$$\max_{n,m} |\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_m| \leq 2 \max_n |\mathbf{s}_n|,$$

получим первое ограничение

$$\tau_k^{(1)} \leq \alpha \frac{\min_n d_n}{2 \max_n |\mathbf{s}_n^{k-1/2}|}, \quad (28.8)$$

где α – заданная максимальная величина относительного перекрытия двух частиц (скажем, $\alpha \leq 0.01$).

Шаг по времени также должен быть меньше, чем минимальная длительность контакта среди всех частиц системы. Это значит, что $C_n(t_k)$ должно оставаться постоянным в течение одного шага по времени. Если выбрать шаг по времени недостаточно малым, то некоторые соударения останутся неучтёнными, что приведёт к неверным результатам. Для определения длительности контакта рассмотрим задачу об упругом соударении двух частиц (слайд 3.27). Уравнения движения такой пары частиц имеют вид ($x_2 > x_1$):

$$m_1 \frac{du_1}{dt} = -f_{12}^{(e)} \left(\frac{1}{2}(d_1 + d_2) - x_2 + x_1 \right),$$

$$\frac{dx_1}{dt} = u_1,$$

$$m_2 \frac{du_2}{dt} = f_{12}^{(e)} \left(\frac{1}{2}(d_1 + d_2) - x_2 + x_1 \right),$$

$$\frac{dx_2}{dt} = u_2.$$

Слайд 3.27. Соударение двух частиц в одномерном случае

Умножая первое уравнение на m_2 , третье на m_1 и вычитая первое уравнение из третьего и второе из четвёртого, получаем уравнения относительного движения

$$\begin{aligned} m_p \frac{du}{dt} &= f_{12}^{(e)} \left(\frac{1}{2}(d_1 + d_2) - r \right) = f_{12}^{(e)} (\Delta r), \\ \frac{d(\Delta r)}{dt} &= u \end{aligned} \quad (28.9)$$

с начальными условиями

$$\Delta r(0) = 0, \quad u(0) = -u_0,$$

где $r = x_2 - x_1$ - расстояние между частицами, $u = u_2 - u_1$ - скорость относительного движения, а $m_p = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ - приведённая масса. При этом длительность контакта $t_c > 0$ есть время, при котором Δr становится равным нулю, и, естественно, оно зависит от величины относительной скорости соударения u_0 . Так как мы считаем соударение упругим, то зависимость $t_c(u_0)$ можно получить из условия сохранения энергии

$$t_c \approx 3.21 \left(\frac{m_p^2}{\left(c_{12}^{(e)} \right)^2 u_0} \right)^{1/5}.$$

В системе многих частиц мы должны ориентироваться на минимальную длительность контакта среди всех частиц. Также мы должны учитывать, что точность вычисления процесса соударения зависит от отношения шага по времени к длительности контакта. Учитывая эти замечания, получим следующее ограничение

$$\tau_k^{(2)} \leq 3.21 \cdot \beta \left(\frac{\left(\min_n m_n \right)^2}{2 \left(\max_{n,m} c_{nm}^{(e)} \right)^2 \max_n |s_n^{k-1/2}|} \right)^{1/5}, \quad (28.10)$$

где $1/\beta$ показывает во сколько раз шаг по времени меньше, чем длительность контакта.

Рассмотрим теперь движение двух частиц под действием силы трения (слайд 3.28). Уравнения относительного движения в этом случае имеют вид

$$m_p \frac{du}{dt} = -c_{12}^{(t)} q_{12},$$

$$\frac{dr}{dt} = u,$$

где, как и прежде, $r = x_2 - x_1$ – расстояние между частицами, $u = u_2 - u_1$ – скорость относительного движения и $m_p = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ – приведённая масса. Относительное смещение q_{12} определяется соотношением (28.3) и $b_{12} = u$.

Слайд 3.28. Движение двух частиц под действием силы трения в одномерном случае

Разностная схема для этих уравнений принимает вид

$$m_p \frac{u^{k+1/2} - u^{k-1/2}}{\tau_k} = -c_{12}^{(t)} u^{k-1/2} \tau_k,$$

$$\frac{r^{k+1} - r^k}{\tau_k} = u^{k+1/2}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Анализ устойчивости этой схемы приводит к условию

$$\tau_k \leq \sqrt{\frac{2m_p}{c_{12}^{(t)}}}.$$

Тогда для системы многих частиц это условие примет вид

$$\tau_k^{(3)} \leq \left(\frac{\min_n m_n}{\max_{n,m} c_{nm}^{(t)}} \right)^{1/2}. \quad (28.11)$$

Учитывая условия (28.8), (28.10) и (28.11), окончательно шаг по времени определяется из условия

$$\tau_k = \min(\tau_k^{(1)}, \tau_k^{(2)}, \tau_k^{(3)}).$$

5.3. Пример: Падение столба гранул на наклонную плоскость

Рассмотрим процесс падения гранул на наклонную плоскость. Предположим, что движение частиц происходит в плоскости (z, x) , то есть движение двумерно. В начальный момент времени рассматриваемая система представляет собой столб, состоящий из 200 гранул (слайд 3.29).

Все частицы имеют следующие физические параметры (полиэтилен):

$$d_n = 0.01 \text{ м}, \rho_n = 900 \text{ кг/м}^3, E_n = 7.6 \cdot 10^8 \text{ Па}, \nu_n = 0.45, \mu_{nm} = 0.2.$$

Граничная плоскость имеет следующие характеристики (сталь):

$$E_w = 2.0 \cdot 10^{11} \text{ Па}, \nu_w = 0.29, \mu_{nw} = 0.2.$$

Скорость гранул в момент касания равна -1 м/с. Угол наклона левой полуплоскости равен $\pi/8$. Шаг по времени определялся при следующих значениях параметров: $\alpha = 0.01$, $\beta = 0.1$, и на начальном этапе течения $\tau \approx 4 \cdot 10^{-5}$ с. Развитие течения показано на слайдах 3.29 – 3.31.

Слайды 3.29-3.31. Положения гранул в разные моменты времени. с

5.4. Заключительные замечания

Мы рассмотрели движение гранулированной среды в рамках простой модели, которая учитывает упругие соударения и статическое трение. Понятно, что эта модель не учитывает всего многообразия процессов, протекающих в гранулированных средах. В эту модель можно включить дополнительные взаимодействия, которые сделают её более универсальной.

Если относительная скорость соударения частиц достаточно велика, то проявляются неупругие эффекты (пластическая деформация, внутреннее трение), которые приводят к диссипации энергии. Так силу внутреннего трения можно представить в виде

$$\mathbf{f}_{nm}^{(if)} = -\gamma_1 (\Delta r_{nm})^{1/2} \mathbf{s}_{nm}^{(n)}.$$

Когда относительное смещение центров частиц вдоль плоскости контакта достигает некоторого предельного значения, то они начинают скользить относительно друг друга. При этом возникает динамическая сила трения, которая в линейном приближении представляется как

$$\mathbf{f}_{nm}^{(df)} = -\gamma_2 \mathbf{s}_{nm}^{(t)}.$$

При взаимодействии частиц малого размера ($d_n \leq 10^{-3}$ м), между ними возникает сила притяжения, которая обусловливается межатомным притяжением на поверхности контакта. Эту силу можно представить в виде

$$\mathbf{f}_{nm}^{(a)} = -\gamma_3 (\Delta r_{nm})^{3/4} \mathbf{n}.$$

Постоянные $\gamma_1, \dots, \gamma_3$ зависят от размеров частиц и их физических параметров. Трудность включения рассмотренных нами сил в вычислительную модель и состоит в том, что значения этих постоянных не всегда известны.

Лекция 29. Метод вихрей в ячейках для моделирования несжимаемой жидкости

1. Основные уравнения

Уравнения гидродинамики для несжимаемой невязкой жидкости в переменных функция тока-завихрённость мы рассматривали в лекции 21:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + (\mathbf{s} \cdot \nabla) \boldsymbol{\omega} &= (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{s}, \\ \boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}, 0) &= \text{rot}(\mathbf{g}_0(\mathbf{r})), \quad \mathbf{r} \in D, \quad t \geq 0, \end{aligned} \quad (29.1)$$

где $\boldsymbol{\omega} = \text{rot}(\mathbf{s})$ – завихрённость и

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

– скорость частиц жидкости в точке $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ в момент времени t . Определим скорость через функцию тока ψ следующим образом:

$$\mathbf{s} = \text{rot}(\boldsymbol{\psi}) = \begin{pmatrix} \partial \psi_3 / \partial y - \partial \psi_2 / \partial z \\ \partial \psi_3 / \partial x - \partial \psi_1 / \partial z \\ \partial \psi_2 / \partial x - \partial \psi_1 / \partial y \end{pmatrix}. \quad (29.2)$$

Связь между $\boldsymbol{\omega}$ и $\boldsymbol{\psi}$ выражается уравнением Пуассона

$$\Delta \boldsymbol{\psi} = -\boldsymbol{\omega} \quad (29.3)$$

или

$$\begin{pmatrix} \Delta \psi_1 \\ \Delta \psi_2 \\ \Delta \psi_3 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix}.$$

В случае двумерных задач, когда

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} u(x, y, t) \\ v(x, y, t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi \end{pmatrix},$$

система уравнений (29.1)–(29.3) значительно упрощается и принимает вид

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} = 0, \quad (29.4)$$

$$\omega(x, y, 0) = \left(\frac{\partial g_{0,2}}{\partial y} - \frac{\partial g_{0,1}}{\partial x} \right), \quad (x, y) \in D, t \geq 0,$$

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega(x, y, t), \quad (29.5)$$

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial \psi / \partial y \\ -\partial \psi / \partial x \end{pmatrix}, \quad (29.6)$$

2. Несжимаемое течение как система вихревых частиц.

Несжимаемую среду можно представить как систему «вихревых частиц». При таком подходе завихрённость среды выражается в виде набора точечных вихрей

$$\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}, t) = \sum_{p=1}^{\infty} \mathbf{b}_p(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p(t)), \quad (29.7)$$

где \mathbf{b}_p – завихрённость частицы-вихря, \mathbf{r}_p – центр частицы, $\delta(x)$ – функция Дирака. Правая часть уравнения (29.1) описывает перенос завихрённости вместе с жидкостью, поэтому движение частиц описывается уравнениями

$$\frac{d\mathbf{r}_p}{dt} = \mathbf{s}(\mathbf{r}_p, t).$$

Движение частиц создаёт распределение завихрённости, которое через уравнения (29.2) и (29.3) определяет поле скорости. Пусть течение происходит в объёме V и $\phi(\mathbf{r})$ – некоторая финитная функция со свойствами

$$\varphi(\mathbf{r}) \begin{cases} \neq 0, & \mathbf{r} \in V, \\ = 0, & \mathbf{r} \in \partial V, \mathbf{r} \notin V. \end{cases}$$

Умножим (29.7) на $\varphi(\mathbf{r})$, подставим полученное выражение в (29.1) и проинтегрируем по V . Учитывая уравнение неразрывности и произвольность функции $\varphi(\mathbf{r})$, получим уравнение для завихрённости частицы:

$$\frac{d\mathbf{b}_p}{dt} = (\mathbf{b}_p \cdot \nabla) \mathbf{s} \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_p}$$

или

$$\frac{db_p^{(n)}}{dt} = b_p^{(1)} \frac{\partial u_n}{\partial x}(\mathbf{r}_p, t) + b_p^{(2)} \frac{\partial u_n}{\partial y}(\mathbf{r}_p, t) + b_p^{(3)} \frac{\partial u_n}{\partial z}(\mathbf{r}_p, t),$$

$$n = 1, 2, 3$$

В двумерном случае уравнения значительно упрощаются. Легко убедиться, что завихрённость частицы в этом случае является скаляром и не зависит от времени. Тогда

$$\omega(\mathbf{r}, t) = \sum_{p=1}^{\infty} b_p \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p(t)),$$

где теперь $\mathbf{r} = (x, y)$. Уравнения движения приобретают вид

$$\frac{dx_p}{dt} = u(x_p, y_p, t), \quad (29.8)$$

$$\frac{dy_p}{dt} = v(x_p, y_p, t).$$

Поле скорости определяется уравнениями (29.5) и (29.6). Перейдём теперь к построению вычислительной модели, основанной на частицах-вихрях. Для простоты мы будем рассматривать двумерные течения.

3. Вычислительная модель

Построение вычислительной модели движения точечных вихрей естественным образом осуществляется на основе метода РМ: положения

частиц определяются из решения уравнений (29.8), а поле скорости вычисляется на сетке. Рассмотрим некоторую прямоугольную область $S = \{0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y\}$. Введём N вихревых частиц с координатами x_p, y_p и завихрённостями $b_p, p = 1, \dots, N$.

Для решения уравнения Пуассона для функции тока введём разностную сетку с узлами (x_n, y_m) , $n = 0, \dots, N_g, m = 0, \dots, M_g$ и шагами h_x и h_y . В каждой ячейке сетки представим завихрённость в виде

$$\omega(x, y, t) = \sum_p b_p g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p(t)),$$

$$g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p(t)) = \begin{cases} 1/\varepsilon^2, & |x - x_p(t)| \leq 0.5h_x\varepsilon, \quad |y - y_p(t)| \leq 0.5h_y\varepsilon, \\ 0 & \text{в других случаях,} \end{cases}$$

где суммирование ведётся по частицам, которые находятся в этой ячейке, и $\varepsilon \rightarrow 0$. Поле скорости (а значит, и завихрённость) в начальный момент времени известно. Тогда завихрённость частиц определяется из соотношения

$$\frac{1}{h_x h_y} \int_{y_m}^{y_{m+1}} \int_{x_n}^{x_{n+1}} \omega(x, y, 0) dx dy = \sum_p b_p, \quad (29.11)$$

$$n = 0, \dots, N_g, \quad m = 0, \dots, M_g,$$

$$\omega(x, y, 0) = \frac{\partial v}{\partial x}(x, y, 0) - \frac{\partial u}{\partial y}(x, y, 0),$$

и суммирование ведётся по тем частицам, которые находятся в ячейке с номером (n, m) .

