

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники»

Кафедра «Вычислительные методы и программирование»

А.К. Сеницын

**СОВРЕМЕННЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ.
ПРОЕКЦИОННО-СЕТОЧНЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

Конспект лекций
для аспирантов и магистрантов БГУИР

МИНСК 2004

УДК 519.6 (075.8)

ББК 22.19 я 73

С 38

Р е ц е н з е н т:

зав. кафедрой информатики БГУИР,
доктор физ.-мат. наук, профессор Л.И. Минченко

Синицын А.К.

С 38 Современные информационные технологии. Проекционно-сеточные методы решения уравнений математической физики: Конспект лекций для аспирантов и магистрантов БГУИР / А.К.Синицын. - Мн.: БГУИР, 2004. - 55 с.

ISBN 985-444-693-X

Настоящее пособие содержит семь лекций, представляющих введение в проекционно-сеточные методы решения уравнений математической физики. Обсуждаются основные постановки задач для уравнений математической физики. Приводятся основы теории метода сеток и основные конечно-разностные схемы для решения как задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений, так и краевых задач для уравнений в частных производных. Рассматриваются основы теории проекционных методов решения краевых задач для уравнений математической физики. Приводятся основные понятия теории аппроксимации финитными функциями. Формулируется понятие метода конечных элементов как синтез проекционного и сеточного методов с использованием базиса из финитных функций. Разбирается пример реализации метода конечных элементов для решения краевой задачи на треугольной сетке.

УДК 519.6 (075.8)
ББК 22.19 я 73

ISBN 985-444-693-X

© Синицын А.К., 2004
© БГУИР, 2004

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
1. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ.....	5
1.1. Как исследуются физические явления и решаются задачи.....	5
1.2. Как оценивается погрешность вычислений?.....	6
1.3. Откуда возникают погрешности расчетов?.....	8
1.4. Итерационные методы решения задач.....	9
2. УРАВНЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ.....	12
3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ.....	15
3.1. Определение дифференциальных уравнений.....	15
3.2. Постановка задач для обыкновенных ДУ.....	15
3.3. Постановка задач для ДУ в частных производных (ДУЧП).....	17
3.4. Как получают дифференциальные уравнения.....	19
3.5. Подобие физических явлений, безразмерные переменные.....	20
4. МЕТОД СЕТОК.....	24
4.1. Теоретические основы метода сеток.....	24
4.2. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений.....	28
4.2.1. Задача Коши.....	28
4.2.2. Решение краевой задачи для линейной системы парных дифференциальных уравнений.....	33
4.3. Решение дифференциальных уравнений в частных производных.....	35
4.3.1. Одномерное нестационарное уравнение теплопроводности.....	35
4.3.2. Задача Дирихле для двухмерного уравнения Пуассона.....	36
5. ПРОЕКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ.....	39
5.1. Теоретические основы проекционных методов.....	39
5.2. Примеры решения задач методом Галеркина.....	42
5.2.1. Одномерная краевая задача Дирихле.....	42
5.2.2. Двухмерная краевая задача Дирихле.....	43
5.2.3. Сведение задачи для ДУ в частных производных к решению задачи для системы ОДУ методом Канторовича.....	44
6. ФИНИТНЫЕ ФУНКЦИИ И АППРОКСИМАЦИЯ.....	46
6.1. Базис из финитных функций.....	46
6.2. Теория аппроксимации финитными функциями Стренга-Фикса.....	47
6.3. В-сплайн и некоторые наиболее часто используемые базисы.....	49
6.4. Двухмерные финитные функции на треугольной сетке.....	53
7. МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.....	55
7.1. Связь метода сеток и метода конечных элементов.....	55
7.2. Пример решения одномерной задачи.....	55
7.3. Решение двухмерной задачи на треугольной сетке.....	56
ЛИТЕРАТУРА.....	59

ВВЕДЕНИЕ

Дисциплина «*Информационные технологии*» (ИТ), представляющая собой совокупность знаний о способах и средствах достижения целей с помощью компьютерной техники, в настоящее время выдвигается в один ряд с такими общепознавательными дисциплинами, как математика, физика, философия.

Понятие «информационные технологии» очень широкое и охватывает практически все, что связано с применением вычислительной техники (ВТ):

- теоретические основы информатики (т.е. теория алгоритмов и их реализация для получения, хранения, защиты, поиска, обработки, преобразования и передачи информации);
- элементы и устройства ВТ и систем управления;
- телекоммуникационные системы и компьютерные сети;
- вычислительные машины, системы и сети;
- технологии программирования;
- математическое и программное обеспечение;
- математическое моделирование, численные методы, методы оптимизации.

В настоящее время ИТ – одна из самых динамично развивающихся дисциплин. Совершенствуются элементная база и архитектура компьютеров, развиваются языки и технологии программирования, создаются новые пакеты прикладных программ на основе современных математических методов моделирования и оптимизации.

Задача курса «Современные информационные технологии» – дать магистрантам и аспирантам представление о возможностях современных программных средств ПК, а также освежить и, возможно, расширить познания о математическом моделировании сложных практических задач на ЭВМ.

Курс, читаемый для аспирантов и магистрантов БГУИР, состоит из 3 разделов:

1. Современные инструментальные средства ИТ.
2. Численные методы и оптимизация.
3. Проекционно-сеточные методы решения уравнений математической физики.

Настоящее пособие содержит семь лекций по разделу 3, представляющих введение в проекционно-сеточные методы решения уравнений математической физики.

1. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

1.1. Как исследуются физические явления и решаются задачи

Имеется два метода решения инженерных и физических задач: экспериментальный и теоретический.

Экспериментальный метод предполагает создание экспериментальной установки и выполнение натуральных экспериментов с целью выбора оптимальных параметров. Как правило, такие исследования связаны с большими материальными затратами, а иногда в принципе невозможны (например, если это эксперименты с атомной электростанцией).

Теоретический метод, или математическое моделирование, опирается на знание фундаментальных законов природы, используя которые строят математическую модель исследуемого явления и, решая математические задачи, производят выбор оптимальных параметров исследуемой конструкции.

Математическая модель - это описание исследуемого явления с помощью математических символов и операций над ними.

Математическая постановка задачи предполагает описание математической модели и указание цели ее исследования. Для одной и той же модели могут быть сформулированы различные задачи. Например, наиболее часто встречающейся моделью является понятие функциональной зависимости $y=f(x)$. Для нее могут быть поставлены различные задачи, например:

- 1) найти $\max f(x)$;
- 2) найти x , при котором $f(x)=0$, и др.

Оказывается, наш мир устроен на удивление однообразно с точки зрения математических моделей. Практически все окружающие нас явления описываются сравнительно небольшим количеством математических моделей, уместающихся в стандартный справочник. Этот справочник называется “Курс высшей математики”. В нем приведены также все представляющие интерес постановки задач, доказаны существование и методы нахождения решений.

Решить задачу - это значит указать алгоритм (т.е. строгую последовательность действий) для получения требуемого результата из исходных данных.

Методы (алгоритмы) решения математических задач можно разделить на точные, приближенные и численные.

К точным методам относятся алгоритмы, позволяющие за конечное число действий получить в принципе (если нет ошибок округления) точное решение. Обычно оно получается в виде формулы или конечного вычислительного алгоритма.

Приближенные - это методы, позволяющие за счет некоторых допущений свести решение исходной задачи к задаче, имеющей точное решение.

Численные методы предполагают разработку **вычислительного алгоритма**, т.е. конечной, строгой последовательности арифметических и

логических действий, обеспечивающих получение решения с заданной контролируемой погрешностью. Изначально ЭВМ "умеет" выполнять только арифметические и логические операции. Но по мере того, как она "учится", в ее память закладывают вычислительные алгоритмы решения все более сложных задач. Поэтому **вычислительным** можно считать алгоритм, последовательность действий которого "умеет" выполнять ЭВМ.

1.2. Как оценивается погрешность вычислений?

Большое значение при вычислениях придается анализу погрешностей.

Погрешность обычно оценивают одним числом ϵ , характеризующим близость между точным и приближенным значениями некоторой величины.

Близость мы привыкли оценивать расстоянием между объектами. Если рассматриваемая величина есть число a , и \tilde{a} - его приближенное значение, то погрешность есть просто модуль разности $e = |a - \tilde{a}|$ или расстояние между точками a и \tilde{a} на числовой оси. Чем ближе \tilde{a} к a , тем меньше ϵ . А как оценить близость между двумя функциями $f(x)$ и $g(x)$ (векторами \vec{x}, \vec{y} , матрицами A, B)? Что такое "близко" для этих объектов?

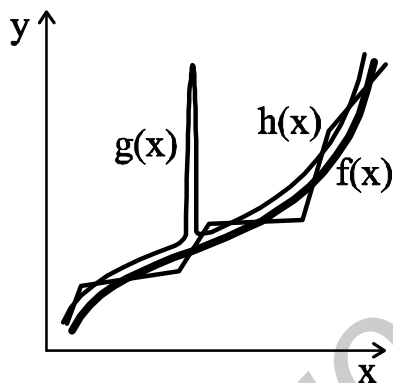


Рис. 1.1

Оказывается, в зависимости от выбранного класса функций (непрерывные, разрывные, но интегрируемые, дифференцируемые) близость может трактоваться по-разному. Например, две функции $f(x)$ и $g(x)$ или $f(x)$ и $h(x)$ на рис.1.1 в одних инженерных задачах могут считаться близкими, а в других - нет. Ввиду этого должны быть предложены математические модели расстояний, различные для функций (матриц векторов) из разных классов. Обычно при выполнении расчетов имеют дело с объектами, являющимися элементами некоторого нормированного пространства.

Нормированным пространством называется такое множество элементов (здесь в качестве элементов рассматриваются функции, векторы или матрицы), в котором каждому элементу поставлено в соответствие число $\|X\|$ (норма X), удовлетворяющее следующим аксиомам:

1. $\|X\| \geq 0$ - норма (положительное число).
2. $\|X\| = 0$, только при $X = \emptyset$ (\emptyset - нулевой элемент).
3. $\|\alpha X\| = |\alpha| * \|X\|$, α - число (может быть комплексным).
4. $\|X_1 \pm X_2\| \leq \|X_1\| + \|X_2\|$ - неравенство треугольника.

Расстояние между элементами $r(X_1, X_2) = \|X_1 - X_2\|$ определяется через норму. В зависимости от класса рассматриваемых объектов норма, а следовательно, и расстояние вводится по-разному.

Наиболее часто используются следующие нормированные пространства.

Пространство непрерывных функций $C[a, b]$ - множество непрерывных функций $\{f(x), g(x), h(x), \dots\}$, определенных на интервале $[a, b]$.

Норма и расстояние в $C[a, b]$ определяются по формулам:

$$\|f\|_C = \max_{x \in [a, b]} |f(x)|; \quad r_C(f, g) = \max_{x \in [a, b]} |f(x) - g(x)|.$$

Пространство интегрируемых с квадратом функций $L_2[a, b]$ - множество функций, для которых $\int_a^b f^2(x) dx < \infty$. В $L_2[a, b]$ имеются и разрывные функции, т.е. $C[a, b] \not\subset L_2[a, b]$. Норма и расстояние:

$$\|f\|_{L_2} = \sqrt{\int_a^b f^2(x) dx}; \quad r_{L_2}(f, g) = \sqrt{\int_a^b (f(x) - g(x))^2 dx}.$$

Скалярное произведение двух функций из $L_2[a, b]$ вводится как $(f, g) = \int_a^b f(x) \cdot g(x) dx$, причем $(f, f) = \|f\|_{L_2}^2$.

Ортогональными называются две функции из L_2 , если $(f, g) = 0$. Заметим, что функции f и g на рис. 1.1 будут "близкими" в пространстве L_2 и "далекими" в пространстве C , т.е. норма C более «сильная»: $\|f\|_{L_2} < \|f\|_C$.

Пространство Соболева $W_2^s[a, b]$ - множество функций, имеющих интегрируемые с квадратом производные до s порядка. Норма определяется как

$$\|f\|_{W_2^s}^2 = \sum_{m=0}^s \int_a^b \left(\frac{d^m f}{dx^m} \right)^2 dx, \quad \text{расстояние} \quad r_{W_2^s}^2 = \sum_{m=0}^s \int_a^b \left(\frac{d^m (f-g)}{dx^m} \right)^2 dx. \quad \text{В этом}$$

пространстве близость между функциями характеризует также близость их производных. Например, функции f и h на рис. 1.1 будут «близкими» по норме $\| \cdot \|_{W_2^0}$ и «далекими» по норме $\| \cdot \|_{W_2^1}$, причем $\| \cdot \|_{W_2^0} = \| \cdot \|_{L_2}$.

Во множестве векторов $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \dots\}$, $\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n)$ нормы также можно ввести

$$\text{по-разному: } \|\mathbf{x}\|_{l_2} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2}; \quad \|\mathbf{x}\|_C = \max_i |x_i|.$$

Во множестве квадратных матриц наиболее употребительны следующие нормы (I_i - собственные значения матрицы A):

$$\|A\|_C = \max_i \left(\sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right); \quad \|A\|_E = \sqrt{\sum_{ij=1}^n |a_{ij}|^2}; \quad \|A\|_I = \sqrt{\max_i I_i}.$$

Абсолютная погрешность ΔX между точным X и приближенным \tilde{X} значениями некоторого элемента определяется через норму разности $\Delta X = \|X - \tilde{X}\|$.

Относительная погрешность δX определяется как отношение абсолютной погрешности к норме элемента $dX = \Delta X / \|X\|$.

1.3. Откуда возникают погрешности расчетов?

Есть четыре источника погрешности результата, о которых следует помнить при выполнении расчетов.

1. Неточность математической модели. Любая модель является определенной идеализацией рассматриваемого физического явления и описывает лишь основные факторы, существенные при решении конкретной технической задачи. Уточнение модели за счет введения описания дополнительных факторов обычно приводит к ее усложнению и, как следствие, к трудности использования, поэтому необходим определенный компромисс. Выбор удачного компромисса - это творческий процесс, требующий большого опыта и инженерной интуиции.

2. Погрешность исходных данных. Исходные данные обычно получают из измерений либо - наоборот, по этим данным затем делается устройство. В каждом случае имеется так называемая неустранимая погрешность между исходными данными, участвующими в расчетах, и теми, которые реализуются. В результате этого получаемое решение также будет отличаться от реализуемого в устройстве. В зависимости от того, как ошибки исходных данных отражаются на результате, задачи разделяют на два класса: **корректные** и **некорректные**. Задача называется **корректной**, если малые ошибки исходных данных приводят к пропорционально малым ошибкам решения. Наоборот, если малые ошибки исходных данных приводят к большим ошибкам в результатах, задача называется **некорректной**. Чаще всего некорректность математической задачи является признаком неправильной математической постановки. Для решения некорректных, но правильных с физической точки зрения задач разрабатываются специальные методы.

3. Погрешность метода. При построении вычислительного алгоритма обычно точное решение представляется в виде бесконечного предела последовательности арифметических и логических действий. При ограничении лишь конечным числом вычислений вносится погрешность, контролируемая некоторыми параметрами метода. Получение зависимости погрешности решения от параметров вычислительного метода является одной из основных задач вычислительной математики.

Например, чтобы вычислить значение функции $y=e^{-x}$ при $x>0$ предлагается в качестве вычислительного метода $M(x)$ взять n первых членов ряда

$$e^{-x} \cong M(x) = 1 - x + \frac{x^2}{2} - \dots (-1)^n \cdot \frac{x^n}{n!}.$$
 Как видно, при расчете $M(x)$ используются

только арифметические действия. Параметром метода здесь является n ,

погрешность метода при этом оценивается последним отброшенным членом

$$e_n = \left\| M(x) - e^{-x} \right\|_c < \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} \text{ и при } n \rightarrow \infty, e_n \rightarrow 0.$$

Однако не всегда можно так просто найти зависимость погрешности от параметра метода, поэтому часто используют асимптотические оценки. Обычно при уменьшении некоторого параметра h метода погрешность решения e_h стремится к нулю, т.е. $e_h \rightarrow 0$ при $h \rightarrow 0$, например в вышеприведенном примере $h = 1/n$. В этом случае, если выполняется оценка $e_h < Ch^p$, где $C = \text{const}$ и не зависит от h , считается, что **порядок погрешности** равен p и обозначается коротко $e_h \approx o(h^p)$.

4. Ошибки округлений. Все расчеты на ЭВМ производятся с конечным числом значащих цифр, определяемым объемом ячеек памяти. Поэтому при вычислении, например, $1/3 = 0,3333\dots3\dots$, и если округление производится на седьмом знаке, то вносится ошибка $e \approx 10^{-8}$. Когда вычислений много, то такие ошибки могут накапливаться и, наоборот, компенсироваться (положительные и отрицательные). В зависимости от реакции на погрешность округлений вычислительные методы разделяются на **устойчивые** и **неустойчивые**.

Метод **устойчив**, если в процессе вычислений ошибки округлений не накапливаются, в противном случае метод неустойчив. Неустойчивость обычно устанавливается путем проведения прямых расчетов с различными значениями параметра метода. При увеличении количества вычислений по неустойчивому методу ошибки быстро нарастают, что приводит к переполнению ЭВМ. Одной из задач вычислительной математики является установление условий устойчивости и разработка рекомендаций по созданию устойчивых методов.

1.4. Итерационные методы решения задач

Символически решаемую задачу можно записать в виде

$$A(x) = b, \quad (1.1)$$

где A - заданный оператор; x, b - элементы некоторых нормированных пространств, причем b задано и требуется найти x . Обозначим через x^* точное решение поставленной задачи (x^* может быть числом, вектором, функцией).

Одним из наиболее часто используемых вычислительных методов является **метод итераций**, а также различные его модификации.

