9.5 Чисельні методи розв'язання диференціальних рівнянь в частинних похідних

З розв'язанням диференціальних рівнянь в частинних похідних (*differential equations in partial derivatives*) інженерам і дослідникам доводиться зустрічатися у багатьох галузях науки і техніки, в аеро- і гідродинаміці, ядерній фізиці, радіозв'язку, теорії автоматичного керування, вимірювальній техніці. В таких рівняннях містяться частинні похідні і шукана величина залежить одразу від декількох змінних. Нагадаємо диференціальне рівняння другого порядку з двома незалежними змінними, яке вже розглянуто у 8 розділі:

$$\begin{gathered} A(x,y)\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+B(x,y)\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}+C(x,y)\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}+ \\ E(x,y)\frac{\partial f}{\partial y}+D(x,y)\frac{\partial f}{\partial x}+F(x,y)=G(x,y). \end{gathered} \tag{9.22}$$

Аналогічно звичайним диференціальним рівнянням єдиний розв'язок рівняння (9.22) можна отримати, лише задавши додаткові умови, але оскільки тут присутні дві незалежні змінні x та y, умова повинна задаватися для якої-небудь кривої у площині x/y. Ця умова може бути накладена на функцію f або/та на її похідні та залежати від типу рівняння, яке визначає її вигляд і характер зміни.

Існують три типи диференціальних рівнянь другого порядку:

– еліптичні, при $B^2-4AC<0$;

– параболічні, при $B^2-4AC=0$;

– гіперболічні, при $B^2-4AC>0$.

Рівняння можуть переходити з одного типу в інший залежно від значень коефіцієнтів.

Еліптичні рівняння описують усталені (стаціонарні) процеси, причому задача ставиться в замкненій області, і в кожній точці на межі цієї області задаються граничні умови. Інші два типи рівнянь описують еволюційні процеси. В таких задачах найбільш поширений випадок, коли на одній частині межі ставлять граничні умови в декількох точках межі, а на іншій – початкові тільки в одній точці.

Загальні методи аналітичного розв'язання диференціальних рівнянь в частинних похідних розглянуто в попередньому розділі, а в цьому зосереджено увагу на чисельних методах та алгоритмах і на їх застосуванні для рівнянь другого порядку.

Приклади деяких диференціальних рівнянь в частинних похідних, які описують різні типи задач, наведені в таблиці 9.4.

В таблиці використані прийняті позначення найбільш поширених операторів:

оператор Лапласа $\Delta f = \dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2}$;

бігармонічний оператор $\Delta^2 f = \dfrac{\partial^4 f}{\partial x^4} + 2\dfrac{\partial^4 f}{\partial x^2 \partial y^2} + \dfrac{\partial^4 f}{\partial y^4}$.

Таблиця 9.4 – Диференціальні рівняння в частинних похідних

Рівняння	**Математична форма**	**Приклади задач, в яких зустрічається рівняння**
Лапласа	$\Delta f = 0$	Усталена течія рідини. Стаціонарні теплові поля
Пуассона	$\Delta f = -R$	Теплопередача з внутрішнім джерелом тепла
Дифузії	$\Delta f = \dfrac{1}{h^2}\dfrac{\partial^2 f}{\partial t^2}$	Нестаціонарна теплопровідність
Хвильове	$\Delta f = \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2 f}{\partial t^2}$	Розповсюдження хвиль
Бігармонічне	$\Delta^2 f = F(x, y)$	Деформація пластин

Існують два основних методи чисельного розв’язання диференціальних рівнянь в частинних похідних: різницевий метод (метод скінченних різниць) і метод скінченних елементів. В сучасній прикладній математиці обидва методи розглядаються як інтерпретації використання загальної теорії різницевих схем до розв’язання диференціальних рівнянь в частинних похідних.

В основі методу скінченних елементів лежить варіаційне обчислення. Диференціальне рівняння, яке описує задачу й відповідні граничні умови, використовується для постановки варіаційної задачі. В методі скінченних елементів фізична задача замінюється кусково-гладкою моделлю. Цей метод вимагає складної постановки задачі, високої кваліфікації й досвіду, неуніверсальний (кожне розв’язання застосовується лише для конкретної задачі). Метод скінченних елементів знайшов широке використання для розв’язання спеціальних задач в теоретичній механіці, гідродинаміці, теорії поля, він складний, вимагає серйозної підготовки і знань в конкретній сфері використання, для його достатньо повного викладу довелося б написати спеціальний підручник. Тому в даній роботі не наводиться докладний виклад методу скінченних елементів, тим більше, що при розв’язанні задач проектування комп’ютерних систем частіше використовується різницевий метод.

