

Н.Г.Бураго

Вычислительная механика

Москва 2005

Книга содержит расширенный конспект лекций по численным методам механики сплошной среды, прочитанных автором студентам 5-го курса МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Целью лекций является систематическое, краткое, но достаточно полное освещение идей, лежащих в основе численных методов вычислительной механики, включая подходы, которые еще не освещались в учебной литературе. Подробности читатель при необходимости найдет в многочисленных цитированных первоисточниках.

Книга может использоваться студентами, аспирантами и научными работниками как учебное и справочное пособие по вычислительной механике.

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ.....	10
1. ОСНОВЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	13
1.1. Проекционные методы	13
1.1.1. Общая схема проекционных методов.....	13
1.1.2. Теоремы о сходимости.....	16
1.1.3. Анализ ошибок проекционных методов	17
1.1.4. Метод Галеркина.....	19
1.1.5. Минимизация функционалов	21
1.1.5.1. Метод Рэлея-Ритца.	21
1.1.5.2. Метод наименьших квадратов.....	22
1.1.6. Нестационарные задачи.....	22
1.1.7. Задачи на собственные значения	23
1.2. Интерполяция.....	26
1.2.1. Задание функций.	26
1.2.2. Полиномы Лагранжа.....	26
1.2.3. Степенные функции.	28
1.2.4. Ошибки и число обусловленности.	29
1.2.5. Сплайны	30
1.2.6. Многомерная локальная интерполяция.....	31
1.2.6.1. Типы сеток	31
1.2.6.2. Покоординатная интерполяция.	32
1.2.6.3. L-координаты.....	32
1.3. Численное интегрирование.....	36
1.3.1. Простейшие квадратурные формулы	36
1.3.2. Квадратуры Гаусса.....	37
1.3.2.1. Одномерное интегрирование.....	38
1.3.2.2. Двумерное интегрирование	39
1.3.2.3. Трехмерное интегрирование	41
1.4. Численное дифференцирование	43
1.4.1. Использование интерполянтов.....	43
1.4.2. Метод неопределенных коэффициентов.....	43
1.4.3. Естественная аппроксимация производных	45
1.4.4. Метод отображений или метод якобианов	46
1.5. Прямые методы решения СЛАУ.	48
1.5.1. Предобуславливание и масштабирование.	48
1.5.2. Правило Крамера.....	49
1.5.3. Методы исключения	49
1.5.4. Оптимизация структуры и хранение матриц СЛАУ	52
1.5.5. Симметризация СЛАУ.....	53
1.5.6. Метод LDL^T -факторизации	53

1.5.7. Методы квадратного корня и Холецкого.....	54
1.5.8. Фронтальные методы.....	56
1.5.9. Исключение внутренних степеней свободы.....	56
1.5.10. Итерационное уточнение.....	57
1.6. Итерационные методы решения СЛАУ	58
1.6.1. Метод простой итерации	58
1.6.2. Метод Зейделя-Либмана.....	58
1.6.3. Методы последовательной релаксации.....	59
1.6.4. Градиентные методы.....	59
1.6.5. Метод сопряженных градиентов.....	61
1.6.6. Безматричные итерации.....	62
1.7. Нелинейные алгебраические уравнения.....	64
1.7.1. Метод Ньютона	64
1.7.2. Метод дифференцирования по параметру.....	65
1.7.3. Метод погружения.....	66
1.8. Проблема единственности и ветвления решений.....	67
1.8.1. Теорема о неявной функции.....	67
1.8.2. Особые точки и продолжение решений.....	68
1.9. Методы минимизации функционалов	70
1.9.1. Условная минимизация линейных функционалов	70
1.9.2. Минимизация нелинейных функционалов.....	71
1.9.3. Метод множителей Лагранжа	72
1.9.4. Метод штрафных функций.....	72
1.9.5. Метод локальных вариаций	73
1.10. Решение задач Коши для ОДУ	75
1.10.1. Постановка задач Коши.....	75
1.10.2. Явные методы Рунге-Кутты.....	77
1.10.3. Явные методы Адамса	78
1.10.5. Жесткие задачи и неявные схемы.....	79
1.11. Двухточечные краевые задачи для систем ОДУ.....	83
1.11.1. Метод стрельбы.....	83
1.11.2. Квазилинеаризация.....	85
1.11.3. Линейная двухточечная краевая задача	86
1.11.4. Конечные разности и матричная прогонка	86
1.11.5. Метод Калнинса	87
1.11.6. Метод ортогональной прогонки Годунова.....	88
1.11.7. Метод переноса граничных условий Абрамова	89
1.11.8. Метод сплайнов.....	89
2. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ	
ПРОИЗВОДНЫХ.....	91
2.1. Основные типы уравнений в частных производных.....	91

2.1.1. Типы уравнений и поведение решений.....	91
2.1.2. Модельные уравнения и краевые задачи.	97
2.1.3. Получение искусственных аналитических решений.	103
2.1.4. Обезразмеривание уравнений. Параметры подобия.	103
2.1.5. Консервативные формы записи уравнений.	106
2.1.6. Соотношения на сильных разрывах.	107
2.2. Сведение сложных задач к простым.	110
2.2.1. Разделение переменных.....	110
2.2.2. Сведение начально-краевых задач к задачам Коши.....	110
2.2.3. Метод прямых.	111
2.2.4. Метод интегральных соотношений.	111
2.2.5. Покоординатная редукция уравнений.	112
2.2.6. Методы расщепления.....	112
2.2.7. Метод конечных разностей.	113
2.2.8. Метод конечных объемов.....	114
2.2.9. Метод конечных элементов.....	116
2.2.10. Бессеточные методы Галеркина.....	117
2.2.11. Бессеточные спектральные методы.	117
2.2.12. Бессеточные методы частиц.	117
2.2.13. Метод граничных элементов.....	118
2.3. Теоремы о сходимости разностных схем.	119
2.3.1. Порядок аппроксимации.....	119
2.3.2. Устойчивость.....	119
2.3.3. Теорема Лакса.	119
2.3.3. Теорема сходимости для МКЭ.....	120
2.3.4. Теорема Лакса-Вендроффа.....	120
2.4. Приемы исследования устойчивости разностных схем....	122
2.4.1. Метод гармонических возмущений.....	122
2.4.2. Спектральный (матричный) метод.	123
2.4.3. Метод дифференциальных приближений.....	124
2.4.4. Принцип замороженных коэффициентов.	128
2.4.5. Принцип расщепления по процессам.....	128
2.4.6. Учет влияния источниковых членов.	128
2.4.7. Практический выбор шага по времени.....	129
2.5. Основные конечно-разностные схемы.....	131
2.5.1. Схема ВВЦП.....	131
2.5.2. ВВЦП-схема с искусственной вязкостью.	132
2.5.3. Схема Лакса.....	133
2.5.4. ВВЦП-схема со сглаживанием.....	134
2.5.5. Схема с разностями против потока.	135
2.5.6. Явные и неявные схемы расчета диффузии.....	137
2.5.7. Схема чехарда.....	138
2.5.8. Схема Дюфорта-Франкела.	139
2.5.9. Схема Лакса-Вендроффа.	140
2.5.10. Схема Мак-Кормака.....	141