Как обычно, мы будем рассчитывать состояния системы в дискретные моменты времени t_k , $t_{k+1} - t_k = \tau_k$ — шаг по времени. Рассмотрим процедуру расчёта одного временного шага. В начальный момент времени $t_0 = 0$ положения частиц и поле скорости в узлах сетки задано:

$$x_p^0 = x_p(0),$$

$$y_p^0 = y_p(0), \quad p = 1, \dots, N,$$

$$u_{n,m}^0 = u(x_n, y_m, 0),$$

$$v_{n,m}^0 = v(x_n, y_m, 0).$$

Положения частиц в момент времени t_{k+1} вычисляются по известным в момент времени t_k положениям с использованием некоторой разностной схемы для уравнений (29.8). Для первого из уравнений (29.8) простейшая схема имеет вид

$$\frac{x_p^{k+1} - x_p^k}{\tau_k} = u(x_p^k, y_p^k),$$

$$p = 1, \dots, N; \quad k = 0, 1, \dots, \\ x_p^0, y_p^0 - \text{заданы.}$$

Скорость в точках положения частиц определяется по значениям $u_{n,m}$ в четырёх ближайших к заданной частице сеточных узлах с использованием интерполяции. Пусть некоторая частица с номером p находится в ячейке $[x_n, x_{n+1}] \times [y_m, y_{m+1}]$. Тогда

$$u(x_p^k, y_p^k) = u_{n,m}^k + (u_{n+1,m}^k - u_{n,m}^k)x_p^* + (u_{n,m+1}^k - u_{n,m}^k)y_p^* + \\ + (u_{n+1,m+1}^k - u_{n+1,m}^k - u_{n,m+1}^k + u_{n,m}^k)x_p^*y_p^*, \\ x_p^* = (x_p^k - x_n)\frac{1}{h_x}, \quad y_p^* = (y_p^k - y_m)\frac{1}{h_y}.$$

Схема для второго уравнения (29.8) выглядит аналогичным образом. Для более точных вычислений можно использовать, например, схемы Адамса (см. лекцию 10). Правда, это требует хранения большего количества информации. Так, например, для схемы второго порядка необходимо хранить положения частиц и значения скоростей на двух временных слоях.

Для расчёта скорости в момент времени t_{k+1} необходимо решить разностный аналог уравнения (29.5)

$$\Delta_h \psi_{n,m}^{k+1} = -\omega_{n,m}^{k+1},$$

где Δ_h – разностная форма оператора Лапласа. На практике часто используются периодические граничные условия или условия Дирихле. Поэтому для решения этого уравнения лучше всего использовать метод на основе FFT (см. лекцию 9). Завихрённость в узлах разностной сетки

$$\omega_{n,m}^{k+1} = \frac{1}{h_x h_y} \int_{y_m - 0.5h_y}^{y_m + 0.5h_y} \int_{x_n - 0.5h_x}^{x_n + 0.5h_x} \omega(x, y, t_{k+1}) dx dy$$

вычисляется по положениям частиц в момент времени t_{k+1} и в простейшем случае завихрённость в узле (n, m) равна сумме завихрённостей всех частиц, находящихся в области $S_{n,m} = \{x_n - 0.5h_x \leq x \leq x_n + 0.5h_x, y_m - 0.5h_y \leq y \leq y_m + 0.5h_y\}$. Это выражается следующей формулой:

$$\omega_{n,m}^{k+1} = \sum_{p=1}^N b_p c\left(n - \left[x_p^{k+1}/h_x + 0.5\right]\right) c\left(m - \left[y_p^{k+1}/h_y + 0.5\right]\right),$$

где

$$c(i-j) = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j, \end{cases}$$

и $[\cdot]$ означает целую часть числа. Для более точного распределения завихрённости можно использовать и более сложные схемы. Применяя центральную разность к уравнениям (29.6), получим значения компонент скорости в узлах сетки:

$$\begin{aligned} u_{n,m}^{k+1} &= \frac{1}{2h_y} (\psi_{n,m+1}^{k+1} - \psi_{n,m-1}^{k+1}), \\ v_{n,m}^{k+1} &= -\frac{1}{2h_x} (\psi_{n+1,m}^{k+1} - \psi_{n-1,m}^{k+1}), \\ n &= 1, \dots, N_g - 1, \quad m = 1, \dots, M_g - 1. \end{aligned}$$

На этом вычисление одного шага по времени заканчивается. Рассмотренная нами процедура часто называется методом вихрей в ячейках (VIC, vortices-in-cells).

Ограничение на шаг по времени следует из простых соображений. Понятно, что за один шаг по времени частица не должна проходить расстояние большее, чем минимальный размер ячейки, иначе она будет «перескакивать» через вариации поля, а это, в свою очередь, может привести к сильным флуктуациям завихрённости и неустойчивости. Поэтому шаг по времени выбирается из условия

$$\tau_k < \frac{\min(h_x, h_y)}{\max_{n,m} \left((u_{n,m}^k)^2 + (v_{n,m}^k)^2 \right)^{1/2}}.$$

Основные погрешности вычислительной модели обуславливаются тем, что

- 1) течение описывается конечным числом вихревых частиц,
- 2) определение поля скорости и расчёт движения частиц осуществляется на основе дискретной аппроксимации соответствующих уравнений,
- 3) определение скорости вихревой частицы через её значения в узлах прямоугольной сетки привносит анизотропность в модель.

Поэтому повышение точности вычислительной модели достигается увеличением числа вихревых частиц и уменьшением шага разностной сетки. Для уменьшения анизотропии можно применять либо более сложные процедуры интерполяции, либо использовать треугольные или шестиугольные сетки.

4. Развитие неустойчивости Кельвина-Гельмгольца в сдвиговом течении

Рассмотрим течение, возникающее на границе двух бесконечных в направлениях x и z слоёв жидкости, которые в начальный момент времени двигаются в противоположных направлениях. Будем рассматривать эту задачу в двумерной постановке, что соответствует следующим начальным условиям для скорости:

$$u(x, y, 0) = \begin{cases} u_0, & y > 0, \\ 0, & y = 0, \\ u_0, & y < 0, \end{cases} \quad v(x, y, 0) = 0, \quad -\infty < x < \infty.$$

Моделирование будет производиться в конечной области $S = \{0 \leq x \leq 1, -0.5 \leq y \leq 0.5\}$. Чтобы учесть, что на самом деле слои в направлении x бесконечны, на левой и правой границах области ставятся периодические граничные условия для функции тока

$$\psi(0, y, t) = \psi(1, y, t).$$

На нижней и верхней границах области граничные условия имеют вид

$$\psi(x, -0.5, t) = \psi(x, 0.5, t) = 0.$$

Периодические условия учитываются и при расчёте движения частиц.

Введём разностную сетку с шагами $h_x = 1/(N_g - 1)$ и $h_y = 1/(M_g - 1)$, где N_g, M_g – число узлов сетки в направлениях x и y , соответственно. В начальный момент времени завихрённость отлична от нуля только в точке $y = 0$. Поэтому поместим вихревые частицы в те ячейки, которые примыкают к прямой $y = 0$. Пусть число частиц в каждой ячейке равно 16 и они равномерно распределены. Тогда общее число частиц $N = 32(N_g - 1)$. Таким образом, в начальный момент времени мы имеем слой частиц, как показано на слайде 3.32.

Слайд 3.32. Положения частиц в момент времени $t = 0$

Пусть все частицы имеют одинаковую завихрённость, которая определяется из соотношения (29.9):

$$b_p = \frac{u_0}{16h_y}, \quad p = 1, \dots, N.$$

Расчёты производились при $N_g = M_g = 33$, и тогда $h_x = h_y = h$. Шаг по времени определялся из условия

$$\tau_k = \frac{0.25h}{\max_{n,m} \left(\left(u_{n,m}^k \right)^2 + \left(v_{n,m}^k \right)^2 \right)^{1/2}}.$$

Развитие течения показано на слайдах 29.2 – 29.6. На слайде 29.2 показана линейная стадия образования неустойчивости Кельвина-Гельмгольца. Затем течение переходит в нелинейную стадию (слайд 3.33) с последующим образованием мелкомасштабных вихрей в области сдвига (слайд 3.34). Далее происходит распад этих вихрей (слайд 3.35) и образование крупномасштабных вихрей (слайдах 3.36). Формирование вихрей сглаживает разрыв скорости течения, поэтому с макроскопической точки зрения турбулентция имеет эффект вязкой диффузии.

Слайды 3.32-3.36. Положения частиц в различные моменты времени.

Лекция 30. Моделирование электростатической плазмы

Плазма представляет собой высокотемпературный ионизированный газ, состоящий из ионов, электронов и нейтральных атомов. Различные физические процессы, протекающие в плазме, обуславливаются взаимодействием её компонент с электромагнитным полем.

Классическая плазма формируется при условии, что средняя кинетическая энергия заряженных частиц много больше, чем средняя энергия электростатического взаимодействия. Основными макроскопическими параметрами плазмы являются плотность числа частиц d (количество частиц в единице объёма) и средняя кинетическая энергия, которая обычно выражается в единицах $k_B T$, где T – температура. В таблице 30.1 приведены примеры некоторых состояний плазмы.

Таблица 30.1

Характерные параметры различных состояний плазмы

Физическая система	T , К	d , м ⁻³	λ_D , м	g
Межзвёздное пространство	10^4	10^6	6.9	$3 \cdot 10^{-9}$
Солнечный ветер (вблизи Земли)	$5 \cdot 10^4$	$7 \cdot 10^6$	5.83	$7.2 \cdot 10^{-10}$
Ионосфера	10^4	10^{11}	$2.18 \cdot 10^{-2}$	$9.6 \cdot 10^{-7}$
Солнечная корона	10^6	10^{12}	$6.9 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-9}$
Хромосфера Солнца	10^4	10^{15}	$2.18 \cdot 10^{-4}$	$9.6 \cdot 10^{-5}$
Токамак	10^8	10^{19}	$2.18 \cdot 10^{-4}$	$9.6 \cdot 10^{-9}$
МГД генератор	10^4	10^{20}	$6.9 \cdot 10^{-7}$	0.03
Электрический разряд в разреженном газе	10^4	10^{16}	$6.9 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-4}$
Типичная лабораторная плазма	10^4	10^{17}	$2.18 \cdot 10^{-5}$	$9.6 \cdot 10^{-4}$

В дальнейшем мы будем предполагать, что плазма состоит из ионов с зарядом $+e$, массой m_i и плотностью d_i , и электронов массой m_e , также имеющих плотность d_e (e – величина заряда электрона). Мы не будем учитывать такие процессы как ионизация, рекомбинация, излучение и т.д., которые характерны для слабоионизированной плазмы, а сосредоточим наше внимание на полностью ионизированной плазме.

1. Идеальная плазма

Рассмотрим теперь условия формирования плазмы более подробно. Пусть V – объём области и N_s – число частиц в этом объёме. Тогда $r_a = (V/N_s)^{1/3} = d^{1/3}$ есть среднее расстояние между частицами. Средняя потенциальная энергия кулоновского взаимодействия двух ближайших частиц представляется в виде $e^2/4\pi\epsilon_0 r_a$. Тогда условие, что средняя кинетическая энергия заряженных частиц много больше, чем средняя потенциальная энергия их взаимодействия (условие формирования плазмы), принимает вид

$$\frac{4\pi\epsilon_0 r_a k_B T}{e^2} = \frac{4\pi\epsilon_0 k_B T}{e^2 d^{1/3}} \gg 1.$$

Возведём левую часть этого соотношения в степень $3/2$ и получим

$$d\lambda_D^3 = N_D \gg 1, \quad (30.1)$$

где

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T}{de^2}}$$

– параметр, называемый дебаевской длиной, и N_D – число частиц в дебаевском кубе. Условие (30.1) называется условием формирования плазмы. Часто бывает удобно работать с величиной, обратной (30.1),

$$g = 1/N_D,$$

которая называется параметром плазмы. Идеальная плазма определяется условием

$$N_D \rightarrow \infty \text{ или } g \rightarrow 0. \quad (30.2)$$

Данные из таблицы 30.1 показывают, что реальная плазма довольно близка к идеальной. При этом значение параметра g можно использовать как меру неидеальности плазмы.

Идеальная плазма является бесстолкновительной средой (хотя $N_D \rightarrow \infty$!). Это свойство следует из условия, что потенциальная энергия взаимодействия частиц мала по сравнению с их кинетической энергией. Под столкновением двух частиц мы будем понимать значительное изменение траекторий их движения под действием кулоновской силы. Радиусом взаимодействия r_i называется расстояние, на котором потенциальная энергия

взаимодействия двух частиц сравнима со средней кинетической энергией, то есть

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} = k_B T \quad \Rightarrow \quad r_i = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T}.$$

Рассмотрим отношение радиуса взаимодействия к среднему расстоянию между частицами $r_a = d^{1/3}$:

$$\frac{r_i}{r_a} = \frac{e^2 d^{1/3}}{4\pi\epsilon_0 k_B T} = \frac{1}{4\pi (d \lambda_D^3)^{2/3}} = \frac{1}{4\pi N_D^{2/3}}.$$

Поэтому при $N_D \rightarrow \infty$

$$\frac{r_i}{r_a} \rightarrow 0,$$

и это говорит о том, что движение частиц системы будет бесстолкновительным. Естественно, что в реальной плазме имеют место столкновения. Время столкновения t_c (время, за которое столкновительные эффекты значительно повлияют на динамику системы) связано с параметром плазмы: $t_c \sim 1/g$.

Из условия (30.2) следует, что идеальная плазма является сплошной средой. В этом смысле она похожа на нейтральную жидкость. Однако поведение идеальной плазмы принципиально отличается от поведения нейтральной жидкости. Во-первых, столкновительные эффекты в значительной мере влияют на движение частиц нейтральной жидкости, так как длина их свободного пробега значительно меньше характерных размеров области. В идеальной плазме длина свободного пробега стремится к бесконечности. Во-вторых, плазма состоит из заряженных частиц и поэтому подвержена влиянию электромагнитного поля.

