

§ 24. Метод сеток для уравнения диффузии

Мы уже упоминали в § II.18, что важным методом численного решения задач математической физики является конечноразностный (сеточный), основанный на приближенной замене производных отношениями приращений. Здесь мы опишем один из самых простых его вариантов в применении к решению уравнения стационарной диффузии (16.1) при граничном условии (16.2).

Идея метода проста. Рассмотрим, например, двумерный случай и вспомним, что в § 3 мы совершили переход от сеточного уравнения диффузии к дифференциальному; теперь же мы совершаем обратный переход. Для этого зададимся некоторым шагом $h > 0$ и построим на плоскости x, y сетку из точек с координатами (jh, kh) , где j, k — произвольные целые числа. Область (K) , в которой надо построить решение, ограниченную контуром (L) (рис. 103), аппроксимируем «сеточной» областью; на рис. 103 соответствующий сеточный контур обозначен крестиками. Граничные значения плотности, заданные на (K) , снесем на этот контур. (Имеются способы того, как при таком сносе совершить по возможности меньшую ошибку в решении; но мы не будем касаться здесь этого специального вопроса.)

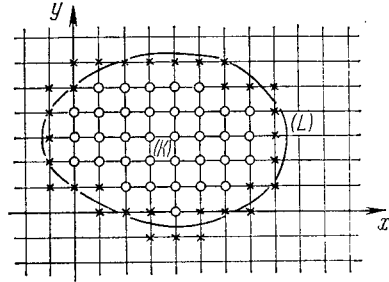


Рис. 103.

Теперь надо перейти от уравнения (16.1) к соответствующему разностному уравнению, заменив лапласиан $\nabla^2 \rho$ на его разностную аппроксимацию. В § 3 была получена эта аппроксимация

$$\nabla^2 \rho(jh, kh) \approx \frac{1}{h^2} (\rho_{j-1, k} + \rho_{j+1, k} + \rho_{j, k-1} + \rho_{j, k+1} - 4\rho_{jk}), \quad (1)$$

где обозначено $\rho_{jk} = \rho(jh, kh)$. Приравнивая правую часть (1) нулю, мы получаем разностный аналог уравнения (16.1):

$$\rho_{jk} = \frac{1}{4} (\rho_{j-1, k} + \rho_{j+1, k} + \rho_{j, k-1} + \rho_{j, k+1}). \quad (2)$$

Это уравнение надо написать для всех внутренних точек сеточной области, обозначенных на рис. 103 кружками; при этом всякий раз, когда в правой части появляются граничные точки сеточной области, надо пользоваться заданными граничными значениями.

Таким образом, получается система алгебраических уравнений 1-й степени, причем как число уравнений, так и число неизвестных значений ρ_{jk} равно числу внутренних точек сеточной области: на-

пример, на рис. 103 это число равно 35. Однако не следует думать, что для решения этой системы нам потребуется выписывать и вычислять определители 35-го порядка! На самом деле положение вовсе не такое уж печальное, так как система (2) весьма приспособлена для применения метода итераций. Опишем один из наиболее наглядных вариантов этого метода.

Для этого зададим произвольно нулевое приближение $\rho_{jk}^{(0)}$ значений ρ_{jk} во внутренних точках сеточной области, стараясь только, чтобы это приближение было по возможности ближе к искомому решению, каким мы его ожидаем. Подставив это приближение в правую часть равенств (2), найдем 1-е приближение $\rho_{jk}^{(1)}$ и т. д. Общая формула, выражающая последующее приближение через предыдущее, такова:

$$\rho_{jk}^{(n+1)} = \frac{1}{4} (\rho_{j-1, k}^{(n)} + \rho_{j+1, k}^{(n)} + \rho_{j, k-1}^{(n)} + \rho_{j, k+1}^{(n)}), \quad (3)$$

причем при вычислении правой части надо в случае необходимости пользоваться заданными граничными значениями.

Формулы (3) — это, с точностью до обозначений, те же рекуррентные соотношения (3.1). Таким образом, смысл метода итераций состоит в том, что мы заменяем стационарный процесс на процесс установления, приняв нулевое приближение за начальное распределение плотностей.