2.7. Схемы метода характеристик.....	143
2.7.1. Квазилинейные уравнения гиперболического типа.....	143
2.7.2. Характеристическая форма уравнений	143
2.7.3. Основные задачи для гиперболических уравнений.	146
2.7.4. Прямой метод характеристик.....	146
2.7.5. Обратно-характеристический метод.	147
2.7.6. Характеристические соотношения для стационарных сверхзвуковых течений.....	147
2.7.7. Маршевые характеристические методы для стационарных сверхзвуковых течений.....	149
2.7.7. Область применимости метода характеристик	150
2.7.8. Примеры определения характеристик.....	150
2.8. Расчет сжимаемых течений	153
2.8.1. Система уравнений и постановка задачи.	153
2.8.2. Подходы к расчету разрывных течений.....	154
2.8.3. Схемы с искусственной вязкостью.....	155
2.8.4. Схема Годунова.....	157
2.8.4.1. Консервативная аппроксимация законов сохранения	158
2.8.4.2. Расчет значений на границах ячеек	159
2.8.4.3. Повышение порядка точности.....	159
2.8.4.4. Расчет вязких течений.....	160
2.8.5. Гибридные схемы.....	161
2.8.6. Схемы коррекции потоков	162
2.8.7. Схемы уравновешенной вязкости.....	162
2.8.8. Схемы экспоненциальной подгонки для погранслоев....	163
2.8.9. Применение неявных схем.	163
2.8.10. Описание стандартных тестовых задач.....	163
2.9. Расчет несжимаемых вязких/невязких течений	164
2.9.1. Формулировка начально-краевой задачи.....	164
2.9.1.1. Переменные скорость-давление.....	164
2.9.1.2. Переменные функция тока-завихренность.....	167
2.9.2. Методы в переменных функция тока – завихренность...169	
2.9.2.1. Метод дискретных вихрей.....	169
2.9.2.2. Метод "Облако в ячейке"	172
2.9.3. Методы в переменных скорость-давление.....	173
2.9.3.1. Методы искусственной сжимаемости.	173
2.9.3.2. Метод коррекции давления.	175
2.9.3.3. Метод штрафных функций.....	177
2.9.4. Расчет течений многокомпонентной смеси	177
2.9.5. Учет гравитационного и электро-магнитного полей	178
2.9.6. Расчет турбулентных течений.....	178
2.9.6.1. Эмпирические модели турбулентности.....	178
2.9.6.2. Теория Рейнольдса осредненного течения.....	178
2.9.6.3. Модель крупных Эдди-вихрей	178
2.9.6.4. Прямое моделирование турбулентности.	178
2.9.7. Описание стандартных тестовых задач.....	178

2.10. Лагранжевы методы для задач упругопластичности	179
2.10.1. Формулировка задач упругопластичности	179
2.10.2. Явные схемы	179
2.10.3. Неявные схемы	179
2.10.4. Расчет контакта деформируемых тел.	179
2.10.5. Расчет тонкостенных конструкций.....	179
2.10.6. Расчет составных конструкций	179
2.10.7. Расчет процессов разрушения.....	179
2.10.8. Описание стандартных тестовых задач.....	179
2.11. Расчет свободных и межфазных границ.....	180
2.11.1. Расчет течений мелкой воды	180
2.11.1.1. Формулировка начально-краевой задачи	180
2.11.1.2. Методы расчета	180
2.11.2. Метод произвольно подвижных координат.....	180
2.11.3. Методы маркеров и ячеек.....	180
2.11.4. Методы непрерывного маркера.	180
2.11.5. Сквозной расчет межфазных границ.....	180
2.11.6. Метод свободных точек. Методика “Медуза”	180
2.11.7. Метод фиктивных областей	180
2.11.8. Метод перекрывающихся сеток.....	180
2.11.9. Многосеточные методы.....	180
2.11.10. Консервативность и сглаживание	180
2.11.11. Спектральные методы.....	180
2.11.12. Бессеточные методы Галеркина.....	180
2.11.13. SPH - метод.....	180
2.12. Метод граничных интегральных уравнений	193
2.13. Методы генерации сеток	201
2.13.1. Простейшие регулярные сетки.	201
2.13.2. Методы отображений.....	203
2.13.3. Методы построения нерегулярных сеток.....	203
2.13.4. Построение сеток на поверхностях	203
2.14. Физически адаптивные сетки.....	204
2.14.1. Адаптивные встраиваемые сетки.....	204
2.14.2. Адаптивные подвижные сетки.....	204
2.15. О программном обеспечении задач МСС.....	205
2.15.1. Устройство пакета программ	205
2.15.2. Правила проведения вычислений	205
2.15.3. Обзор пакетов программ для задач МСС.....	205
2.15.3.1. ABAQUS.....	205
2.15.3.2. ADAMS.....	205
2.15.3.3. ADINA	206
2.15.3.4. ANSYS.....	206
2.15.3.5. CFX	207
2.15.3.6. COSMOS	207
2.15.3.7. COYOTE.....	207

2.15.3.8. <i>DYNA2D/3D</i>	208
2.15.3.9. <i>FIDAP</i>	208
2.15.3.10. <i>FLUENT</i>	208
2.15.3.11. <i>JAS3D</i>	209
2.15.3.12. <i>LINFLOW</i>	209
2.15.3.13. <i>LS-DYNA3D</i>	209
2.15.3.14. <i>MARC/AUTOFORGE</i>	210
2.15.3.15. <i>NASTRAN</i>	210
2.15.3.16. <i>NIKE2D/3D</i>	211
2.15.3.17. <i>ProEngineer</i>	212
2.15.3.18. <i>PRONTO3D</i>	212
2.15.3.19. <i>PHOENICS</i>	212
2.15.3.20. <i>SEACAS/ACCESS</i>	212
2.15.3.21. <i>STAR-CD</i>	213
2.15.3.22. <i>SYSWELD</i>	213
2.15.3.23. <i>TOPAZ2D/3D</i>	213
2.15.4. Гидрокоды	213
Общее введение	213
2.16. Применение ускорителей вычислений	221
2.16.1. Векторизация	221
2.16.2. Распараллеливание	221
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	224
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	225
ПРИЛОЖЕНИЕ 1. СВЕДЕНИЯ ИЗ	
ФУНКЦИОНАЛЬНОГО АНАЛИЗА	231
1.1. Линейное множество	231
1.2. Норма	231
1.3. Гильбертовы пространства	232
1.4. Линейная зависимость и базис	233
1.5. Оператор и функционал	234
1.6. Полнота	234
1.7. Подпространство	235
ПРИЛОЖЕНИЕ 2. ЗАПИСЬ ОСНОВНЫХ	
ОПЕРАТОРОВ В АБСТРАКТНОЙ ТЕНЗОРНОЙ НОТАЦИИ.	
.....	236

ПРИЛОЖЕНИЕ 3. ЗАПИСЬ ОСНОВНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ В КРИВОЛИНЕЙНЫХ КООРДИНАТАХ.....	239
3.1. Цилиндрические координаты	239
3.2. Сферические координаты	240
ПРИЛОЖЕНИЕ 4. СВОДКА ОСНОВНЫХ СВОЙСТВ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ.....	243
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	245
ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ	247

Введение

Эта книга содержит сведения, которые будут интересны тем, кто хочет получить представление о методах и алгоритмах решения задач механики сплошной среды. Наряду с изложением основ численного анализа книга имеет своей целью ознакомление читателя с современными разработками и достижениями в области вычислительной континуальной механики.

Первая часть курса посвящена основам численного анализа. Знание этого материала абсолютно необходимо для понимания методов вычислительной механики, поэтому необходимый минимум сведений приводится. Ключом к большинству применяемых методов является теория проекционных методов. Поэтому краткий и очень простой пересказ этой теории приведен уже в самом начале первой части. Затем описаны основные методы интерполяции и показана важнейшая роль выбора базиса в успехе или неуспехе численного решения.

Далее дано описание практически важных методов многомерного численного дифференцирования - метода естественной аппроксимации и метода отображений, отсутствующее, как это ни странно, в стандартных курсах численного анализа. Приведены практически важные квадратурные формулы для численного интегрирования в случае многих независимых переменных.

Задачи численного анализа сводятся к системам алгебраических уравнений. В разделе о решении линейных алгебраических уравнений наряду с традиционными вариантами метода исключения описаны наиболее перспективные итерационные безматричные методы, приводящие к точному решению за конечное число операций.

В разделе про нелинейные (алгебраические) задачи помимо традиционной ньютоновской квазилинеаризации, описаны методы погружения и продолжения по параметру, а также дано представление о численном исследовании вопросов существования, единственности и ветвления решений нелинейных уравнений.

Системы алгебраических уравнений часто выражают условия минимальности или стационарности некоторых функционалов. Задачи и методы поиска и анализа экстремальных точек функционалов рассмотрены в разделе по теории математического программирования. В этом разделе описаны основные методы

безусловной минимизации функционалов и методы сведения задач условной минимизации к задачам безусловной минимизации.

Завершается первая часть курса рассмотрением основных вопросов эффективного численного решения начальных и двухточечных краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Вторая часть курса посвящена методам численного решения уравнений в частных производных, возникающих в задачах вычислительной механики.

Дан обзор основных типов задач и классических методов решения, описаны основные способы построения и исследования классических разностных схем.

Разобраны лагранжевы методы для задач упругопластичности, в частности, методы контрольных объемов и конечных элементов, специфические лагранжевы методы расчета контактных границ и континуального разрушения, расчет взаимодействия разреженных и конденсированных сред.