2. Построение математической модели

Движение заряженных частиц плазмы описывается уравнениями

$$m_p \frac{d\mathbf{s}_p}{dt} = q_p \left(\mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t) + \mathbf{s}_p \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_p, t) \right), \quad (30.3)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_p}{dt} = \mathbf{s}_p,$$

$$\mathbf{r}_p(0), \mathbf{s}_p(0) - \text{заданы,} \quad p = 1, \dots, N_s,$$

где $\mathbf{s} = (u, v, w)$ – скорость частиц в точке $\mathbf{r} = (x, y, z)$ в момент времени t . Самосоогласованное электромагнитное поле (\mathbf{E} и \mathbf{B}) связано с плотностью заряда и тока уравнениями Максвелла

$$\operatorname{div}(\mathbf{E}) = \rho / \varepsilon_0, \quad (30.4)$$

$$\operatorname{rot}(\mathbf{E}) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (30.5)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{B}) = 0, \quad (30.6)$$

$$\operatorname{rot}(\mathbf{B}) = \mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (30.7)$$

где ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, μ_0 – магнитная проницаемость вакуума и $c = (\varepsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$ – скорость света в вакууме. Уравнения Максвелла обычно решаются с помощью конечно-разностных или конечно-элементных методов. Если в малом объёме пространства V (например в ячейке разностной сетки) находится M частиц с зарядами q_p и скоростями \mathbf{s}_p ($p = 1, \dots, M$), то плотности заряда и тока могут быть вычислены как

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_{p=1}^M q_p, \quad \mathbf{J} = \frac{1}{V} \sum_{p=1}^M q_p \mathbf{s}_p.$$

Полное трёхмерное моделирование плазмы с помощью системы уравнений (30.3)–(30.7) требует значительных вычислительных ресурсов. Однако во многих случаях приведённую выше систему можно упростить. Хотя возможны различные приближения, мы кратко рассмотрим электростатическую модель. Предполагается, что длительность процесса существенно превосходит время прохождения света через систему. Поэтому второе слагаемое в правой части (30.7), пропорциональное c^{-2} , не учитывается. В этом подходе отсутствуют электромагнитные волны и подразумевается, что поля \mathbf{E} и \mathbf{B} мгновенно подстраиваются под заданные распределения зарядов и токов. Пусть l – пространственный масштаб задачи и t_p – длительность рассматриваемого процесса. Если $l \geq \lambda_D$ и $t_p \leq t_c$, то следует учитывать разделение зарядов, и мы сохраняем правую часть в (30.4). Предполагая, что токи малы, так что самосоогласованное поле незначительно, можно пренебречь правыми частями в (30.7) и (30.5). В этом приближении (электростатическое приближение) уравнения Максвелла приобретают вид

$$\operatorname{rot}(\mathbf{B}) = 0, \quad \operatorname{rot}(\mathbf{E}) = 0, \quad (30.8)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{E}) = \rho/\varepsilon_0, \quad \operatorname{div}(\mathbf{B}) = 0.$$

Введём электростатический потенциал φ , так что

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad}(\varphi). \quad (30.9)$$

Тогда уравнения (30.8) приводятся к уравнению Пуассона

$$\Delta\varphi = -\rho/\varepsilon_0. \quad (30.10)$$

Движение плазмы в электростатическом приближении описывается уравнениями (30.3), только $\mathbf{B}(\mathbf{r}_p, t)$ следует заменить на $\mathbf{B}^{(ext)}(\mathbf{r}_p, t)$ – заданное внешнее магнитное поле. Для такой плазмы характерны коллективные движения, которые являются результатом согласованного движения большого числа частиц плазмы. Рассмотрим такие движения в одномерном случае.

Пусть d_0 будет плотностью электронов в невозмущённом равновесном состоянии. Положительные ионы также имеют плотность d_0 , так как плазма нейтральна. Допустим, что электроны выведены из положения равновесия. Если плотность электронов в какой-то области возросла, они начнут отталкиваться и стремиться вернуться в прежнее положение. Двигаясь к своим первоначальным положениям, они наберут кинетическую энергию и проскочат мимо положения равновесия. Начнутся колебания. Уравнение движения электрона относительно положения равновесия имеет вид

$$m_e \frac{d^2 r}{dt^2} = F_x = -\frac{d_0 e^2}{\varepsilon_0} r. \quad (30.11)$$

Таким образом, мы получили классическое уравнение гармонических колебаний. Частота колебаний определяется из (30.11):

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{d_0 e^2}{\varepsilon_0 m_e}}.$$

Это число является одним из основных параметров, характеризующих плазму, и называется электронной плазменной частотой. Итак, мы получили,

что возмущения плазмы приводят к свободным колебаниям электронов вблизи положения равновесия с собственной частотой ω_{pe} .

Наличие магнитного поля также влияет на движение заряженных частиц. Рассмотрим однородное магнитное поле \mathbf{B} . Движение электрона в этом поле – это движение с постоянной скоростью в направлении \mathbf{B} и круговое движение в плоскости, перпендикулярной \mathbf{B} , то есть движение по цилиндрической спирали. При этом угловая частота (гирочастота, или ларморовская частота) равна

$$\omega_{ge} = \frac{e|\mathbf{B}|}{m_e}$$

и радиус спирали (ларморовский радиус) определяются как

$$a_{ge} = \frac{|\mathbf{s}^{(t)}|}{\omega_{ge}},$$

где $\mathbf{s}^{(t)}$ – проекция скорости на плоскость, перпендикулярную \mathbf{B} . Аналогичные соотношения справедливы и для ионов.

В реальной плазме число частиц в рассматриваемой области

$$N_s = N_D \left(\frac{l}{\lambda_D} \right)^3$$

может быть очень велико и решение задачи потребует значительных вычислительных ресурсов. Можно работать с меньшим количеством частиц, но для этого необходимо внести некоторые изменения в исходную систему. Вместо реальных частиц (электронов и ионов) введём модельные частицы, число которых $N < N_s$. Тогда плотность числа этих частиц будет $d_m = N/V$ и $d/d_m = N_s/N = \alpha > 1$. Модельные частицы, так же как и реальные частицы, имеют заряд и массу, но значения этих величин отличаются от соответствующих значений реальных частиц. Заряд и массу модельных частиц следует задать таким образом, чтобы основные характеристики исходной системы и системы, состоящей из модельных частиц, не изменились. Из условия сохранения суммарного заряда и массы следует

$$q^{(m)} = \pm \alpha e \text{ и } m^{(m)} = \alpha m_e \text{ (или } \alpha m_i),$$

где $q^{(m)}$ и $m^{(m)}$ – заряд и масса модельной частицы, соответственно. Легко проверить, что плазменная и ларморовская частоты модельной системы при

этом сохраняются. Для того чтобы сохранялась дебаевская длина, необходимо положить $T^{(m)} = \alpha T$, что приводит к излишнему разогреву плазмы и увеличению тепловых шумов. Однако при этом сохраняются тепловая скорость $s_{Te} = (k_B T / m_e)^{1/2}$ и ларморовский радиус, основанный на этой скорости. Динамика модельной системы описывается уравнениями (30.3), только q , m и N_s следует заменить на $q^{(m)}$, $m^{(m)}$ и N , соответственно.

Для решения поставленной задачи естественным образом подходит метод частица-сетка, кратко рассмотренный в параграфе 3. Вычисление силы, действующей на заряженную частицу, можно осуществить и в рамках метода РР на основе закона электростатического взаимодействия:

$$q_p^{(m)} \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq p}}^N \frac{q_p^{(m)} q_n^{(m)} (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n)}{r_{pn}^3},$$

где r_{pn} – расстояние между частицами p и n . Так как кулоновское взаимодействие является дальнодействующим, то суммирование необходимо производить по всем частицам, что может потребовать большого объема вычислений. Дополнительные сложности также возникают при задании граничных условий, на сетке это сделать гораздо проще.

Обсудим теперь реализацию метода РМ для расчёта динамики плазмы более подробно.

3. Вычислительная модель

Для аппроксимации уравнений движения (30.3) можно, как и прежде, применить схему с перешагиванием, которая теперь примет следующий вид:

$$m_p^{(m)} \frac{\mathbf{s}_p^{k+1/2} - \mathbf{s}_p^{k-1/2}}{\tau_k} = q_p^{(m)} \left(\mathbf{E}(\mathbf{r}_p^k) + \frac{1}{2} (\mathbf{s}_p^{k+1/2} + \mathbf{s}_p^{k-1/2}) \times \mathbf{B}^{(ext)}(\mathbf{r}_p^k, t_k) \right), \quad (30.12)$$

$$\frac{\mathbf{r}_p^{k+1} - \mathbf{r}_p^k}{\tau_k} = \mathbf{s}_p^{k+1/2},$$

$$\mathbf{r}_p^0, \mathbf{s}_p^{1/2} - \text{заданы, } p = 1, \dots, N.$$

На первый взгляд это соотношение выглядит как неявная схема, но на самом деле неизвестную в момент времени $t_{k+1/2}$ скорость можно выразить явным образом из этого соотношения.

Для расчёта по этой схеме нам необходимо знать электрическое поле, которое зависит от распределения зарядов. Напряжённость электрического поля определяется из соотношения (30.9), где потенциал φ описывается уравнением (30.10). Для решения этого уравнения можно применить, например, конечно-разностные методы (см. лекцию 9). Для простоты мы будем рассматривать двумерный случай. Введём разностную сетку с узлами (x_n, y_m) и шагами h_x, h_y , соответственно. Разностная форма уравнения (30.10) будет иметь вид

$$\Delta_h \varphi_{n,m}^k = -\rho(x_n, y_m, t_k) / \varepsilon_0, \quad (30.13)$$

где Δ_h – разностная форма оператора Лапласа, $\varphi_{n,m}$ – значения потенциала в узлах разностной сетки в момент времени t_k , и $\rho(x_n, y_m, t_k)$ – плотность заряда в узлах разностной сетки. Для того чтобы решить уравнение (30.13), нам необходимо вычислить плотность зарядов в узлах разностной сетки, исходя из положения заряженных частиц в момент времени t_k . Эта процедура называется *распределением зарядов*. Простейший способ распределения состоит в приписывании заряда частицы ближайшему сеточному узлу (слайд 30.1), и этот способ называется *методом ближайшего сеточного узла* (NGP – Nearest Grid Point). Хотя этот метод является наиболее быстрым, он приводит к большим погрешностям при моделировании. Более точная процедура основана на представлении заряда в виде заряженного облака размером $c_x \times c_y$ (часто полагается $c_x = h_x, c_y = h_y$) с плотностью заряда $q_p^{(m)} / (c_x c_y)$, и центр этого облака совпадает с положением заряженной частицы. Тогда распределение заряда облака в ближайшие узлы сетки производится так, как показано на слайде 3.37.

Слайд 3.37. Распределение заряда на сетку; • – заряженная частица; —> – метод NGP; ---> – метод CIC

Это приводит к следующим соотношениям:

$$q(x_n, y_m, t_k) = (c_x - h_x x_p^*) (c_y - h_y y_p^*) \frac{q_p^{(m)}}{(2c_x c_y)^2} = a_{n,m}^{(p)} q_p^{(m)},$$

$$\begin{aligned}
q(x_n, y_{m+1}, t_k) &= (c_x - h_x x_p^*) (c_y + h_y y_p^*) \frac{q_p^{(m)}}{(2c_x c_y)^2} = a_{n,m+1}^{(p)} q_p^{(m)}, \\
q(x_{n+1}, y_{m+1}, t_k) &= (c_x + h_x x_p^*) (c_y + h_y y_p^*) \frac{q_p^{(m)}}{(2c_x c_y)^2} = a_{n+1,m+1}^{(p)} q_p^{(m)}, \\
q(x_{n+1}, y_m, t_k) &= (c_x + h_x x_p^*) (c_y - h_y y_p^*) \frac{q_p^{(m)}}{(2c_x c_y)^2} = a_{n+1,m}^{(p)} q_p^{(m)}, \\
x_p^* &= (x_p^k - x_{n+1/2}) \frac{2}{h_x}, \quad y_p^* = (y_p^k - y_{m+1/2}) \frac{2}{h_y},
\end{aligned}$$

где $(x_{n+1/2}, y_{m+1/2})$ – координаты центра разностной ячейки и $(x_p, y_p) \in [x_n, x_{n+1}] \times [y_m, y_{m+1}]$ – координаты заряженной частицы. Тогда плотность заряда в узле (x_n, y_m) вычисляется как

$$\begin{aligned}
\rho(x_n, y_m, t_k) &= \frac{1}{h_x h_y} \sum_p a_{n,m}^{(p)} q_p^{(m)}, \\
n &= 0, \dots, N_g; \quad m = 0, \dots, M_g.
\end{aligned}$$

и суммирование производится по всем облакам, которые вносят вклад в узел (x_n, y_m) . Такая процедура распределения заряда называется методом облаков в ячейках (CIC, Clouds-in-Cells). Можно использовать облака и более сложной структуры. Это улучшает качество вычислительной модели, но требует большего объёма вычислений.

После того как плотность зарядов определена в узлах разностной сетки, решается уравнение (30.13). Для определённых граничных условий и областей простой формы наиболее эффективными методами для задач такого типа являются методы на основе FFT. Напряжённость электрического поля в узлах разностной сетки вычисляется из разностной формы соотношения (30.9)

$$\mathbf{E}_{n,m}(t_k) = \begin{pmatrix} E_{n,m}^{(x)}(t_k) \\ E_{n,m}^{(y)}(t_k) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \frac{1}{2h_x} (\phi_{n+1,m}^k - \phi_{n-1,m}^k) \\ \frac{1}{2h_y} (\phi_{n,m+1}^k - \phi_{n,m-1}^k) \end{pmatrix}.$$

Значение \mathbf{E} в граничных узлах следует из граничных условий, налагаемых на φ . Окончательно, нам необходимо вычислить напряжённость электрического поля в точках положения частиц. В простейшем случае это можно сделать по значениям $\mathbf{E}_{n,m}$ в четырёх ближайших к заданной частице сеточных узлах, используя интерполяцию. Пусть некоторая частица с номером p находится в ячейке $[x_n, x_{n+1}] \times [y_m, y_{m+1}]$. Тогда

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x_p^k, y_p^k) = & \mathbf{E}_{n,m}(t_k) + (\mathbf{E}_{n+1,m}(t_k) - \mathbf{E}_{n,m}(t_k))x_p^* + (\mathbf{E}_{n,m+1}(t_k) - \mathbf{E}_{n,m}(t_k))y_p^* + \\ & + (\mathbf{E}_{n+1,m+1}(t_k) - \mathbf{E}_{n+1,m}(t_k) - \mathbf{E}_{n,m+1}(t_k) + \mathbf{E}_{n,m}(t_k))x_p^*y_p^*, \\ x_p^* = & (x_p^k - x_n) \frac{1}{h_x}, \quad y_p^* = (y_p^k - y_m) \frac{1}{h_y}. \end{aligned}$$

Далее положения частиц в момент времени t_{k+1} рассчитываются по схеме (30.12), и расчёт одного шага по времени завершён.