Итерационные методы основаны на построении сходящейся к точному решению x^* бесконечной рекуррентной последовательности $x^0, x^1, \dots, x^k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} x^*$ элементов той же природы, что и x^* (числа, векторы, функции).

Последовательность называется **рекуррентной** порядка m , если каждый следующий ее член выражается через m предыдущих по некоторому правилу

$$x^k = j(x^{k-1}, x^{k-2}, \dots, x^{k-m}). \quad (1.2)$$

Соответствующий итерационный метод называется *m-шаговым*. Для реализации *m*-шагового метода требуется задать *m* первых членов $\{x^0, x^1, \dots, x^{m-1}\}$, называемых *начальным приближением*. Зная начальное приближение, по формуле (1.2) последовательно находят $x^m, x^{m+1}, \dots, x^k, \dots$. Процесс получения следующего *k*-го члена через предыдущие называется *k*-й *итерацией*. Итерации выполняются до тех пор, пока очередной член x^k не будет удовлетворять заданной точности, т.е. $\|x^k - x^*\| < d$. Ввиду того, что точное решение x^* заранее неизвестно, обычно сходимость метода определяют по близости двух последних членов, т.е. расчеты производят до тех пор, пока не выполнится условие $\|x^k - x^{k-1}\| < \epsilon$, где ϵ - некоторая заданная малая величина. Из теории сходящихся последовательностей известно, что в большинстве практически важных случаев δ и ϵ связаны пропорциональной зависимостью, поэтому если взять ϵ с некоторым запасом (обычно достаточно $\epsilon = \delta/10$), то требуемая точность будет достигнута. Для более точной оценки сходимости (обычно когда сходимость медленная) можно воспользоваться критерием $\left\| \frac{(x^k - x^{k-1})^2}{2x^{k-1} - x^k - x^{k-2}} \right\| < \epsilon$. В качестве искомого решения берут последний член последовательности x^k , при котором выполнилось указанное неравенство.

Простой итерационный метод для решения задачи (1.1) строится следующим образом.

Преобразуем задачу (1.1) к виду, разрешенному относительно неизвестного x :

$$x = j(x). \quad (1.3)$$

При этом точное решение (1.1) x^* является и решением (1.3). Заметим, что привести задачу (1.1) к виду (1.3), не изменяя решения, можно различными способами, например: $x = w_r[A(x) - b] + x = j(x)$, здесь w_r - произвольный параметр, который в дальнейшем подбирается из условия сходимости итераций.

Используем выражение (1.3) в качестве рекуррентной формулы ($m=1$):

$$x^k = j(x^{k-1}). \quad (1.4)$$

Задав одно x^0 (начальное приближение), последовательно находим x^1, x^2, \dots, x^k . Если полученная таким образом последовательность сходится к некоторому конечному пределу, то этот предел совпадает с точным решением x^* .

Условие сходимости последовательности, задаваемой рекуррентной формулой (1.4), определяется выполнением неравенства

$$\|dj/dx\| = \|G\| < 1. \quad (1.5)$$

Чем ближе $\|G\|$ к нулю, тем быстрее сходится рекуррентная последовательность к точному решению и, следовательно, для получения решения с заданной точностью требуется меньше итераций.

Контрольные вопросы

1. Что такое математическая модель и ее погрешность?
2. Что такое математическая постановка задачи?
3. Что такое численный метод, чем он отличается от других методов?
4. Какие нормированные пространства вы знаете?
5. Как оценить погрешность метода в нормированном пространстве?
6. Что понимается под корректностью задачи?
7. Что понимается под устойчивостью (неустойчивостью) метода?
8. Что такое итерационный метод, как определяется его погрешность?

Библиотека БГУИР

2. УРАВНЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Одной из важнейших составляющих информационных технологий являются современные методы и пакеты программ решения задач теоретической физики.

Особая сила методов теоретической физики заключается в формулировке законов природы в форме дифференциальных и интегральных уравнений. Основной задачей теоретической физики является исследование полей физических величин, например, таких, как температурное поле, электромагнитное поле, поле скоростей, поле вероятности.

В общем случае любое физическое явление или процесс представляет собой изменение каких-либо физических величин (скалярных, векторных, тензорных) в пространстве и во времени. Поэтому поля, вообще говоря, описываются функциями четырех независимых переменных x, y, z, t , и задача состоит в нахождении этих функций.

Необходимость решения таких задач неуклонно возрастает по мере того, как усложняются требования при конструировании современных устройств. Так, например, если тактовая частота процессора достигает 10^9 с, то методы электротехники уже становятся неадекватными и требуется электродинамическое (т.е. полевое) описание процессов функционирования элементов ВТ. Нанoeлектроника использует квантовое представление и уравнение Шредингера для поля вероятностей нахождения электрона в точках пространства.

Разработка любого пакета программ решения инженерных и физических задач начинается с модели. Математической моделью физических полей является математическое поле, под которым понимают область пространства, каждой точке которого соответствует определенное значение некоторой физической величины.

Поля бывают скалярные, векторные и тензорные. Каждое из них, в свою очередь, может быть стационарным (если физическая величина в каждой точке области со временем не меняется) или нестационарным. Ясно, что стационарное поле есть функция координат x, y, z точек пространства, а нестационарное поле представляет собой функцию четырех переменных: координат x, y, z и времени t , например $T(x, y, z), \dot{E}(x, y, z, t), \dot{H}(x, y, z, t), \dot{V}(x, y, z, t), \Psi(x, y, z, t), \|e_{ij}(x, y, z)\|$.

Введение понятия поля имело для физики такое же важное значение, как и в свое время появление в математике понятия переменной величины.

При решении задач, описываемых математическими полями (полевые задачи), можно выделить две проблемы – прямую и обратную.

Прямая проблема состоит в следующем. Задано правило определения интересующей нас физической величины в любой точке пространства, т.е. задано поле; требуется установить характер этого поля, например быстроту его изменения от точки к точке. Изучением дифференциальных и интегральных свойств различных полей занимается *математическая теория поля*.

Здесь для векторной $\dot{\mathbf{u}} = u_x \dot{x}_0 + u_y \dot{y}_0 + u_z \dot{z}_0$ и скалярной $j(x, y, z)$ функций введены операторы дифференцирования $\text{div} \dot{\mathbf{u}}$, $\text{rot} \dot{\mathbf{u}}$, ∇j , $\nabla^2 j$:

$$\text{div} \dot{\mathbf{u}} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} - \text{дивергенция}, \quad (2.1)$$

$$\text{rot} \dot{\mathbf{u}} = \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) \dot{x}_0 + \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \dot{y}_0 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \dot{z}_0 - \text{ротор}, \quad (2.2)$$

$$\nabla j = \frac{\partial j}{\partial x} \dot{x}_0 + \frac{\partial j}{\partial y} \dot{y}_0 + \frac{\partial j}{\partial z} \dot{z}_0 - \text{градиент}, \quad (2.3)$$

$$\nabla^2 j = \text{div}(\nabla j) = \frac{\partial^2 j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 j}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 j}{\partial z^2} - \text{лапласиан}. \quad (2.4)$$

Введена классификация полей. **Соленоидальные** (или вихревые) $\text{div} \dot{\mathbf{u}} = 0$, такое поле может быть представлено в виде $\dot{\mathbf{u}} = \text{rot} \dot{\mathbf{v}}$, здесь $\dot{\mathbf{v}}$ – векторный потенциал; **потенциальные** (или безвихревые) $\text{rot} \dot{\mathbf{u}} = 0$, такое поле может быть представлено в виде $\dot{\mathbf{u}} = \nabla j$, здесь j – скалярный потенциал.

Имеется ряд основополагающих интегральных теорем: Стокса, Гаусса, Грина и др., которые отражают закономерности реальных физических полей.

Теорема Остроградского – Гаусса:

$$\oint_S \dot{\mathbf{u}} \dot{\mathbf{n}} dS = \iiint_V \text{div} \dot{\mathbf{u}} dV, \quad (2.5)$$

здесь V – объем, ограниченный замкнутой поверхностью S ; $\dot{\mathbf{n}}$ – единичный вектор нормали к поверхности.

Теорема Стокса:

$$\oint_\Gamma \dot{\mathbf{u}} \dot{\mathbf{t}} dt = \iint_S \text{rot} \dot{\mathbf{u}} \dot{\mathbf{n}} dS, \quad (2.6)$$

где Γ – замкнутый контур, ограничивающий некоторую поверхность S ; $\dot{\mathbf{t}}$ – единичный вектор направления касательной к кривой.

Теорема Грина:

$$\iiint_V (j \nabla^2 y - y \nabla^2 j) dV = \oint_S \left(j \frac{\partial y}{\partial \dot{\mathbf{n}}} - y \frac{\partial j}{\partial \dot{\mathbf{n}}} \right) dS. \quad (2.7)$$

Формула интегрирования по частям:

$$\int_\Omega j \nabla y d\Omega = - \int_\Omega y \nabla j d\Omega + \int_\Gamma j y \dot{\mathbf{n}} d\Gamma, \quad (2.8)$$

где Ω – область (трехмерная, двухмерная), имеющая границу Γ .

Обратная проблема состоит в нахождении распределения в пространстве некоторой физической величины, т.е. конкретного вида математического поля, если известны условия, в которых находится физический объект.

Для нахождения неизвестных функций нужно, исходя из управляющих данным физическим явлением закономерностей, составить функциональные уравнения, решая которые, можно будет найти искомые функции. Эти функциональные уравнения обычно представляют собой своеобразные дифференциальные или интегральные уравнения, в которых искомая функция зависит от нескольких переменных.

Чаще всего задача нахождения поля, удовлетворяющего требуемым условиям, приводит к решению краевой задачи для дифференциального (или интегрального) уравнения.

Методы составления и, главное, решения уравнений такого рода изучаются в разделе математической физики – **теория дифференциальных уравнений в частных производных и теория интегральных уравнений**. Эти уравнения исторически получили название «уравнения математической физики».

Совокупность теории поля и теории дифференциальных уравнений в частных производных образует так называемую **классическую математическую физику**.

Для решения задач математической физики традиционно используются методы: факторизации, проекционные методы, метод сеток. Синтезом двух последних является проекционно-сеточный метод, который получил название **метод конечных элементов**.

Контрольные вопросы

1. Что такое математическое поле?
2. Сформулируйте содержание математической теории поля.
3. Сформулируйте понятие уравнений математической физики.
4. Что составляет содержание дисциплины «математическая физика»?

3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

3.1. Определение дифференциальных уравнений

Любой физический закон наиболее точно может быть выражен только в виде некоторого (часто дифференциального) уравнения и его решение при заданных исходных данных позволяет предсказывать всевозможные физические явления и результаты эксперимента. Дифференциальными уравнениями можно описать широкий круг явлений, таких, как поведение планет и галактик, движение воздушных потоков в атмосфере, течения в океанах, распространение радиоволн, протекание химических реакций, процессы выращивания кристаллов, поведение электронов в атомной решетке полупроводника.

В общем случае дифференциальное уравнение (ДУ) – это уравнение, связывающее искомую функцию $u(x, y, z, t)$, ее частные производные и независимые переменные x, y, z, t :

$$\Phi \left[x, y, z, t, u(x, y, z, t), \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right] = f(x, y, z, t). \quad (3.1)$$

Максимальный порядок входящих в это уравнение производных называется порядком ДУ.

Описание конкретной прикладной задачи может приводить к одному ДУ порядка m или к эквивалентной системе ДУ, суммарный порядок которой равен m . Установлены теоремы о том, что систему ДУ порядка m можно привести к эквивалентной системе из m ДУ первого порядка, причем если m – четное, то и к системе из m ДУ второго порядка. В настоящее время теория систем ДУ первого и второго порядка детально разработана. Для решения таких ДУ имеются хорошо апробированные как приближенные, так и численные методы. Это обстоятельство позволяет при создании прикладных пакетов программ сосредоточить усилия на разработке программ решения систем ДУ первого и второго порядка.

По количеству независимых переменных ДУ разделяют на два класса: обыкновенные ДУ (ОДУ), которые описывают процессы, зависящие от одной независимой переменной $u(x)$, и ДУ в частных производных (ДУЧП), которые описывают поля физических величин, зависящих более чем от одной независимой переменной.

3.2. Постановка задач для обыкновенных ДУ

Систему ОДУ можно привести к системе, разрешенной относительно первой или второй производной. Для них имеются хорошо разработанные методы и стандартные программы.

Система ОДУ первого порядка:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du_1}{dx} = f_1(x, u_1, u_2, \dots, u_m); \\ \dots\dots\dots \text{или коротко } \frac{d\mathbf{u}}{dx} = \mathbf{f}(x, \mathbf{u}). \\ \frac{du_m}{dx} = f_m(x, u_1, u_2, \dots, u_m). \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Система ОДУ второго порядка:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \left(g_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} \right) + q_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + p_1 u_1 = f(x, u_2, \dots, u_m, \frac{\partial u_2}{\partial x}, \dots, \frac{\partial u_m}{\partial x}); \\ \dots\dots\dots \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(g_m \frac{\partial u_m}{\partial x} \right) + q_m \frac{\partial u_m}{\partial x} + p_m u_m = f(x, u_1, \dots, u_{m-1}, \frac{\partial u_1}{\partial x}, \dots, \frac{\partial u_{m-1}}{\partial x}). \end{array} \right. \quad (3.3)$$

Требуется найти $\mathbf{u} = \{u_1(x), \dots, u_m(x)\}$ для значений x из заданного интервала $a \leq x \leq b$.

Известно, что системы (3.2) и (3.3) имеют бесконечное множество решений, семейство которых зависит от набора произвольных параметров $\mathbf{C} = (c_1, \dots, c_m)$, их количество равно порядку системы m для (3.2) и $2m$ для (3.3).

Это семейство решений описывает многообразие реализаций физического процесса, математической моделью которого являются системы ОДУ (3.2), (3.3). Для выделения одной искомой реализации среди этого многообразия необходимо наложить дополнительные условия на функцию $\mathbf{u}(x)$, количество этих условий равно порядку системы ОДУ.

В зависимости от способа постановки дополнительных условий можно выделить два основных типа задач для ОДУ.

Задача Коши (задача с начальным условием), когда все условия заданы в начале отрезка интегрирования $[a, b]$ (при $x=a$). Эта задача чаще всего ставится для системы (3.2) в виде

$$u_1(a) = u_1^0; \dots u_m(a) = u_m^0 \text{ или коротко } \mathbf{u}(a) = \mathbf{u}^0. \quad (3.4)$$

Краевая задача, когда условия заданы на обоих концах отрезка $[a, b]$. Эта задача обычно ставится для ДУ второго порядка (3.3) в общем виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1^a \left(u_1(a), \frac{du_1(a)}{dx} \right) = 0; \dots f_m^a \left(u_m(a), \frac{du_m(a)}{dx} \right) = 0; \\ f_1^b \left(u_1(b), \frac{du_1(b)}{dx} \right) = 0; \dots f_m^b \left(u_m(b), \frac{du_m(b)}{dx} \right) = 0. \end{array} \right. \quad (3.5)$$

Имеется ряд установленных теорем о том, что при определенных условиях как задача Коши (3.2), (3.4), так и краевая задача (3.3), (3.5) имеют

единственное решение. Прежде чем приступить к решению ОДУ, необходимо удостовериться в выполнении этих условий. Обычно, если физическая задача поставлена правильно, то и математическая ее постановка в «разумном» диапазоне параметров будет иметь решение.

3.3. Постановка задач для ДУ в частных производных (ДУЧП)

Наш мир устроен так удивительно, что большинство окружающих нас физических полей описывается ДУЧП второго порядка или, если имеется несколько взаимосвязанных полей, - системами таких ДУ. Более того, если процессы не слишком интенсивны, то при их описании можно ограничиться линейными дифференциальными уравнениями второго порядка. Самый общий вид такого уравнения:

$$\sum_{ij} a_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_i b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + cu = f; \quad x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z, x_4 = t. \quad (3.6)$$

Оказывается, что свойства решений (3.6) существенно зависят от коэффициентов, стоящих при старших производных. Причем с помощью соответствующей замены независимых переменных уравнение (3.6) может быть приведено к одному из следующих трех типов.

1. Параболические

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f.$$

Более общий случай

$$a \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(g \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(g \frac{\partial u}{\partial z} \right) + f. \quad (3.7)$$

К этому типу сводятся уравнения для физических полей, описывающих диссипативные процессы: теплопроводность – поле температуры $T(x, y, z, t)$; диффузия – поле концентрации $C(x, y, z, t)$ (например, сахара в растворе). Уравнение (3.7) получило название **уравнение теплопроводности**.

Процесс распространения возмущения, возникающего в таком поле, имеет затухающий характер и для одномерного случая этот процесс иллюстрирует рис. 3.1:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

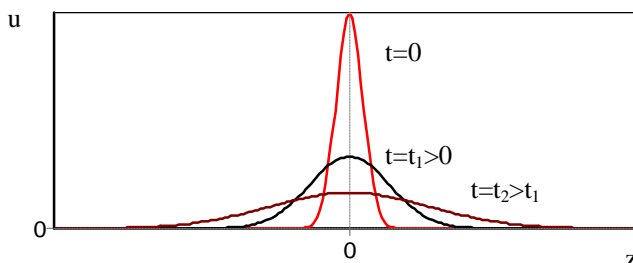


Рис. 3.1

2. Гиперболические

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f. \quad (3.8)$$

Более общий случай

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

К этому типу сводятся уравнения для физических полей, описывающих волновые процессы – электромагнитные волны $\vec{E}, \vec{H}(x, y, z, t)$, звук, поле вероятностей в квантовой физике. Уравнение (3.8) получило название **уравнение Д’Аламбера**, или **неоднородное волновое уравнение**.