Изложены основные схемы эйлеровой гидро-газодинамики. Рассмотрены способы учета несжимаемости, приемы расчета разрывов, пограничных слоев. Описаны основные методы расчета турбулентных течений.

Рассмотрены алгоритмы расчета подвижных контактных, свободных и межфазных границ. Изложен метод произвольно подвижных адаптивных координат, метод фиктивных областей и подвижных перекрывающихся сеток. Описаны основные методы генерации сеток и управления физически и геометрически адаптивными сетками.

Разобраны методы дискретных маркеров и частиц, а также методы непрерывного маркера для расчета многофазных течений.

Изложены спектральные и бессеточные методы частиц. Специальная глава посвящена описанию метода граничных элементов.

Рассказано об устройстве пакетов прикладных программ для задач механики сплошных сред и сделан краткий обзор основных пакетов.

Книга написана по материалам лекций, прочитанных автором

студентам 5-го курса кафедры прикладной математики МГТУ им. Н. Э. Баумана. Она содержит пересказ наиболее интересных и перспективных методов вычислительной механики, составленный по материалам других учебников и монографий, а также научной периодики, ссылки на которые даны в списке литературы.

Автор благодарит В.С.Зарубина, Г.Н.Кувыркина, В.Н.Кукуджанова, А.В.Манжирова за поддержку и стимулирование работы по написанию книги, Б.Н.Азаренка и В.А.Гаранжу за конструктивную критику фрагментов книги.

1. Основы численного моделирования

1.1. Проекционные методы

1.1.1. Общая схема проекционных методов

Приближенное решение начально-краевых задач математической физики проекционными методами подразумевает поиск проекции решения на аппроксимирующее конечномерное подпространство. Коэффициенты разложения приближенного решения по базису аппроксимирующего подпространства определяются при этом из системы уравнений, выражающей требование близости приближенного и точного решений.

Рассмотрим общую схему проекционных методов на примере некоторой линейной краевой задачи, которая в условной операторной записи выглядит так:

$$Ax = y^*$$

где A - линейный оператор, x, y - элементы гильбертовых пространств X, Y . Предполагается, что задача корректна, т.е. для оператора A существует ограниченный обратный $\|A^{-1}\| \leq M < \infty$, определяющий единственное решение $x^* = A^{-1}y^*$ для любого заданного элемента правой части y^* . Приближенное решение $x_{(k)}$ ($k=1,2,\dots$) строится в виде разложений по некоторому множеству базисных элементов $\{u_i\}_{i=1}^k$ (пробных функций), называемому аппроксимационным базисом. Элементы аппроксимационного базиса в общем случае не принадлежат пространству решения X и определяют конечномерное пространство - оболочку X^k . Эта оболочка имеет своими элементами наборы коэффициентов разложения x^k решений x по пробным базисным элементам. Аналогично вводится конечномерное пространство Y^k наборов коэффициентов разложения y^k правых частей y^* по своему базису $\{v_i\}_{i=1}^k$, который называется проекционным.

Линейные комбинации элементов аппроксимационного и проекционного базисов с наборами коэффициентов $x^k = \{a_i\}_{i=1}^k$, $y^k = \{b_i\}_{i=1}^k$ будем обозначать $x^{(k)}, y^{(k)}$.

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i \quad y^{(k)} = \sum_{i=1}^k b_i v_i$$

а соответствующие конечномерные пространства обозначим $X^{(k)}$ и $Y^{(k)}$.

В результате удовлетворения требований близости приближенных решений к точному исходная задача сводится к конечномерной для определения коэффициентов разложения решения по аппроксимационному базису. Конечномерная или, как говорят, дискретизированная задача имеет вид:

$$A_k x^k = y^k$$

где A_k обозначает матрицу-оператор дискретизированной задачи. Выражения для матрицы A_k и вектора y^k имеют вид

$$A_k = \left\{ (v_i, Au_j) \right\}_{i,j=1}^k, \quad y^k = \{ (v_i, y^*) \}_{i=1}^k$$

где (u, v) - скалярное произведение элементов подпространств $X^{(k)}$ и $Y^{(k)}$. Записанная система уравнений дискретизированной задачи выражает условия равенства нулю проекции невязки $Ax^{(k)} - y^*$ на проекционное подпространство:

$$(Ax^{(k)} - y^*, v_i) = 0 \quad (i=1,2,\dots,k)$$

Поэтому такие методы решения и называются проекционными. Имеется и старое альтернативное название – “прямые методы” (см. Михлин, 1950).

При реализации некоторого проекционного метода решаются следующие подзадачи:

- 1) построить базисы $\{u_i\}_{i=1}^k$, $\{v_i\}_{i=1}^k$.
- 2) построить алгоритм определения коэффициентов разложения решения x^k по аппроксимационному базису.
- 4) убедиться в том, что $x^{(k)}$ стремится к x^* при $k \rightarrow \infty$ в некотором общем для них нормированном пространстве.

Приближенные оценки близости решений проводятся априорно

аналитически (если это возможно) и проверяются затем апостериорно численно. Из-за сложности практических задач априорное теоретическое исследование проекционных методов часто проводится на упрощенных аналогах исходных задач, называемых модельными задачами, что позволяет отсеять заведомо негодные алгоритмы решения.

Аппроксимации решения и оператора задачи реализуются операторами проектирования $\varphi_k : X \rightarrow X^k$ и $\phi_k : Y \rightarrow Y^k$

$$\begin{aligned} x &\rightarrow Ax \rightarrow \phi_k(Ax) \\ x &\rightarrow \varphi_k x \rightarrow A_k \varphi_k x \end{aligned}$$

где $A_k : X^k \rightarrow Y^k$ - дискретный аналог исходного оператора задачи.

Величина $\gamma_k = \|A_k \varphi_k x - \phi_k Ax\|$ называется мерой аппроксимации. Преобразование наборов коэффициентов разложения в элементы функциональных пространств реализуют операторы восполнения $\tilde{\varphi}_k : X^k \rightarrow X^{(k)}$ и $\tilde{\phi}_k : Y^k \rightarrow Y^{(k)}$:

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i \quad y^{(k)} = \sum_{i=1}^k b_i v_i$$

или

$$x^{(k)} = \tilde{\varphi}_k x^k, \quad y^{(k)} = \tilde{\phi}_k y^k$$

Операторы проектирования и восполнения не являются взаимно обратными.

Решение дискретизированной задачи $x_*^k = A_k^{-1} y_*^k$ называется каркасом приближенного решения (Гавурин, 1971) и отличается от каркаса проекции точного решения на величину:

$$\tau_k = \|x^k - \varphi_k x_*\|,$$

называемую ошибкой приближенного решения в аппроксимационном пространстве X^k .

Описание алгоритма (не только для проекционных методов) обычно состоит из следующих частей: мотивировка алгоритма (желательная, но необязательная часть), формальное описание, исследование

(теоретическое и/или численное).

1.1.2. Теоремы о сходимости

Пусть для меры аппроксимации $\gamma_k = \|A_k \phi_k x - \phi_k Ax\|$ имеет место оценка $\gamma_k = Ck^{-N}$, где число $N > 0$ возможно является дробным и характеризует скорость убывания меры аппроксимации с ростом размерности k аппроксимирующего пространства X^k . Это число N называется порядком аппроксимации.

Под устойчивостью конечномерной задачи понимается существование ограниченного обратного оператора $\|A_k^{-1}\| \leq M < \infty$.

Теорема о сходимости каркасов приближенных решений: из аппроксимации $\gamma_k \rightarrow 0$ и устойчивости $\|A_k^{-1}\| \leq M < \infty$ следует сходимость (каркасов): $\tau_k \rightarrow 0$

Доказательство: Поскольку $A_k a_{(k)}^* = \phi_k y^* = \phi_k Ax^*$, то

$$\|\phi_k x^* - a_{(k)}^*\| = \|A_k^{-1}(A_k \phi_k x^* - A_k a_{(k)}^*)\| \leq \|A_k^{-1}\| \|A_k \phi_k x^* - \phi_k y^*\| \leq M \gamma_k \rightarrow 0$$

Теорема о сходимости приближенных решений: Если каркасы сходятся, то есть $\beta_k = \|A_k^{-1}\| \gamma_k \rightarrow 0$ и оператор выполнения корректен, то есть $\|\tilde{\phi}_k \phi_k x^* - x^*\| \rightarrow 0$ и ограничен, то есть $\|\tilde{\phi}_k\| \leq P < \infty$, то приближенные решения сходятся: $x_{(k)} \rightarrow x^*$.