Для завершения описания вычислительной модели нам ещё осталось обсудить практически важный вопрос о выборе пространственной сетки и шага по времени. Этот выбор основан на характерных частотах и пространственных характеристиках задачи. Для выбора пространственной сетки мы должны ориентироваться на дебаевскую длину λ_D , электронный ларморовский радиус

$$a_{ge} = \frac{m_e s_{Te}}{e \cdot \max |\mathbf{B}^{(ext)}|}$$

и ионный ларморовский радиус

$$a_{gi} = \frac{m_i s_{Ti}}{e \cdot \max |\mathbf{B}^{(ext)}|},$$

где s_{Te} и s_{Ti} – характерные тепловые скорости электронов и ионов, соответственно. Так как $a_{ge} \ll a_g$, то шаги сетки должны выбираться из условия

$$(h_x, h_y) < \min(\lambda_D, a_{ge}).$$

Выбор шага по времени для схемы (30.12) основан на условии (27.7), где ω – максимальная характерная частота системы. В нашем случае характерными частотами являются электронная плазменная частота ω_{pe} и ларморовская частота $\omega_{ge} = e \cdot \max |\mathbf{B}^{(ext)}| / m_e$ (соответствующие частоты для ионов значительно меньше). В дополнение следует учесть, что если частицы

пересекают больше одной разностной ячейки за один шаг по времени, то возникает значительная погрешность, поскольку частицы «перепрыгивают» через вариации поля. В результате мы приходим к следующему условию:

$$\tau_k \leq \min \left(\frac{\sqrt{12}\delta}{\max(\omega_{pe}, \omega_{ge})}, \frac{\min(h_x, h_y)}{\max_p |\mathbf{s}_p^k|} \right).$$

4. Применимость вычислительной модели

Основные отличия вычислительной модели от математической модели физической системы состоят в том, что

- 1) число модельных частиц меньше, чем число реальных частиц системы;
- 2) определение электрического поля и расчёт движения частиц осуществляется на основе дискретной аппроксимации соответствующих уравнений;
- 3) сила взаимодействия между двумя заряженными частицами (облаками), определённая на прямоугольной сетке, не является полностью центральной, а имеет небольшую азимутальную составляющую. Этот эффект можно уменьшить, если использовать треугольные или шестиугольные сетки.

Всё это приводит к возникновению различного рода ошибок. В процессе вычислений эти ошибки накапливаются, и после некоторого числа шагов по времени вычислительная модель уже не отображает поведение реальной системы. Поведение вычислительной модели характеризуется двумя основными параметрами – временем столкновения и временем разогрева.

5. Удержание позитронов магнитным полем

Система, состоящая из одноимённо заряженных частиц, называется ненейтральной плазмой. Примерами такой плазмы являются электронные и ионные пучки, плазма для генерации электромагнитных волн и удерживаемые в ловушках электроны и античастицы (позитроны и антипротоны), которые используются при исследовании антивещества.

Рассмотрим задачу о движении позитронов в магнитном поле в ограниченной области (ловушке). Будем считать, что движение частиц является двумерным и происходит в области $S = \{0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y\}$.

Постоянное магнитное поле B направлено вдоль оси z . Пусть в начальный момент времени позитроны случайным образом расположены в области

$$\left(\frac{x-c}{a}\right)^2 + \left(\frac{y-c}{b}\right)^2 \leq 1.$$

Начальные скорости частиц зададим из средней кинетической энергии на частицу $k_B T$:

$$\mathbf{s}_p = \begin{pmatrix} u_p \\ v_p \end{pmatrix}_{t=0} = \sqrt{\frac{k_B T}{m_e}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad p = 1, \dots, N,$$

где знаки выбираются случайным образом. Граница ловушки заземлена, поэтому граничное условие для потенциала имеет вид

$$\varphi|_{\partial S} = 0.$$

Параметры физической системы и вычислительной модели приведены в таблице 30.2.

Таблица 30.2

ЧИСЛО ПОЗИТРОНОВ, N_S	10^6
Число модельных частиц, N	400
Размер области, l_x, l_y , м	0.01, 0.01
B , Тл	$4 \cdot 10^{-4}$
Ларморовская частота, ω_{ge} , Гц	$7.02 \cdot 10^7$
Ларморовский радиус, a_{ge} , м	$1.1 \cdot 10^{-3}$
Размер разностной сетки, $N_g \times M_g$	33×33
Температура, T , К	100

На слайдах 3.38 – 3.39 показаны конфигурации системы позитронов в различные моменты времени. На слайде 3.39 показана траектория некоторой частицы. Движение частицы обуславливается двумя факторами: круговым движением под действием магнитного поля и дрейфом поперёк магнитного поля со скоростью $\sim \mathbf{E} \times \mathbf{B}$.

Слайды 3.38 – 3.39. Положение частиц в различные моменты времени.

Лекция 31. Классификация биологических моделей.

Компьютеры в современном мире стали привычными для человеческой деятельности: в финансовой сфере, в бизнесе, промышленности, образовании, сфере досуга. Благодаря компьютерам удалось существенно продвинуться в следующих направлениях:

- 1) автоматизация исследований (возможность хранить, структурировать значительный объем информации).
- 2) прогнозирование (строится математическая модель, разрабатываются различные сценарии, выполняются прогнозы).
- 3) оптимизация (любая система имеет несколько уровней состояний).

Наиболее оптимальное состояние то, при котором затрагивается наименьшая энергия). Оптимизация – это процесс построения целевой функции, критериев оптимизации и их исследование.

Компьютер работает не с самой системой, а с моделью. Модель – это копия объекта, в некотором смысле «более удобная», допускающая манипуляции в пространстве и во времени.

При моделировании, выборе и формулировке модели, определяющими обстоятельствами являются объект, цель и метод (средства) моделирования. В данном разделе объектами моделирования будут биологические процессы разного уровня организации.

Цели моделирования:

- 1) выяснение механизмов взаимодействия элементов системы (влияние факторов).
- 2) идентификация и верификация параметров модели по экспериментальным данным (сравнение эксперимент – модель).
- 3) оценка устойчивости модели (системы).
- 4) прогноз поведения системы при различных внешних воздействиях, различных способах управления.
- 5) оптимальное управление системой в соответствии с выбранным критерием оптимальности.

То есть в принципе те же задачи и цели, что и для физических процессов. Меняются только переменные и параметры.

- численность популяции;
- влияние погодных явлений (засуха, пожар, потоп);

- влияние запасов продовольствия.

При построении модели выполняется процедура

- гипотеза;
- формализация;
- уравнения;
- исследование;
- результаты;
- выводы.

Наиболее сложный этап – формализация знаний об объекте. Условно все математические модели биологических систем можно разделить на регрессионные, качественные и имитационные. Регрессионные модели используют зависимость в виде формул, которые описывают связь различных характеристик системы без использования физического или биологического смысла этих зависимостей. Для построения регрессионной модели используются статистические данные. Корреляция – связь статистических достоверных наблюдений между переменными и параметрами системы.

Примеры:

1. Зависимость между количеством производителей хамсы и количеством молоди от каждого нерестившегося производителя в Азовском море.

Хамса производители и молодь.

$$S = \frac{4.95}{x^2} + \frac{27.78}{x} - 0.078$$

S - количество молоди от каждого нерестившегося производителя (штуках)

x - количество зашедших весной из Черного в Азовское море производителей хамсы (млрд. шт.).

Чем меньше зайдет x , тем больше S выживет.

$\sigma = 0.24$ - среднеквадратичное отклонение.

2. Скорость поглощения кислорода опадом листьев.

$$\lg(Y + 1) = 0.561 - 8.701D \cdot 10^{-4} + 3.935D^2 \cdot 10^{-7} + 7.187B \cdot 10^{-4} + 0.0398T$$

Y - поглощение кислорода, измеренное в мкл(0,25 г)⁻¹ч⁻¹;

D - число дней, в течении которого выдерживаются образцы;

B - процентное содержание влаги в образцах;

T - температура ($^{\circ}C$).

Эта формула дает несмещенные оценки для скорости поглощения кислорода во всем диапазоне дней, температур и влажностей, которые наблюдались в эксперименте, со средним квадратичным отклонением в поглощении кислорода, равном $\sigma = 0.319 \pm 0.321$. То есть с увеличением количества дней, температуры и влаги поглощение кислорода интенсифицируется.

Коэффициенты в регрессионных моделях определяются по экспериментальным данным.

Суть имитационного моделирования заключается в исследовании сложной математической модели с помощью вычислительных экспериментов и обработки результатов этих экспериментов. При этом, как правило, создатели имитационной модели пытаются максимально использовать всю имеющуюся информацию об объекте моделирования, как количественную, так и качественную.

Основные этапы построения имитационной модели следующие:

- формулируются основные вопросы о поведении сложной системы. В каждом блоке формулируются собственные законы, уравнения, логические операторы, время;
- каждый блок верифицируется по фактическим данным. При этом его информационные связи с другими блоками замораживаются;
- проводится объединение блоков имитационной модели. Апробируются и отрабатываются различные схемы взаимодействия блоков.;
- проводится верификация всей модели и проверка ее адекватности;
- планируются эксперименты с моделью.

На каждом из этапов могут возникнуть трудности, для преодоления которых необходимо перестраивать модель, расширять список фазовых переменных, уточнять вид их взаимодействий. По существу, создание имитационной модели включает путь последовательных приближений, в процессе которых получается новая информация об объекте моделирования, усовершенствуется система наблюдений, проверяются гипотезы о механизмах тех или иных процессов в рамках общей имитационной системы.

Таким образом, основные задачи имитационного моделирования:

- проверка гипотез о взаимосвязи отдельных объектов и подсистем;

- прогноз поведения при изменении внутренних характеристик и внешних условий;
- оптимизация управления.

Примеры.

1. Молекулярная динамика. Цель:

Зная координаты молекул и законы их взаимодействия описать протекающие процессы.

- функциональные свойства белков, их активность;
- построение новых веществ.

То есть задаются начальные координаты и скорости частиц. В результате имеются траектории атомов и образование макромолекул.

Исследована микромолекулярная динамика различных аминокислот, белков и прочее. Выделяются и исследуются несколько блоков:

- блок движения;
- блок химических реакций;
- блок биологических реакций;
- блок физических воздействий.

2. Модель продукционного роста растений.

Имитационные модели продукционного процесса растений (агробιοценозов) для разных культур являются одними из первых имитационных моделей. Практическая задача моделирования - выбор оптимальной стратегии проведения сельскохозяйственных мероприятий: орошения, полива, внесения удобрений с целью получения максимального урожая. Существует большое число моделей разных культур, как упрощенных, предназначенных для решения конкретных вопросов управления, так и очень подробных, используемых в основном для исследовательских целей. Подробные модели имеют иерархическую блочную структуру. Среди биотических процессов выделяют блок фотосинтеза, блок корневого питания, блок роста и развития, блок почвенной микрофлоры, блок развития болезней сельскохозяйственной культуры и другие. Рассматриваются также геофизические процессы: формирование теплового и водного режима, концентрации и передвижения биогенных и токсических солей, концентрации CO_2 в посевах и других.

3. Модели водных экосистем.

Водная среда гораздо более однородна, чем сухопутные биогеоценозы, и имитационные модели водных систем успешно создаются начиная с 70-х годов 20 века. Описание обменных процессов в водной среде включает описание усвоения азота, фосфора и других биогенных элементов, рост фито- и зоопланктона, рост популяций рыб и зверей. При этом важно учитывать гидрофизические процессы в рассматриваемых водоемах (движение, теплообмен, примесь).

4. Модели глобальной динамики.

Такие модели играют особую роль в становлении имитационного моделирования. Именно для этих моделей был разработан формализм представления системы в виде узлов и потоков между ними, который затем в разных видах использовался практически во всех моделях сложных систем. Первая глобальная модель – система ограниченного роста – впервые послужила предостережением человечеству в том, что Земля – ограниченная система, безудержный прогресс ведет к истощению ее ресурсов, и человечество ждет глобальный экологический кризис.

Вторая знаменитая глобальная модель – модель ядерной зимы. Ее результаты наглядно показали, что глобальная ядерная война приведет к уничтожению как побежденных, так и победителей, так как после нее небо над всей Землей закроется тучами и настанет ядерная зима на период в несколько десятков лет. Поэтому победа в такой войне будет бессмысленной.

В настоящее время активно разрабатываются глобальные модели, позволяющие рассчитать «парниковый эффект» и другие процессы, протекающие в глобальном масштабе.

Таким образом рассмотрены основные модели. Несмотря на разнообразие живых систем, все они обладают следующими специфическими чертами, которые необходимо учитывать при построении моделей.

Сложность системы.

Все биологические системы являются сложными многокомпонентными, пространственно структурированными, элементы которых обладают индивидуальностью. При моделировании таких систем возможно два подхода. Первый - агрегированный, феноменологический. В соответствии с этим подходом выделяются определяющие характеристики системы (например, общая численность видов) и рассматриваются качественные свойства поведения этих величин во времени (устойчивость

стационарного состояния, наличие колебаний, существование пространственной неоднородности). Такой подход является исторически наиболее древним и свойственен динамической теории популяций.

Другой подход - подробное рассмотрение элементов системы и их взаимодействий, рассмотренное выше имитационное моделирование. Имитационная модель не допускает аналитического исследования, но ее параметры имеют ясный физический и биологический смысл, при хорошей экспериментальной изученности фрагментов системы она может дать количественный прогноз ее поведения при различных внешних воздействиях.

2. Размножающиеся системы (то есть способные к авторепродукции).

Это важнейшее свойство живых систем определяет их способность перерабатывать неорганическое и органическое вещество для биосинтеза биологических макромолекул, клеток, организмов, которые служат источниками возобновления. В моделях это свойство выражается в наличии в уравнениях членов, определяющих возможность роста (в нелимитированных условиях - экспоненциального), возможность неустойчивости стационарного состояния в локальных системах (необходимое условие возникновения колебательных и квазистохастических режимов) и неустойчивости гомогенного стационарного состояния в пространственно распределенных системах (условие неоднородных в пространстве распределений и автоволновых режимов).

Важную роль в развитии сложных пространственно-временных режимов играют процессы взаимодействия компонентов (биохимические реакции) и процессы переноса, как хаотического (диффузия), так и связанного с направлением внешних сил (гравитация, электромагнитные поля) или с адаптивными функциями живых организмов (например, движение цитоплазмы в клетках под действием микрофиламентов).

3. Биологические объекты имеют сложную многоуровневую систему регуляции:

- запас продуктов;
- запас жиров.

То есть имеются механизмы обратной связи, которые возвращают систему к состоянию равновесия.