Процесс распространения возмущения, возникающего в таком поле, имеет вид бегущих в разных направлениях возмущений, причем в одномерном случае, представленном на рис. 3.2, возмущения не затухают.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

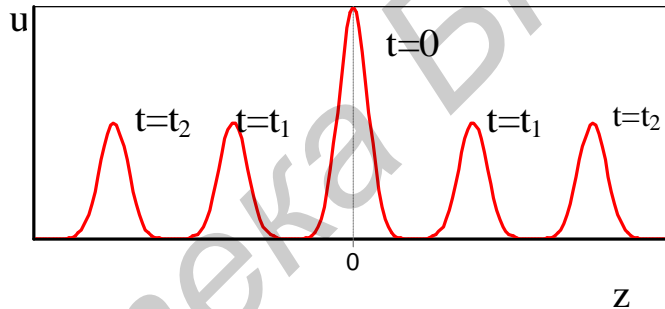


Рис. 3.2

3. Эллиптические (не изменяющиеся во времени процессы):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = f. \quad (3.9)$$

В более общем случае:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(g \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(g \frac{\partial u}{\partial z} \right) = f.$$

К этому типу сводятся уравнения для многих физических полей: электростатические и магнитостатические поля, установившееся температурное поле и поле концентраций и др.

Уравнение (3.9) получило название **уравнение Пуассона**; если $f=0$ – **уравнение Лапласа**.

При постановке задач для ДУ в частных производных обычно требуется найти распределение $u(x, y, z, t)$, удовлетворяющее ДУ в некоторой области пространства Ω с границей Γ , причем область может быть как ограниченной, так и неограниченной.

Оказывается, что общее решение ДУЧП в отличие от ОДУ не зависит от конечного набора параметров, а содержит произвольные дифференцируемые функции. Так, легко показать, что решением одномерного волнового уравнения $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$ является произвольная, дважды дифференцируемая функция с аргументом $t \pm z$: $u = f(t \pm z)$ (бегущие влево и вправо волны, см. рис. 3.2). Это значит, что класс функций, являющихся решением ДУЧП, гораздо шире, чем у ОДУ.

Для выделения единственного искомого решения из класса решений необходимо задать дополнительные условия. Чаще всего ими являются начальные условия (для нестационарных полей, описываемых уравнениями (3.7), (3.8)) и граничные (краевые) условия.

Начальные условия задают значение искомой функции в начальный момент времени. При этом для ДУ (3.7) достаточно задать

$$u|_{t=0} = U^0(x, y, z). \quad (3.10)$$

Для ДУ (3.8), содержащего вторую производную по времени, нужно задать еще начальное распределение производных:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t=0} = U^1_0(x, y, z).$$

Граничные (краевые) условия задают либо значения искомой функции на границе Γ области – условия (первого рода) Дирихле

$$u|_{\Gamma} = j(\Gamma), \quad (3.11)$$

либо значения производной на границе – условия (второго рода) Неймана

$$\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\Gamma} = y(\Gamma), \quad (3.12)$$

либо некоторое соотношение между производной и значением функции на границе – условия (третьего рода) Ньютона:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial n} + au \right)_{\Gamma} = g(\Gamma). \quad (3.13)$$

Задачи для (3.7), (3.8) с (3.10), (3.11) – (3.13) называют задачами Коши, задачи для (3.9) с (3.11) – (3.13) – краевыми задачами.

3.4. Как получают дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения чаще всего являются следствием фундаментальных законов природы. Рассмотрим для примера, как получается стационарное уравнение теплопроводности (3.9).

Французский математик и физик Жан Батист Жозеф Фурье в 1822 г. установил закон теплопроводности (закон Фурье), формулируемый следующим образом: *количество тепла, проходящее через единицу площади в единицу*

времени, пропорционально проекции градиента температуры на нормаль к поверхности. Математически этот закон выражается следующим простым соотношением:

$$q = -I \nabla T \mathbf{n}, \quad (3.14)$$

здесь $q \left[\frac{Вт}{м^2} \right]$ - плотность теплового потока; $T [град]$ - температурное поле; $I \left[\frac{Вт}{м \cdot град} \right]$ - коэффициент теплопроводности.

Знание этого закона позволяет довольно просто рассчитать тепловой поток через любую поверхность S :

$$Q_S = \iint_S (-I \nabla T) \mathbf{n} dS. \quad (3.15)$$

Рассмотрим температурное поле $T(x, y, z)$ и выберем элементарный объем $\Delta x \Delta y \Delta z = \Delta V$, в центре которого находится точка x, y, z . Допустим, что в таком кубике в единицу времени выделяется количество теплоты, равное $Q_V = q_V \Delta x \Delta y \Delta z$, здесь $q_V \left[\frac{Вт}{м^3} \right]$ - мощность источника тепла в единице объема.

Используя закон сохранения, открытый Ломоносовым, можно заключить, что в стационарном режиме (когда температура не изменяется во времени) все выделенное внутри элементарного объема количество теплоты должно выходить через стенки элементарного объема, т.е. $Q_V = Q_S$ (условие теплового баланса):

$$q_V \Delta x \Delta y \Delta z = \left[- \left(-I \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x+\frac{\Delta x}{2}} + \left(-I \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x-\frac{\Delta x}{2}} \right] \Delta y \Delta z + \\ + \left[- \left(-I \frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y+\frac{\Delta y}{2}} + \left(-I \frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y-\frac{\Delta y}{2}} \right] \Delta x \Delta z + \left[- \left(-I \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z+\frac{\Delta z}{2}} + \left(-I \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z-\frac{\Delta z}{2}} \right] \Delta x \Delta y.$$

Разделив это уравнение на $\Delta x \Delta y \Delta z$ и перейдя к пределу при $\Delta V \rightarrow 0$, получим стационарное уравнение теплопроводности типа (3.9):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(I \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(I \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(I \frac{\partial T}{\partial z} \right) + q_V(x, y, z) = 0. \quad (3.16)$$

В общем случае коэффициент теплопроводности I является функцией как x, y, z , так и T . Поэтому реальные процессы теплопроводности описываются нелинейными ДУЧП и их точное решение удается найти лишь в исключительных случаях.

3.5. Подобие физических явлений, безразмерные переменные

Теория подобия физических явлений возникла из потребностей моделирования технических устройств и является мощным средством обобщения физического и математического эксперимента. Термин «подобие» заимствован из

геометрии, где изучаются подобные геометрические фигуры, т.е. имеющие пропорциональные линейные элементы. Для реализации подобия физических явлений и технических устройств одного геометрического подобия недостаточно. Так, например, давно было замечено, что уменьшенная точная геометрически подобная копия корабля или самолета имеет существенно отличные от реальной конструкции ходовые и аэродинамические характеристики. Оказывается, что при уменьшении геометрических размеров для того, чтобы модель соответствовала исходным характеристикам, необходимо соответствующим образом изменять физические свойства обтекаемой жидкости – плотность, вязкость, теплопроводность. Например, не всегда удается найти в природе жидкость, обладающую нужными для физического моделирования свойствами.

С появлением вычислительной техники очень большое значение приобретает вычислительный эксперимент, связанный с моделированием физических величин и технических конструкций. При этом особенно важно знать, как результаты одного варианта расчета можно использовать для получения данных об исследуемой конструкции в широком диапазоне параметров и обратно, как выбрать модель для расчета, имеющую наименьшее, но достаточное количество параметров.

Подобными называются физические явления, протекающие в подобных системах, если у них во всех сходных точках в сходственные моменты времени отношения одноименных, т.е. имеющих одинаковый физический смысл величин, есть постоянные числа. Эти постоянные числа называются константами подобия.

Рассмотрим для примера явление теплообмена, протекающее в двухмерной области $\Omega' = \{0 \leq x' < a', 0 \leq y' \leq b'\}$ и описываемое уравнением

$$\frac{\partial}{\partial x'} \left(I' \frac{\partial T'}{\partial x'} \right) + \frac{\partial}{\partial y'} \left(I' \frac{\partial T'}{\partial y'} \right) + q'_v = 0. \quad (3.17)$$

Как видим, это явление описывается двумя геометрическими параметрами x' , y' и тремя физическими T' , I' , q'_v . В подобной системе с параметрами, имеющими одинаковый физический смысл x , y , u , g , q_v , должны выполняться соотношения подобия:

$$\frac{x'}{x} = c_x; \quad \frac{y'}{y} = c_y; \quad \frac{T'}{u} = c_T; \quad \frac{I'}{g} = c_I; \quad \frac{q'_v}{q_v} = c_q, \quad (3.18)$$

здесь c_x , c_y , c_T , c_I , c_q - константы подобия. Отсюда видно, в частности, чтобы исследовать явления, необходимо произвести расчет при различных C . Однако константы подобия связаны между собой. Поэтому, установив эту связь, можно уменьшить количество необходимых расчетов. Для установления такой связи подставим (3.18) в (3.17):

$$\frac{c_1 c_T}{c_x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{c_1 c_T}{c_y^2} \frac{\partial}{\partial y} \left(g \frac{\partial u}{\partial y} \right) + c_q q_v = 0.$$

Умножив уравнение на $c_x^2 / c_1 c_T$, получим

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{c_x^2}{c_y^2} \frac{\partial}{\partial y} \left(g \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{c_q c_x^2}{c_1 c_T} q_v = 0.$$

Положив в (3.18) далее $c_x = c_y = a'$, $b = b' / a'$ - условия геометрического подобия,

$\frac{c_x^2}{c_1 c_T} q'_v = -f$ - условия физического подобия, получаем

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(g \frac{\partial u}{\partial y} \right) = f \quad \Omega = \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq b\}. \quad (3.19)$$

Как видим, задача (3.19) является эквивалентной исходной задаче (3.17) в том смысле, что найдя ее решение $u(xy)$ при некоторых g, f , мы с помощью соотношений (3.18) получаем решение $T'(x', y')$ исходной. В этом смысле задача (3.19) является **модельной** для исходной. Поэтому константы подобия (3.18) обычно выбирают по своему усмотрению таким образом, чтобы модельная задача имела наиболее удобный для расчетов вид.

Как видно, наша модельная задача (3.19) имеет на один параметр меньше, чем исходная. При проведении расчетов для обеспечения более высокой точности важно, чтобы в модельной задаче значения входящих в нее переменных были одного порядка. Этого добиваются путем выбора констант подобия, имеющих размерные значения из диапазона возможного изменения входящих в задачу переменных. В результате модельная задача записывается в безразмерных переменных, значения которых изменяются около единицы. Так, в нашем примере, если I' изменяется (например, для воздуха при температуре T' от 0 до 100°C) в диапазоне 0,01–0,03 Вт/(м·град), то выбрав $c_1 = 0,02$ Вт/(м·град), $c_T = 50^\circ\text{C}$, получим, что параметр g (безразмерная теплопроводность) будет меняться от 0,5 до 1,5, а параметр u (безразмерная температура) – от 0 до 2; параметры b и f также получаются безразмерными.

Эффективность выполнения расчетов зачастую определяется удачным выбором модельной задачи. В последующем будем полагать, что переход к безразмерной модельной задаче осуществлен.

Контрольные вопросы

1. Дайте определение дифференциального уравнения. Сколько решений оно имеет?
2. Как формулируются задачи для дифференциальных уравнений?
3. Дайте характеристику трех основных типов дифференциальных уравнений в частных производных.
4. Как ставятся граничные условия Дирихле и Неймана?
5. Какие физические явления называются подобными?
6. Как осуществляется переход к безразмерным переменным перед решением ДУ?

Библиотека БГУИР

4. МЕТОД СЕТОК

4.1. Теоретические основы метода сеток

До появления вычислительных машин для решения дифференциальных уравнений использовались в основном приближенные методы, основанные на поиске решения в виде разложения его в ряд по некоторому параметру. Эти методы обычно требуют очень глубоких аналитических исследований решаемой задачи и поэтому не могут быть универсальными.

Прогресс в области вычислительной техники позволяет разрабатывать универсальные алгоритмы решения дифференциальных уравнений, требующие от пользователя лишь корректно поставить задачу и правильно задать программе начальные и граничные условия. Одним из наиболее широко используемых универсальных методов решения задач для дифференциальных уравнений является метод сеток.

Суть метода сеток в том, что решение ДУ получают в отличие от классических методов не в виде некоторой комбинации функций, а в виде достаточно подробной таблицы значений искомого решения в узлах сетки, покрывающей область определения решения (область исследуемого поля). При этом получаемая таблица должна обладать свойством аппроксимации, т.е. возможностью восстановления всех значений искомого точного решения с заданной погрешностью.

Постановка задачи

Будем иллюстрировать реализацию метода сеток на решении простейшей одномерной краевой задачи Дирихле для ОДУ второго порядка:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g(x, u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = f(x, u); \quad u(0) = a; \quad u(b) = b. \quad (4.1)$$

В общем случае задачу Дирихле для дифференциального уравнения запишем в виде

$$Lu = f; \quad u|_{\Gamma} = a(\Gamma), \quad (4.2)$$

где L - дифференциальный оператор $u = u(\dot{x})$, Γ - граница многомерной области Ω , внутри которой необходимо получить решение. В рассматриваемом частном случае Ω представляет собой отрезок $[0, b]$, Γ - точки $[0], [b]$.

Решение методом сеток предполагает следующие этапы.

1. Построение сетки, представляющей собой набор узлов (точек), «равномерно» распределенных по области Ω . Множество таких узлов будем обозначать $w_h = \{x_i, x_i \in \Omega\}$. Для одномерного случая $w_h = \{0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{n+1} = b\}$, $h_k = x_{k+1} - x_k$ - шаг сетки. Если $h_k = h = b/n$, сетка называется равномерной. Для упрощения в дальнейшем будем использовать равномерные по координатам сетки: $w_h = \{(i-1)h, i = 1 \dots n+1\}$,

$w_{h_x, h_y} = \left\{ \left[(i-1)h_x, (j-1)h_y \right], i=1 \dots n+1, j=1 \dots m+1 \right\}$ и т.д. Параметр h (в общем случае $\vec{h} = (h_x, h_y, \dots)$) является основным параметром метода сеток. Главное требование к выбору сетки состоит в том, чтобы при $h \rightarrow 0$ узлы сетки покрывали все точки Ω , а при конечном h таблица должна обладать хорошими аппроксимационными свойствами.

2. Получение конечно-разностной схемы. Решение $u(x)$ ищется в виде таблицы значений в узлах выбранной сетки $u_h = \{u_i = u(x_i)\}$ (для двумерной области $u_h = \{u_{ij} = u(x_i, y_j)\}$). При этом дифференциальное уравнение заменяется системой алгебраических уравнений, связывающих между собой значения искомой функции в соседних узлах. Такая система алгебраических уравнений называется конечно-разностной схемой.

Для записи конечно-разностной схемы, полученной для уравнения (4.2), введем следующие обозначения:

$$L_h \bar{u}_h = \bar{f}_h, \quad (4.3)$$

здесь $\bar{u}_h = (\bar{u}_1, \bar{u}_2, \dots, \bar{u}_{n+1})$ – полученные в результате решения конечно-разностной схемы значения искомой функции $u(x)$ в узлах сетки. Ввиду погрешностей расчета значения \bar{u}_h заведомо будут отличны от точных значений u_h , поэтому расчетные значения будем отмечать «крышкой»; L_h – оператор, обычно это матрица системы; \bar{f}_h – таблица значений функции $f(x)$ в узлах сетки.

Имеется несколько способов получения конечно-разностной схемы. Приведем для примера один из универсальных – **интегроинтерполяционный**. Согласно этому способу, область $\Omega = [0, b]$ разобьем на элементарные непересекающиеся подобласти, в центре каждой из которых имеется узел сетки: $\Omega_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, $x_{i-1/2} = x_i - h/2$, $x_{i+1/2} = x_i + h/2$, $i = 2 \dots n$. После чего проинтегрируем (4.1) по каждой области Ω_i и получим следующую систему $n-1$ уравнений:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x) dx; \quad i = 2 \dots n. \quad (4.4)$$

Обозначим $\bar{f}_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x) dx$; $f(x_i)$; $\bar{f}_h = \{\bar{f}_2, \dots, \bar{f}_n\}$.

Левую часть уравнения (4.4) преобразуем следующим образом:

$$\frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx = \frac{1}{h} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_{i+1/2}} - g \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_{i-1/2}} \right); \quad \frac{1}{h} \left(g_{i+1/2} \frac{u_{i+1} - u_i}{h} - g_{i-1/2} \frac{u_i - u_{i-1}}{h} \right).$$

В результате из (4.4) получаем следующую конечно-разностную схему, каждое

уравнение которой связывает значения таблицы в трех смежных узлах сетки (т.е. используется трехточечный *шаблон*):

$$\frac{g_{i-1/2}}{h^2} \bar{u}_{i-1} - \left(\frac{g_{i-1/2} + g_{i+1/2}}{h^2} \right) \bar{u}_i + \frac{g_{i+1/2}}{h^2} \bar{u}_{i+1} = \bar{f}_i, \quad i = 2 \dots n. \quad (4.5)$$

После добавления двух уравнений $\bar{u}_1 = a$, $\bar{u}_{n+1} = b$, являющихся следствием граничных условий (4.1), имеем систему из $n+1$ уравнений с $n+1$ неизвестными, которая является конкретной реализацией общей записи (4.3).