Доказательство:

$$\begin{aligned} \|x_{(k)} - x^*\| &= \|\tilde{\phi}_k a_{(k)}^* - x^*\| \leq \|\tilde{\phi}_k a_{(k)}^* - \tilde{\phi}_k \phi_k x^*\| + \|\tilde{\phi}_k \phi_k x^* - x^*\| \leq \\ &\leq \|\tilde{\phi}_k\| \|\phi_k x^* - a_{(k)}^*\| + \|\tilde{\phi}_k \phi_k x^* - x^*\| = \\ &= \|\tilde{\phi}_k\| \|A_k^{-1} A_k \phi_k x^* - A_k^{-1} \phi_k Ax\| + \|\tilde{\phi}_k \phi_k x^* - x^*\| \leq \\ &\leq \|\tilde{\phi}_k\| \beta_k + \|\tilde{\phi}_k \phi_k x^* - x^*\| \rightarrow 0 \end{aligned}$$

1.1.3. Анализ ошибок проекционных методов

При численной реализации различают: ошибку в задании оператора задачи ΔA , ошибку в задании правой части Δy^* и ошибку в вычислении невязки уравнения Δ_s .

Для оценки влияния этих разновидностей ошибок на решение ниже используется вспомогательная лемма Канторовича-Акилова, доказательство которой можно найти в курсах функционального анализа¹. В соответствии с этой леммой, если норма оператора $\|C\| < 1$ и E является тождественным оператором, то справедливы следующие два неравенства

$$\|(E + C)^{-1}\| \leq (1 - \|C\|)^{-1},$$

$$\|(E + C)^{-1} - E\| \leq \|C\| (1 - \|C\|)^{-1}$$

Теперь можно сделать оценки для ошибок.

Ошибка по правой части. $\Delta_y x^*$ определяется из уравнения:

$$A(x + \Delta_y x^*) = (y^* + \Delta y^*)$$

и подчинена неравенству:

$$\|\Delta_y x^*\| \leq \|A^{-1}\| \|\Delta y^*\|$$

Ошибка по оператору $\Delta_A x^*$ определяется из уравнения:

$$(A + \Delta A)(x^* + \Delta_A x^*) = y^*$$

которое можно переписать так:

$$A(E + A^{-1}\Delta A)(x^* + \Delta_A x^*) = y^*$$

или

¹ См. книгу Колмогорова и Фомина.

$$x^* + \Delta_A x^* = (E + A^{-1} \Delta A) A^{-1} y^* - A^{-1} y^* + A^{-1} y^*$$

или

$$\Delta_A x^* = (E + A^{-1} \Delta A) A^{-1} y^* - A^{-1} y^*$$

откуда с учетом неравенств Канторовича-Акилова следует оценка:

$$\|\Delta_A x^*\| \leq \|A^{-1} y^*\| (A^{-1} \Delta A) (1 - \|A^{-1} \Delta A\|)^{-1} = \frac{\rho}{1 - \rho} \|x^*\| \leq \frac{\rho}{1 - \rho} \|A^{-1}\| \|y^*\|$$

где $\rho = \|A^{-1} \Delta A\|$.

Ошибка процесса решения: $\Delta_s x^*$ приводит к ненулевой невязке исходного уравнения, которую можно рассматривать как дополнительную ошибку в правой части Δ_s . Оценка будет такой же как для погрешности по правой части.

Суммарная ошибка Δx^* определяется из уравнения:

$$(A + \Delta A)(x^* + \Delta x^*) = y^* + \Delta y^* + \Delta_s$$

и подчинена следующему неравенству (вывод аналогичен рассмотренному выше):

$$\Delta x^* \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left[\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta y^*\| + \|\Delta_s\|}{\|y^*\|} \right]$$

где $\text{cond}(A) = \|A^{-1}\| \|A\|$ - число обусловленности оператора A :

Оценки показывают, что при $\text{cond}(A) \gg 1$ влияние ошибок приводит к потере точности. Аналогичный результат имеется и для конечномерных уравнений: уравнение погрешностей

$$(A_k + \Delta A_k)(x^k + \Delta x^k) = y^{*k} + \Delta y^{*k} + \Delta_s^k$$

приводит к оценке:

$$\Delta x^k \leq \frac{cond(A_k)}{1 - cond(A_k) \frac{\|\Delta A_k\|}{\|A_k\|}} \left[\frac{\|\Delta A_k\|}{\|A_k\|} + \frac{\|\Delta y^{*k}\| + \|\Delta_s^k\|}{\|y^{*k}\|} \right]$$

1.1.4. Метод Галеркина

Решение исходной задачи

$$Ax = y^*$$

ищется в виде линейной комбинации пробных функций $\{u_i\}_{i=1}^k$

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i$$

где $x^k = \{a_i\}_{i=1}^k$ - набор искомых коэффициентов разложения, называемый каркасом приближенного решения. Функции $u_i(r)$ образуют аппроксимационный базис, состоящий из пробных или координатных функций. Система уравнений метода Галеркина-Петрова для определения каркаса приближенного решения выражает условия ортогональности

$$(v_i, R_k) = 0$$

невязки исходного уравнения:

$$R_k = Ax_{(k)} - y^*$$

к линейной оболочке второго множества базисных функций $\{v_i\}_{i=1}^k$, образующих так называемый проекционный базис, состоящий из проекционных или весовых функций. Конечномерная система уравнений для каркасов приближенных решений имеет вид:

$$A_k x^k = y^k$$

где выражения для матрицы A_k и вектора y^k имеют вид

¹ r - радиус-вектор, указанный в качестве аргумента он обозначает зависимость базисных функций от пространственных переменных

$$A_k = \left\{ (v_i, Au_j) \right\}_{i,j=1}^k, \quad y^k = \{(v_i, y^*)\}_{i=1}^k$$

Метод Галеркина-Петрова называют также методом взвешенных невязок. Термин “взвешенные” означает “скалярно умноженные на весовые функции” $\{v_i\}_{i=1}^k$. Коэффициенты разложения по пробным базисным функциям называются при этом весовыми коэффициентами. В частности, если аппроксимационный и проекционный базисы совпадают, то такая модификация называется просто методом Галеркина или методом Бубнова-Галеркина.

Справедлива следующая лемма (см. Гавурин, 1971): преобразования базисов $\{u_i\}_{i=1}^k$, $\{v_i\}_{i=1}^k$, сохраняющие аппроксимационную (координатную) и проекционную оболочки X^k и Y^k , не меняют решения $x^{(k)}$.

С вычислительной точки зрения, однако, выбор аппроксимационного (координатного) и проекционного базисов критичен, поскольку влияет на скорость сходимости приближенных решений и на обусловленность систем алгебраических уравнений. Соответствующие примеры разобраны далее в разделе про интерполяцию.

Замечания по разновидностям метода Галеркина-Петрова.

Выбор дельта-функций в качестве проекционного базиса или в качестве весовых функций

$$v_i = \delta(x - x_i)$$

приводит к *методу коллокации*, требующему обращения невязок в нуль (удовлетворения уравнений метода Галеркина) в конечном числе точек области решения.

Выбор степенных функций в качестве проекционного базиса или в качестве весовых функций

$$v_i = x^{i-1}$$

приводит к *методу моментов*, называемому так из-за аналогии формул метода с определениями моментов сил (i-1)-го порядка в механике.

1.1.5. Минимизация функционалов

1.1.5.1. Метод Рэлея-Ритца.

В случае положительно определенного самосопряженного оператора A уравнение

$$Ax = y^*$$

является уравнением Эйлера для функционала энергии

$$F = \frac{1}{2}(Ax, x) - (y^*, x)$$

Разыскивая приближенное решение в виде проекции на линейную оболочку X_k , натянутую на базисные векторы $\{u_i\}_{i=1}^k$

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i$$

каркас приближенного решения $x^k = \{a_i\}_{i=1}^k$ определяем из условий минимума функционала энергии:

$$\frac{\partial}{\partial a_i} F(x^{(k)}) = 0$$

и, таким образом, приходим к системе уравнений метода Рэлея-Ритца:

$$\sum_{j=1}^k (Au_i, u_j) a_j = (y^*, u_i), \quad i=1, 2, \dots, k.$$

Эта система уравнений, как нетрудно заметить, формально совпадает с системой уравнений метода Бубнова-Галеркина для уравнения $(u_i, Ax_{(k)} - y^*) = 0$. Однако, метод Бубнова-Галеркина является более общим, поскольку в отличие от метода Ритца не требует существования функционала энергии и, соответственно, не требует положительной определенности и самосопряженности оператора исходной задачи. Область применимости методов Ритца ограничена задачами со знакоопределенными и самосопряженными операторами.