Лекция 32. Модели биологических систем, описываемые одним дифференциальным уравнением

Изучение математических моделей биологических систем начнем с систем первого порядка, которым соответствует одно дифференциальное уравнение первого порядка:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

Если система автономная, то правая часть уравнений не зависит явно от времени и уравнение имеет вид:

$$\frac{dx}{dt} = f(x)$$

Состояние таких систем в каждый момент времени характеризуется одной единственной величиной – значением переменной x в данный момент времени t .

Примеры (модельные задачи).

1) Рост колонии микроорганизмов.

За время Δt прирост численности равен:

$$\Delta x = R - S$$

где R – число родившихся и S – число умерших за время Δt особей, пропорциональные этому промежутку времени:

$$R(\Delta t, x) = R(x)\Delta t,$$

$$S(\Delta t, x) = S(x)\Delta t$$

В дискретной форме:

$$\Delta x = [R(x) - S(x)]\Delta t.$$

Разделив на Δt и переходя к пределу при $\Delta t \rightarrow 0$, получим дифференциальное уравнение

$$\frac{dx}{dt} = R(x) - S(x).$$

В простейшем случае, когда рождаемость и смертность пропорциональны численности:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \alpha x - \beta x, \alpha - \beta = r, \\ \frac{dx}{dt} &= rx. \end{aligned} \tag{32.1}$$

Разделим переменные и проинтегрируем:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{rx} &= dt, \\ \ln x &= rt + C. \end{aligned}$$

Переходя от логарифмов к значениям переменной x и определяя произвольную постоянную C из начальных условий, получим экспоненциальную форму динамики роста.

$$\begin{aligned} x &= x_0 \exp(rt), \\ x_0 &= x|_{t=0}. \end{aligned} \tag{32.2}$$

График полученной функции (32.2) при положительных (размножение) и отрицательных (вымирание) значениях константы скорости роста представлен на слайде 4.1.

Слайд 4.1. Экспоненциальная форма динамики роста численности колонии микроорганизмов в соответствии с системой уравнений (32.1)

2) Вещество переходит в раствор.

Пусть количество вещества, переходящего в раствор, пропорционально интервалу времени и разности между максимально возможной концентрацией P и концентрацией x в данный момент времени:

$$\Delta x = (P - x)\Delta t.$$

В форме дифференциального уравнения этот закон выглядит в следующем виде:

$$\frac{dx}{dt} = k(P - x).$$

Разделим в этом уравнении переменные, и проинтегрируем:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{k(P - x)} &= dt; \\ -\ln(P - x) &= kt + C; \\ x &= P - C_1 e^{-kt}.\end{aligned}$$

Здесь C_1 - произвольная постоянная. Если $x|_{t=0} = 0$, то

$$C_1 = P, x = P(1 - e^{-kt}).$$

График этой функции представлен на слайде 4.2. – он представляет собой кривую с насыщением.

Слайд 4.2. Концентрация вещества x в зависимости от времени.

Лишь для ограниченных классов дифференциальных уравнений разработаны аналитические методы решения. Подробно они изучаются в курсах дифференциальных уравнений. Отметим основные из них:

1. Уравнения с разделяющимися переменными решаются в интегралах. К ним относятся оба приведенные выше примера.
2. Линейные дифференциальные уравнения.
3. Некоторые специальные виды уравнений.

Лекция 33. Модели роста популяции. Модель Мальтуса

Численность популяции может меняться во времени различным образом: расти, совершать колебания, падать, и причины этого могут быть различны. Здесь мы рассмотрим модели роста популяций и математический аппарат, позволяющий описывать динамику численности разных популяций.

1) Уравнения экспоненциального роста.

Всемирно известной математической моделью, в основу которой положена задача о динамике численности популяции, является классическая модель неограниченного роста – геометрическая прогрессия в дискретном представлении,

$$A_{n+1} = qA_n$$

или экспонента, – в непрерывном

$$\frac{dx}{dt} = rx. \quad (33.3)$$

Модель предложена Мальтусом в 1798 г. в его классическом труде «О законе роста народонаселения». Томас Роберт Мальтус (1766-1834) – известный английский демограф и экономист, обратил внимание на тот факт, что численность популяции растет по экспоненте (в геометрической прогрессии), в то время как производство питания растет со временем линейно (в арифметической прогрессии). Исходя из этого он сделал справедливый вывод, что рано или поздно экспонента обязательно «обгонит» линейную функцию, и наступит голод. На основании этих выводов Мальтус говорит о необходимости ввести ограничения на рождаемость, в особенности для беднейших слоев общества.

Обсуждению важности вывода Мальтуса для популяционной динамики великий Дарвин посвятил несколько страниц своего дневника, указывая, что поскольку ни одна популяция не размножается до бесконечности, должны существовать факторы, препятствующие такому неограниченному размножению. Среди этих факторов может быть нехватка ресурса (продовольствия), вызывающая конкуренцию внутри популяции за ресурс, хищничество, конкуренция с другими видами. Результатом является

замедление скорости роста популяции и выход ее численности на стационарный уровень.

График зависимости численности от времени в соответствии с законом экспоненциального роста изображен на слайде 4.3 а. На слайде 4.3 б. представлена зависимость скорости роста популяции (правая часть уравнения 3) от ее численности.

Слайд 4.3. Экспоненциальный рост. Зависимость скорости роста от численности (а) и численности от времени (б).

В соответствии с экспоненциальным законом изолированная популяция развивалась бы в условиях неограниченных ресурсов. В природе такие условия встречаются крайне редко. Примером может служить размножение видов, завезенных в места, где имеется много пищи и отсутствуют конкурирующие виды и хищники (кролики в Австралии).

2) Модель ограниченного роста.

Впервые системный фактор, ограничивающий рост популяции, описал Ферхюльст в уравнении логистического роста:

$$\frac{dx}{dt} = rx \left(1 - \frac{x}{K}\right). \quad (33.4)$$

Логистическое уравнение обладает двумя важными свойствами. При малых значениях x численность возрастает экспоненциально (как в уравнении (33.3)), при больших – приближается к определенному пределу K . Эта величина, называемая емкостью экологической ниши популяции, определяется ограниченностью пищевых ресурсов, мест для гнездования, многими другими факторами, которые могут быть различными для разных видов. Таким образом, емкость экологической ниши представляет собой системный фактор, который определяет ограниченность роста популяции в данном ареале обитания.

Уравнение (33.4) можно также переписать в виде:

$$\frac{dx}{dt} = rx - \delta x^2.$$

Здесь δ - коэффициент внутривидовой конкуренции (за пищевой ресурс, убежища и т. п.) Аналитическое решение уравнения (33.4) будет иметь вид:

$$x(t) = \frac{x_0 K \exp(rt)}{K - x_0 + x_0 \exp(rt)}.$$

Полученная формула описывает кинетическую кривую, то есть зависимость численности популяции от времени. Ход кинетических кривых для разных начальных условий представлен на рис. 4.

Проведем такое исследование уравнения. Легко видеть, что уравнение имеет два стационарных состояния:

$$\frac{dx}{dt} = 0 \Rightarrow x_1 = 0, x_2 = K.$$

Считая, что величина r – коэффициент естественной скорости роста популяции положительная; получаем, что $x_1 = 0$ – неустойчивая особая точка. стационарное решение уравнения $x = K$ соответствует устойчивому стационарному режиму существования популяции в ограниченной среде. Форма кривой скорости роста меняется в зависимости от вида популяции, однако во всех случаях наблюдается колоколообразная кривая, форма которой отражает общую природу зависимых от плотности изменений рождаемости и смертности всякий раз, когда возникает внутривидовая конкуренция.

3) Модель популяции с наименьшей критической численностью.

В рассмотренных моделях прирост численности (биомассы) популяции представлен линейным членом rx , пропорциональным численности. Строго говоря, это соответствует лишь тем популяциям, размножение которых происходит путем самооплодотворения (микроорганизмы). Если же в основе размножения лежит скрещивание, предполагающее встречи между особями разных полов одного и того же вида, то прирост будет тем выше, чем больше количество встреч между особями, а последнее пропорционально второй степени x . Таким образом, для разнополой популяции в условиях неограниченных ресурсов можно записать

$$\frac{dx}{dt} = rx^2.$$

Это уравнение хорошо описывает тот факт, что при низких плотностях популяций скорость размножения резко падает, так как вероятность встречи двух особей разных полов уменьшается при понижении плотности популяции пропорционально квадрату плотности. Однако при больших плотностях популяций скорость размножения лимитирует уже не число встреч особей противоположного пола, а число самок в популяции, формула, учитывающая эти оба эффекта, имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = a \frac{\beta x^2}{\beta + \tau x}. \quad (33.5)$$

В действительности плотность популяции не должна опускаться ниже некоторой критической величины. При падении плотности популяции ниже критической среднее время, в течение которого может состояться оплодотворение, становится больше времени жизни отдельной особи, точнее времени, в течение которого особь способна к размножению. В этом случае популяция вымирает. Этот эффект может быть учтен, если в формулу (33.5) ввести член, пропорциональный численности и описывающий смертность. Зависимость скорости роста популяции от ее численности при этом примет вид

$$\frac{dx}{dt} = a \frac{\beta x^2}{\beta + \tau x} - dx. \quad (33.6)$$

здесь dx описывает смертность, α, β - некоторые масштабные коэффициенты, τ - параметр, определяющий влияние соотношения самок и самцов. Уравнение (33.6) имеет два стационарных решения: $x = 0$ и $x = d\beta(\alpha\beta - d\tau) = L$. При начальных численностях $x_0 < L$ популяция вырождается, причем тем быстрее, чем меньше x_0 .

Величина нижней критической плотности L различна для разных видов. Наблюдения биологов показали, что это всего лишь одна пара особей на тысячу квадратных километров в случае ондатры и сотни тысяч особей для американского странствующего голубя. Заранее трудно было предугадать,

что столь многочисленный вид перешел через критическую границу своей численности и обречен на вырождение. Однако это произошло, несмотря на все усилия по охране этих птиц.

Для голубых китов критическая граница общей численности оказалась равной десяткам – сотням. Хищническое истребление этих гигантских животных привело к тому, что их осталось слишком мало в Мировом океане. И хотя охота на них запрещена, надежд на восстановление популяции голубых китов практически нет.

Наиболее общая формула, учитывающая как нижнюю границу численности, так и внутривидовую конкуренцию, имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = a \frac{\beta x^2}{\beta + \tau x} - dx - \delta x^2$$

При любых промыслах особый интерес представляет величина нижней критической границы, при переходе через которую популяция уже не сможет восстановиться. Модель позволяет дать некий методический рецепт определения не самой критической границы, но степени близости к ней численности вида.

4) Матричные модели популяций.

Пусть ресурсы питания не ограничены. Размножение происходит в определенные моменты времени t_1, t_2, \dots, t_n . Пусть популяция содержит n возрастных групп. Тогда в каждый фиксированный момент времени (например, t_0) популяцию можно охарактеризовать вектор-столбцом

$$X(t_0) = \begin{pmatrix} x_1(t_0) \\ x_2(t_0) \\ \dots \\ x_n(t_0) \end{pmatrix}$$

Вектор $X(t_1)$, характеризующий популяцию в следующий момент времени, например, через год, связан с вектором $X(t_0)$ через матрицу перехода L :

$$X(t_1) = LX(t_0)$$

Установим вид этой матрицы. Из всех возрастных групп выделим те, которые производят потомство. Пусть их номера будут $k, k+1, \dots, k+p$. Предположим, что за единичный промежуток времени особи i -й группы переходят в группу $i+1$, от групп $k, k+1, \dots, k+p$ появляется потомство, а часть особей от каждой группы погибает. Потомство, которое появилось за единицу времени от всех групп, поступает в группу 1.

$$x(t_1) = \sum_{i=k}^{k+p} a_i x_i(t_0) = a_k x_k(t_0) + a_{k+1} x_{k+1}(t_0) + \dots + a_{k+p} x_{k+p}(t_0)$$

Вторая компонента получается с учетом двух процессов. Первый – переход особей, находившихся в момент t_0 в первой группе, во вторую. Вторым процессом – возможная гибель части из этих особей. Поэтому вторая компонента $x_2(t_1) = \beta_1 x_1(t_0)$, $0 < \beta_1 < 1$. Аналогично получаются третья компонента $\beta_2 x_2(t_0)$ и все остальные.

Предположим, что все особи, находившиеся в момент времени t_0 в последней возрастной группе к моменту t_1 погибли. Поэтому последняя компонента вектора $X(t_1)$ составляется лишь из тех особей, которые перешли из предыдущей возрастной группы.

$$x_n(t) = \beta_{n-1} x_{n-1}(t), 0 < \beta_n < 1.$$

Коэффициенты для каждой группы имеют следующий смысл: a – коэффициент рождаемости, β – коэффициент выживания. Вектор численностей возрастных групп в момент времени t_1 представим в виде:

$$X(t_1) = \begin{pmatrix} x_1(t_1) \\ x_2(t_1) \\ \dots \\ x_n(t_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_k^{k+p} a_i x_i(t_0) \\ \beta_1 x_1(t_0) \\ \dots \\ \beta_{n-1} x_{n-1}(t_0) \end{pmatrix}$$

Вектор $X(t_1)$ получается умножением вектора $X(t_0)$ на матрицу

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & a_k & a_{k+1} & 0 & 0 \\ \beta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{n-1} & 0 \end{pmatrix}$$

По диагонали матрицы стоят нули, под диагональными элементами - коэффициенты выживания β , на первой строке стоят члены, характеризующие число особей, родившихся от соответствующих групп. Все остальные элементы матрицы равны нулю. Тогда

$$\begin{aligned} X(t_1) &= LX(t_0); \\ X(t_2) &= LX(t_1) = LLX(t_0) = L^2 X(t_0); \\ X(t_k) &= LX(t_{k-1}) = L^k X(t_0) \end{aligned}$$

Таким образом, зная структуру матрицы L и начальное состояние популяции – вектор-столбец $X(t_0)$ – можно прогнозировать состояние популяции в любой наперед заданный момент времени. Главное собственное число матрицы L определяет скорость, с которой размножается популяция, когда ее возрастная структура стабилизировалась.

Этот пример страдает тем же недостатком, что и модель Мальтуса экспоненциального роста: популяция может неограниченно расти. Более реалистическая модель должна учитывать, что все элементы матрицы L являются некоторыми функциями размера популяции.

5) Модель с использованием уравнения с запаздыванием.