3. Решение системы конечно-разностных уравнений. Если коэффициенты исходного дифференциального уравнения g и f не зависят от u , конечно-разностная схема представляет собой систему линейных алгебраических уравнений с ленточной матрицей. В нашем примере одномерная задача (4.5) приводится к следующей стандартной системе с трехдиагональной матрицей вида:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_n & b_n & c_n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{n1} & b_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \\ \dots \\ \bar{u}_n \\ \bar{u}_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \dots \\ d_n \\ d_{n1} \end{bmatrix}, \quad (4.6)$$

здесь $n1 = n + 1$; $b_1 = 1$; $c_1 = 0$; $d_1 = a$; $a_{n1} = 0$; $b_{n1} = 1$; $d_{n1} = b$;

$$a_i = g_{i-1/2}; \quad c_i = g_{i+1/2}; \quad b_i = -a_i - c_i; \quad d_i = h^2 \bar{f}_i; \quad i = 2 \dots n.$$

Решение такой системы получают эффективным *методом прогонки*, который реализуется в 2 цикла:

1) *прямой ход*

$$x_1 = -c_1/b_1; \quad h_1 = d_1/b_1;$$

для $i = 2 \dots n$ вычисляем: $x_i = -c_i/(b_i + a_i x_{i-1})$; $h_i = (d_i - a_i h_{i-1})/(b_i + a_i h_{i-1})$;

2) *обратный ход*

$$\bar{u}_{n1} = (d_{n1} - a_{n1} h_n)/(b_{n1} + a_{n1} h_n);$$

для i от n до 1 вычисляем: $\bar{u}_i = x_i \bar{u}_{i+1} + h_i$.

Достаточным (хотя не необходимым) и легко проверяемым условием устойчивости прогонки является выполнение неравенства

$$|b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \quad (4.7)$$

причем хотя бы для одного $i \in 1 \dots n1$ должно быть выполнено строгое неравенство. В нашем примере $|b_1| > |c_1|$ и $|b_{n1}| > |a_{n1}|$.

В случае нелинейной задачи, когда $g(x, u)$, $f(x, u)$, решение (4.6) ищется итерационным методом в соответствии с п. 1.4: задается некоторое начальное приближение искомого решения \bar{u}_h^0 , находятся $g_h(\bar{u}_h^0)$, $\bar{f}_h(\bar{u}_h^0)$, a_i , b_i , c_i , d_i ,

после чего решается система (4.6) и находится новое приближение \bar{u}_h^1 . Итерации производятся до достижения сходимости или же до констатации расходимости итерационного процесса.

4. Нахождение погрешности аппроксимации. При замене дифференциального уравнения системой алгебраических уравнений вносится так называемая **погрешность аппроксимации конечно-разностной схемой дифференциального уравнения**, которая получается следующим образом: подставим в конечно-разностную схему (4.3) вместо \bar{u}_h значения точного решения u_h . Ввиду того, что $L_h \bar{u}_h - f_h = 0$, но $\bar{u}_h \neq u_h$, после такой подстановки получается невязка:

$$y_h = L_h u_h - f_h \neq 0. \quad (4.8)$$

Эта невязка и называется погрешностью аппроксимации. Если погрешность аппроксимации велика, то, естественно, никакого приближения полученного решения к искомому нет. Поэтому основное требование к конечно-разностной схеме – погрешность аппроксимации должна стремиться к нулю при $h \rightarrow 0$, т.е. должна иметь место оценка:

$$\|y_h\| \leq C_y h^p; \quad (4.9)$$

C_y не зависит от h ; p – порядок погрешности аппроксимации.

Нахождение и оценка погрешности аппроксимации обычно осуществляются без труда с использованием разложения решения в ряд. Например, для нашей схемы (4.5)

$$y_h = \frac{1}{h} \left(g \left(x_i + \frac{h}{2} \right) \frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h} - g \left(x_i - \frac{h}{2} \right) \frac{u(x_i) - u(x_i - h)}{h} \right) - f(x_i).$$

Используем начальные члены разложения $u(x)$ в ряд Тейлора:

$$u(x_i + h) = u \left(x_{i+1/2} + \frac{h}{2} \right); \quad u_{i+1/2} + \frac{h}{2} u'_{i+1/2} + \frac{h^2}{4} u''_{i+1/2} + o(h^3),$$

$$u(x_i) = u \left(x_{i+1/2} - \frac{h}{2} \right); \quad u_{i+1/2} - \frac{h}{2} u'_{i+1/2} + \frac{h^2}{4} u''_{i+1/2} - o(h^3),$$

$$u(x_i) = u_{i-1/2} + \frac{h}{2} u'_{i-1/2} + \frac{h^2}{4} u''_{i-1/2} + o(h^3),$$

$$u(x_{i-1} - h) = u_{i-1/2} - \frac{h}{2} u'_{i-1/2} + \frac{h^2}{4} u''_{i-1/2} - o(h^3).$$

После подстановки получим

$$y_h = \frac{1}{h} \left(g \left(x_i + \frac{h}{2} \right) u' \left(x_i + \frac{h}{2} \right) - g \left(x_i - \frac{h}{2} \right) u' \left(x_i - \frac{h}{2} \right) \right) + o(h^2) - f(x_i).$$

Продельвая аналогичные разложения с функцией $u = gu' \left(x_i \pm \frac{h}{h} \right)$ и учитывая, что $u'(x_i) = f(x_i)$, получим окончательную оценку y_h ; $o(h^2)$.

Таким образом, полученная нами оценка конечно-разностной схемы (4.5) имеет погрешность аппроксимации второго порядка.

5. Оценка погрешности решения и проверка устойчивости схемы. Разность между \bar{u}_h и u_h называется погрешностью решения:

$$e_h = u_h - \bar{u}_h. \quad (4.10)$$

Аппроксимация является необходимым, но еще не достаточным условием того, чтобы погрешность решения e_h было мала. Необходимым условием малости погрешности решения является еще требование **устойчивости** конечно-разностной схемы к ошибкам округления.

Теоретическое исследование устойчивости конечно-разностной схемы сводится обычно к доказательству того, что малые возмущения $f_h - f_h^0$ правой части (или начальных данных) системы приводят к малым изменениям решения $\bar{u}_h - u_h^0$; $L_h u_h^0 = f_h^0$:

$$\|\bar{u}_h - u_h^0\| \leq C_0 \|f_h - f_h^0\|, \quad (4.11)$$

где C_0 - константа устойчивости.

Основная теорема теории метода сеток утверждает, что если схема устойчива и аппроксимирует исходное ДУ, то при $h \rightarrow 0$ погрешность решения e_h стремится к нулю с тем же порядком, что и погрешность аппроксимации:

$$\|e_h\| \leq C_0 \|y_h\| \leq C_0 C_y h^p. \quad (4.12)$$

4.2 Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений

4.2.1. Задача Коши

$$\frac{d\mathbf{u}}{dx} = f(x, \mathbf{u}); \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0. \quad (4.13)$$

Область интегрирования $\Omega = \{0 \leq x \leq b\}$ покрываем равномерной сеткой $w_h = \{kh, k = 0..n\}$. Для нахождения таблицы решения $\bar{\mathbf{u}}_h = \{\bar{\mathbf{u}}^k; \bar{\mathbf{u}}(x_k)\}$ используем интегроинтерполяционный способ с разбиением Ω на подобласти $\Omega_k = \{x_k \leq x \leq x_{k+1}\}$. Согласно этому способу, для получения конечно-разностной схемы проинтегрируем уравнение (4.13) на каждом интервале $[x_k, x_{k+1}]$ для $k = 0, \dots, n-1$ и разделим на длину этого интервала:

$$\frac{1}{h} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{d\mathbf{r}}{dx} dx = \frac{\mathbf{r}^{k+1} - \mathbf{r}^k}{h} = \frac{1}{h} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, \mathbf{r}(x)) dx. \quad (4.14)$$

Интеграл в правой части (4.14) аппроксимируем одной из квадратурных формул, после чего получаем систему уравнений относительно *приближенных* неизвестных значений искомой функции \bar{u}_h :

$$\frac{\bar{u}^{\mathbf{r},k+1} - \bar{u}^{\mathbf{r},k}}{h} = \frac{1}{h} \sum_j \mathbf{a}_j \mathbf{F}^j, \quad \mathbf{F}^j = f(x_j, \bar{u}^{\mathbf{r},j}), \quad x_k \leq x_j \leq x_{k+1}. \quad (4.15)$$

здесь x_j - точки внутри интервала, используемые для получения квадратурной формулы.

Структура конечно-разностной схемы (4.15) для задачи Коши такова, что она устанавливает закон рекуррентной последовательности $\bar{u}^{\mathbf{r},k+1} = j(\bar{u}^{\mathbf{r},k})$ для искомого решения $\bar{u}^{\mathbf{r},0}, \bar{u}^{\mathbf{r},1}, \bar{u}^{\mathbf{r},2}, \dots, \bar{u}^{\mathbf{r},n}$. Поэтому, используя начальное условие задачи (4.13) и задавая $\bar{u}^{\mathbf{r},0} = \mathbf{u}^{\mathbf{r},0}$, затем по рекуррентным формулам последовательно находят все $\bar{u}^{\mathbf{r},k}$, $k = 1, \dots, n$.

При замене интеграла приближенной квадратурной формулой вносится *погрешность аппроксимации* дифференциального уравнения разностным, которая получается как невязка, если в конечно-разностном уравнении (4.15) подставить вместо $\bar{u}^{\mathbf{r},k}$ значение точного решения $\mathbf{u}^{\mathbf{r},k}$:

$$y_k = \left| \frac{\mathbf{u}^{\mathbf{r},k+1} - \mathbf{u}^{\mathbf{r},k}}{h} - \frac{1}{h} \sum_j \mathbf{a}_j f(x_j, \mathbf{u}^{\mathbf{r},j}) \right|. \quad (4.16)$$

Воспользовавшись соотношением (4.14), получаем простое выражение для вычисления $y_k(h)$:

$$y_k(h) = \frac{1}{h} \left| \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, \mathbf{u}(x)) dx - \sum_j \mathbf{a}_j \mathbf{F}^j \right| \quad (4.17)$$

Таким образом порядок погрешности аппроксимации на единицу меньше порядка погрешности квадратурной формулы, используемой в (4.15).

Явная схема 1-го порядка (Эйлера)

Заменяем интеграл в (4.14) по формуле левых прямоугольников:

$$\frac{1}{h} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, \mathbf{u}(x)) dx \approx \frac{\mathbf{F}^k h}{h} = \mathbf{F}^k.$$

Получим

$$\frac{\bar{u}^{\mathbf{r},k+1} - \bar{u}^{\mathbf{r},k}}{h} = f(x_k, \bar{u}^{\mathbf{r},k}), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (4.18)$$

Задавая $\bar{u}^{\mathbf{r},0} = \mathbf{u}^{\mathbf{r},0}$, с помощью (4.18) легко получить все последующие значения $\bar{u}^{\mathbf{r},k}$, $k = 1, 2, \dots, n$, так как формула **явно разрешается** относительно

$\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1}$. Погрешность аппроксимации $y(h)$ и соответственно точность $e(h)$ имеют первый порядок в силу того, что формула левых прямоугольников на интервале $[x_x, x_{k+1}]$ имеет погрешность второго порядка, а схема устойчива.

Неявная схема 1-го порядка

Используя в (4.15) формулу правых прямоугольников, получим

$$\frac{\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1} - \frac{\mathbf{r}}{u}^k}{h} = f(x_{k+1}, \frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1}). \quad (4.19)$$

Эта схема неразрешима явно относительно $\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1}$, поэтому для получения $\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1}$ требуется использовать итерационную процедуру решения уравнения (4.19) (см. метод простой итерации в подразд.1.4):

$$\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1,s} = \frac{\mathbf{r}}{u}^k + h \cdot f(x_{k+1}, \frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1,s-1}); \quad s=1, 2, \dots - \text{номер итерации.}$$

За начальное приближение берется значение $\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1,0} = \frac{\mathbf{r}}{u}^k$ с предыдущего шага. Обычно, если h выбрано удачно, достаточно сделать 2, 3 итерации для достижения заданной погрешности $\|\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1,s} - \frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1,s-1}\| < e$. Эффективность неявной схемы заключается в том, что у нее константа устойчивости C_0 значительно меньше, чем у явной схемы.

Неявная схема 2-го порядка

Используя в (4.15) формулу трапеций, получим

$$\frac{\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1} - \frac{\mathbf{r}}{u}^k}{h} = \frac{f(x, \frac{\mathbf{r}}{u}^k) + f(x_{k+1}, \frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1})}{2}. \quad (4.20)$$

Так как формула трапеций имеет третий порядок точности, то погрешность аппроксимации $y(h)$ - второй.

Схема (4.20) не разрешена относительно $\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1}$, поэтому требуется итерационная процедура (см.(4.19)):

$$\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1,s} = \frac{\mathbf{r}}{u}^k + \frac{h}{2} (f(x_k, \frac{\mathbf{r}}{u}^k) + f(x_{k+1}, \frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1,s-1})); \quad s=1, 2, \dots; \quad \frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1,0} = \frac{\mathbf{r}}{u}^k. \quad (4.21)$$

Схема Рунге-Кутты 4-го порядка

Используя в (4.15) формулу Симпсона, получим

$$\frac{\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1} - \frac{\mathbf{r}}{u}^k}{h} = \frac{1}{6} \left[f(x_k, \frac{\mathbf{r}}{u}^k) + 4f(x_{k+1/2}, \frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1/2}) + f(x_{k+1}, \frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1}) \right]. \quad (4.22)$$

Ввиду того, что формула Симпсона имеет пятый порядок, погрешность аппроксимации (4.22) имеет четвертый порядок.

Можно по-разному реализовать расчет неявного по $\frac{\mathbf{r}}{u}^{k+1}$ уравнения (4.22), однако наибольшее распространение получила реализация **предиктор-корректор** вида

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1/2,1} &= \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^k + \frac{h}{2} \mathbf{r} f(x_k, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^k), \\ \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1/2,2} &= \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^k + \frac{h}{2} \mathbf{r} f(x_{k+1/2}, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1/2,1}), \\ \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1,1} &= \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^k + h \mathbf{r} f(x_{k+1/2}, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1/2,2}), \\ \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1} &= \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^k + \frac{h}{6} \left[f(x_k, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^k) + 2f(x_{k+1/2}, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1/2,1}) + 2f(x_{k+1/2}, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1/2,2}) + f(x_{k+1}, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1,1}) \right]. \end{aligned}$$

Многошаговые схемы Адамса

При построении всех предыдущих схем для вычисления интеграла в правой части (4.14) использовались лишь точки в диапазоне одного шага $[x_k, x_{k+1}]$. Поэтому при реализации таких схем для вычисления следующего значения $\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1}$ необходимо знать только одно предыдущее значение $\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^k$, т.е. рекуррентная последовательность получается первого порядка. Такие схемы называют **одношаговыми**. Мы, однако, видели, что для повышения точности при переходе от x_k к x_{k+1} приходилось использовать и значения функции F внутри интервала $[x_{k+1/2}, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k+1/2}]$. Схемы, в которых это используется, называют **схемами с дробными шагами**. В этих схемах повышение точности достигается за счет дополнительных затрат на вычисление функции $F(x)$ в промежуточных точках интервала $[x_k, x_{k+1}]$.

Идея методов Адамса заключается в том, чтобы для повышения точности использовать уже вычисленные на предыдущих шагах значения $\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^k, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k-1}, \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{u}}^{k-2}, \dots$

Заменим в (4.14) $F(x)$ интерполяционным многочленом Ньютона вида

$$\begin{aligned} F(x) &\approx F(x_k) + (x - x_k) \frac{F(x_k) - F(x_{k-1})}{h} + \\ &+ (x - x_k)(x - x_{k-1}) \frac{F(x_k) - 2F(x_{k-1}) + F(x_{k-2})}{2h^2} + \dots \end{aligned}$$

После интегрирования на интервале $[x_k, x_{k+1}]$ получим **явную экстраполяционную схему Адамса**. (*Экстраполяцией* называется получение значений интерполяционного многочлена в точках x , выходящих за крайние узлы сетки). В нашем случае интегрирование производится на интервале $[x_k, x_{k+1}]$, а полином строится по узлам x_k, x_{k-1}, x_{k-2} .

Порядок аппроксимации схемы в этом случае определяется количеством использованных при построении полинома узлов (например, если используются x_k, x_{k-1} , то схема второго порядка).

Если в (4.14) заменим $F(x)$ многочленом Ньютона вида

$$F(x) \approx F(x_{k+1}) + (x - x_{k+1}) \frac{F(x_{k+1}) - F(x_k)}{h} + \\ + (x - x_{k+1})(x - x_k) \frac{F(x_{k+1}) - 2F(x_k) + F(x_{k-1}))}{2h^2} + \dots,$$

то после интегрирования получим *неявную интерполяционную схему Адамса*. Заметим, что неявная интерполяционная схема второго порядка совпадает со схемой (4.20).

Явная экстраполяционная схема Адамса 2-го порядка

$$\frac{\overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1} - \overset{\mathbf{r}}{u}^k}{h} = 1,5 f(x_k, \overset{\mathbf{r}}{u}^k) - 0,5 f(x_{k-1}, \overset{\mathbf{r}}{u}^{k-1}). \quad (4.23)$$

Схема двухшаговая, поэтому для начала расчетов необходимо найти $\overset{\mathbf{r}}{u}^1$ по методу (4.20), после чего $\overset{\mathbf{r}}{u}^2, \overset{\mathbf{r}}{u}^3, \dots$, вычислять по (4.23).

Явная экстраполяционная схема Адамса 3-го порядка

$$\frac{\overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1} - \overset{\mathbf{r}}{u}^k}{h} = \frac{23}{12} f(x_k, \overset{\mathbf{r}}{u}^k) - \frac{16}{12} f(x_{k-1}, \overset{\mathbf{r}}{u}^{k-1}) + \frac{5}{12} f(x_{k-2}, \overset{\mathbf{r}}{u}^{k-2}). \quad (4.24)$$

Схема трехшаговая, поэтому для начала расчетов необходимо найти $\overset{\mathbf{r}}{u}^1, \overset{\mathbf{r}}{u}^2$ по методу (4.22), после чего $\overset{\mathbf{r}}{u}^3, \overset{\mathbf{r}}{u}^4, \dots$, вычислить по (4.24).