1.1.5.2. Метод наименьших квадратов.

В случае знаконеопределенного и несамосопряженного оператора A исходную задачу можно-таки свести к поиску минимума функционала и затем использовать метод Рунца. Для этого в качестве функционала данной задачи принимается квадрат нормы невязки $R_k = Ax_{(k)} - y^*$, а именно $F(x_{(k)}) = (R_k, R_k)$, тогда в качестве условий минимума имеем следующую систему уравнений:

$$\sum_{j=1}^k (Au_i, Au_j) a_j = (y^*, Au_i), \quad i=1,2,\dots,k.$$

Заметим, что система уравнений метода наименьших квадратов характеризуется симметричной и положительно определенной матрицей, но хуже обусловлена, чем система уравнений метода Бубнова-Галеркина, и нуждается в предобусловливании (умножении на приближенную обратную матрицу) для уменьшения числа обусловленности (отношения максимального и минимального собственных чисел). Это необходимо для подавления влияния на решение ошибок при вычислении правой части и оператора задачи.

1.1.6. Нестационарные задачи

Рассмотрим применение проекционных методов в случае эволюционных уравнений. В этом случае запись исходной задачи в операторной форме содержит нестационарный член с производной по времени:

$$\partial_t x = Ax - y^*$$

и начальные условия

$$x|_{t=0} = x^0$$

Как и для стационарных задач по методу Галеркина решение ищется в виде разложения по базисным функциям, но с коэффициентами, зависящими от времени

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i(t) u_i(r)$$

Разрешающие уравнения в этом случае как и для стационарных

задач выражают ортогональность невязки к проекционному пространству, но из-за нестационарных членов принимают вид системы обыкновенных дифференциальных уравнений по времени

$$\sum_{j=1}^k (u_i, u_j) \partial_t a_j = \sum_{j=1}^k (u_i, Au_j) a_j + (u_i, y^*), \quad i=1,2,\dots,k.$$

дополненной начальными условиями, которые также скалярным умножением на проекционный базис приводятся к начальным условиям для каркасов приближенных решений

$$\sum_{j=1}^k (v_i, u_j) a_j(0) = (v_i, x_{(k)}^0)$$

Методы Бубнова-Галеркина ($u_i = v_i$) и коллокации ($v_i = \delta(r - r_i)$) также, в частности, применимы к нестационарным задачам. Методы, основанные на минимизации функционалов также можно применять в нестационарных задачах. Для этого можно строить вспомогательный функционал нормы ошибки на каждом шаге по времени, используя, например, разностную аппроксимацию производных по времени:

$$\frac{(x_{(k)}^{n+1} - x_{(k)}^n)}{\Delta t_n} = Ax_{(k)}^{n+1} - y^*$$

Для величин на новом временном слое (n+1) возникает вспомогательная стационарная задача, так что все ранее рассмотренные проекционные методы можно применять и в этом случае.

1.1.7. Задачи на собственные значения

Задачи на собственные значения возникают во многих практических приложениях в связи с определением собственных частот и форм колебаний, критических нагрузок и форм потери устойчивости, а также, в более общем смысле, в связи с определением точек неединственности и ветвления решений нелинейных задач. Задачи на собственные значения приходится решать также при построении спектральных базисов и во многих других случаях.

Операторная запись задачи на собственные значения имеет вид:

$$Ax = \lambda Bx$$

Тривиальное решение $x=0$ имеет место для любых значений числа λ и интереса не представляет. Требуется определить нетривиальные решения (собственные функции) и соответствующие значения параметра λ (собственные значения).

Проекционные методы отыскания нетривиальных решений, которые отвечают собственным значениям числа λ , основаны на представлении решения в виде линейных комбинаций координатных функций:

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i$$

Для метода Галеркина-Петрова конечномерные (алгебраические) уравнения задачи на собственные значения выражают ортогональность невязки к проекционному пространству с базисом v_i и имеют вид:

$$A_k x^k = \lambda B_k x^k$$

где

$$A_k = \{(v_i, Au_j)\}_{i,j=1}^k, \quad B_k = \{(v_i, Bu_j)\}_{i,j=1}^k$$

Решение полученной алгебраической задачи на собственные значения получается далее методами линейной алгебры.

Альтернативный метод¹ отыскания собственных решений, основан на минимизации функционалов (см. детали в книге Михлин, 1970): Минимальное собственное значение и соответствующая собственная функция определяются путем решения следующей задачи минимизации

$$\lambda_1 = \min_{x \in X} \frac{(Ax, x)}{(Bx, x)}$$

Следующие собственные значения $\lambda_m, m=2,3,\dots$ также определяются задачами минимизации

$$\lambda_m = \min_{x \in X \setminus \tilde{X}_{m-1}} \frac{(Ax, x)}{(Bx, x)}$$

¹ Метод Ланцоша (подробнее см. книгу Уилкинсона и Райнша)

где \tilde{X}_{m-1} - оболочка, натянутая на $(m-1)$ собственных функций, отвечающих первым $(m-1)$ собственным числам.

Подробное описание алгоритмов для линейных задач на собственные значения можно найти в книге Уилкинсона и Райнша (1976).

1.2. Интерполяция.

1.2.1. Задание функций.

Известны следующие способы задания функций: аналитический способ подразумевает, что имеется формула для вычисления значения функции по значению аргумента; алгоритмический способ использует последовательность математических действий (алгоритм) вычисления функции по значению аргумента и, наконец, табличный способ, который определяет интерполяцией значение функции $f(x)$ по ее значениям в конечном числе точек (то есть по таблице): $(x_k, f_k)_{k=1}^N$.

Интерполяция это аналитическое или алгоритмическое приближенное представление таблично заданной функции, позволяющее определить ее значение в любой точке ее области определения.

Экстраполяция это применение интерполяционных формул или алгоритмов для определения значений функции за пределами ее области определения.

Различают следующие основные типы интерполяции. Глобальная интерполяция использует базисные функции, отличные от нуля во всей области определения функции. Примером может служить интерполяция степенными или тригонометрическими функциями. Глобальная интерполяция часто является бессеточной.

Локальная интерполяция использует базисные функции, отличные от нуля в малой окрестности данной точки. Такие интерполяции чаще всего используются при численном моделировании с применением сеток. Примером является одномерная кусочно-линейная интерполяция.

$$f(x) = \frac{(x - x_i)f_{i+1} + (x_{i+1} - x)f_i}{(x_{i+1} - x_i)}$$

где $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, 2, \dots, N - 1$

1.2.2. Полиномы Лагранжа.

Функции полиномиального базиса следующего вида называются

полиномами Лагранжа

$$\varphi^{(i)}(x) = \frac{\prod_{k=1, k \neq i}^N (x - x_k)}{\prod_{k=1, k \neq i}^N (x_i - x_k)}$$

где i -й полином принимает значения 1 в точке x_i и 0 во всех остальных табличных точках, то есть

$$\varphi^{(i)}(x_k) = \delta_{ki}$$

где δ_{ki} - индексная функция Кронекера, равная единице, если индексы совпадают и нулю в противном случае.

Решение интерполяционной проблемы по Лагранжу имеет следующий очень простой вид

$$P_{N-1}(x; f) = \sum_{i=1}^N \varphi^{(i)}(x) f_i$$

то есть, табличные значения функции служат коэффициентами разложения.

Чтобы оценить погрешность интерполяции по Лагранжу, вводится вспомогательная функция:

$$u(x) = f(x) - P_{N-1}(x; f) - k(x - x_1) \cdots (x - x_N)$$

Пусть

$$\tilde{x} \neq x_i, (i = 1, \dots, N)$$

тогда по теореме Ролля

$$\left. \frac{d^N u(x)}{dx^N} \right|_{x=\tilde{x}} = 0 \Rightarrow k = \frac{1}{n!} f^{(N)}(\xi), \quad \xi = \xi(\tilde{x}) \in [x_1, x_N]$$

откуда следует

$$f(x) - P_{N-1}(x; f) = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi)(x - x_1) \cdots (x - x_N)$$

Оценка ошибки следует немедленно, если

$$|f^{(n)}(\xi)| < M$$

Оценка справедлива при условии, что интерполируемая функция является достаточно гладкой, так что она имеет производные до n-го порядка.