9.5.1 Різницевий метод

Для диференціальних рівнянь другого порядку в частинних похідних найчастіше використовується двовимірна прямокутна сітка. Центрально-різницеві шаблони, що їх застосовують на двовимірній квадратній сітці з кроком h, зображеній на рис. 9.16 можуть бути отримані аналогічно одновимірному випадку.

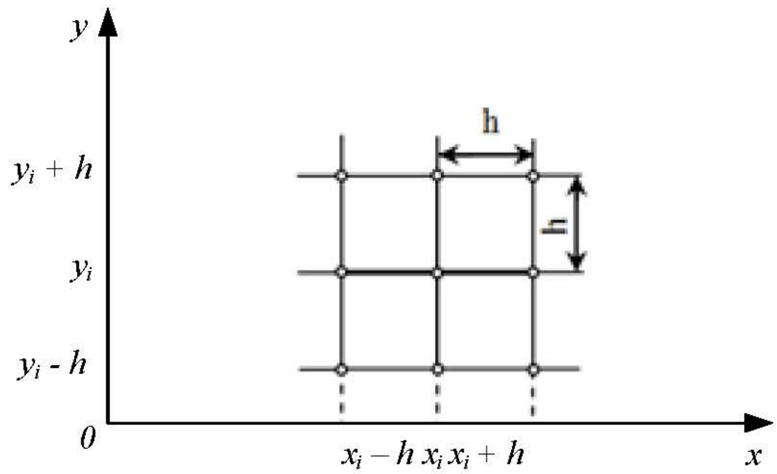
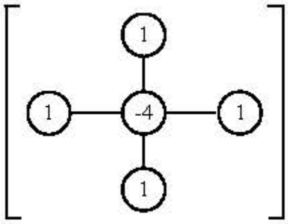


Рисунок 9.16 – Квадратна сітка

Для зручності позначення $f(x_i + h, y_i)$ замінимо на $f_{i+1,j}$ (індекс j надається незалежній змінній y, а i стосується до x). Користуючись цим позначенням, отримаємо вирази для частинних похідних, з якими доводиться зустрічатися на практиці й використання яких ілюструється відповідними обчислювальними шаблонами (таблиця 9.5).

З цих елементів будуються більш складні обчислювальні шаблони для диференціальних рівнянь. Додавання похідних здійснюється суперпозицією відповідних обчислювальних шаблонів. Цим методом конструюються шаблони для Δf і $\Delta^2 f$ (рис. 9.17) з шаблонів для частинних похідних.

$$\Delta f \approx \frac{1}{h^2}$$ 

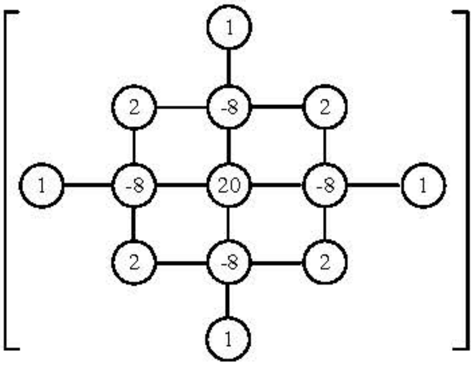
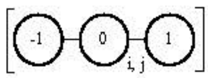
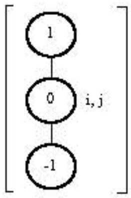
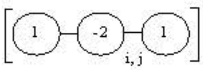
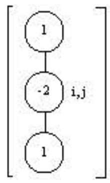
$$\Delta^2 f \approx \frac{1}{h^2}$$ 

Рисунок 9.17 – Обчислювальні шаблони для операторів

Таблиця 9.5 – Обчислювальні шаблони для похідних

$\dfrac{\partial f}{\partial x} \approx \dfrac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2h} \approx \dfrac{1}{2h}$	
$\dfrac{\partial f}{\partial y} \approx \dfrac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2h} \approx \dfrac{1}{2h}$	
$\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx \dfrac{f_{i+1,j} - 2f_{i,1} + f_{i-1,j}}{h^2} \approx \dfrac{1}{h^2}$	
$\dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2} \approx \dfrac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{h^2} \approx \dfrac{1}{h^2}$	