В реальных системах всегда имеется некоторое запаздывание в регуляции численности, вызванное несколькими причинами. Развитие любой взрослой особи из оплодотворенного яйца требует определенного времени. Поэтому если какое-нибудь изменение внешних факторов, например, увеличение ресурсов, вызовет повышение продуктивности взрослых особей,

то соответствующее изменение численности произойдет лишь по прошествии времени T . Это означает, что уравнение

$$\frac{dx}{dt} = f(x)$$

где x - число взрослых особей в момент времени t следует заменить уравнением

$$\frac{dx}{dt} = f(x[t - T]).$$

Логистическое уравнение с запаздыванием может быть записано в виде:

$$\frac{dN}{dt} = rN(t)\left[1 - \frac{N(t - T)}{K}\right].$$

Уравнение с запаздыванием приводит к появлению колебательных режимов, неустойчивости в зависимости от параметров задачи. При этом даже небольшие запаздывания могут оказывать существенное влияние.

Лекция 34. Модели биологических систем, описываемые двумя дифференциальными уравнениями. Модели взаимодействия двух видов

Наиболее интересные результаты по качественному моделированию свойств биологических систем получены на моделях из двух дифференциальных уравнений, которые допускают качественное исследование с помощью метода фазовой плоскости. Рассмотрим систему двух автономных обыкновенных дифференциальных уравнений общего вида

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= P(x, y), \\ \frac{dy}{dt} &= Q(x, y).\end{aligned}\tag{34.1}$$

$P(x, y), Q(x, y)$ - непрерывные функции, определенные в некоторой области G евклидовой плоскости (x, y - декартовы координаты) и имеющие в этой области непрерывные производные порядка не ниже первого. Область G может быть как неограниченной, так и ограниченной. Если переменные x, y имеют конкретный биологический смысл (концентрации веществ, численности видов) чаще всего область G представляет собой положительный квадрант правой полуплоскости. Переменные x, y во времени изменяются в соответствии с системой уравнений (34.1), так что каждому состоянию системы соответствует пара значений переменных (x, y) . Обратно, каждой паре переменных (x, y) соответствует определенное состояние системы.

Рассмотрим плоскость с осями координат, на которых отложены значения переменных x, y . Каждая точка M этой плоскости соответствует определенному состоянию системы. Такая плоскость носит название *фазовой плоскости* и изображает совокупность всех состояний системы. Точка $M(x, y)$ называется изображающей или представляющей точкой. Пусть в начальный момент времени $t = t_0$ координаты изображающей точки $M_0(x(t_0), y(t_0))$. В каждый следующий момент времени t изображающая точка будет смещаться в соответствии с изменениями значений переменных $x(t), y(t)$. Совокупность точек $M(x(t), y(t))$ на фазовой плоскости, положение

которых соответствует состояниям системы в процессе изменения во времени переменных $x(t), y(t)$ согласно уравнениям (34.1), называется *фазовой траекторией*. Совокупность фазовых траекторий при различных начальных значениях переменных дает легко обозримый "портрет" системы. Построение *фазового портрета* позволяет сделать выводы о характере изменений переменных x, y без знания аналитических решений исходной системы уравнений (34.1).

В задаче построения фазовых траекторий полезно изучить

$$\frac{dy}{dx} = \frac{Q(x, y)}{P(x, y)}$$

Оно получается при делении первого уравнения (34.1) на второе. Решение этого уравнения $y = y(x, c)$, где c – постоянная интегрирования, дает семейство интегральных кривых, которые являются фазовыми траекториями системы (34.1) на плоскости x, y .

Для построения фазового портрета пользуются *методом изоклин*. На фазовой плоскости наносят линии, которые пересекают интегральные кривые под одним определенным углом. Уравнение изоклин имеет вид

$$A = \frac{Q(x, y)}{P(x, y)}$$

где A – определенная постоянная величина. Значение A представляет собой тангенс угла наклона касательной к фазовой траектории и может принимать значения от $-\infty$ до $+\infty$.

Особый интерес представляют главные изоклины

$$\frac{dy}{dx} = 0, P(x, y) = 0 \text{ - изоклина горизонтальной касательной,}$$

$$\frac{dy}{dx} = \infty, Q(x, y) = 0 \text{ - изоклина горизонтальной касательной}$$

Построив главные изоклины и найдя точку их пересечения (x, y) , координаты которой удовлетворяют условиям:

$$P(x, y) = 0, Q(x, y) = 0.$$

В результате находится точка пересечения всех изоклин фазовой плоскости, в которой направление касательных к фазовым траекториям неопределенно. Это – *особая точка*, которая соответствует *стационарному состоянию системы*.

Система (34.1) обладает столькими стационарными состояниями, сколько точек пересечения главных изоклин имеется на фазовой плоскости. Рассмотрим систему двух линейных уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= ax + by, \\ \frac{dy}{dt} &= cx + dy.\end{aligned}\tag{34.2}$$

Здесь a, b, c, d - некоторые константы, x, y - декартовы координаты на фазовой плоскости.

Общее решение будем искать в виде:

$$x = A \exp(\lambda t), y = B \exp(\lambda t).$$

Подставим эти выражения в исследуемое уравнение и сократим на $\exp(\lambda t)$. В результате получим

$$\begin{aligned}\lambda A &= aA + bB, \\ \lambda B &= cA + dB.\end{aligned}$$

Эта алгебраическая система уравнений с неизвестными A, B имеет ненулевое решение лишь в том случае, если ее определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных, равен нулю:

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая этот определитель, получим характеристическое уравнение системы:

$$\lambda^2 - (a + d)\lambda + (ad - bc) = 0.$$

Решение этого уравнения дает значения показателя $\lambda_{1,2}$, при которых возможны ненулевые для A и B решения. Эти значения суть

$$\lambda_{1,2} = \frac{a + d}{2} \pm \sqrt{\frac{(a + d)^2 - 4(ad - bc)}{4}}.$$

В зависимости от $\lambda_{1,2}$ может наблюдаться 6 типов фазовых траекторий.

1) Корни λ_1, λ_2 – действительны и одного знака.

Состояние равновесия типа узел при $\lambda_1, \lambda_2 < 0$ устойчиво по Ляпунову, так как изображающая точка по всем интегральным кривым движется по направлению к началу координат. Это *устойчивый узел*. Если же $\lambda_1, \lambda_2 > 0$, изображающая точка удаляется от начала координат. В этом случае особая точка – *неустойчивый узел*.

2) Корни λ_1, λ_2 – действительны и разных знаков.

В этом случае особая точка носит название «*седло*». Линии уровня вблизи горной седловины ведут себя подобно фазовым траекториям в окрестности седла. *Особая точка типа седла всегда неустойчива*.

3) Корни λ_1, λ_2 – комплексные сопряженные.

В этом случае особая точка, которая является асимптотической точкой всех интегральных кривых, имеющих вид спиралей, вложенных друг в друга, называется *фокусом*.

Пусть $\text{Re}(\lambda_1, \lambda_2) < 0$. Изображающая точка тогда непрерывно приближается к началу координат, не достигая его в конечное время. Это означает, что фазовые траектории представляют собой скручивающиеся спирали и соответствуют затухающим колебаниям переменных. Это – *устойчивый фокус*.

Если $\text{Re}(\lambda_1, \lambda_2) > 0$, то изображающая точка удаляется от начала координат, и мы имеем дело с *неустойчивым фокусом*.

Рассмотрим теперь случай, когда $\operatorname{Re}(\lambda_1, \lambda_2) = 0$. Таким образом через особую точку не проходит ни одна интегральная кривая. *Такая изолированная особая точка, вблизи которой интегральные кривые представляют собой замкнутые кривые, в частности, эллипсы, вложенные друг в друга и охватывающие особую точку, называется центром.*

Вид фазовых траекторий на плоскости x, y для этих шести случаев изображен на слайдах 4.4 – 4.6.

Слайды 4.4 – 4.6. Вид фазовых траекторий

Структуру фазовых траекторий можно определить на бифуркационной диаграмме. Введем обозначения:

$$\sigma = -(a + d); \Delta = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}.$$

Тогда характеристическое уравнение запишется в виде:

$$\lambda^2 + \sigma\lambda + \Delta = 0.$$

Рассмотрим плоскость с прямоугольными декартовыми координатами σ, Δ и отметим на ней области, соответствующие тому или иному типу состояния равновесия, который определяется характером корней характеристического уравнения

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\sigma \pm \sqrt{\sigma^2 - 4\Delta}}{2}.$$

Условием устойчивости состояния равновесия будет наличие отрицательной действительной части у λ_1 и λ_2 . Необходимое и достаточное условие этого – выполнение неравенств $\sigma > 0, \Delta > 0$. На слайде 4.7 этому условию соответствуют точки, расположенные в первой четверти плоскости параметров. Особая точка будет фокусом, если λ_1 и λ_2 комплексные. Этому условию соответствуют те точки плоскости, для которых $\sigma^2 - 4\Delta < 0$, т.е. точки между двумя ветвями параболы. Точки полуоси $\sigma = 0, \Delta > 0$ соответствуют состояниям равновесия типа центр. Аналогично, λ_1 и λ_2 -

действительны, но разных знаков, т.е. особая точка будет седлом, если $\Delta < 0$ и т.д. В итоге мы получим диаграмму разбиения плоскости параметров σ, Δ на области, соответствующие различным типам состояния равновесия.

Слайд 4.7. Бифуркационная диаграмма для системы линейных уравнений

Если коэффициенты линейной системы a, b, c, d зависят от некоторого параметра, то при изменении этого параметра будут меняться и величины σ, Δ . При переходе через границы характер фазового портрета качественно меняется. Поэтому такие границы называются бифуркационными – по разные стороны от границы система имеет два топологически различных фазовых портрета и, соответственно два разных типа поведения.

На рисунке видно, как могут проходить такие изменения. Если исключить особые случаи – начало координат, – то легко видеть, что седло может переходить в узел, устойчивый или неустойчивый при пересечении оси ординат. Устойчивый узел может перейти либо в седло, либо в устойчивый фокус, и т.д. Отметим, что переходы устойчивый узел – устойчивый фокус и неустойчивый узел – неустойчивый фокус не являются бифуркационными, так как топология фазового пространства при этом не меняется.

В качестве примера рассмотрим систему линейных химических реакций. Вещество X притекает извне с постоянной скоростью, превращается в вещество Y и со скоростью, пропорциональной концентрации вещества Y , выводится из сферы реакции. Все реакции имеют первый порядок, за исключением притока вещества извне, имеющего нулевой порядок. Схема реакций описывается системой уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= k_1 - k_2 x, \\ \frac{dy}{dt} &= k_2 x - k_3 y.\end{aligned}$$

Стационарные концентрации получим, приравняв правые части нулю:

$$\bar{x} = \frac{k_1}{k_2}, \bar{y} = \frac{k_1}{k_3}.$$

Рассмотрим фазовый портрет системы. Разделим второе уравнение системы на первое. Получим:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{k_2 x - k_3 y}{k_1 - k_2 x}.$$

Полученное уравнение определяет поведение переменных на фазовой плоскости. Построим фазовый портрет этой системы. Сначала нарисуем главные изоклины на фазовой плоскости.

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} = \infty, x = \frac{k_1}{k_2} & \text{ - изоклины вертикальных касательных,} \\ \frac{dy}{dx} = 0, x = \frac{k_2 x}{k_3} & \text{ - изоклины горизонтальных касательных} \end{aligned}$$

Особая точка (стационарное состояние) лежит на пересечении главных изоклин.

Характер устойчивости особой точки установим, пользуясь методом Ляпунова. Характеристический определитель системы имеет вид:

$$\begin{vmatrix} -k_2 - \lambda & 0 \\ k_2 & -k_3 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая определитель, получим характеристическое уравнение системы:

$$\lambda^2 + (k_2 + k_3)\lambda + k_2 k_3 = 0.$$

Корни этого уравнения

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left[-(k_2 + k_3) \pm \sqrt{(k_2 + k_3)^2 - 4k_2 k_3} \right],$$

оба действительны, так как дискриминант

$$D = (k_2 - k_3)^2$$

положителен при любых значениях параметров. \sqrt{D} всегда меньше, чем $k_2 + k_3$, т.е. корни характеристического уравнения оба отрицательны. Следовательно, стационарное состояние системы представляет собой устойчивый узел. При этом концентрация вещества X стремится к стационарному состоянию всегда монотонно, концентрация вещества Y может проходить через \min или \max . Колебательные режимы в такой системе невозможны.

Обобщенные модели взаимодействия двух видов

Было предложено большое число моделей, описывающих взаимодействие видов, правые части уравнений которых представляли собой функции численностей взаимодействующих популяций. Решался вопрос о выработке общих критериев, позволяющих установить, какого вида функции могут описать особенности поведения временного численности популяции, в том числе устойчивые колебания. Наиболее известные из этих моделей принадлежат Колмогорову и Розенцвейгу.

А.Н.Колмогоров рассмотрел обобщенную модель взаимодействия биологических видов типа хищник - жертва или паразит - хозяин. Модель представляет собой систему двух уравнений общего вида

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= k_1(x)x - L(x)y, \\ \frac{dy}{dt} &= k_2(x)y.\end{aligned}$$

В модель заложены следующие предположения:

- 1) Хищники не взаимодействуют друг с другом, т.е. коэффициент размножения хищников k_2 и число жертв L , истребляемых в единицу времени одним хищником, не зависит от y .
- 2) Прирост числа жертв при наличии хищников равен приросту в отсутствие хищников минус число жертв, истребляемых хищниками. Функции $k_1(x), k_2(x), L(x)$ - непрерывны и определены на положительной полуоси $x, y \geq 0$.

3) $\frac{dk_1}{dx} < 0$. Это означает, что коэффициент размножения жертв в отсутствие

хищника монотонно убывает с возрастанием численности жертв, что отражает ограниченность пищевых и иных ресурсов.

4) $\frac{dk_2}{dx} > 0, k_2(0) < 0$. С ростом численности жертв коэффициент размножения

хищников монотонно убывает с возрастанием численности жертв, переходя от отрицательных значений, (когда нечего есть) к положительным.

5) Число жертв, истребляемых одним хищником в единицу времени $L(x) > 0$; $L(0) = 0$.

Стационарные решения (их два или три) имеют следующие координаты:

$$(1) \quad x = 0, y = 0 - \text{седло};$$

$$(2) \quad x = A, y = 0 - \text{жертва без хищника},$$

A определяется из уравнения:

$$k_1(A) = 0.$$

Стационарное решение (2) – зависит от B , которое определяется из уравнения

$$k_2(B) = 0.$$

Если $B > A$, то решение (2) - устойчивый узел, если $B < A$ - седло. Кроме того, существует еще случай равновесия

$$(3) \quad x = B, y = C.$$

Этот случай соответствует гибели хищника и выживанию жертвы.