Неявная схема Адамса 3-го порядка

$$\frac{\overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1} - \overset{\mathbf{r}}{u}^k}{h} = \frac{5}{12} f(x_{k+1}, \overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1}) + \frac{8}{12} f(x_k, \overset{\mathbf{r}}{u}^k) - \frac{1}{12} f(x_{k-1}, \overset{\mathbf{r}}{u}^{k-1}). \quad (4.25)$$

Так как схема двухшаговая, то для начала расчетов необходимо найти $\overset{\mathbf{r}}{u}^1$ по методу (4.20), после чего $\overset{\mathbf{r}}{u}^2, \overset{\mathbf{r}}{u}^3, \dots$, вычислить по (4.25).

Для нахождения $\overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1}$ требуется использовать метод простой итерации:

$$\overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1,s} = \overset{\mathbf{r}}{u}^k + h \left[\frac{5}{12} f(x_{k+1}, \overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1,s-1}) + \frac{8}{12} f(x_k, \overset{\mathbf{r}}{u}^k) - \frac{1}{12} f(x_{k-1}, \overset{\mathbf{r}}{u}^{k-1}) \right].$$

Значение $\overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1,0}$ следует рассчитать по формуле (4.23):

$$\overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1,0} = \overset{\mathbf{r}}{u}^k + h \left[1,5 f(x_k, \overset{\mathbf{r}}{u}^k) - 0,5 f(x_{k-1}, \overset{\mathbf{r}}{u}^{k-1}) \right].$$

Чаще всего бывает достаточно одной итерации. Если при этом разность $\left| \overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1,0} - \overset{\mathbf{r}}{u}^{k+1,1} \right|$ оказывается большой, то следует уменьшить h .

4.2.2. Решение краевой задачи для линейной системы парных дифференциальных уравнений

Как отмечалось выше (см. разд.2), множество практически важных задач приводятся к краевой задаче для системы ОДУ второго порядка (3.3). При этом граничные условия на концах отрезка интегрирования задают связь между значением и производной функции для каждого такого уравнения.

Для решения таких систем обычно используют или *метод прогонки*, аналогичный описанному выше для задачи (4.1), или *метод пристрелки*. При реализации последнего система ОДУ второго порядка (например вида (3.3)) преобразуется к системе четного числа уравнений первого порядка вида (3.2) со специфическими граничными условиями: каждое условие задает связь между значениями u^k и u^{k+1} на границах. Такую систему назовем *парной системой дифференциальных уравнений*.

В соответствии с методом пристрелки краевую задачу приводят к решению ряда задач Коши, для чего дополняют недостающие начальные условия при $x=0$ пристрелочными параметрами и подбирают их таким образом, чтобы после решения задачи выполнялись все заданные условия на другом конце интервала.

Существует, однако, класс таких систем, для которых, с одной стороны, метод обычной прогонки для системы вида (4.6) неустойчив, а с другой стороны, задача Коши некорректна. Такие системы возникают, например, при расчете нерегулярных волноводов. Ниже приведен устойчивый алгоритм матричной прогонки для таких систем парных уравнений.

Запишем систему парных дифференциальных уравнений в виде

$$\frac{d\mathbf{u}}{dx} = G(x)\mathbf{u} + \mathbf{f}(x), \quad (4.26)$$

$$\mathbf{u} = \{u^1, \dots, u^{2M}\} = \{A_1, B_1, A_2, B_2, \dots, A_m, B_m, \dots, A_M, B_M\}; \quad \mathbf{f} = \{f^1, f^2, \dots, f^{2M-1}, f^{2M}\}.$$

Здесь, например, A_k – значение функции в соответствующем ДУ второго порядка, а B_k – значение ее производной.

Зададим граничные условия к (4.26) в виде

$$\begin{aligned} a_m^0 u^{2m-1}(0) + b_m^0 u^{2m}(0) &= g_m^0; \\ a_m^L u^{2m-1}(b) + b_m^L u^{2m}(b) &= g_m^L; \quad m=1 \dots M. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Как видно, эти условия задают связь между A_k и B_k .

Для расчетов выберем равномерную сетку

$$w_h = \{(i-1)h, \quad h = b/n, \quad i=1 \dots n1, \quad n1 = n+1\}$$

и трехточечную конечно-разностную неявную схему Адамса третьего порядка точности (4.25):

$$\frac{\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i}{h} = \frac{5}{12}(G\mathbf{u} + \mathbf{f})_{i+1} + \frac{8}{12}(G\mathbf{u} + \mathbf{f})_i - \frac{1}{12}(G\mathbf{u} + \mathbf{f})_{i-1}. \quad (4.28)$$

Заметим, что эта схема приводит к блочной трехдиагональной матрице с преобладающим диагональным элементом. После приведения подобных членов в (4.28) получим систему линейных алгебраических уравнений (если не считать, что \dot{f} может зависеть от \dot{u}):

$$\frac{h}{12} G_{i-1} \mathbf{r}_{\bar{u}_{i-1}} - \left(E + \frac{8h}{12} G_i \right) \mathbf{r}_{\bar{u}_i} + \left(E - \frac{5h}{12} G_{i+1} \right) \mathbf{r}_{\bar{u}_{i+1}} = \mathbf{d}_i \quad i = 2 \dots n; \quad (4.29)$$

$$\mathbf{d}_i = \frac{h}{12} (5 \mathbf{r}_{f_{i+1}} + 8 \mathbf{r}_{f_i} - \mathbf{r}_{f_{i-1}}),$$

здесь E – единичная диагональная матрица.

Систему (4.29) следует дополнить одним недостающим конечно-разностным уравнением второго порядка (4.20):

$$\frac{\mathbf{r}_{\bar{u}_2} - \mathbf{r}_{\bar{u}_1}}{h} = \frac{G_1 \mathbf{r}_{\bar{u}_1} + f_1 + G_2 \mathbf{r}_{\bar{u}_2} + f_2}{2} \quad (4.30)$$

и двумя граничными условиями (4.27):

$$\mathbf{a}_m^0 \bar{u}_1^{2m-1} + \mathbf{b}_m^0 \bar{u}_1^{2m} = \mathbf{g}_m^0; \quad \mathbf{a}_m^L \bar{u}_{n1}^{2m-1} + \mathbf{b}_m^L \bar{u}_{n1}^{2m} = \mathbf{g}_m^L.$$

Структура матрицы конечно-разностной схемы (4.29), (4.30) представлена на рис.4.1. Здесь размер ячеек $2M \times 2M$, кроме первой и последней строк, в которых ячейки имеют размер $M \times 2M$. Матрица получается ленточной.

Для решения системы уравнений с такой матрицей разработан эффективный метод прогонки на основе модификации метода Гаусса.

$\mathbf{a}^0 \quad \mathbf{b}^0$	0	0	0	•	0	0	0	0
$-E - \frac{h}{2} G_1$	$E - \frac{h}{2} G_2$	0	0	•	0	0	0	0
$\frac{h}{12} G_1$	$-E - \frac{8h}{12} G_2$	$E - \frac{5h}{12} G_3$	0	•	0	0	0	0
•	•	•	•	•	•	•	•	•

0	0	0	0	•	0	$\frac{h}{12}G_{n-1}$	$-E - \frac{8h}{12}G_n$	$E - \frac{5h}{12}G_{n1}$
0	0	0	0	•	0	0	0	$a^L \quad b^L$

Рис. 4.1

4.3. Решение дифференциальных уравнений в частных производных

4.3.1. Одномерное нестационарное уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f; \quad u(a,t) = a; \quad u(b,t) = b; \quad u(x,0) = u^0(x). \quad (4.31)$$

Область интегрирования $\Omega = \{0 \leq x \leq b, 0 \leq t \leq T\}$ покрываем равномерной сеткой $w_{h,t} = \{(i-1)h, kt, i=1 \dots n1, k=0 \dots K\}$, t - шаг по времени; h - шаг по x ; k - номер временного слоя; i - номер точки. Для нахождения таблицы решения $\bar{u}_h = \{\bar{u}_i^k; u(x_i, t^k)\}$ используем интегроинтерполяционный способ с разбиением Ω на подобласти $\Omega_i^k = \{x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}, kt \leq t \leq (k+1)t\}$. По аналогии с (4.4) и (4.5) построим следующую неявную конечно-разностную схему Кранка-Николсона, безусловно устойчивую и имеющую погрешность аппроксимации второго порядка $o(t^2 + h^2)$:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{u}_i^{k+1} - \bar{u}_i^k}{t} &= w_r L_x \bar{u}_i^{k+1} + (1 - w_r) L_x \bar{u}_i^k + \bar{f}_i = \\ &= \frac{w_r}{h^2} \left[g_{i-1/2} \bar{u}_{i-1}^{k+1} - (g_{i-1/2} + g_{i+1/2}) \bar{u}_i^{k+1} + g_{i+1/2} \bar{u}_{i+1}^{k+1} \right] + \\ &+ \frac{1 - w_r}{h^2} \left[g_{i-1/2} \bar{u}_{i-1}^k - (g_{i-1/2} + g_{i+1/2}) \bar{u}_i^k + g_{i+1/2} \bar{u}_{i+1}^k \right] + \bar{f}_i; \quad w_r = 0,5. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Каждое уравнение (4.32) связывает между собой значения искомого решения в шести узлах сетки (шеститочечный шаблон), три из которых берутся на нижнем k -м слое, три – на соответствующих местах верхнего $k+1$ - го слоя.

Решение (4.32) находится следующим образом. Воспользуемся начальным условием (4.31) – зададим все значения u_h на нулевом слое при $k=0$ $\bar{u}_i^0 = u^0(x_i)$. Используя (4.32), для нахождения таблицы решения на следующем $k+1$ слое решаем методом прогонки систему с трехдиагональной матрицей (4.6) при следующих коэффициентах:

$$\begin{aligned}
a_i u_{i-1}^{k+1} + b_i u_i^{k+1} + c_i u_{i+1}^{k+1} &= d_i, \quad u_1^{k+1} = a, \quad u_{n1}^{k+1} = b; \quad i = 2 \dots n. \\
a_i &= \frac{w_r t}{h^2} g_{i-1/2}; \quad c_i = \frac{w_r t}{h^2} g_{i+1/2}; \quad b_i = -a_i - c_i - 1; \quad \mathcal{A}_i = \frac{(1-w_r)t}{h^2} g_{i-1/2}; \\
\mathcal{B}_i &= \frac{(1-w_r)t}{h^2} g_{i+1/2}; \quad \mathcal{B}_i^0 = -\mathcal{A}_i - \mathcal{B}_i + 1; \quad d_i = -[\mathcal{A}_i u_{i-1}^k + \mathcal{B}_i u_i^k + \mathcal{B}_i^0 u_{i+1}^k] - t f_i.
\end{aligned}$$

В результате все значения на l -м слое будут найдены. После этого переходим к вычислению значений на втором слое и т.д. до слоя K .

Заметим, что изменяя весовой параметр w_r , регулирующий распределение разностного оператора $L_x \bar{u}_h$, между соседними слоями k и $k+1$ можно изменять свойства конечно-разностной схемы. Так, при $w_r = 0$, когда разностный оператор привязан к нижнему слою, получим явную ($a_i^{k+1} = c_i^{k+1} = 0, b_i^{k+1} = 1$) схему: для получения значений \bar{u}_i^{k+1} нет необходимости решать систему уравнений типа (4.6). Такая явная схема имеет погрешность аппроксимации $o(t^1 + h^2)$ и условно устойчива, т.е. ее можно использовать лишь при $t < h^2/4$. Другой предельный случай $w_r = 1$ соответствует чисто неявной схеме, когда $L_x \bar{u}_h$ привязан к верхнему слою ($d_i = \bar{u}_i^k$). Этот вариант схемы также имеет первый порядок аппроксимации по времени, т.е. $o(t^1 + h^2)$, однако, она безусловна устойчива (при любых t) и константа устойчивости C_0 (4.11) значительно меньше, чем у схемы Кранка-Николсона. Поэтому чисто неявную схему используют или при расчетах быстро изменяющихся во времени процессов, или при нахождении стационарных режимов методом установления. В последнем случае сам процесс установления не важен для приложений и для ускорения сходимости w_r и t выбирают эмпирически в широких пределах $0 < w_r \leq 2$, добиваясь установления процесса за минимальное количество шагов по времени.

4.3.2. Задача Дирихле для двухмерного уравнения Пуассона

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g(x, y, u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(g(x, y, u) \frac{\partial u}{\partial y} \right) = f. \quad (4.33)$$

Область интегрирования $\Omega = \{0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b\}$.

На границе Γ : $u(0, y) = a^0(y); \quad u(a, y) = a^1(y);$

$u(x, 0) = b^0(x); \quad u(x, b) = b^1(x).$

Выбираем равномерную сетку $w_{h_x h_y} = \{(i-1)h_x, (j-1)h_y, i = 1 \dots n1, j = 1 \dots m1\}$. При нахождении таблицы $\bar{u}_h = \{\bar{u}_{ij}; u(x_i, y_j)\}$ разбиваем область Ω на подобласти

$\Omega_{ij} = \{x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}, y_{i-1/2} \leq y \leq y_{i+1/2}\}$ и по аналогии с (4.4), (4.5) построим следующую конечно-разностную схему:

$$\begin{aligned} & \frac{g_{i-1/2,j} \bar{u}_{i-1,j} - (g_{i-1/2,j} + g_{i+1/2,j}) \bar{u}_{i,j} + g_{i+1/2,j} \bar{u}_{i+1,j}}{h_x^2} + \\ & + \frac{g_{i,j-1/2} \bar{u}_{i,j-1} - (g_{i,j-1/2} + g_{i,j+1/2}) \bar{u}_{i,j} + g_{i,j+1/2} \bar{u}_{i,j+1}}{h_y^2} = \\ & = L_x \bar{u}_{i,j} + L_y \bar{u}_{i,j} = \bar{f}_{i,j}; \quad i = 2 \dots n1, \quad j = 2 \dots m1. \end{aligned} \quad (4.34)$$

После дополнения уравнений $\bar{u}_{1j} = a_j^0$; $\bar{u}_{n1j} = a_j^1$; $j = 2 \dots m$, $\bar{u}_{i1} = b_i^0$; $\bar{u}_{im} = b_i^1$; $i = 2 \dots n$ получаем полностью определенную систему алгебраических уравнений. Эта система имеет ленточную пятидиагональную матрицу, так как каждое уравнение связывает значение решения в пяти смежных узлах сетки (пятиточечный шаблон «крест»).

Ввиду очень большого количества неизвестных, решение системы (4.34), как правило, получают одним из итерационных методов, среди которых наиболее часто используются метод простой итерации. Его модификация - метод Зейделя с последовательной релаксацией или более эффективный метод продольно-поперечной прогонки.

Метод простой итерации с релаксацией реализуется следующим образом: выразим в каждом уравнении (4.34) диагональный элемент и запишем следующую итерационную схему (k – номер итерации):

$$\begin{aligned} \bar{u}_{ij}^{k+1} &= a_{ij} \bar{u}_{i-1,j}^k + b_{ij} \bar{u}_{i+1,j}^k + c_{ij} \bar{u}_{i,j-1}^k + d_{ij} \bar{u}_{i,j+1}^k + e_{ij}, \\ \bar{u}_{ij}^{k+1} &= w_r \bar{u}_{ij}^{k+1} + (1 - w_r) \bar{u}_{ij}^k. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Здесь $0 < w_r < 2$ – некоторый эмпирически подбираемый параметр, получивший название **параметр релаксации**. Если процесс сходимости монотонный и очень медленный, то для его ускорения обычно выбирают $1 \leq w_r$, что соответствует верхней релаксации. Если процесс развивается в виде ярко выраженных расходящихся колебаний, то его «релаксируют», выбирая $w_r < 1$, что соответствует нижней релаксации.

При программной реализации метода простой итерации используют два массива: $Uk[1..n1, 1..m1]$ и $Uk1[1..n1, 1..m1]$. Вначале в массиве Uk помещается начальное распределение $u^0(x_i, y_i)$, после этого по формуле (4.35) получают результат итерации в массиве $Uk1$. Затем массив $Uk1$ пересылается в Uk , и снова повторяется итерация до достижения условия сходимости.

Метод Зейделя отличается от метода простой итерации тем, что в нем используют только один массив Uk , а полученное по формуле (4.35) новое

значение \bar{u}_{ij}^{k+1} сразу засылается на место \bar{u}_{ij}^k и используется при вычислении следующих значений $\bar{u}_{p>i,l>j}^{k+1}$. За счет этого скорость сходимости возрастает примерно вдвое. Однако следует отметить, что условия сходимости метода Зейделя более жесткие, поэтому если данный метод расходится при всех w_r , то рекомендуется попробовать использовать метод простой итерации.

Метод продольно-поперечной прогонки реализуется следующим образом. Запишем для (4.34) итерационную схему:

$$\begin{aligned} L_x \bar{u}_{ij}^{k+1/2} + L_y \bar{u}_{ij}^k &= \bar{f}_{ij} + \frac{\bar{u}_{ij}^{k+1/2} - \bar{u}_{ij}^k}{w_r}, \\ L_x \bar{u}_{ij}^{k+1/2} + L_y \bar{u}_{ij}^{k+1} &= \bar{f}_{ij} + \frac{\bar{u}_{ij}^{k+1} - \bar{u}_{ij}^{k+1/2}}{w_r}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

здесь $w_r \leq \min(a^2/n, b^2/m)$ - эмпирически подбираемый параметр, аналогичный шагу по времени в схеме (4.32); $k+1/2$ - промежуточный шаг итерации.