$\dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \approx \dfrac{f_{i+1,j+1} - f_{i-1,j+1} - f_{i+1,j-1} + f_{i-1,j-1}}{4h^2} \approx \dfrac{1}{4h^2}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
$\dfrac{\partial^4 f}{\partial x^4} \approx \dfrac{1}{h^4}$	$\begin{bmatrix} 1 & -4 & \underset{i,j}{6} & -4 & 1 \end{bmatrix}$
$\dfrac{\partial^4 f}{\partial y^4} \approx \dfrac{1}{h^4}$	$\begin{bmatrix} 1 \\ -4 \\ 6 \;\; i,j \\ -4 \\ 1 \end{bmatrix}$

Всі наведені обчислювальні шаблони мають похибку другого порядку. Можна побудувати більш точні обчислювальні шаблони, якщо внести у розгляд додаткові вузли. Іноді, щоб звести до мінімуму розповсюдження похибок, користуються лівими або правими різницями.

Часто труднощі, що пов'язані з використанням прямокутної сітки, виникають через межу неправильної конфігурації, яка не проходить через вузли сітки. Розглянемо приклад розв'язання такої задачі для обчислювального шаблону рівняння Лапласа в області, що обмежена довільною кривою, яка зображена на рис. 9.18.

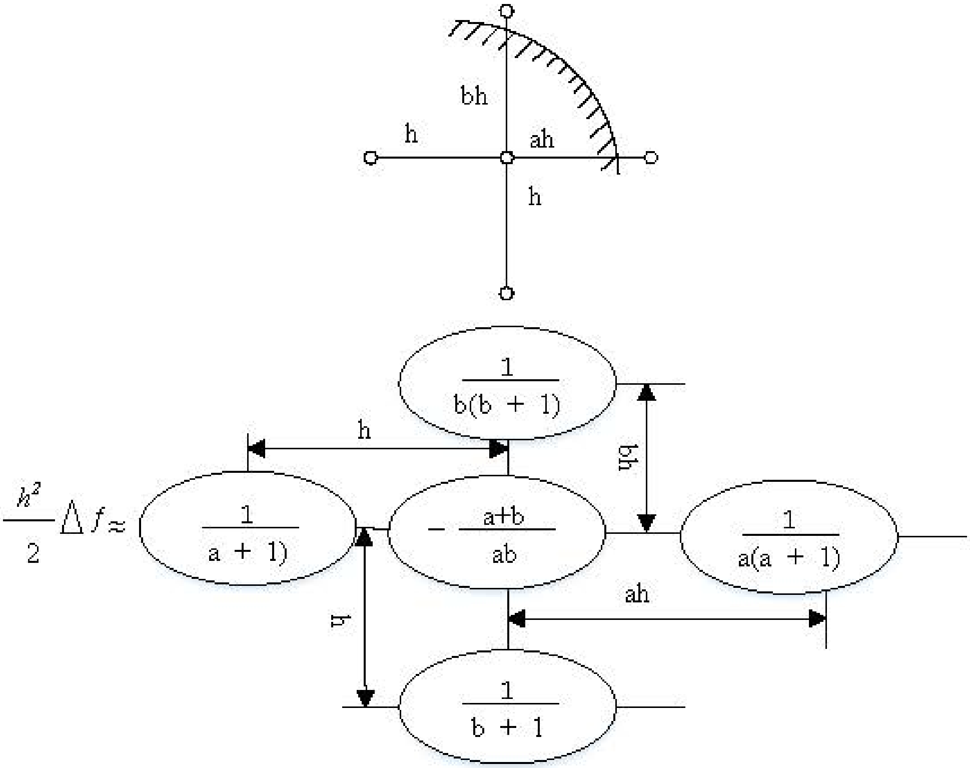


Рисунок 9.18 – Обчислювальний шаблон для границі неправильної форми

Другі частинні похідні для вузлів, які лежать на межі області, можна записати у вигляді:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx \frac{\dfrac{f_a - f_{i,j}}{ah} - \dfrac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{h}}{0{,}5(ah+h)};$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \approx \frac{\dfrac{f_b - f_{i,j}}{bh} - \dfrac{f_{i,j} - f_{i,j-1}}{h}}{0{,}5(bh+h)}.$$