Величина C определяется из уравнений:

$$k_2(B) = 0, k_1(B)B - L(B)C = 0.$$

Решение (3) – фокус или узел, устойчивость которых зависит от знака величины σ

$$\sigma = -k_1(B) - k_1(B)B + L(B)C.$$

Если $\sigma > 0$, точка устойчива, если $\sigma < 0$ - точка неустойчива, и вокруг нее могут существовать предельные циклы.

Лекция 35. Гипотезы Вольтера. Модель хищник – жертва

При исследовании динамики двух или нескольких взаимодействующих популяций используются гипотезы Вольтера.

1. Пища либо имеется в неограниченном количестве, либо ее поступление с течением времени жестко регламентировано (ввод законов поступления пищи).
2. Особи каждого вида умирают так, что в единицу времени погибает постоянная доля существующих особей.
3. Хищные виды поедают жертв, причем в единицу времени количество съеденных жертв всегда пропорционально вероятности встречи особей этих двух видов, т.е. произведению количества хищников на количество жертв.
4. Если имеется пища в ограниченном количестве и несколько видов, которые способны ее потреблять, то доля пищи, потребляемой видом в единицу времени, пропорциональна количеству особей этого вида, взятому с некоторым коэффициентом, зависящим от вида (модели межвидовой конкуренции) - cx .
5. Если вид питается пищей, имеющейся в неограниченном количестве, прирост численности вида в единицу времени пропорционален численности вида.

$$\frac{dx}{dt} = cx.$$

6. Если вид питается пищей, имеющейся в ограниченном количестве, то его размножение регулируется скоростью потребления пищи, т.е. за единицу времени прирост пропорционален количеству съеденной пищи (Π).

$$\frac{dx}{dt} = c\Pi.$$

В соответствии с гипотезами Вольтерра взаимодействие двух видов популяции с численностью x_1 и x_2 , могут быть описаны уравнениями:

$$\frac{dx_1}{dt} = a_1 x_1 + b_{12} x_1 x_2 - c_1 x_1^2,$$

$$\frac{dx_2}{dt} = a_2 x_2 + b_{21} x_1 x_2 - c_2 x_2^2,$$

здесь параметры a_i - константы собственной скорости роста видов, c_i - константы самоограничения численности (внутривидовой конкуренции), связано с запасами пищи, b_{ij} - константы взаимодействия видов, ($i, j = 1, 2$). Модель может быть расширена на $3 \dots n$ видов. Знаки коэффициентов b_{ij} определяют тип взаимодействия.

В зависимости от знаков b_{ij} вводится классификация по механизмам взаимодействия. Классификация в общем случае является весьма обширной. Поскольку взаимодействие может происходить в различных средах – борьба за пищу, за свет, за сферу обитания – поэтому вводится классификация по результатам взаимодействия. Согласно этой классификации, оценивать взаимоотношения следует как положительные, отрицательные или нейтральные в зависимости от того, возрастает, убывает или остается неизменной численность одного вида в присутствии другого вида.

Рассмотрим характерные типы взаимодействия типов.

- 1) Симбиоз (+ +), ($b_{12}, b_{21} > 0$) – форма тесного сожительства, в котором виды поддерживают друг друга.
- 2) Комменсализм (+ 0), ($b_{12} > 0, b_{21} = 0$) – форма сожительства, при которой один организм живет за счет другого, не причиняя ему вреда.
- 3) Хищник – жертва (+ –), ($b_{12} > 0, b_{21} < 0$) – форма сожительства, при которой один организм (хищник) живет, уничтожая другой (жертву).
- 4) Аменсализм (0 –), ($b_{12} = 0, b_{21} < 0$) – форма взаимодействия, при которой один организм подавляет другой без собственного прироста непосредственно от взаимодействия.
- 5) Конкуренция (– –), ($b_{12}, b_{21} < 0$) – форма взаимодействия, при которой организмы подавляют друг друга.
- 6) Нейтрализм (0 0), ($b_{12} = b_{21} = 0$) – организмы не оказывают влияния друг на друга.

Рассмотрим основные типы взаимодействий.

1) *Модель межвидовой конкуренции.* Уравнения конкуренции имеют вид:

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= x_1(a_1 - b_{12}x_2 - c_1x_1), \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_2(a_2 - b_{21}x_1 - c_2x_2).\end{aligned}\tag{35.1}$$

Стационарные решения системы:

- 1) $\bar{x}_1 = 0, \bar{x}_2 = 0$ - неустойчивый узел,
 2) $\bar{x}_1 = 0, \bar{x}_2 = \frac{a_2}{c_2}$ - седло при $a_1 > \frac{b_{12}}{c_2}$, устойчивый узел при $a_1 < \frac{b_{12}}{c_2}$.

Последнее условие означает, что вид вымирает, если его собственная скорость роста меньше некоторой критической величины.

- 3) $\bar{x}_1 = \frac{a_1}{c_1}, \bar{x}_2 = 0$ - седло при $a_2 > \frac{b_{21}}{c_1}$, устойчивый узел при $a_2 < \frac{b_{21}}{c_1}$.
 4) $\bar{x}_1 = \frac{a_1c_2 - a_2b_{12}}{c_1c_2 - b_{12}b_{21}}, \bar{x}_2 = \frac{c_1b_{12} - b_{21}a_1}{c_1c_2 - b_{12}b_{21}},$

Последнее стационарное состояние характеризует сосуществование двух конкурирующих видов и представляет собой устойчивый узел в случае выполнения соотношения:

$$\frac{a_1b_{12}}{c_2} < a_1 < \frac{a_2c_1}{b_{21}}$$

Отсюда в случае одинаковой скорости роста имеем неравенство:

$$b_{12}b_{21} < c_1c_2,$$

позволяющее сформулировать условие сосуществования видов:

Произведение коэффициентов межпопуляционного взаимодействия меньше произведения коэффициентов внутри популяционного взаимодействия.

Действительно, пусть естественные скорости роста двух рассматриваемых видов a_1, a_2 одинаковы. Тогда необходимым для устойчивости условием будет

$$c_2 > b_{12}, \quad c_1 > b_{21},$$

то есть увеличение численности одного из конкурентов сильнее подавляет его собственный рост, чем рост другого конкурента.

Поведение фазовых траекторий системы дает наглядное представление о возможных исходах конкуренции. Приравняем нулю правые части системы уравнений (35.1):

$$\begin{aligned} x_1(a_1 - c_1 x_1 - b_{12} x_2) &= 0, \\ x_2(a_2 - c_2 x_2 - b_{21} x_1) &= 0. \end{aligned}$$

При этом получим уравнения для главных изоклин системы

$$\begin{aligned} x_2 = -\frac{b_{21} x_1}{c_2} + \frac{a_2}{c_2}, \quad x_2 = 0 & \text{ - уравнения изоклин горизонтальных касательных,} \\ x_2 = -\frac{c_1 x_1}{b_{12}} + \frac{a_1}{b_{12}}, \quad x_1 = 0 & \text{ - уравнения изоклин вертикальных касательных} \end{aligned}$$

Точки попарного пересечения изоклин вертикальных и горизонтальных касательных систем представляют собой стационарные решения системы уравнений (35.1).

Модель конкуренции имеет недостатки, в частности, из нее следует, что сосуществование двух видов возможно лишь в случае, если их численность ограничивается разными факторами, но модель не дает указаний, насколько велики должны быть различия для обеспечения длительного сосуществования. В то же время известно, что для длительного сосуществования в изменчивой среде необходимо различие, достигающее определенной величины. Внесение в модель стохастических элементов (например, введение функции использования ресурса) позволяет количественно исследовать эти вопросы.

2) *Модель хищник – жертва.* Для взаимоотношений типа хищник - жертва или паразит - хозяин система уравнений будет иметь вид:

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= x_1(a_1 - b_{12}x_2 - c_1x_1), \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_2(a_2 + b_{21}x_1 - c_2x_2).\end{aligned}$$

Здесь, в отличие от (35.1) знаки b_{12} и b_{21} - разные. Как и в случае конкуренции возможны следующие стационарные состояния

- 1) $\bar{x}_1 = 0, \bar{x}_2 = 0$ - неустойчивый узел,
- 2) $\bar{x}_1 = 0, \bar{x}_2 = \frac{a_2}{c_2}$ - выживание только хищника (если у него имеются и другие источники питания)
- 3) $\bar{x}_1 = \frac{a_1}{c_1}, \bar{x}_2 = 0$ - возможно выживание только жертвы.
- 4) $\bar{x}_1 = \frac{a_1c_1 - a_2b_{12}}{c_1c_2 + b_{12}b_{21}}, \bar{x}_2 = \frac{a_2c_1 + a_1b_{21}}{c_1c_2 + b_{12}b_{21}}$ - возможно сосуществование обоих видов.

Рассмотрим отдельно последний вариант. Точка 4 в зависимости от коэффициентов может быть устойчивым узлом, устойчивым фокусом либо центром. Изоклины горизонтальных касательных представляют собой прямые

$$x_2 = \frac{b_{21}x_1}{c_2} + \frac{a_2}{c_2}, x_2 = 0,$$

а изоклины вертикальных касательных – прямые

$$x_2 = -\frac{c_1x_1}{b_{12}} + \frac{a_2}{b_{12}}, x_1 = 0.$$

Стационарные точки лежат на пересечении изоклин вертикальных и горизонтальных касательных.

Недостаток этой модели следующий – не наблюдается незатухающих колебаний при внутривидовой конкуренции.

Лекция 36. Классификация экономических моделей. Особенности применения метода математического моделирования в социально-экономических исследованиях

1. Основные задачи

1. Анализ экономических объектов и процессов. Исследование линейности, монотонности выявление зависимостей и влияющих факторов. Построение интерполяционных формул, экстраполяция, трендовый анализ.
2. Экономическое прогнозирование, предвидение развития экономических процессов.
3. Выработка управленческих решений.

2. Особенности экономических систем

1. В экономических системах присутствует тесная связь между элементами, входящих в систему. В результате общий эффект воздействия может принимать сумму эффектов, действующих независимо на каждый элемент системы.

Поэтому экономические системы следует рассматривать и моделировать в целом.

2. Массовый характер экономических явлений и процессов. Т.е. экономические закономерности не проявляются на небольшом числе наблюдений, на коротком промежутке времени. Поэтому моделирование должно проводиться на значительном промежутке времени, либо в массовых процессах.
3. Динамичность экономических процессов. Параметры и структуры экономических систем подвержены влиянию внешних факторов.
4. Случайность и неопределенность экономических явлений. Экономические явления и процессы носят вероятностный характер.
5. Невозможно изолировать протекающие в экономической системе явления и процессы от влияния окружающей среды.

3. Этапы моделирования

1. Постановка экономической проблемы и ее анализ. Выделение основных свойств объекта. Характер и структура взаимодействий элементов. Сформулировать гипотезу, описав поведение системы.
2. Построение экономической модели. Формализация экономической проблемы.
 - Определение типа модели.
 - Запись уравнений.
 - Определение диапазона параметров.
 - Адекватность модели.
3. Математический анализ модели. Доказательство существования и единственности решения. Метод исследования уравнений.
4. Подготовка исходной информации.
5. Численное решение.
6. Анализ численных результатов и их применение.

4. Классификация экономических моделей

1. По целевому назначению.
 - теоретико-аналитические, для изучения общих свойств и закономерностей экономических процессов;
 - прикладные, для решения конкретных экономических задач, прогнозирование и управление.
2. По степени агрегирования объектов.
 - макроэкономические процессы, экономика в целом;
 - микроэкономические процессы, отдельные экономические структурные элементы.
3. По предназначению.
 - балансовые модели, выражают требование соответствия наличия ресурсов и их использования;
 - трендовые модели, развитие моделируемой экономической системы выражается через основные показатели.
 - оптимизирующие модели, выбор наилучшего варианта из имеющихся.
 - имитационные, для имитации динамики системы.
4. По типу информации.

- аналитические, используется априорная информация;
- идентифицируемые, используется экспериментальная информация.

5. По учету фактора времени.

- статистические;
- динамические.

6. По учету фактора неопределенности.

- детерминированные модели, результаты однозначно определяются воздействием;
- стохастические (вероятностные), результаты формируются под действием случайных факторов.

7. По характеру математического аппарата.

- математические модели линейного (нелинейного) программирования;
- математические модели массового обслуживания;
- модели сетевого планирования и управления.

Лекция 37. Модель рекламной компании

Организация рекламирует товар (услугу). Предполагается, что прибыль от продажи товара должна покрывать затраты на рекламу. В начале процесса расходы превышают прибыль, т.к. малая часть потребителей информирована. При увеличении числа продаж растет прибыль. При насыщении рынка реклама не нужна.

Основные предположения и обозначения:

N - число информированных клиентов, которые готовы купить товар;

N_0 - общее число потенциальных потребителей.

Главное предположение: скорость изменения со временем числа потребителей $\left(\frac{dN}{dt}\right)$ пропорциональна числу потребителей, не знающих о товаре

$$\frac{dN}{dt} = (N_0 - N)\alpha_1(t),$$

где N зависит от t , $\alpha_1(t) > 0$ - характеризует интенсивность рекламной компании (затраты на рекламу).

Кроме того, узнавшие о товаре потребители распространяют информацию. Их вклад определяется

$$\alpha_2(t)N(N_0 - N),$$

$\alpha_2(t)$ - степень общения потребителей. Тогда уравнение имеет вид:

$$\frac{dN}{dt} = (\alpha_1(t) + \alpha_2(t)N)(N_0 - N). \quad (37.1)$$

На систему влияют два фактора $\alpha_1(t)$ и $\alpha_2(t)N$. Если $\alpha_1 \gg \alpha_2 N$ - то быстрый рост, если $\alpha_1 \ll \alpha_2 N$ - то медленный рост.

Уравнение логистической кривой $\frac{dN}{dt} = N(N_0 - N)$, медленно выходит на стационарное значение.

Задачи: Моделирование позволяет оценить затраты на рекламу и в необходимое время прекратить, по мере насыщения рынка.