Вначале по заданному распределению \bar{u}_{ij} , используя первое уравнение (4.36), находим $\bar{u}_{ij}^{k+1/2}$, решая для каждого $j=2..m$ систему с трехдиагональной матрицей:

$$\begin{aligned} a_{ij}^k \bar{u}_{i-1,j}^{k+1/2} + b_{ij}^k \bar{u}_{i,j}^{k+1/2} + c_{ij}^k \bar{u}_{i+1,j}^{k+1/2} &= d_{ij}^k; \\ a_{ij}^k &= g_{i-1/2,j}; \quad c_{ij}^k = g_{i+1/2,j}; \quad b_{ij}^k = -a_{ij}^k - c_{ij}^k - \frac{h^2}{w_r}; \quad d_{ij}^k = h^2 \left(f_{ij} - L_y u_{ij}^k - \frac{\bar{u}_{ij}^k}{w_r} \right). \end{aligned}$$

После этого, используя второе уравнение (4.36), находим \bar{u}_{ij}^{k+1} , решая для каждого $i=2..n$ систему с трехдиагональной матрицей:

$$\begin{aligned} a_{ij}^{k+1} \bar{u}_{i,j-1}^{k+1} + b_{ij}^{k+1} \bar{u}_{i,j}^{k+1} + c_{ij}^{k+1} \bar{u}_{i,j+1}^{k+1} &= d_{ij}^{k+1}, \\ a_{ij}^{k+1} &= g_{i,j-1/2}; \quad c_{ij}^{k+1} = g_{i,j+1/2}; \quad b_{ij}^{k+1} = -a_{ij}^{k+1} - c_{ij}^{k+1} - \frac{h^2}{w_r}; \quad d_{ij}^{k+1} = h^2 \left(f_{ij} - L_x u_{ij}^{k+1/2} - \frac{\bar{u}_{ij}^{k+1/2}}{w_r} \right). \end{aligned}$$

Метод продольно-поперечной прогонки является одним из самых эффективных методов решения двухмерных задач для уравнения типа теплопроводности. Его развитием для трехмерных уравнений является метод расщепления.

Контрольные вопросы

1. Сформулируйте коротко суть метода сеток.
2. Как строится сетка и какие требования к ней предъявляются?
3. Что собой представляет конечно-разностная схема, как она получается?

4. Что такое погрешность аппроксимации и устойчивость конечно-разностной схемы?
5. Сформулируйте и поясните смысл основной теоремы теории метода сеток.
6. Какие методы решения задачи Коши для ОДУ вы знаете?
7. Приведите примеры решения методом сеток дифференциального уравнения теплопроводности.

5. ПРОЕКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ

5.1. Теоретические основы проекционных методов

Основной задачей классического вариационного исчисления является следующая: среди всех непрерывных функций $u = u(x)$, $a \leq x \leq b$, имеющих кусочно-непрерывные производные и удовлетворяющих граничным условиям (например, $u(a) = a$; $u(b) = b$), найти такую, которая доставляет минимальное значение функционала:

$$J[u] = \int_a^b \Phi(x, u, u') dx; \quad \left(u' = \frac{du}{dx} \right). \quad (5.1)$$

В общем случае функция u может быть функцией нескольких переменных $u(x, y, z, \dots)$, в Φ входят частные производные, а интеграл берется по некоторой области Ω .

Содержание одной из центральных теорем классического вариационного исчисления заключается в том, что дважды дифференцируемая функция $u(x)$, доставляющая минимум функционала (5.1), является решением краевой задачи для дифференциального уравнения Эйлера с теми же граничными условиями:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial u'} \right) = 0.$$

Справедливо также обратное утверждение: решение краевой задачи для дифференциального уравнения (в общем случае ДУ в частных производных) при определенных условиях является также решением соответствующей задачи вариационного исчисления.

Таким образом, имеется возможность одни и те же задачи теоретической физики сводить либо к решению краевой задачи для дифференциального уравнения, либо к нахождению минимума некоторого функционала, т.е. к решению задачи вариационного исчисления. Это позволяет при решении краевой задачи для ДУ, сводя ее к вариационной, применять специфические вариационные методы. Проиллюстрируем технику такого решения.

Запишем краевую задачу для ДУ в общем виде (4.2):

$$Lu = f; \quad u|_{\Gamma} = a(\Gamma). \quad (5.2)$$

Область определения функции u : $R(u) = \Omega$; Γ – граница Ω .

Тогда соответствующий функционал (заметим, что это один из возможных), минимум которого достигается на решении (5.2), имеет вид

$$J[u] = (Lu, u) - 2(f, u). \quad (5.3)$$

Здесь (\cdot, \cdot) мы обозначили скалярное произведение в общем случае в многомерном пространстве $L_2[\Omega]$ (см. подразд. 1.2).

Самым универсальным и во многих случаях единственным способом нахождения минимума функционала общего вида $J[u]$ является *метод Рунца* (W. Ritz), впервые им предложенный в 1908 г. (иногда его называют методом пробных функций). Теоретическим обоснованием этого метода занимались Н.М. Крылов и Н.Н. Боголюбов. Чаще всего этот метод реализуется следующим образом.

Выбираем в области определения $R(L)$ оператора L (например, в классе дважды дифференцируемых функций, удовлетворяющих определенным граничным условиям) некоторой *базис*, т.е. набор функций $\{j_1(x), j_2(x), \dots, j_N(x)\}$, обладающих *свойством полноты*: любая функция $u(x)$ из области решений может быть представлена в виде $u(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N a_k j_k(x)$.

Будем искать приближение к функции, доставляющей минимум функционала $J[u]$ в виде

$$u^N(x) = \sum_{k=1}^N a_k j_k(x). \quad (5.4)$$

После подстановки (5.4) в функционал $J[u]$ получим функцию N переменных:

$$F(a_1, a_2, \dots, a_N) = J[u^N] = J \left[\sum_{k=1}^N a_k j_k(x) \right].$$

Неизвестные значения коэффициентов разложения a_1, a_2, \dots, a_N искомого решения по функциям базиса будем находить из условия $\min_{a_1, \dots, a_N} F(a_1, a_2, \dots, a_N)$.

Таким образом, задача вариационного исчисления сводится к нахождению минимума функции n переменных.

Алгоритмы решения этой задачи для небольшого числа n хорошо разработаны. Для случая квадратичных функционалов, например вида (5.3) с линейным дифференциальным оператором Lu , нахождение a_1, a_2, \dots, a_N сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений следующим образом. После подстановки (5.4) в (5.3) получим

$$F = \left(L \sum_{k=1}^N a_k j_k(x), \sum_{i=1}^N a_i j_i(x) \right) - 2(f, \sum_{i=1}^N a_i j_i) = \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^N a_k a_i (L j_k, j_i) - 2 \sum_{i=1}^N a_i (f, j_i).$$

Воспользуемся необходимым условием минимума и составим n уравнений вида

$$\frac{\partial F(a_1, \dots, a_N)}{\partial a_i} = 2 \sum_{k=1}^N a_k (Lj_k, j_i) - 2(f, j_i) = 0; \quad i=1 \dots N.$$

Получаем систему линейных алгебраических уравнений для нахождения a_k :

$$\sum_{k=1}^N a_k (Lj_k, j_i) = (f, j_i); \quad i=1 \dots N. \quad (5.5)$$

Если переписать систему (5.5) в виде

$$\left(L \sum_{k=1}^N a_k j_k, j_i \right) = (f, j_i) \quad \text{или} \quad (Lu^N, j_i) = (f, j_i), \quad (5.6)$$

то можно заметить, что система (5.6) получается из исходной краевой задачи (5.2) простой подстановкой u^N вместо u и последующим умножением скалярно на каждую функцию базиса.

Ввиду того, что такое скалярное произведение называется проекцией на функцию базиса, система (5.6) получила название **системы проекционных уравнений**. Заметим, что для получения проекционных уравнений (5.6) совершенно необязательно требование линейности дифференциального оператора L . В наиболее общем случае при построении проекционной системы уравнений выбирают два базиса $\{j_1(x), j_2(x), \dots, j_N(x)\}$ и $\{y_1(x), y_2(x), \dots, y_N(x)\}$ и некоторый дифференциальный оператор K :

$$\left(L \sum_{k=1}^N a_k j_k, Ky_i \right) = (f, Ky_i); \quad i=1 \dots N. \quad (5.7)$$

Как видим, полученное уравнение (5.7) совершенно не связано с необходимостью предварительного получения функционала (5.3), а обоснование сходимости полученного решения u^N к u следует из теоремы о сходимости к нулю невязки $r_n(x) = Lu^N - f$, если равны нулю ее проекции на базисные функции: $(r_n, Ky_i) = 0$. Поэтому алгоритмы отыскания решения краевых задач на основе построения системы (5.7) получили название **проекционные методы**.

Впервые идею такого решения ДУ (не обращаясь к вариационной задаче) предложил в 1915 г. Б.Г. Галеркин. Теоретическим обоснованием этого метода занимался Келдыш.

В зависимости от выбора в (5.7) функций j_i , y_i и оператора K эти методы имеют свои названия:

метод Бубнова-Галеркина: $K = I$ (тождественный), $y_i = j_i$, $j_i \in R(L)$, оператор L может не быть симметричным и положительно определенным. Бубнов открыл этот метод и использовал в своих расчетах конструкций кораблей еще до публикации Галеркина;

метод Галеркина-Петрова: $K = I$, $y_i \neq j_i$, $j_i \in R(L)$, $y_i \in H(L)$. $H(L)$ - область значений L , L - имеет ограниченный обратный оператор L^{-1} ;

метод наименьших квадратов: $K = L$, $y_i = j_i$, при условии существования ограниченного оператора L^{-1} доказана сходимость метода;

метод моментов: $K \neq I$, $y_i = j_i$. При условии на оператор K вида $(Lu, Ku) \geq g^2 \|u\|^2$ и $(Lu, Ku) \geq b^2 \|Ku\|^2$ доказана сходимость.

Вышеперечисленные методы обычно называют просто методом Галеркина (иногда методом Ритца, так как все они могут быть получены из применения метода Ритца к нахождению минимума соответствующего задаче (5.2) функционала).

Следует отметить, что в каждом конкретном случае от выбора удачной модификации проекционного метода зависит эффективность решения задачи.

5.2. Примеры решения задач методом Галеркина

5.2.1. Одномерная краевая задача Дирихле

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = f(x); \quad u(0) = a; \quad u(1) = b; \quad \Omega = [0, 1]; \quad \Gamma = [0, 1]. \quad (5.8)$$

Выберем базис вида

$$\{j_1(x), j_2(x), \dots, j_N(x); j_k(0) = j_k(1) = 0; y_i = j_i\}. \quad (5.9)$$

Функции базиса (5.9) удовлетворяют нулевым граничным условиям, а сам базис является полным в классе функций, обращающихся в ноль на границах, например $\{j_k = \sin(k\pi x), k = 1 \dots N\}$.

Решение будем искать в виде

$$u^N(x) = j_0(x) + \sum_{k=1}^N a_k j_k(x). \quad (5.10)$$

Здесь $j_0(x)$ выбирается такой, чтобы u^N удовлетворяло заданным граничным условиям (5.8), например, можно положить $j_0 = a + (b - a)x$. Если известна некоторая информация об искомом решении, то ее можно учесть в функции j_0 .

Составим проекционные уравнения (5.6):

$$\int_0^1 \frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial (j_0 + \sum a_k j_k)}{\partial x} \right) j_i dx = \int_0^1 f j_i dx; \quad i = 1 \dots N.$$

В левой части уравнения применим формулу интегрирования по частям и, воспользовавшись тем, что $j_i|_{\Gamma} = 0$, получим

$$-\int_0^1 g \frac{\partial (j_0 + \sum a_k j_k)}{\partial x} \frac{\partial j_i}{\partial x} dx = \int_0^1 f j_i dx.$$

После очевидных преобразований имеем

$$\sum_{k=1}^n a_k \int_0^1 g \frac{\partial j_k}{\partial x} \frac{\partial j_i}{\partial x} dx = -\int_0^1 \left(f + g \frac{\partial j_0}{\partial x} \right) j_i dx.$$

Или в принятых выше обозначениях

$$\sum_{k=1}^N \left(g \frac{\partial j_k}{\partial x}, \frac{\partial j_i}{\partial x} \right) a_k = \hat{f}_i; \quad i=1 \dots N. \quad (5.11)$$

Полученная система линейных алгебраических уравнений имеет симметричную, положительно определенную матрицу, и ее решение находится эффективным методом квадратного корня. Следует, однако, отметить, что с увеличением N система становится плохо обусловленной. Если коэффициенты $g(x)$, $f(x)$ имеют особенности (например разрывы), то для увеличения точности полезно эти особенности выделить и учесть в функции j_0 . В этом случае удастся значительно ускорить сходимость ряда (5.10).

Из вида системы (5.11) следует, что для получения решения базисные функции могут не иметь второй производной (достаточно только первой). В этом случае полученное решение (5.10) не является в обычном смысле решением исходного дифференциального уравнения (5.8) и говорят, что оно является *обобщенным решением*.

5.2.2. Двухмерная краевая задача Дирихле

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(g(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right) = f(x, y); \quad u|_{\Gamma} = a(\Gamma); \quad x, y \in \Omega. \quad (5.12)$$

Выбираем базис $\{j_0(x, y), j_1(x, y), \dots, j_N(x, y)\}$, плотный во множестве функций, удовлетворяющих граничным условиям (5.12) и имеющих первую производную. Решение ищем в виде

$$u^N = \sum_{k=0}^N a_k j_k(x, y). \quad (5.13)$$

Составляем проекционные уравнения:

$$\iint_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u^N}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(g \frac{\partial u^N}{\partial y} \right) \right] j_k d\Omega = \int_{\Omega} f j_j d\Omega. \quad (5.14)$$

Чтобы избавиться от второй производной, воспользуемся методом интегрирования по частям (2.7), который для двухмерного случая имеет вид (здесь $\hat{n} = (n_x, n_y)$ – единичный вектор нормали к границе):

$$\iint_{\Omega} v \frac{\partial u}{\partial x} d\Omega = - \iint_{\Omega} u \frac{\partial v}{\partial x} d\Omega + \int_{\Gamma} u v n_x d\Gamma,$$

$$\iint_{\Omega} v \frac{\partial u}{\partial y} d\Omega = - \iint_{\Omega} u \frac{\partial v}{\partial y} d\Omega + \int_{\Gamma} u v n_y d\Gamma.$$

После подстановки в (5.14) получаем систему проекционных уравнений для нахождения неизвестных $a_0 \dots a_N$:

$$\sum_{k=0}^N a_k \left[\iint_{\Omega} g \left(\frac{\partial j_k}{\partial x} \frac{\partial j_i}{\partial x} + \frac{\partial j_k}{\partial y} \frac{\partial j_i}{\partial y} \right) d\Omega - \int_{\Gamma} g \left(\frac{\partial j_k}{\partial x} n_x + \frac{\partial j_k}{\partial y} n_y \right) j_i d\Gamma \right] = \hat{f}_i. \quad (5.15)$$

Заметим, что если удастся подобрать функции j_k с нулевыми значениями на Γ , то второй интеграл в (5.15) обращается в ноль; иногда удается подобрать $j_0|_{\Gamma} = a$, $j_{k \geq 1}|_{\Gamma} = 0$, тогда, выбрав $a_0 = 1$, этот интеграл переносится в правую часть и входит в \hat{f}_i , как в предыдущем примере.

5.2.3. Сведение задачи для ДУ в частных производных к решению задачи для системы ОДУ методом Канторовича

Предположим, что задана краевая задача в цилиндрической области вида

$$Lu(xyz) = f; \quad u|_{z=0} = a(xy); \quad u|_{z=L} = b(xy); \quad u|_{\Gamma} = 0, \quad (5.16)$$

где L - дифференциальный оператор 2-го порядка по z ; Γ - граница области поперечного сечения Ω_{Γ} , $x, y \in \Omega_{\Gamma}$.

Выберем базис из функций, определенных на Ω_{Γ} $\{j_1(x, y), \dots, j_N(x, y)\}$ и обращающихся в ноль на границе $j_k|_{\Gamma} = 0$.

Решение (5.16) Л.В. Канторович предложил искать в виде

$$u^N = \sum_{k=1}^N a_k(z) j_k(x, y), \quad (5.17)$$

т.е. коэффициенты разложения a_k зависят от третьей координаты z .

Составим проекционные уравнения:

$$\iint_{\Omega_{\Gamma}} \left[\left(L \sum_{k=1}^N a_k(z) j_k(x, y) \right) j_i(x, y) \right] dx dy = \iint_{\Omega_{\Gamma}} f(x, y, z) j_i(x, y) dx dy. \quad (5.18)$$

После интегрирования получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка для неизвестных коэффициентов с граничными условиями $a_k(0) = a_k$; $a_k(L) = b_k$. Значения a_k , b_k находятся из решения двух систем линейных алгебраических уравнений:

$$\sum_k a_k \iint_{\Omega_{\Gamma}} j_k j_i dx dy = \iint_{\Omega_{\Gamma}} a j_i dx dy; \quad \sum_k b_k \iint_{\Omega_{\Gamma}} j_k j_i dx dy = \iint_{\Omega_{\Gamma}} b j_i dx dy. \quad (5.19)$$

Заметим, что решение задачи значительно упрощается, если функции выбранного базиса оказываются ортогональными, т.е.

$$\iint_{\Omega_{\Gamma}} j_k j_i dx dy = \begin{cases} 0, & i \neq k \\ \|j_k\|_{L_2}^2, & i = k. \end{cases}$$

В этом случае $a_k = \iint_{\Omega_{\Gamma}} a j_k dx dy / \|j_k\|_{L_2}^2$; $b_k = \iint_{\Omega_{\Gamma}} b j_k dx dy / \|j_k\|_{L_2}^2$.