Додавши другі похідні, отримаємо:

$$\Delta f \approx \frac{2}{h^2}\left(\frac{f_{i-1,j}}{1+a} + \frac{f_a}{a(1+a)} + \frac{f_b}{b(1+b)} + \frac{f_{i,j-1}}{1+b} - \frac{a+b}{ab} f_{i,j}\right).$$

Застосувавши обчислювальний шаблон до кожного з n вузлів сітки, отримаємо систему з n рівнянь, яка може були лінійною, якщо початкове диференціальне рівняння має відповідну структуру. В цьому випадку розв'язання задачі зводиться до розв'язання системи рівнянь вигляду:

$$\begin{bmatrix} \text{матриця} \\ \text{коефіцієнтів} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \text{невідоме значення у} \\ \text{вузлах (вектор} - \text{стовпець)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{вектор} - \text{стовпець} \\ \text{вільних членів} \end{bmatrix},$$

яка розв'язується найчастіше ітераційними методами.

9.5.2 Розв'язання окремих типів диференціальних рівнянь в частинних похідних

Практичні методи і алгоритми розв'язання різних типів диференціальних рівнянь в частинних похідних мають свої особливості і вимагають окремого розгляду на прикладі найбільш розповсюджених задач.

9.5.2.1 Еліптичні рівняння

До еліптичних рівнянь (elliptic equations) приводиться багато різних фізичних задач: розрахунок напружень, які виникають при пружному скручуванні довгого циліндричного стрижня; розподіл електричних напруг на площині, що проводить струм; задача про стаціонарні течії тепла в двовимірному тілі. Часто виникає необхідність розв'язання таких задач і в теорії автоматичного керування. Більшість еліптичних рівнянь описується рівнянням Пуассона або його окремим випадком – рівнянням Лапласа.

Розглянемо класичну задачу Діріхле для рівняння Лапласа в прямокутній області, яка формулюється таким чином: знайти неперервну функцію *f(x,y)*, яка задовольняє всередині прямокутної області $\Omega = \{(x, y) \ / \ 0 \le x \le a, \ 0 \le y \le b\}$ рівняння Лапласа:

$$\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0$$

і приймає на межі області задані значення:

$$x=0; \quad f(0,y) = f_1(y),$$

$$x=a; \quad f(a,y) = f_2(y),$$

$$y=0; \quad f(x,0) = f_3(x),$$

$$y=b; \quad f(x,b) = f_4(x).$$

Введемо в області розв'язання двовимірну сітку з кроком h по осі x і l по осі y. Тоді, користуючись прийнятими в попередніх розділах позначеннями і апроксимуючи рівняння Лапласа різницевим рівнянням, отримаємо таку систему лінійних рівнянь (приймемо для спрощення $l=h$):

$$f_{ij} = \frac{1}{4}(f_{i+1,j} + f_{i-1,j} + f_{i,j+1} + f_{i,j-1}) \ ,$$
$$f_{i,0} = f_3(x_i) \ , \quad f_{i,m} = f_4(x_i) \ , \quad f_{0,j} = f_1(y_i) \ , \quad f_{n,j} = f_2(y_i). \qquad (9.23)$$

при i=1,2,…,n-1; j=1,…,m-1.

Ця система рівнянь має велику кількість нульових елементів і задовольняє умову збіжності при використанні ітераційних методів. Найбільше використання для розв’язання таких систем знайшов метод Гаусса – Зейделя, який, коли застосовується до еліптичних різницевих рівнянь, називається методом Лібмана або методом послідовних зміщень. Порядок ітерацій можна простежити, переписавши систему (9.23) у вигляді:

$$f_{1,1}^{(m+1)} = \frac{1}{4}\left[f_3(h) + f_1(h) + f_{2,1}^{(m)} + f_{1,2}^{(m)}\right],$$
$$f_{2,1}^{(m+1)} = \frac{1}{4}\left[f_3(2h) + f_{1,1}^{(m+1)} + f_{3,1}^{(m)} + f_{2,2}^{(m)}\right],$$
$$f_{3,1}^{(m+1)} = \frac{1}{4}\left[f_3(3h) + f_{2,1}^{(m+1)} + f_{4,1}^{(m)} + f_{3,2}^{(m)}\right],$$