1.2.3. Степенные функции.

Выбор базиса исключительно важен для успеха численных методов. Например, в том же функциональном пространстве степенных полиномов, которому принадлежат и полиномы Лагранжа, можно воспользоваться другим базисом и столкнуться с вычислительной катастрофой.

Действительно, попробуем поискать решение задачи интерполяции в виде разложения по степенным функциям

$$f(x) = \sum_{i=1}^N c_i x^{i-1}$$

Ошибка запишется так:

$$E = \int_{x_1}^{x_N} \left[\sum_{i=1}^N c_i x^{i-1} - f(x) \right]^2 dx,$$

Коэффициенты разложения определяем из условия минимума ошибки:

$$E_{\min} = \min_{c_i} E$$

Решение минимизационной проблемы определяется из системы уравнений:

$$\frac{\partial E}{\partial c_i} = 0 \Rightarrow \sum_{j=1}^N h_{ij} c_j = b_i$$

где

$$b_i = \int_{x_1}^{x_N} f(x)x^{i-1}dx, \quad h_{ij} = \int_{x_1}^{x_N} x^{i+j-2}dx = \frac{1}{i+j-1}$$

Матрица Гильберта $H = \{h_{ij}\}$ очень плоха для вычислений, что сейчас станет видно.

1.2.4. Ошибки и число обусловленности.

Уравнение для собственных значений матрицы имеет вид

$$\det\{h_{ij} - \lambda\delta_{ij}\} = 0$$

где δ_{ij} - дельта Кронеккера, равная 1 для одинаковых индексов и нулю в противном случае, она представляет индексную запись единичной матрицы.

Числом обусловленности симметричной вещественной положительной матрицы называется величина

$$\text{cond}(H) = \|H\| \|H^{-1}\| = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \geq 1.$$

В случае знакоопределенных матриц число обусловленности определяется как отношение максимального и минимального сингулярных чисел матрицы, являющихся квадратными корнями собственных чисел симметризованной положительной матрицы $A^T A$.

Ошибка вычислений при решении системы уравнений для коэффициентов разложения зависит от числа обусловленности так (см. Форсайт, Молер, 1967).

$$\|\delta\bar{c}\|/\|\bar{c}\| \leq \text{cond}(H) \|\delta\bar{b}\|/\|\bar{b}\|$$

Числа обусловленности для матрицы Гильберта быстро стремятся к бесконечности с ростом числа используемых базисных функций:

Таблица 1.3.4.1. Зависимость числа обусловленности от числа базисных функций

N	2	3	4	5	6	7	8
cond(H)	19	524	15500	$477_{10}3$	$150_{10}5$	$475_{10}6$	$153_{10}8$

Большие значения числа обусловленности делают невозможным определение коэффициентов интерполяции уже при приближении числа базисных функций N к 10, так как небольшие возмущения в правой части вызывают огромные изменения в решении. Отсюда следует вывод о том, что степенные функции образуют очень плохой глобальный базис, который приводит к очень плохо обусловленной задаче для коэффициентов интерполяции.

Хотя полиномы Лагранжа являются линейными комбинациями степенных функций и принадлежат тому же функциональному пространству, они представляют наилучший базис в этом пространстве, поскольку система уравнений для коэффициентов разложения Лагранжа характеризуется единичной матрицей и имеет число обусловленности равное единице, что представляет идеальный случай. Таким образом, в одном и том же функциональном пространстве эффективность интерполяции определяется выбором базиса.

1.2.5. Сплаины

В основе сплайн-аппроксимации лежит идея приближения функции полиномами невысокого порядка, каждый из которых действует на своей ячейке сетки. Коэффициенты таких полиномов определяются условиями коллокации (совпадения значений) этих полиномов и интерполируемой функции в точках коллокации и условиями сопряжения полиномов между собой по значению функции и ее нескольких низших производных на границах между ячейками. Для замыкания системы алгебраических уравнений на границах области изменения функции сплайны подчиняются некоторым дополнительным граничным условиям. Сплаины применяются на регулярных сетках, имеющих ijk покоординатную нумерацию узлов, так что запись условий непрерывности на границах ячеек не вызывает затруднений. Кусочно-полиномиальная аппроксимация сплайнами приводит к хорошо обусловленным системам алгебраических уравнений относительно коэффициентов разложения. Для приближения сплайнами функций со сложным поведением не требуется повышать порядок полиномов, а

достаточно увеличить число ячеек сетки.

Во многих случаях сплайны показывают очень хорошие результаты. Так, кубические сплайны, образованные набором полиномов третьей степени, позволяют интерполировать табличные данные так, что человеческий глаз не замечает каких-либо изломов на получающихся графиках. Для точного воспроизведения окружности достаточно использовать параметрическое представление окружности $(x(\xi), y(\xi))$ и представить функции x и y кубическими сплайнами на четырех одномерных ячейках по параметрической координате ξ .

Подробное изложение теории сплайн-аппроксимации дано в монографии (Алберг, Нильсон, Уолш, 1973). Пример применения сплайн-аппроксимации к численному решению двухточечных краевых задач разобран далее в этой книге.

К сожалению применение сплайнов ограничено случаями, когда область решения представима регулярными ijk сетками. На нерегулярных сетках идея кусочно-полиномиальной интерполяции воплощена в методе конечных элементов.

с использованием локальных базисных функций. Базис сплайн-аппроксимации является существенно глобальным, что отличает ее от аппроксимаций, применяемых в методе конечных элементов,

1.2.6. Многомерная локальная интерполяция

1.2.6.1. Типы сеток

Далее будет использоваться стандартная терминология для характеристики свойств используемых сеток. Говорят, что *сетка* задана, если определены и пронумерованы ее узлы и для каждого узла сетки определены его соседи, используемые для локальной интерполяции. Область определения искомой функции при этом аппроксимирована (приближенно представлена) объединением ячеек сетки, для которых указаны номера образующих эти ячейки узлов.

Регулярная (структурированная) сетка это такая сетка, для которой имеется правило для определения соседства узлов. Примером может служить ij -сетка с координатами $x_i = ih_x, y_j = jh_y$. В такой сетке для узла (i, j) соседями являются узлы $(i \pm 1, j \pm 1)$.

В *нерегулярных (неструктурированных) сетках* соседство узлов

определяется информационными массивами соседства, содержащими для каждого узла номера соседних узлов или для каждой ячейки номера образующих ее узлов.

В равномерной сетке все ячейки имеют одинаковую форму и размер. В неравномерных сетках имеются ячейки разных размеров. В однородных сетках все ячейки имеют одинаковое число узлов. В неоднородных сетках содержатся ячейки с разным числом узлов.

Ребром называется линия, соединяющая два соседних узла. Гранью называется поверхностная ячейка, служащая границей для объемной ячейки. Заметим, что регулярная сетка вполне может быть неравномерной с криволинейными координатами, отвечающими постоянным значениям индексов i и j .

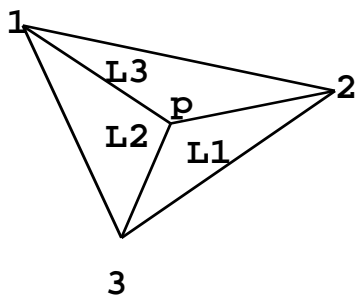
1.2.6.2. Покоординатная интерполяция.

Для регулярных ijk -сеток чаще всего используется набор одномерных интерполяций по координатным направлениям i, j, k . Пусть координаты такой сетки определяются отображением $x = x(\xi)$, где $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$ - узлы прямоугольной сетки в арифметическом пространстве, $x = (x_1, \dots, x_n)$ узлы (криволинейной) сетки, наведенной данным отображением. Это отображение характеризуется матрицей Якоби $\partial x / \partial \xi$ с якобианом $\det(\partial x / \partial \xi) > 0$. Формула связи интерполяций на исходной прямоугольной сетке (прообразе) и криволинейной сетке (образе) имеет вид

$$f_x(x) = f_\xi(\xi(x))$$

1.2.6.3. L-координаты

Для нерегулярных сеток применяется кусочно-полиномиальная (конечно-элементная) интерполяция.