Приведем простой численный пример. Пусть внутренние узлы (точки) сеточной области образуют прямоугольник размера 2×3 . На рис. 104 эти узлы для удобства вычислений изображены в виде маленьких прямоугольников; в граничных узлах указаны заданные граничные значения (частицы поступают сверху и исчезают снизу и по бокам).

Первым шагом в решении является выбор нулевого приближения. Хотя в данной задаче процесс итераций сойдется, каким бы нулевым приближением ни выбрать, но это произойдет тем быстрее, чем мы лучше угадаем искомое решение. При этом выборе большую роль играют, конечно, навыки и интуиция. Наглядно можно себе представить, что числа на рис. 104 показывают температуру на контуре металлической пластинки (ведь стационарное распределение температуры удовлетворяет тому же уравнению (16.1)), а требуется указать температуру во внутренних точках пластинки.

Допустим, что мы выбрали нулевое приближение, как указано на рис. 105. Теперь надо приступить к итерациям*). Если вычисления проводит один человек, то удобнее всего не применять непосредственно формулы (3), а пользоваться следующим *методом Зейделя*,

*) Мы описываем процесс вычислений применительно к человеку, пользующемуся простейшими вычислительными средствами. Однако и мощная ЭЦВМ проводит вычисления по аналогичным схемам, хотя, конечно, для нее число узлов в сетке и, тем самым, точность вычисления можно значительно повысить.

который, кстати, и несколько ускорит сходимость. Внутренние узлы сетки нумеруются в некотором порядке — например так, как это показано на рис. 105 стрелками. Затем к первой точке применяется формула (3) с $n=0$, что даст результат $\frac{1}{4}(0+40+10+40)=22$ (мы будем проводить вычисления только с точностью до единицы). После этого формула (3) с $n=0$ применяется ко второй точке,

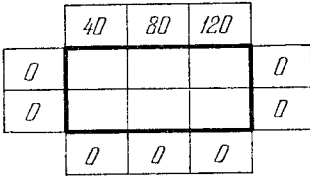


Рис. 104.

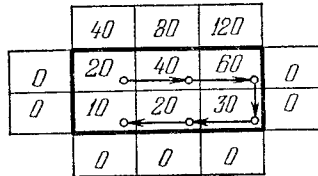


Рис. 105.

однако в правой части мы пользуемся уже вычисленным значением 22 в первой точке, что даст $\frac{1}{4}(22+60+20+80)=46$. (Практически удобно вычисляемые значения писать карандашом в соответствующих клетках и после каждого вычисления стирать предыдущий результат и писать новый, исправленный.) После шести вычислений мы получим 1-е приближение, приведенное на рис. 106. Хорошо видно, что в нулевом приближении мы недостаточно учли влияние

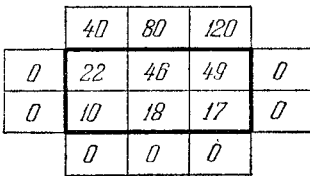


Рис. 106.

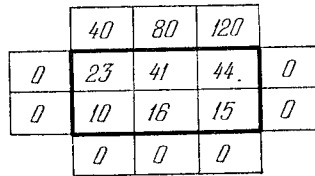


Рис. 107.

правого бока и потому через этот бок ушло большое количество части из начального распределения.

Затем все описанные действия в том же порядке совершаются над 1-м приближением, в результате чего получится 2-е приближение и т. д., пока с выбранной при вычислениях точностью последнее приближение не совпадет с предыдущим. Мы предоставляем читателю проверить, что в нашем примере 4-е приближение совпадает с 3-м, и мы получаем результат, приведенный на рис. 107.

В применении к уравнению Пуассона метод сеток не имеет каких-либо принципиальных особенностей, и мы предоставляем продумать его читателю.