$$f_{n-1,1}^{(m+1)} = \frac{1}{4}\left\{f_3\left[(n-1)h\right] + f_2(h) + f_{n-2,1}^{(m+1)} + f_{n-1,2}^{(m)}\right\},$$
$$f_{1,2}^{(m+1)} = \frac{1}{4}\left[f_1(2h) + f_{1,1}^{(m+1)} + f_{2,2}^{(m)} + f_{1,3}^{(m)}\right],$$
$$f_{2,2}^{(m+1)} = \frac{1}{4}\left[f_{2,1}^{(m+1)} + f_{1,2}^{(m+1)} + f_{3,2}^{(m)} + f_{2,3}^{(m)}\right],$$

де верхніми індексами позначено порядковий номер ітерації: m – попередня, m+1 – наступна.

Зазвичай вважають $f_{i,j}^{(0)} = 0$ для всіх i, j. Система рівнянь легко розв’язується на ЕОМ. Взагалі кажучи, будь-які еліптичні рівняння, які не містять $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$, зводяться до систем різницевих рівнянь, які можна розв’язувати як методом Лібмана, так і іншими ітераційними методами (Якобі, послідовної верхньої релаксації та ін.), оскільки для них виконуються умови збіжності. Для еліптичних рівнянь, які містять $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ в загальному вигляді, питання про збіжність ітераційних методів не має теоретичного розв'язку і необхідно розглядати отриману систему рівнянь в кожному конкретному випадку.

9.5.2.2 Гіперболічні рівняння

Найчастіше зустрічається в інженерній практиці гіперболічне рівняння в частинних похідних (hyperbolic equations in partial derivatives) – хвильове рівняння, яке описує різні види коливань: коливання струни або мембрани, розповсюдження звукових хвиль в різних середовищах тощо.

В загальному вигляді задача формулюється таким чином: знайти функцію f (x, t), яка задовольняє всередині області $\Omega=\{(x, t)\ , 0\le x \le a,\ 0 \le t \le T\ \}$ рівняння

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}=c^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \qquad (c=const>0),$$

Початкові

$$f(x,0)=f_0(x)\ ,$$

$$\frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{x,0}=g(x)$$

і граничні умови

$$f(0,t)=\mu_1(t)\ ,$$

$$f(a,t)=\mu_2(t)\ .$$

Оскільки заміна змінних $t = c\ t$ приводить рівняння до вигляду:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}=\frac{\partial^2 f}{\partial x^2},$$

то надалі приймаємо c=1.

Переходячи до різницевого рівняння на сітці з кроком h по x й τ по t з центральними різницями, отримаємо

$$\frac{f_{i+1,j}-2f_{i,j}+f_{i-1,j}}{h^2}=\frac{f_{i,j+1}-2f_{i,j}+f_{i,j-1}}{\tau^2}.$$

Якщо ввести $r=\dfrac{\tau}{h}$, то вираз для $f_{i,j+1}$ набуде вигляду:

$$f_{i,j+1}=r^2(f_{i+1,j}+f_{i-1,j})+2(1-r^2)f_{i,j}-f_{i,j-1}\,. \qquad (9.24)$$

Схема розв'язання за рівнянням (9.24) називається тришаровою, оскільки так зв'язує значення $f_{i,j}$ на трьох часових шарах j-1, j, j+1. Ця схема явна й дозволяє в явному вигляді виразити $f_{i,j}$ через значення f з попередніх шарів (існують неявні схеми, основані на використанні інших обчислювальних шаблонів, але вони вимагають більшого обсягу обчислень при розв'язанні системи рівнянь). Для знаходження розв'язку на першому шарі зазвичай використовують інтерполяційні методи. Наприклад,

$$f_{i,1} = f_{i,0} + \tau g(x_i). \tag{9.25}$$

Співвідношення сторін сітки визначається величиною r, яка є мірою стійкості отриманого розв'язку. При r>1 розв'язок нестійкий, при r<1 хоча й стійкий, але точність його при зменшенні r спадає, при $r=1$ різницевий розв'язок стійкий і збігається з точним. Вибір r=1 зручний ще й тим, що при цьому спрощується співвідношення (9.25)

$$f_{i,j+1} = f_{i+1,j} + f_{i-1,j} - f_{i,j-1}.$$

9.5.2.3 Параболічні рівняння

Прикладом задачі, яка приводить до параболічного рівняння (parabolic equation) в частинних похідних, є задача про теплопередачу по довгому стрижню. Вона описується рівнянням теплопередачі (або дифузії).