Такое сведение к системе ОДУ обычно используют при решении задач распространения волн в нерегулярных волноводах, а базис получают как набор собственных функций из решения соответствующей задачи Штурма-Лиувилля.

Контрольные вопросы

1. Как ставится основная задача вариационного исчисления?
2. Сформулируйте метод Рунге для нахождения минимума функционала.
3. Как получаются проекционные уравнения при решении краевой задачи для дифференциальных уравнений?
4. В чем разница между методами Бубнова-Галеркина, Галеркина-Петрова, методом наименьших квадратов и методом моментов?
5. Как решается краевая задача методом Галеркина-Канторовича?

Библиотека БГУИР

6. ФИНИТНЫЕ ФУНКЦИИ И АППРОКСИМАЦИЯ

6.1. Базис из финитных функций

В проекционных методах, рассмотренных в предыдущей лекции, использовались базисные функции $j_k(x)$, определенные на всей области определения решения Ω , имеющей границу Γ . При этом наряду с несомненными достоинствами проявились два основных недостатка этих методов:

а) сложность выбора базиса из функций с соответствующими граничными условиями для произвольной области Ω ;

б) получаемая система алгебраических уравнений (5.11), (5.15) имеет полностью заполненную матрицу, каждый элемент которой представляет собой интеграл по всей области Ω , поэтому при большом количестве базисных функций метод становится слишком затратным.

Выход из этой ситуации был найден в результате использования базиса из финитных функций.

Финитной называется функция $j_\Omega(x)$, определенная для всех $-\infty \leq x \leq \infty$, но отличная от нуля лишь на некоторой конечной области Ω , называемой **конечным носителем**:

$$j_\Omega(x) = \begin{cases} 0, & x \notin \Omega, \\ j(x), & x \in \Omega. \end{cases} \quad (6.1)$$

Для $u(x)$, определенных на Ω , построение базиса $\{j_1 \dots j_N\}$ из финитных функций осуществляется следующим образом. Сначала область Ω , в которой решается задача, некоторым регулярным образом покрывается конечным числом N перекрывающихся подобластей Ω_k , например как на рис. 6.1:

$$\Omega \subset \sum_{k=1}^N \Omega_k; \quad \Omega \cap \Omega_k \neq \emptyset; \quad \Omega_k \cap \Omega_i \neq \{\Omega_k \text{ или } \Omega_i\}. \quad (6.2)$$

Желательно, чтобы $\Omega_k \cap \Omega_i \neq \emptyset$ только для Ω_i , смежных с Ω_k .

Подобласти Ω_k получили название **конечные элементы**.

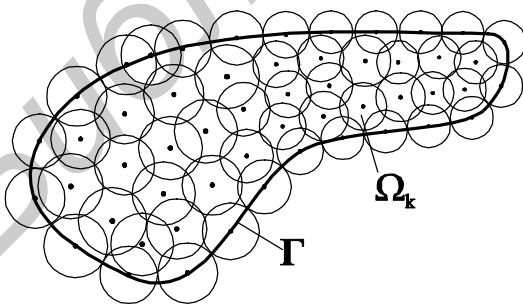


Рис.6.1

Затем на каждом Ω_k как на конечном носителе строим базисную финитную функцию $j_k(x)$. Все функции таким образом выбранного базиса линейно независимы в силу условий (6.1), (6.2).

Отметим преимущества такого выбора базиса:

а) ввиду того, что Ω_k выбираются значительно меньшими Ω и при этом скалярные произведения

$$(j_k j_i) = \int_{\Omega} j_k j_i d\Omega = \int_{\Omega_k \cap \Omega_i} j_k j_i d\Omega \quad (6.3)$$

равны нулю для функций с непересекающимися носителями, матрица проекционного уравнения (5.11), (5.15) будет сильно разрежена. Более того, если условие $\Omega_k \cap \Omega_i \neq \emptyset$ выполняется только для смежных носителей, то матрица получается ленточной, т.е. аналогична той, к которой приводят сеточные методы (4.6), (4.16);

б) возможность выбора специфических приграничных конечных элементов и связанных с ними финитных функций, учитывающих особенности границы, позволяет эффективно решать краевые задачи на достаточно произвольной области Ω .

Основная трудность аппроксимации финитными функциями состоит в сопряжении финитных функций на границах Ω_k таким образом, чтобы функция $u^N(x)$ в целом была непрерывна вместе со своими производными достаточно высокого порядка.

При таком выборе базиса естественно поставить вопросы о его полноте, выборе вида функций $j_k(x)$ и аппроксимационных свойствах разложения искомого решения

$$u \sim u^N(x) = \sum_{k=1}^N a_k j_k(x). \quad (6.4)$$

На все эти вопросы частично дает ответ теория Стренга-Фикса.

6.2. Теория аппроксимации финитными функциями Стренга-Фикса

Изложим основные идеи этой теории для функций одной переменной с регулярными конечными элементами.

Область $\Omega = [0, b]$ покрываем равномерной сеткой

$$\{x_k = (k - [p])h, \quad h = b/n, \quad k = 1 \dots N = n + 1 + 2[p - 1]\}, \quad [p] - \text{целая часть } p.$$

Конечные элементы Ω_k выберем как отрезки длиной $2ph$ ($p > 0,5$) с центром в точке x_k : $\Omega_k = [x_k - ph, x_k + ph]$. Если $p = 0,5$, смежные элементы не пересекаются и их длина равна h ; если $p = 1$, то длина пересечения равна h , длина Ω_k равна $2h$; при $p = 2$ - длина пересечения $2h$, длина Ω_k равна $4h$. Заметим, что такое покрытие полностью удовлетворяет условиям (6.2). Все базисные финитные функции с носителями Ω_k выберем одинаковой формы как сдвиги одной «стандартной» финитной функции $j^p(x)$:

$$j_k^p(x) = j^p\left(\frac{x - (k - [p])h}{h}\right); \quad j^p(x) = \begin{cases} 0, & p < |x|, \\ j(x), & |x| \leq p. \end{cases} \quad (6.5)$$

Если «стандартная» функция нормирована к единице, то ее сдвиги записываются в виде

$$j_k^p(x) = j^1\left(\frac{x - (k - [p])h}{ph}\right); \quad j^1(x) = \begin{cases} 0, & 1 < |x|, \\ j(x), & |x| \leq 1. \end{cases} \quad (6.6)$$

На рис.6.2 представлены стандартная финитная функция (рис.6.2, а) и базис из сдвигов этой функции для $n=4$, $p=2$, $N=7$ (рис.6.2, б).

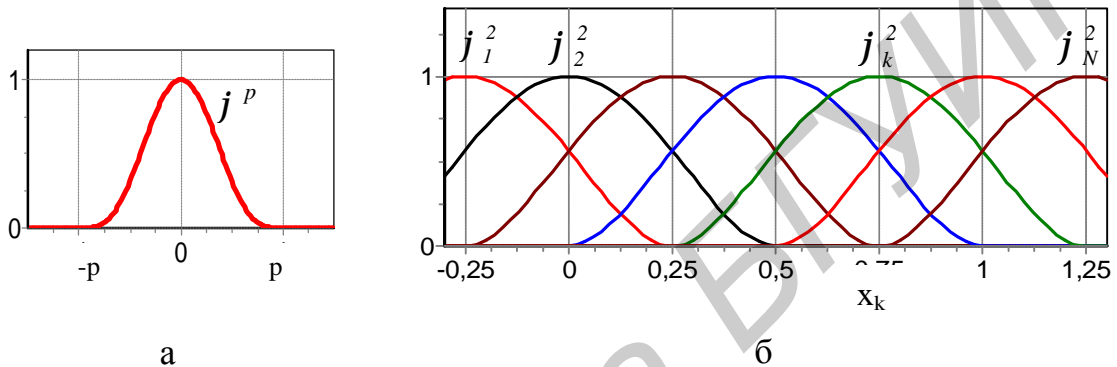


Рис
6.2

Теорема Стрэнга-Фикса (один из вариантов)

Допустим, что $u \in W_2^{s+1}$, $j \in W_2^s$. В этом случае для j существует преобразование Фурье:

$$\text{прямое } \hat{f}(x) = \frac{1}{\sqrt{2p}} \int_{-\infty}^{\infty} j(x) e^{-jxx} dx; \quad \text{обратное } j(x) = \frac{1}{\sqrt{2p}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(x) e^{jxx} dx.$$

Допустим, что для преобразования Фурье стандартной финитной функции j выполнено условие

$$\hat{f}(0) \neq 0 \text{ и } \frac{d^m \hat{f}(2pi)}{dx^m} = 0 \text{ при } i \neq 0, \quad -\infty \leq i \leq \infty; \quad 0 \leq m \leq s \quad (6.7)$$

(т.е. в $\hat{f}(x)$ точках $2pi$ имеет нули s -й кратности).

Тогда существуют такие $a_1 \dots a_N$, что при $h \rightarrow 0$

$$\left\| u - u^N \right\|_{W_2^m} = \left\| u - \sum_{k=1}^N a_k j^p\left(\frac{x - (k - [p])h}{h}\right) \right\|_{W_2^m} \leq Ch^{s+1-m}.$$

Это значит, что если, например, подобрать $j(x)$, у которой условия теоремы выполняются для $s=3$, то аппроксимация самой функции $u(x)$ имеет порядок $o(h^4)$, аппроксимация ее первой производной $o(h^3)$, второй - $o(h^2)$.

Наличие такой центральной теоремы, а также еще ряда доказанных Стрэнгом-Фиксом теорем, в частности о существовании функций, удовлетворяющих

условиям (6.7), дает алгоритм для построения базисных финитных функций, обладающих необходимыми аппроксимационными свойствами.

6.3. В-сплайн и некоторые наиболее часто используемые базисы

Теорема Стренга-Фикса указывает на то, что если стандартную финитную функцию $j(x)$ выбрать исходя из условия (6.7), то ряд (6.4), построенный на основе ее сдвигов, будет обладать хорошими аппроксимационными свойствами.

Шенберг предложил один интересный класс функций, удовлетворяющих условию (6.7). Функцию $j_s(x)$ называют В-сплайном (Шенберга) степени $s = 0, 1, 2, \dots$, если ее преобразование Фурье имеет вид

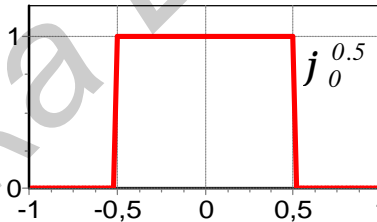
$$\hat{j}_s(x) = \left[\frac{\sin(x/2)}{x/2} \right]^{s+1}. \quad (6.8)$$

Как видим, функция (6.8) удовлетворяет всем условиям (6.7).

Базис из ступенек

Довольно просто показать, что при $s = 0$

$$j_0^{0.5}(x) = \begin{cases} 0, & |x| > 0,5, \\ 1, & |x| \leq 0,5. \end{cases} \quad (6.9)$$



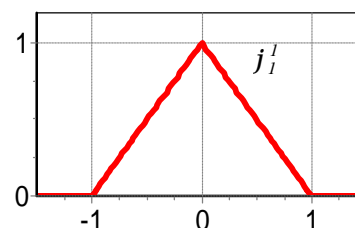
В этом случае базис представляет собой набор сдвигов (6.5) стандартной ступеньки $j_0^{0.5}(x)$ (6.9), а функция $u^N(x)$ представляет собой разрывную ступенчатую функцию ($N = n$). Аппроксимация по норме W_2^0 имеет порядок $o(h^1)$. Такой базис может быть выбран в качестве второго базиса $\{y_1 \dots y_N\}$ при использовании метода Галеркина-Петрова.

Базис из крышек

Рассмотрим В-сплайн степени $s = 1$: $\hat{j}_1(x) = \left[\frac{\sin(x/2)}{x/2} \right]^2 = \hat{j}_0(x) \hat{j}_0(x)$. Из этого соотношения следует, что $j_1(x)$ получается как свертка функций

$$j_1(x) = j_1(x) * j_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} j_0(y) j_0(x-y) dy$$

После несложных преобразований получаем:



$$j_1^1(x) = \begin{cases} 0, & |x| > 1, \\ x+1, & -1 \leq x \leq 0, \\ 1-x, & 0 \leq x \leq 1. \end{cases} \quad (6.10)$$

Функция $u^N(x)$ представляет собой аппроксимацию непрерывной ломаной линией, имеющей разрывные производные. Аппроксимация по норме W_2^0 имеет второй порядок, по норме W_2^1 - первый. Эта аппроксимация используется наиболее часто при решении дифференциальных уравнений второго порядка проекционным методом. Она приводит к наиболее простым формулам для интегралов и максимально разреженной матрице (5.11) при ее вычислении. Кроме того, у этого базиса ввиду того, что $p=1$, есть одна особенность – для аппроксимируемой функции $u(x)$ значения коэффициентов a_k совпадают со значениями функции в узлах сетки a_k ; $u(x_k)$, что позволяет быстро находить начальные приближения для a_k .

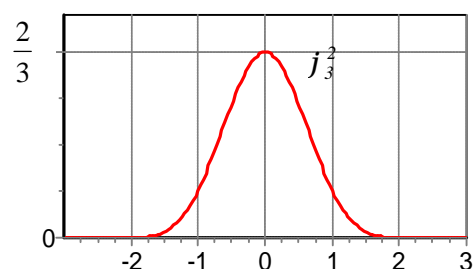
В-сплайн степени $s=3$ представляет собой кусочно-полиномиальный кубический сплайн, который получается сверткой:

$$j_3(x) = j_1(x) * j_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} j_1(y) j_1(x-y) dy.$$

$$j_3^2(x) = \begin{cases} 0, & |x| \geq 2, \\ \frac{(2-x)^3}{6}, & 1 \leq x \leq 2, \\ \frac{1}{6} [1 + 3(1-x) + 3(1-x)^2 - 3(1-x)^3], & 0 \leq x \leq 1, \\ j_3(-x), & x \leq 0. \end{cases} \quad (6.11)$$

$$\frac{dj_3^2(x)}{dx} = \begin{cases} 0, & |x| \geq 2, \\ \frac{(2-x)^2}{2}, & 1 \leq x \leq 2, \\ -\frac{1}{2} [1 + 2(1-x) - 3(1-x)^2], & 0 \leq x \leq 1, \\ -j_3'(-x), & x \leq 0. \end{cases}$$

Размер носителя при $s=3$ увеличился до четырех ($p=2$). Заметим, что для обеспечения непрерывности второй производной в точках $x = \pm 2$



выполняется условие $j_3 = j_3' = j_3'' = 0$. Как уже отмечалось, аппроксимация по норме W_2^0 имеет четвертый порядок, по норме W_2^1 - третий.

Атомарные функции

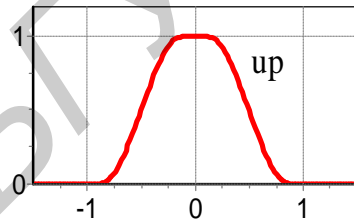
В качестве базисных функций используются полиномы небольших порядков $s \leq 5$ из-за нарастания погрешности при их вычислении.

В практике же аппроксимации возникает потребность приближения бесконечно дифференцируемыми функциями, подобными $\sin(x)$, e^x . Класс таких функций, удовлетворяющих условиям теории Стренга-Фикса как естественное обобщение В-сплайнов, был введен в 1971 г. В.Л. Рвачевым и В.А. Рвачевым. Эти функции получили название **атомарные функции**. Одна из основных атомарных функций $up(x)$ вводится как преобразование Фурье вида:

$$up(x) = \frac{1}{2^p} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{\infty} \frac{\sin(x/2^i)}{x/2^i} dx; \quad (6.12)$$

$$up(x) = 1 - up(1-x);$$

$$\frac{dup(x)}{dx} = 2[up(2x+1) - up(2x-1)].$$



Она имеет стандартный нормированный к единице вид и обладает рядом замечательных свойств [9]. Рекомендуется использовать с $p \geq 2$.

Эрмитовы базисы

Заметим, что при аппроксимации на конечном интервале использование сдвигов с $p > 1$ приводит к необходимости привлекать узлы вне интервала, что не всегда удобно. С другой стороны, точность аппроксимаций существенно возрастает с увеличением p за счет увеличения размера носителей и области их перекрытия. Чтобы сохранить точность при фиксированном $p=1$, вводят на одном носителе не одну, а несколько линейно независимых, ортогональных стандартных финитных функций, например таких:

$$j_1(x) = \begin{cases} 0, & |x| > 1, \\ (1-x)^3(1+3x+6x^2), & 0 \leq x \leq 1, \\ j_1^1(-x), & -1 \leq x \leq 0 \end{cases} \quad j_1'(x) = \begin{cases} 0, & |x| > 1, \\ 30x^2(1-x)^2, & 0 \leq x \leq 1, \\ 30x^2(1+x)^2, & -1 \leq x \leq 0. \end{cases} \quad (6.13)$$

$$j_2(x) = \begin{cases} 0, & |x| > 1, \\ x(1-x)^3(1+3,5x), & 0 \leq x \leq 1, \\ -j_2(-x), & -1 \leq x \leq 0 \end{cases} \quad j_2'(x) = \begin{cases} 0, & |x| > 1, \\ (1-x)^2(1+4x-17,5x^2), & 0 \leq x \leq 1, \\ (1+x)^2(1-4x-17,5x^2), & -1 \leq x \leq 0. \end{cases} \quad (6.14)$$

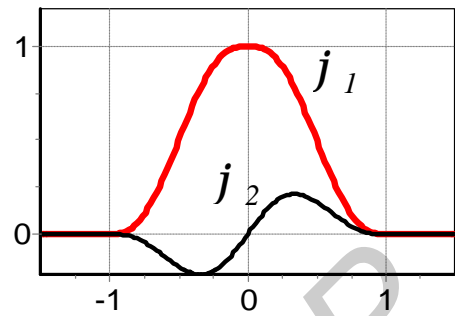
Они обладают свойством:

$$j_{12}(\pm 1) = j'_{12}(\pm 1) = j''_{12}(\pm 1) = 0, \quad j'_2(0) = 1.$$

Поэтому при аппроксимации:

$$u^{2N} = \sum_{k=1}^N a_k j_1\left(\frac{x-hk}{h}\right) + b_k j_2\left(\frac{x-hk}{h}\right)$$

значения $a_k ; u(x_k)$, $b_k ; u'(x_k)$, а порядок аппроксимации в W_2^0 не ниже четвертого.