При этом модель лишена недостатка логистического уравнения $\frac{dN}{dt} = N(N_0 - N)$, при $N_{t=0} = 0$, логистическое уравнение дает решение $N = 0 \equiv \text{const}$. Модель (37.1) при $N_{t=0}$ имеет вид

$$\frac{dN}{dt} = \alpha_1(t)N_0, \quad (37.2)$$

т.е. в начальный момент население не освещено о товаре, что позволяет быстрее исследовать динамику на начальном этапе.

Решение уравнения (37.2) имеет вид:

$$N(t) = N_0 \int_0^t \alpha_1(t) dt, \quad (37.3)$$

и начальное условие $N_{t=0} = 0$. Используя (37.3) можно вывести соотношение между издержками на рекламу и прибылью на начальном этапе.

Пусть p - величина прибыли от единичной продажи. Каждый покупатель приобретает одну единицу товара. Положим S - стоимость элементарного действия рекламы. Тогда суммарная прибыль:

$$P = pN(t) = pN_0 \int_0^t \alpha_1(t) dt. \quad (37.4)$$

$S = s \int_0^t \alpha_1(t) dt$ - суммарные затраты на рекламу. Прибыль превосходит издержки при $P > S$, т.е. $pN_0 > S$. Это выражение справедливо только на самом начальном этапе, когда $N \ll N_0$. В действительности, на начальном этапе реклама убыточна.

Однако здесь начинает действовать нелинейность роста N за счет использования неучтенных факторов $\alpha_2(t)N$.

Рассмотрим это на примере постоянных коэффициентов α_1 и α_2 в уравнении (37.1).

Замена $L = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} + N$.

Получим уравнение:

$$\begin{aligned}\frac{dL}{dt} &= \alpha_2 L (L_0 - L), \\ L_0 &= \frac{\alpha_1}{\alpha_2} + N_0.\end{aligned}\tag{37.5}$$

Решение (37.4) имеет вид:

$$L(t) = L_0 \left[1 + \left(L_0 \frac{\alpha_1}{\alpha_2} - 1 \right) \exp(-L_0 \alpha_2 t) \right]^{-1}, \tag{37.6}$$

при этом начальное условие $L_{t=0} = \frac{\alpha_1}{\alpha_2}$.

Из (37.5), (37.6) видно, что производная $\frac{dN}{dt}$ при $t > 0$ растет в случае $L_0 > \frac{\alpha_1}{\alpha_2}$, что выполняется согласно условию замены.

Максимум производной достигается при $L = \frac{L_0}{2}$ (определяется через экстремум функции) или $N = \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + N_0 \right)$, можно определить $t_{эф}$ из (37.6).

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{\max} = \{из 4\} = \alpha_2 \frac{L_0^2}{4} = \alpha_2 \frac{1}{4} \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + N_0 \right)^2$$

В этот период времени можно оценить текущую прибыль (прибыль в единицу времени)

$$P_m = p \frac{dN}{dt} = \frac{1}{4} p \alpha_2 \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + N_0 \right)^2.$$

Начальная текущая прибыль согласно (37.4) $P_0 = p \left(\frac{dN}{dt} \right)_{t=0} = \alpha_1 N_0$. Можно оценить разницу между текущей и начальной прибылью:

$$P_m - P_0 = \frac{p}{4} \left(\frac{\alpha_1}{\sqrt{\alpha_2}} - \sqrt{\alpha_2} N_0 \right)^2.$$

Видно, что разница существенная за счет $\sqrt{\alpha_2}$. После прохождения максимальной прибыли, доходность рекламной компании падает. Так как при насыщении рынка при $L \rightarrow L_0$ уравнение (37.5) можно записать в виде:

$$\frac{dL}{dt} = \alpha_2 L_0 (L_0 - L).$$

Решение этого уравнения слабо зависит от времени приближаясь при $t \rightarrow \infty$ к L_0 , т.е. в единицу времени появляется малое число новых покупателей и прибыль не покрывает издержки на рекламу.

Лекция 38. Модель равновесия рыночной экономики. Модель экономического роста

1. Модель равновесия рыночной экономики

В экономическом процессе занято много участников. Каждый из участников действует в собственных интересах.

- извлечение прибыли;
- улучшение условий труда;
- минимизация риска;
- экономия ресурсов; и т.д.

Простейший вариант такой экономической системы – экономика с совершенной конкуренцией, когда каждый участник мал и не оказывает влияния на уровень производства, цены и других экономических показателей. В результате такого экономического взаимодействия складывается некоторое состояние экономики, которое называется *равновесным*, когда производство товаров и услуг согласованно с общим спросом на них. Таким образом можно сформулировать балансовую задачу.

Балансовая задача: определить условия равновесного состояния экономики и равновесные рыночные цены.

Модель равновесия рыночной экономики строится при следующих предположениях:

1. Современная рыночная конкуренция. Отсутствие крупных производственных корпораций или объединений работников которые могут регулировать условия для всей системы.

2. Неизменность производственных возможностей системы: оборудование, производственная мощность и технологии не меняются со временем либо известны законы изменения.

3. Не изменение во времени экономических критериев партнеров:

- предприниматели не пытаются увеличить прибыль;
- рабочие – зарплату;
- инвесторы – процент дохода от ценных бумаг.

В процессе моделирования рассматриваются некоторые фиксированные условия. В наших моделях исследуется возможность наличия равновесного состояния и определяются экономические показатели системы.

Основные показатели:

1. Национальный доход. Пусть Y -продукт, произведенный в единицу времени. Этот продукт вырабатывается производственными секторами экономики; его величина задается функцией F .

F зависит от – количества и качества ресурсов;

– состава производственных фондов

– числа занятых работников R .

2. R - второй показатель. В соответствии с предположением два:

$$Y = F(R), \quad (38.1)$$

т.е. ресурсы и производственные фонды фиксированные.

$$F(R): F(0) = 0$$

$$F(R) > 0 \text{ при } R > 0$$

$$F(R) < 0 \text{ при } R < 0.$$

Функция $F(R)$ обладает свойством насыщения, т.е. с ростом R выпуск растет медленнее. Таким образом уравнение (38.1) дает связь между рынками труда R и продукта Y .

3. Заработная плата s равна стоимости продукта, которая была бы потеряна, при уменьшения занятости на одну единицу.

$$s = \Delta Y^{(1)} p,$$

где $\Delta Y^{(1)}$ - количество продукта, потерянное при уменьшении занятости на единицу, p - цена продукта. Если занятость изменится на ΔR , то

$$\Delta Y p = s \Delta R, \quad (38.2)$$

где $\Delta Y = \Delta Y^{(1)} \Delta R$ - стоимость, которая образуется умножением числа работников на ΔR . Равенство (38.2) можно записать в дифференциальной форме

$$\frac{dY}{dR} = \frac{s}{p}$$

или с учетом (38.1)

$$F'(R) = \frac{s}{p}. \quad (38.3)$$

Учитывая, что $F(R)$ задана, а следовательно и $F'(R)$ задана, то при известных s и p из (38.3) можно найти уровень занятости R , а из (38.1) можно найти величину продукта Y . Этот уровень соответствует числу работников, которые согласны трудиться при таких зарплатах и условиях труда. Предполагается, что всегда достаточное количество согласных работать на существующих условиях.

4. Предложение труда не сдерживает производство. Число занятых определяется спросом на труд со стороны производства.

5. Заработная плата S в модели считается заданной. Она определяется результате компромисса между работодателями и работниками.

Далее рассмотрим финансовый рынок. *Предположение:* произведенный продукт тратится на потребление и сбережение $Y = S + \omega$, где ω - потребляемая часть (не возвращается в экономику), S - сберегаемая часть (возвращается в экономику). Определим соотношение между S и ω .

6. Потребляемая часть зависит от самого выпуска

$$\omega = \omega(Y).$$

При этом $\omega(Y)$ обладает свойством насыщения, т.е. чем больше выпуск, тем меньше доля Y тратится на потребление и больше доля сбережения.

$\frac{d\omega}{dY} = c(Y)$ - склонность к потреблению, $0 < c < 1$ ($d = 1 - c$ - склонность к накоплению). Тогда сберегаемая часть

$$S = Y - \omega(Y), \quad (38.4)$$

S - вкладывается инвесторами в экономику с целью получить инвестиционный доход. Предполагается, что инвестиции эквивалентны отложенному потреблению и определяются нормой банковского процента r , r - еще один показатель экономики. Т.е. сделав инвестиции в размере A и

получив через год доход $D = Fr$ снова может использовать эти средства для потребления (инвестиций).

Спрос на инвестиции задается функцией $A(r)$: $A'(r) < 0$ при $0 < r < r_1$ и $A'(r) > 0$ при $r \geq r_1$, т.е. при большой норме продукта инвестиции отсутствуют.

В условиях равновесия экономики предложение сберегаемой части продукта S сбалансировано со спросом на инвестиции

$$S(Y) = A(r)$$

Или с учетом (38.4)

$$Y - \omega(Y) = A(r). \quad (38.5)$$

7. О денежной массе.

Операционный спрос – определяется количеством денег, которые необходимы для покупки товара Y .

Если цена продукта p , время обращения τ , то операционный спрос равен τpY .

Спекулятивный спрос – связан с величиной процента r . Если норма процента высока, то деньги хранятся в банке, т.к. риск меньше. Если процентная ставка низкая, то спекулятивный спрос увеличивается, т.к. владельцы желают иметь больше денег на руках для инвестиций.

Спекулятивный спрос задается функцией $I(r)$, $I'(r) < 0$ при $r > r_2$, $\lim_{r \rightarrow r_2} I(r) = \infty$. Когда финансовый рынок находится в равновесии имеем баланс денег в системе:

$$z = \tau pY + I(r),$$

таким образом получим систему уравнений:

$$y = F(r)$$

$$F'(r) = \frac{s}{p},$$

$$Y - \omega(Y) = A(r),$$

$$z = \tau pY + I(r).$$

Параметры системы s , z и τ ; известные функции - F , F' , ω , A , I ;
выходные данные : Y - выпуск продукта,

R - занятость,

p - цена продукта,

r - норма прибыли.

2. Модель экономического роста

Когда экономика растет, число работающих увеличивается. В простейшем случае, считается, что темп прироста занятых пропорционален числу работников:

$$\frac{dR}{dt} = \alpha R(t).$$

Тогда $R(t) = R_0 e^{\alpha t}$ - известная функция, α , $R_0 = R_{t=0}$ - известные.

Работники производят национальный продукт

$$Y(t) = \omega + A, \quad (38.6)$$

где ω - потребление, A - накопление. Здесь A - возвращается в экономику для создания новых мощностей. Мощность $M(t)$ - максимально возможный выпуск продукта.

$$Y(t) = M(t)f(x(t)), \quad (38.7)$$

где $x(t) = R(t)/M(t)$ - количество работающих в единицах мощности,

$f(x)$: $f(0) = 0$, $f' > 0$ - выпуск растет с ростом занятости, $f'' < 0$ - насыщение.

Функция $f(x)$ определена на интервале $0 \leq x \leq x_m$, $x_m = R_m/M$; $R_m(t)$ - число рабочих мест в количестве при мощности $M(t)$.

Если все места заполнены, то выпуск $Y(t) = M(t)$, а $f(x_m) \equiv 1$.

Основная задача экономического роста – определение соотношения между накоплением и потреблением.

Критерий оптимальности:

Душевое потребление – количество продукта потребляемое одним работником.

$$c(t) = \frac{\omega(t)}{R(t)},$$

т.е. следует стремиться к $\max(c(t))$.

Сбережений продукта $A(t)$ расходуется на создание новой мощности $A(t) = aI(t)$, $a = \text{const} > 0$ - количество продукта для создания единицы новой мощности, $I(t)$ - число единиц новой мощности.

Темп выбираемой мощности предполагается, пропорциональным величине самой мощности $\beta M(t)$; $\beta = \text{const} > 0$ - коэффициент выбытия. Тогда

$$\frac{dM}{dt} = I(t) - \beta M(t). \quad (38.8)$$

Уравнения (38.6)-(38.8) содержат четыре величины $Y(t)$, $\omega(t)$, $M(t)$, $I(t)$. Для замыкания модели полагается, что скорость введения новой мощности пропорционален самой мощности, т.е.

$$I(t) = \gamma M(t), \quad \gamma = \text{const} > 0, \quad \gamma > \beta.$$

Тогда решение (38.8) будет иметь вид $M(t) = M_0 e^{(\lambda - \beta)t}$.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Сибирский Федеральный Университет

Основная литература

1. Х. Гулд, Я. Тобочник Компьютерное моделирование в физике. Т. 1, 2. М. Мир. 1990
2. А. А. Самарский, А. П. Михайлов Математическое моделирование. Москва: Физматлит, 2001. 320 с.
3. А. Б. Горстко, Г. А. Угольницкий Введение в моделирование эколого-экономических систем – Ростов, РГУ, 1990
4. Г. Ю. Ризниченко Лекции по математическим моделям в биологии. Часть 1. Москва, 2002.
5. А. В. Недорезов Курс лекций по математической экологии. Новосибирск, 1997.
6. Е. В. Бережная, В. И. Бережной Математические методы моделирования экономических систем. – М., Финансы и статистика, 2005.
7. В. Е. Зализняк, Основы научных вычислений. Москва-Ижевск, РХД, 2006
8. В. Е. Зализняк, Основы вычислительной физики. Часть 2: Введение в методы частиц, Москва-Ижевск, РХД, 2006
9. В. Е. Зализняк, Основы вычислительной физики. Часть 1: Введение в конечно-разностные методы, Москва-Ижевск, РХД, 2004
10. Дж. Е. Марсден, А. Дж. Чорин, Математические основы механики жидкости, Москва-Ижевск, РХД, 2004.
11. А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003
12. П. Я. Полубаринова-Кочина Теория движения грунтовых вод. Изд. 2-е, М.: Наука, 1977.
13. М. И. Рабинович, Д. И. Трубецков Введение в теорию колебаний и волн. М.: Наука, 1984.
14. В. Говорухин, Б. Цибулин Компьютер в математическом исследовании
15. О. В. Бартеньев Современный Фортран
16. Численное решение многомерных задач газовой динамики. Под. ред. С. К. Годунова, М.: Наука, 1976

Дополнительная литература

1. А.Д. Мышкис Элементы теории математических моделей. – М., УРСС. 2004.
2. М.Г. Хубларян Водные потоки: модели течений и качества вод суши. – М., Наука, 1991.
3. К. Флетчер Вычислительные методы в динамике жидкости. – М., Мир, 1991.
4. А.А. Петров, И.Г. Пospelов, А.А. Шананин Опыт математического моделирования экономики, – М.: Энергоиздат, 1996, 544 с.