Для интерполяции на одномерных (отрезок), двумерных (треугольных) или трехмерных (тетраэдр) конечных элементах используются так называемые L-координаты.

Одномерные L-координаты. В одномерном случае сетка представлена конечными элементами, являющимися отрезками. Значение интерполируемой функции f в точке p с координатой x по ее значениям в узлах определяется по следующей интерполяционной формуле

$$f(x) = f_1 L_1(x) + f_2 L_2(x)$$

где функции формы (L координаты) определяются отношениями длин отрезков

$$L_1 = \frac{l_{2p}}{l_{21}}, \quad L_2 = \frac{l_{p1}}{l_{21}}$$

где $l_{ij} = x_i - x_j$.

Двумерные L-координаты. В двумерном случае для треугольного конечного элемента значение интерполируемой функции f в точке p с координатами (x,y) по значениям ее в узлах определяется по следующей интерполяционной формуле

$$f(x, y) = f_1 L_1(x, y) + f_2 L_2(x, y) + f_3 L_3(x, y)$$

где функции формы (L координаты) определяются отношениями площадей треугольников

$$L_1 = \frac{\Delta_{p23}}{\Delta_{123}}, \quad L_2 = \frac{\Delta_{1p3}}{\Delta_{123}}, \quad L_3 = \frac{\Delta_{12p}}{\Delta_{123}}$$

Замечание. Площадь треугольника Δ_{ijk} , где i,j,k – номера вершин, определяется половиной векторного произведения векторов, представляющих смежные стороны треугольника:

$$\Delta_{ijk} = [(y_j - y_i)(x_k - x_i) - (y_k - y_i)(x_j - x_i)] / 2$$

или в другой записи

$$\Delta_{ijk} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_1 - x_m & y_1 - y_m \\ 1 & x_2 - x_m & y_2 - y_m \\ 1 & x_3 - x_m & y_3 - y_m \end{vmatrix}$$

где

$$x_m = (x_1 + x_2 + x_3) / 3$$

$$y_m = (y_1 + y_2 + y_3) / 3$$

Локальную нумерацию узлов определяют так, чтобы площадь треугольника была бы положительной.

Трехмерные L-координаты. В трехмерном случае для треугольного конечного элемента значение интерполируемой функции f в точке p с координатами (x, y, z) по значениям ее в узлах определяется по следующей интерполяционной формуле

$$f(x, y, z) = f_1 L_1(x, y, z) + f_2 L_2(x, y, z) + f_3 L_3(x, y, z) + f_4 L_4(x, y, z)$$

где функции формы (L координаты) определяются отношениями объемов тетраэдров

$$L_1 = \frac{V_{p234}}{V_{1234}}, L_2 = \frac{V_{1p34}}{V_{1234}}, L_3 = \frac{V_{12p4}}{V_{1234}}, L_4 = \frac{V_{123p}}{V_{1234}}$$

Объем тетраэдра V_{ijkl} , где i, j, k, l – номера вершин, определяется формулой

$$V_{ijkl} = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} 1 & x_1 - x_m & y_1 - y_m & z_1 - z_m \\ 1 & x_2 - x_m & y_2 - y_m & z_2 - z_m \\ 1 & x_3 - x_m & y_3 - y_m & z_3 - z_m \\ 1 & x_4 - x_m & y_4 - y_m & z_4 - z_m \end{vmatrix}$$

где

$$x_m = (x_1 + x_2 + x_3 + x_4) / 4$$

$$y_m = (y_1 + y_2 + y_3 + y_4) / 4$$

$$z_m = (z_1 + z_2 + z_3 + z_4) / 4$$

Приведенные простейшие интерполяционные формулы используют кусочно-линейную аппроксимацию и имеют второй порядок точности, то есть ошибка интерполяции пропорциональна квадрату характерного размера элемента: $\varepsilon = O(h_{\Delta}^2)$.

С помощью L-координат строятся интерполяции и более высоких порядков. (примеры приведены в приложении 1).

Описанные способы интерполяции далеко не исчерпывают их множества и разнообразия. Более подробное описание основных способов интерполяции можно найти в специальной литературе по методу конечных элементов.

1.3. Численное интегрирование

При реализации проекционных методов матрицы систем уравнений и векторы правых частей определяются скалярными произведениями, реализуемыми с помощью интегралов. Поскольку подынтегральные выражения в практических задачах нелинейны, приходится использовать численное интегрирование, реализуемое с помощью квадратурных формул приближенного вычисления интегралов. Рассмотрим задачу численного интегрирования.

1.3.1. Простейшие квадратурные формулы

Простейшей квадратурной формулой является формула прямоугольников:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = f(\tilde{x})(x_{i+1} - x_i)$$

которая просто обобщается на двумерный и трехмерный случаи

$$\int_{S_k} f(x) dS = f(\tilde{x})S_k, \quad \int_{V_k} f(x) dV = f(\tilde{x})V_k$$

где S_k площадь поверхностной и V_k объем пространственной ячейки, \tilde{x} - некоторая точка, принадлежащая ячейке.

В одномерном случае оценка локальной ошибки квадратурной формулы прямоугольников выполняется так

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \left| I(x_i, x_{i+1}; f) - f(\tilde{x})(x_{i+1} - x_i) \right| \leq \\ &\leq \left| f'(\tilde{x}) \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - \tilde{x}) dx \right| + \frac{1}{2} \left| f''(\tilde{x}) \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - \tilde{x})^2 dx \right| + O(h_i^4) \end{aligned}$$

где $h_i = x_{i+1} - x_i$. Во всех точках кроме центра интервала $x \neq x_{i+1/2} = 0.5(x_i + x_{i+1})$ локальная ошибка пропорциональна квадрату шага сетки:

$$\varepsilon = \frac{1}{2} M_i^{(1)} h_i^2 \quad |f'(x)| \leq M_i^{(1)}$$

а в центре интервала $x = x_{i+1/2}$ она пропорциональна третьей степени шага сетки:

$$\varepsilon = \frac{1}{24} M_i^{(2)} h_i^3 \quad |f''(x)| \leq M_i^{(2)}$$

Видно, что в середине интервала асимптотическая скорость убывания погрешности скачком возрастает. Такие точки называются точками сверхсходимости.

Пример квадратурной формулы повышенной точности дает формула Симпсона:

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x) dx = \frac{h}{3} (f_i + 4f_{i+1} + f_{i+2})$$

где $h = x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i$

Ошибка формулы Симпсона записывается так:

$$\varepsilon \sim M^{(4)} h^5, \quad |f^{(4)}(x)| \leq M^{(4)}$$

Оценка глобальной ошибки дается формулой

$$E = \sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_i \leq (N-1) \max_i (\varepsilon_i) \leq \kappa \frac{1}{\min(h_i)} \max(\varepsilon_i)$$

то есть

$$\varepsilon = O(h^m) \Rightarrow E \sim O(h^{m-1})$$

1.3.2 Квадратуры Гаусса

В многомерном случае применяются квадратурные формулы Гаусса

$$\int_V f(x) dV = \sum_{i=1}^N f(x_i) \omega_i \text{mes}(V) + \varepsilon_N$$

где V - n -мерная ячейка (отрезок, треугольник, четырехугольник, тетраэдр, топологический куб и т.д.), N - количество гауссовых точек интегрирования x_i , ω_i - весовые коэффициенты, обладающие свойством

$$\sum_{i=1}^N \omega_i = 1$$

гарантирующим точное интегрирование функции-константы, ϵ_N - погрешность, зависящая от числа гауссовых точек. Число и координаты гауссовых точек интегрирования для каждой квадратуры зависят от типа ячейки (линейная, плоская, объемная, треугольная, четырехугольная, тетраэдральная и так далее) и желаемой точности интегрирования. Таблицы широко используемых гауссовых квадратур приведены ниже.

1.3.2.1. Одномерное интегрирование

Рассмотрим квадратуры Гаусса для вычисления интеграла

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(a_i)$$

где координаты точек интегрирования $a_i = \pm a$, число точек n и весовые коэффициенты ω_i даны ниже в таблице

Таблица 1.3.2.1.