Задача полягає у знаходженні $f(x, t)$, яка задовольняє в області $\Omega = \{(x, t)\ 0 \le x \le a,\ \ 0 \le t \le T\}$ рівняння

$$\frac{\partial f}{\partial t} = k\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (k = const > 0),$$

початкові

$$f\,(x,\ 0)=f_0\,(x)$$

і граничні умови першого роду

$$f(0,t) = \mu_1(t) \quad ,$$

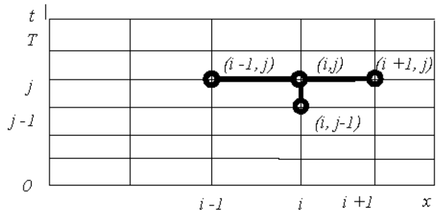
$$f(a,t) = \mu_2(t) \quad .$$

Заміна змінних $t = k\ t$ приводить рівняння до вигляду

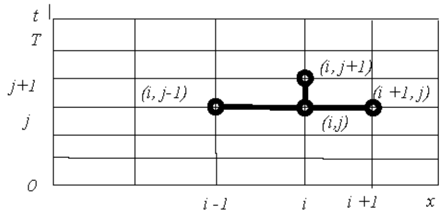
$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2},$$

тому надалі будемо вважати $k=1$.

Можливі два варіанти отримання різницевого рівняння на сітці з кроком h по x та τ по t (рис. 9.19).



а)



б)

Рисунок 9.19 – Обчислювальні шаблони для параболічних рівнянь

Варіант з апроксимацією на чотириточковому шаблоні (рис. 9.19, а) приводить до неявної двошарової різницевої схеми

$$2f_{i+1,j} - (1+2r)f_{i,j} + 2f_{i-1,j} = -f_{i,j-1},$$

де $r = \dfrac{\tau}{h^2}$.

Ця схема, доповнена рівняннями, отриманими з крайових умов

$$f_{0,j} = \mu_1(t_j); \qquad f_{n,j} = \mu_2(t_j),$$

зводить задачу до розв’язання системи рівнянь, які мають стійкий розв’язок при будь-яких значеннях r.

Варіант з апроксимацією на чотириточковому шаблоні (рис. 9.19, б) призводить до явної двошарової системи

$$f_{i,j+1} = rf_{i+1,j} + (1-2r)f_{i,j} + 2f_{i-1,j}.$$

Ця схема стійка тільки при $r \le 0{,}5$, що приводить до необхідності проводити обчислення з дуже малим кроком по t, який обмежує швидкодію і вимагає більших витрат часу ЕОМ. Тому для параболічних рівнянь більш широке розповсюдження отримала неявна схема.

9.5.3 Загальні рекомендації до чисельного розв’язання диференціальних рівнянь в частинних похідних

На початковому етапі вибирається метод розв’язання задачі. Зазвичай простіше використовувати різницевий метод, який вимагає більш простої підготовки задачі до розв’язання, але в ряді випадків для задач з добре розробленою теорією (наприклад, задач механіки) доцільно звертатися до методу скінченних елементів.

При визначенні кроку розв’язання задачі основним фактором є точність (якщо висока, то необхідна або дуже дрібна сітка, або розбиття на дуже малі елементи). При цьому необхідно враховувати, що похибка різницевих методів має другий порядок. Її оцінювання можна проводити аналогічно звичайним диференціальним рівнянням за методом Рунге.

У випадку симетрії в області розв’язання можна число вузлів зменшити в два або навіть у чотири рази (при симетрії по обох осях координат). Це дозволяє отримати економію часу та обсягу обчислень.

Велику роль для ефективного розв’язання задачі відіграє вибір початкових наближень. При використанні ітераційних методів від цього значною мірою залежить швидкість збігання. Часто має сенс розв’язувати задачу в декілька етапів: на першому за допомогою грубої сітки (або розбиття на крупні елементи) отримують добре початкове наближення, на наступних – шукають більш точний розв’язок на дрібній сітці.