Остановимся еще на решении нестационарной задачи, причем для простоты ограничимся одномерным случаем. Пусть, например, надо решить уравнение (1.8) на отрезке $0 \leq x \leq l$ при граничных условиях

$$\rho|_{x=0} = 0, \quad \rho|_{x=l} = 0$$

и начальном условии

$$\rho|_{t=0} = \rho_0(x) \quad (0 \leq x \leq l).$$

Разобьем отрезок $0 \leq x \leq l$ на некоторое число J равных частей, выберем некоторый временной шаг τ и обозначим через $\rho_{j,h}$ значение искомого решения в точке $x = jh$ ($h = \frac{l}{J}$), $t = n\tau$. Тогда, заменяя производные разностными отношениями, можно уравнение диффузии (1.8) приближенно записать в виде

$$\frac{\rho_{j,n+1} - \rho_{jn}}{\tau} = \kappa \frac{\rho_{j-1,n} + \rho_{j+1,n} - 2\rho_{jn}}{h^2}, \quad (4)$$

откуда

$$\rho_{j,n+1} = \rho_{jn} + \frac{\kappa\tau}{h^2} (\rho_{j-1,n} + \rho_{j+1,n} - 2\rho_{jn}). \quad (5)$$

При этом значения

$$\rho_{j_0} = \rho(jh) \quad \text{и} \quad \rho_{0n} = \rho_{Jn} = 0$$

являются заданными.

Соотношение (5) дает возможность шаг за шагом находить значения ρ_{jn} . Так, полагая в (5) $n=0$ и пользуясь заданными значениями ρ_{j_0} , мы подсчитываем значения ρ_{j_1} . Зная эти значения и полагая в (5) $n=1$, мы вычисляем значения ρ_{j_2} ; при этом для $j=1$ и $j=J-1$ придется воспользоваться граничными значениями $\rho_{01} = \rho_{J1} = 0$ (почему?) и т. д.

Таким образом, по терминологии § II.18, замена уравнения (1.8) уравнением (4) определяет явную схему вычислений. Чтобы проверить ее на устойчивость, надо в силу § II.18 в уравнении (4) положить $\Delta\rho = \alpha e^{i\gamma} p^n$, что после сокращений приведет к соотношению

$$\frac{p-1}{\tau} = \kappa \frac{e^{-i\gamma} + e^{i\gamma} - 2}{h^2}, \quad (6)$$

откуда

$$p = 1 + \frac{\kappa\tau}{h^2} (e^{-i\gamma} + e^{i\gamma} - 2) = 1 - 4 \frac{\kappa\tau}{h^2} \sin^2 \frac{\gamma}{2} \geq 1 - 4 \frac{\kappa\tau}{h^2}.$$

Из условия $|p| \leq 1$ при всех γ приходим к неравенству

$$4 \frac{\kappa\tau}{h^2} \leq 2, \quad \text{т. е.} \quad \tau \leq \frac{h^2}{2\kappa}. \quad (7)$$

Мы видим, что при уточнении аппроксимации дифференциального уравнения разностным, т. е. при уменьшении h шаг τ надо

уменьшать еще более значительно. Этим рассматриваемая схема неудобна.

Отметим, что уравнение (4) в точности совпадает с (1.10), так что в методе сеток мы, действительно, совершаем переход, обратный проделанному в § 1. При этом неравенство (7) показывает, что при заданных κ и h временной шаг в методе сеток не должен превосходить того, который в § 1 в сочетании с данным h породил данное значение коэффициента κ .

Как и в § II.18, для экономии вычислений оказывается удобным перейти к неявной вычислительной схеме. Для этого можно уравнение (4) заменить на

$$\frac{\rho_{j,n} - \rho_{j,n-1}}{\tau} = \kappa \frac{\rho_{j-1,n} + \rho_{j+1,n} - 2\rho_{j,n}}{h^2}. \tag{8}$$

Проверка на устойчивость приводит, взамен (6), к соотношению

$$\frac{1 - 1/p}{\tau} = \kappa \frac{e^{-i\gamma} + e^{i\gamma} - 2}{h^2},$$

откуда легко подсчитать

$$p = \left(1 + 4 \frac{\kappa\tau}{h^2} \sin^2 \frac{\gamma}{2} \right)^{-1} \leq 1,$$

т. е. данная вычислительная схема — устойчивая при любом соотношении шагов h и τ .