Библиотека БГУИР

6.4. Двухмерные финитные функции на треугольной сетке

При решении двумерных краевых задач наибольшее распространение получили кусочно-линейные базисные функции, построенные на треугольной сетке. В этом случае область Ω покрывается сеткой из треугольников Δ_{kij} (триангуляция), например, как показано на рис.6.3.

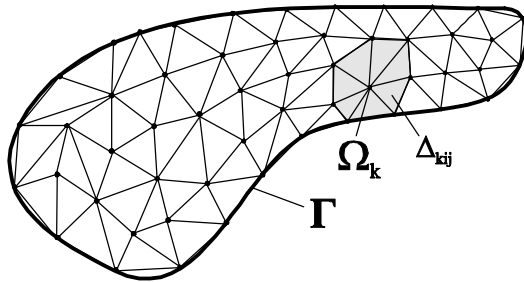


Рис.6.3

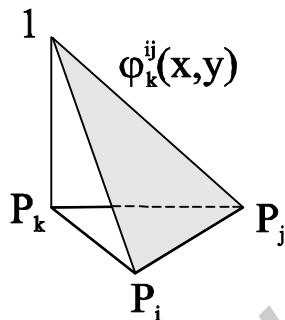
1) Каждая пара треугольников имеет либо одну общую вершину, либо одну общую сторону, либо не пересекается.

2) $\cup \Delta_{kij} \cong \Omega$. При выборе приграничных

треугольников желательно, чтобы на границу попадали либо одна либо две вершины. Иногда бывает удобно описать многоугольником границу.

Множество вершин треугольников обозначим P_0, P_1, \dots, P_N , $P_k = (x_k, y_k)$. На каждом треугольнике Δ_{kij} , имеющем вершину P_k , определим кусочно-линейную функцию $j_k^{ij}(xy)$, которая в точке P_k равна единице, а в точках P_i, P_j равна нулю.

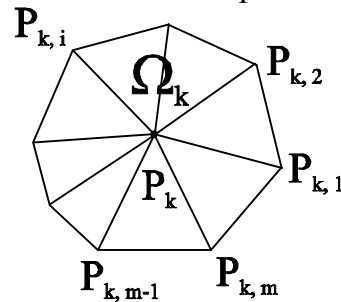
Аналитически эта функция задается довольно просто:



$$j_k^{ij} = \frac{1 - \frac{x - x_i}{x_j - x_i} - \frac{y - y_j}{y_i - y_j}}{1 - \frac{x_k - x_i}{x_j - x_i} - \frac{y_k - y_j}{y_i - y_j}} = 1 + a_k^{ij}(x - x_k) + b_k^{ij}(y - y_k). \quad (6.15)$$

Теперь выбираем набор конечных элементов Ω_k следующим образом: в Ω_k будут входить все треугольники Δ_{kij} , имеющие вершину P_k : $\Omega_k = \Delta_{k,k_1,k_2} + \Delta_{k,k_2,k_3} + \dots + \Delta_{k,k_{m-1},k_m}$, а функция $j_k(x, y)$ составляется из функций треугольников, смежных с вершиной P_k , как показано на рис. 6.4.

$$j_k(xy) = \begin{cases} j_k^{k_1,k_2}(xy), & (xy) \in \Delta_{k,k_1,k_2}, \\ \dots \\ j_k^{k_{m-1},k_m}(xy), & (xy) \in \Delta_{k,k_{m-1},k_m}, \\ j_k^{k_m,k_1}(xy), & (xy) \in \Delta_{k,k_m,k_1}, \\ 0, & xy \notin \Omega_k. \end{cases}$$



(6.16)

Рис. 6.4

Аппроксимационные свойства функции u ; $u^N(x, y) = \sum_{k=1}^N a_k j_k(x, y)$

аналогичны свойствам функции (6.10)

В заключение отметим, что для трехмерной области Ω при выборе базиса вместо треугольной сетки Ω покрывается сеткой из тетраэдров Δ_{kijl} . Конечный элемент Ω_k , связанный с узлом $P_k(x_k, y_k, z_k)$, состоит из тетраэдров, имеющих вершину P_k . Финитная функция $\varphi_k(x, y, z)$ строится аналогично (6.16) из кусочно линейных функций тетраэдра:

$$j_k^{ijl} = 1 + a_k^{ijl}(x - x_k) + b_k^{ijl}(y - y_k) + g_k^{ijl}(z - z_k).$$

Коэффициенты этой функции находятся из решения системы трех линейных уравнений:

$$1 + a_k^{ijl}(x_i - x_k) + b_k^{ijl}(y_i - y_k) + g_k^{ijl}(z_i - z_k) = 0;$$

$$1 + a_k^{ijl}(x_j - x_k) + b_k^{ijl}(y_j - y_k) + g_k^{ijl}(z_j - z_k) = 0;$$

$$1 + a_k^{ijl}(x_l - x_k) + b_k^{ijl}(y_l - y_k) + g_k^{ijl}(z_l - z_k) = 0.$$

Контрольные вопросы

1. Как строится базис из финитных функций?
2. Сформулируйте содержание теоремы Стренга-Фикса.
3. Перечислите наиболее часто используемые при аппроксимации финитными функциями В-сплайны.
4. Как строится базис из финитных функций на основе триангуляции двумерной области?

7. МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

7.1. Связь метода сеток и метода конечных элементов

Метод конечных элементов (МКЭ) в настоящее время является одним из наиболее востребованных и универсальных методов решения задач математической физики. Его теоретическое обоснование было в основном завершено в 70-е годы, а с появлением высокопроизводительной вычислительной техники он стал важным инструментом исследований в науке и технике. Появилось множество пакетов прикладных программ, как коммерческих, так и общедоступных, позволяющих решать разнообразные задачи – теплопроводности, электродинамики, механики деформируемого твердого тела, гидродинамики и др.

МКЭ представляет собой синтез метода сеток и проекционного метода Галеркина с выбором базиса из финитных функций, носители которых (конечные элементы) покрывают каждый узел сетки. В результате применения к такому базису проекционной процедуры (5.7) для коэффициентов разложения (5.4) искомого решения получается система алгебраических уравнений, аналогичная той, к которой приводят сеточные методы – матрица ленточная, количество неизвестных равно количеству узлов сетки. Заметим к тому же, что при определенном выборе финитных функций, например в виде (6.10), (6.13) или (6.16), искомые коэффициенты в (5.7) являются приближенными значениями решения в узлах сетки.

Поэтому можно сказать, что МКЭ – это тот же классический метод сеток, в котором конечно-разностная схема получается в результате применения проекционной процедуры к базису из финитных функций, привязанных к каждому узлу сетки. Такой способ получения конечно-разностной схемы позволил избавиться от основного недостатка классического метода сеток – привязки узлов сетки к координатным линиям, что позволило в случае многомерных задач гибко адаптировать сетку к произвольной форме границ и особенностям искомого решения.

7.2. Пример решения одномерной задачи

Рассмотрим реализацию МКЭ на решении простейшей задачи, приведенной ранее в подразд.4.1:

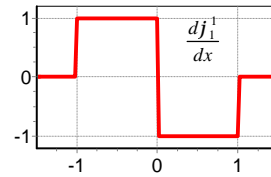
$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) = f(x) \quad u(0) = a; \quad u(b) = b. \quad (7.1)$$

Выбираем равномерную сетку $w_h = \{x_i = (i-1)h, i = 1 \dots N = n+1\}$ и базис из сдвигов финитной функции-крышки (6.10). Ищем решение в виде

$$u^N(x) = \sum_{k=1}^N \bar{u}_k j_k(x), \quad j_k = j_1^1 \left(\frac{x - (k-1)h}{h} \right). \quad (7.2)$$

Мы здесь обозначили $a_k = \bar{u}_k$. Заметим, что $\bar{u}_1 = a$, $\bar{u}_N = b$ в силу граничных условий (7.1). Производная от функции-крышки также финитная функция:

$$\frac{\partial j_1}{\partial x} = \begin{cases} 0, & |x| > 1, \\ 1, & -1 \leq x \leq 0, \\ -1, & 0 \leq x \leq 1. \end{cases} \quad (7.3)$$



Используем проекционные уравнения (5.11).

$$\sum_{k=1}^N \left(g \frac{\partial j_k}{\partial x}, \frac{\partial j_i}{\partial x} \right) a_k = \hat{f}_i; \quad i = 1 \dots N.$$

Ввиду финитности функций (7.3) каждое i -е уравнение содержит только три члена:

$$-\bar{u}_{i-1} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{g}{h^2} dx + \bar{u}_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{g}{h^2} dx - \bar{u}_{i+1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{g}{h^2} dx = - \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f j_i dx.$$

Обозначим $g_{i-1/2} = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} g dx$, $g_{i+1/2} = \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} g dx$, $\hat{f}_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f j_i dx$. Получаем

конечно-разностную схему, аналогичную (4.5):

$$\frac{g_{i-1/2}}{h^2} \bar{u}_{i-1} - \left(\frac{g_{i-1/2} + g_{i+1/2}}{h^2} \right) \bar{u}_i + \frac{g_{i+1/2}}{h^2} \bar{u}_{i+1} = \hat{f}_i, \quad i = 2 \dots n, \quad \bar{u}_1 = a, \quad \bar{u}_N = b. \quad (7.4)$$

Как видим, технология МКЭ для одномерного уравнения приводит практически к той же конечно-разностной схеме с трехдиагональной матрицей, что и классический метод сеток. Имеются, однако, некоторые отличия в вычислении коэффициентов. А именно, в МКЭ коэффициенты $g_{i\pm 1/2}$ вычисляются через интегралы по соответствующим участкам сетки. Это значит, что технология МКЭ приводит к так называемым однородным конечно-разностным схемам, т.е. таким, которые позволяют проводить расчеты ДУ с разрывными коэффициентами. Программная реализация алгоритма решения (7.4) такая же, как и для (4.5) – метод прогонки (4.6).

7.3. Решение двумерной задачи на треугольной сетке

Проиллюстрируем технологию МКЭ на примере решения задачи Дирихле для двумерного уравнения Пуассона (4.1):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(g \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(g \frac{\partial u}{\partial y} \right) = f; \quad u|_{\Gamma} = a(\Gamma). \quad (7.5)$$

Допустим, что область Ω , на которой необходимо получить решение, покрыта треугольной сеткой и представлена на рис. 6.3.

Решение ищем в виде

$$u^N = \sum_{k=1}^N \bar{u}_k j_k(x, y),$$

где j_k - набор финитных функций (6.16), привязанных к внутренним узлам сетки $P_k \in \Gamma$.

Следует отметить, что построение треугольной сетки для произвольной области, учитывающей особенности получаемого решения, является зачастую наиболее трудоемкой задачей при использовании МКЭ. Для решения этой задачи предложено много различных алгоритмов и имеются доступные через Интернет пакеты программ [9].

Результатом триангуляции являются список узлов $P_k(x_k, y_k, z_k)$, $k=1 \dots N_0, N_0+1, \dots, N$ ($1 \dots N_0$ - номера внутренних узлов, N_0+1, \dots, N - номера граничных узлов) и список треугольников Δ_{kij}^m , $m=1 \dots M$, содержащий номера соответствующих m -му треугольнику узлов-вершин.

Зная координаты вершин и список треугольников, легко построить список конечных элементов Ω_k , связанных с каждым узлом сетки, вычислить параметры a_k^{ij} , b_k^{ij} соответствующих финитных функций j_k (6.16), а также всю необходимую информацию – площади треугольников S_{kij}^m , координаты их центров тяжести C_{kij}^m и др.

При построении конечно-разностной схемы воспользуемся проекционным соотношением (5.15) для внутренних узлов:

$$\sum_{j=1}^N \bar{u}_j \left[\iint_{\Omega_k} g \left(\frac{\partial j_j}{\partial x} \frac{\partial j_k}{\partial x} + \frac{\partial j_j}{\partial y} \frac{\partial j_k}{\partial y} \right) \right] d\Omega = \hat{f}_k, \quad k=1 \dots N_0. \quad (7.6)$$

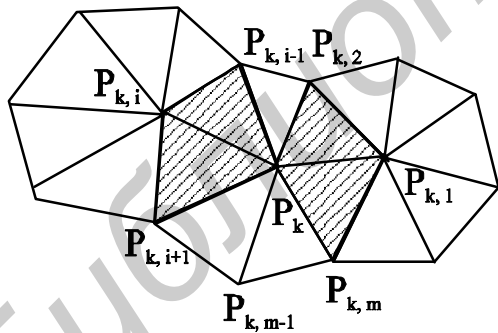


Рис.7.1

Ввиду линейности финитных функций j_j , j_k на каждом треугольнике значения производных, входящих в (7.6), постоянны. Кроме того, как видно из рис.7.1, в каждом уравнении (7.6) имеется только m_k+1 отличных от нуля матричных элементов (заметим, что количество вершин m_k у разных элементов Ω_k могут отличаться):

$$\bar{u}_k g_k + \bar{u}_{k_1} g_{k_1} + \dots + \bar{u}_{k_m} g_{k_m} = \hat{f}_k; \quad k=1 \dots N_0; \\ \bar{u}_{N_0+1} \dots \bar{u}_N = a_{N_0+1} \dots a_N. \quad (7.7)$$

Причем $g_k = -\sum_{i=1}^{m_k} g_{k_i}$, а элементы g_{k_i} вычисляются как интегралы по двум смежным треугольникам:

$$g_{k_i} = \left(a_k^{k_{i-1}k_i} a_{k_i}^{k_{i-1}k} + b_k^{k_{i-1}k_i} b_{k_i}^{k_{i-1}k} \right) \iint_{\Delta_{kk_{i-1}k_i}} g dS + \left(a_k^{k_i k_{i+1}} a_{k_i}^{k_{i+1}k} + b_k^{k_i k_{i+1}} b_{k_i}^{k_{i+1}k} \right) \iint_{\Delta_{kk_i k_{i+1}}} g dS. \quad (7.8)$$

При вычислении интегралов в (7.8) ввиду малости Δ для случая непрерывных $g(xy)$ обычно используют формулу средних

$$\iint_{\Delta_{kij}} g dS = g(C_{kij}) S_{kij}, \text{ где } C_{kij} - \text{точка пересечения медиан.}$$

Решается система (7.7) методом простой итерации или Зейделя с использованием релаксации (см. подразд.4.3.2):

$$\bar{u}_k^{s+1} = (1 - w_r) \bar{u}_k^s + w_r \frac{1}{g_k} \left(\hat{f}_k - \sum_{i=1}^{m_k} \bar{u}_{k_i}^s g_{k_i} \right). \quad (7.9)$$

Эффективность метода во многом зависит от удачной программной реализации итерационного процесса (7.9).

Контрольные вопросы

1. В чем отличие МКЭ от классического метода сеток?
2. Как построить конечно-разностную схему по МКЭ задачи Дирихле для одномерного уравнения второго порядка?
3. Как строится конечно-разностная схема для двухмерной области на основе треугольной сетки?
4. Какие результаты триангуляции области являются исходными данными для построения конечно-разностной схемы по технологии МКЭ?

ЛИТЕРАТУРА

1. Синицын А.К., Навроцкий А.А. Алгоритмы вычислительной математики: Лабораторный практикум по курсу «Программирование» для студентов 1-2 курсов всех специальностей БГУИР». – Мн.: БГУИР, 2002.
2. Калиткин Н.Н. Численные методы. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
3. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1980. – 534 с.
4. Болсун А.И., Гронский В.К., Бейда А.А. Методы математической физики. – Мн.: Выш. шк., 1988. – 200с.
5. Михлин С.Г. Вариационные методы в математической физике. – М.: Наука, 1970.
6. Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно-сеточные методы. – М.: Наука, 1981. – 414 с.
7. Рвачев В.Л., Рвачев В.А. Неклассические методы теории приближений в краевых задачах. – Киев: Наук. думка, 1979. – 220с.
8. Деклу Ж. Метод конечных элементов. – М.: Мир, 1976. – 189 с.
9. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. – М.: Мир, 1977.
10. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. – М.: Мир, 1979. – 392с.
11. Скворцов А.В. Триангуляция Делоне. – Томск: Изд-во Томского университета, 2002. – 128 с.

Резерв 2004

Учебное издание

Синицын Анатолий Константинович

**СОВРЕМЕННЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ.
ПРОЕКЦИОННО-СЕТОЧНЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

Конспект лекций
ДЛЯ АСПИРАНТОВ И МАГИСТРАНТОВ БГУИР

Редактор Н.А. Бебель
Корректор Е.Н. Батурчик

писано в печать 08.09.2004.
Гарнитура «Таймс».
Уч.-изд. л. 3,5.

Формат 60x84 1/16.
Печать ризографическая.
Тираж 180 экз.

Бумага офсетная.
Усл. печ. л. 3,37.
Заказ 375.

Под

Изд

атель и полиграфическое исполнение: Учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»
Лицензия на осуществление издательской деятельности №02330/0056964 от 01.04.2004.
Лицензия на осуществление полиграфической деятельности №02330/0133108 от 30.04.2004.
220013, Минск, П. Бровки, 6.