При применении схемы (8) на каждом временном шаге, т. е. при каждом $n \geq 1$, приходится решать систему из $J - 1$ уравнений первой степени с $J - 1$ неизвестными $\rho_{1n}, \rho_{2n}, \dots, \rho_{J-1,n}$. Это делается несколько более громоздко, чем в неявной схеме § II.18, но все же не очень, из-за простой структуры системы. Например, при $n=1$, после обозначения $h^2/\kappa\tau = \alpha$, система приобретает вид

$$\left. \begin{aligned} (2 + \alpha) \rho_{11} - \rho_{21} &= \alpha \rho_{10}, \\ -\rho_{11} + (2 + \alpha) \rho_{21} - \rho_{31} &= \alpha \rho_{20}, \\ -\rho_{21} + (2 + \alpha) \rho_{31} - \rho_{41} &= \alpha \rho_{30}, \\ \dots & \\ -\rho_{J-3,1} + (2 + \alpha) \rho_{J-2,1} - \rho_{J-1,1} &= \alpha \rho_{J-2,0}, \\ -\rho_{J-2,1} + (2 + \alpha) \rho_{J-1,1} &= \alpha \rho_{J-1,0}. \end{aligned} \right\} \tag{9}$$

Для ее решения можно применить обычный метод исключения (так называемый метод Гаусса; для систем, структура которых аналогична системе (9), он называется также *прогонкой*). Именно, из первых двух уравнений исключаем ρ_{11} , в результате чего получается соотношение между ρ_{21} и ρ_{31} (напомним, что правые части системы заданы в силу начальных условий). Затем из полученного соотношения и третьего уравнения системы исключаем ρ_{21} , получается соотношение между ρ_{31} и ρ_{41} и т. д. На предпоследнем этапе получится соотношение между $\rho_{J-2,1}$ и $\rho_{J-1,1}$, которое вместе с

последним уравнением даст возможность найти $\rho_{J-1,1}$. Затем идем в обратную сторону: из последнего из упомянутых соотношений, зная $\rho_{J-1,1}$, находим $\rho_{J-2,1}$; из предшествующего соотношения, зная уже $\rho_{J-2,1}$, находим $\rho_{J-3,1}$ и т. д., вплоть до ρ_{11} . Эту схему вычислений легко записать в виде рекуррентных соотношений, удобных для применения ЭЦВМ. При $n=2$ в системе (9) надо все вторые индексы увеличить на 1, в результате чего в правых частях появятся найденные значения ρ_{j1} , а в остальной схема вычислений останется прежней.

Таким путем можно произвольно увеличивать n , т. е. получить приближенные значения решения для любых значений $t > 0$.

Упражнения

1. Исходя из результатов, приведенных на рис. 107, найдите решение задачи рис. 104 с точностью до 0,01; сколько потребовалось добавочных итераций?

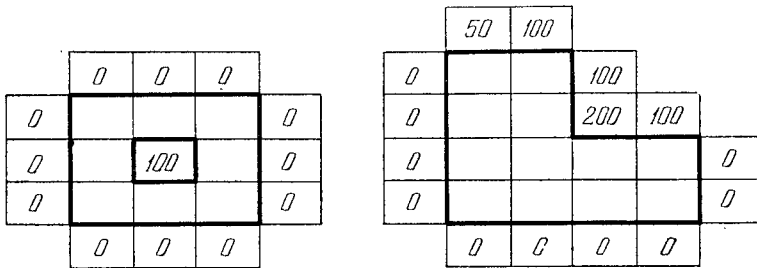


Рис. 108.

2. Найдите решение системы (2) с точностью до единицы для сеточных областей и граничных значений, показанных на рис. 108.

ОТВЕТЫ И РЕШЕНИЯ

§ 1

Уравнение (1.8), где $\kappa = \alpha h^2 / \tau$.

§ 2

1. Ah^2 ; $Ah^3/3$; $2Ah^3$; $\sqrt{\pi} Ah^3/4$.

2. $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$; $\rho(x, t) \equiv \rho_0(x)$. При данном ядре частицы не переносятся вдоль оси x , поэтому распределение плотности не зависит от t .

3. $\frac{\partial \rho}{\partial t} = A \frac{\partial \rho}{\partial x}$; $\rho(x, t) = \rho_0(x + At)$. Система «перекачивает» частицы без рассеивания за время dt на расстояние $A dt$ в отрицательном направлении оси x .

4. $\frac{\partial \rho}{\partial t} = A \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$. После подстановки в правую часть (2.4) разложения (2.7) и выполнения интегрирования в упражнении 2 остается только первый член разложения, а в упражнении 4 — только третий.