$\pm a$	ω
n=2	
0.577360	1.0
n=3	
0.774591	0.(5)
0	0.(8)
n=4	
0.861136	0.347865
0.339981	0.652145
n=5	
0.906180	0.236927
0.538470	0.478629
0.0	0.56(8)
n=6	

0.932470	0.171324
0.661210	0.360762
0.238619	0.467914
n=7	
0.949110	0.129485
0.741531	0.279705
0.405845	0.381830
0.0	0.417959
n=8	
0.960290	0.101228
0.796666	0.222381
0.525532	0.313707
0.183435	0.362684

Таблица 1.3.2.1 (продолжение).

$\pm a$	ω
N=9	
0.968160	0.081274
0.836031	0.180648
0.013371	0.260611
0.324253	0.312347
0.0	0.330239
n=10	
0.973906	0.066671
0.865063	0.149451
0.679410	0.219086
0.433395	0.269267
0.148874	0.295524

1.3.2.2. Двумерное интегрирование

Квадратуры Гаусса для треугольных ячеек имеют вид

$$\int_{S_{\Delta}} f(x, y) dS = S_{\Delta} \sum_{i=1}^n \omega_i f(L_1, L_2, L_3) + R$$

где S_{Δ} - площадь треугольника. В приводимой таблице даны значения L -координат точек численного интегрирования, соответствующие значения весовых коэффициентов ω_i и погрешности R

Таблица 1.3.2.2

ω	L_1	L_2	L_3	Кратность
$n=3, R = O(h^2)$				
0.(3)	0.(6)	0.1(6)	0.1(6)	3
$n=3, R = O(h^2)$				
0.(3)	0.5	0.5	0.0	3
$n=4, R = O(h^3)$				
-0.56250	0.(3)	0.(3)	0.(3)	1
0.5208(3)	0.6	0.2	0.2	3
$n=6, R = O(h^3)$				
0.1(6)	0.659028	0.231933	0.109039	6

Таблица 1.3.2.2 (продолжение).

ω	L_1	L_2	L_3	Кратность
$n=6, R = O(h^4)$				
0.109952	0.816848	0.091576	0.091576	3
0.223381	0.108103	0.445948	0.445948	3
$n=7, R = O(h^4)$				
0.375	0.(3)	0.(3)	0.(3)	1
0.1041(6)	0.736712	0.237932	0.025355	6
$n=7, R = O(h^5)$				
0.225033	0.(3)	0.(3)	0.(3)	1
0.125939	0.797427	0.101286	0.101286	3
0.132394	0.470142	0.470142	0.059716	3
$n=9, R = O(h^5)$				
0.205950	0.124950	0.437525	0.437525	3
0.063691	0.797112	0.165410	0.037477	6
$n=12, R = O(h^6)$				
0.050845	0.873822	0.063089	0.063089	3
0.116786	0.501426	0.249287	0.249287	3
0.082851	0.636502	0.310352	0.053145	6
$n=13, R = O(h^7)$				
-0.149570	0.(3)	0.(3)	0.(3)	1
0.175615	0.479308	0.260346	0.260346	3
0.053347	0.869740	0.065130	0.065130	3
0.077114	0.638444	0.312865	0.048690	6

Приведенные формулы (Стренг и Фикс, 1977) симметричны относительно пространственных переменных, поэтому если встречается квадратурный узел (L_1, L_2, L_3) , то обязательно встречаются и все его перестановки. Если все L -координаты различны, то таких узлов в квадратуре 6, если две L -координаты совпадают, то таких узлов три, если используется центральная точка (все L -координаты совпадают), то лишь один раз. В выражении для погрешности R характерный размер ячейки обозначен h .

1.3.2.3. Трехмерное интегрирование

Рассмотрим квадратуры Гаусса для интегралов по тетраэдральной ячейке

$$\int_{V_{\Delta}} f(x, y) dS = V_{\Delta} \sum_{i=1}^n \omega_i f(L_1, L_2, L_3) + R$$

где обозначения предыдущего раздела сохранены. Значения L -координат и весовых коэффициентов приведены в следующей таблице

Таблица 1.3.2.3.

Точки	L - координаты	ω
$n=1, R = O(h^2)$		
a	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	1.0
$n=4,$ $R = O(h^3), \alpha = 0.585410, \beta = 0.138197$		
a	$\alpha, \beta, \beta, \beta$	1/4
b	$\alpha, \beta, \beta, \beta$	1/4
c	$\alpha, \beta, \beta, \beta$	1/4
d	$\alpha, \beta, \beta, \beta$	1/4

n=5, R = O(h ⁴)		
a	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4},$	$-\frac{4}{5}$
b	$\frac{1}{3}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6},$	$\frac{9}{20}$
c	$\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6},$	$\frac{9}{20}$
d	$\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{3},$	$\frac{9}{20}$
e	$\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6},$	$\frac{9}{20}$

1.4. Численное дифференцирование

1.4.1. Использование интерполянтов.

Один из наиболее очевидных способов численного дифференцирования заключается в построении интерполирующей функции и в ее последующем обычном дифференцировании. Пусть $f_h(x)$ - интерполяционное представление функции $f(x)$ с ошибкой $O(h^m)$, тогда интерполянты производных (то есть функции, интерполирующие производные) вычисляются так

$$\frac{df}{dx} = \frac{d}{dx} f_{N-1} + O(h^{m-1}), \dots$$

в результате порядок аппроксимации производной (показатель степени шага в ошибке) оказывается на единицу меньше, чем для самой функции. Интерполянты используются для вычисления производных во всех проекционных методах, включая метод конечных элементов.

1.4.2 Метод неопределенных коэффициентов.

Формулы для вычисления производных можно получить методом неопределенных коэффициентов. В соответствии с этим методом в окрестности данного узла сетки функция ищется в виде полинома. Коэффициенты полинома определяются из системы алгебраических уравнений, выражающих требование равенства значений полинома и функции в узлах (условия коллокации). Пока полиномы имеют невысокий порядок, вычислительная катастрофа, описанная в разделе про интерполяцию степенными функциями, нам не грозит. Ниже приводятся наиболее распространенные формулы численного дифференцирования для одномерного случая. Выкладки по выводу формул опущены.

Простейшая формула для производной первого порядка имеет вид:

$$f'_{hi}(x) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

Оценим ошибку аппроксимации, используя разложение Тейлора в окрестности x_i

$$f'_h(x) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} =$$

$$\frac{1}{x_{i+1} - x_i} \left[f(x) + f'(x)(x_{i+1} - x) + \frac{1}{2} f''(x)(x_{i+1} - x)^2 + O((x_{i+1} - x)^3) - \right.$$

$$\left. - f(x) - f'(x)(x - x_i) - \frac{1}{2} f''(x)(x - x_i)^2 + O((x - x_i)^3) \right]$$

откуда следует

$$f'_{hi}(x) = f'(x) + \frac{f''(x)[(x_{i+1} - x)^2 - (x - x_i)^2]}{2(x_{i+1} - x_i)} + O((x_{i+1} - x_i)^2)$$

Ошибка имеет первый порядок для всех точек, кроме середины ячейки: $x \neq x_{i+1/2} = 0.5(x_i + x_{i+1})$ и второй порядок в середине. Точки ячеек, в которых производные имеют повышенный порядок точности называются точками суперсходимости или сверхсходимости.

Для равномерной сетки с шагом h формулы второго порядка точности для первой производной в точке x_i имеют вид:

$$f'_h = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}$$

$$f'_h = \frac{4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}) - 3f(x_i)}{2h}$$

$$f'_h = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{2h}$$

Формула для второй производной в точке x_i на неравномерной сетке имеет первый порядок точности и выглядит так:

$$f''_{hi}(x) = \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \left[\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{x_i - x_{i-1}} \right],$$

Для равномерной сетки эта формула имеет второй порядок точности.

Метод неопределенных коэффициентов можно применять и в общем многомерном случае, однако при этом вывод формул можно предоставить вычислительной машине. В самом деле, для этого в окрестности каждого узла достаточно сформировать систему алгебраических уравнений (условий коллокации) для определения коэффициентов усеченного ряда Тейлора, интерполирующего данную функцию. Из численного решения этой системы необходимые производные в данном узле определяются как коэффициенты разложения Тейлора.

1.4.3. Естественная аппроксимация производных

Метод естественной аппроксимации основан на исходных интегральных определениях операторов дифференцирования, известных из курса математического анализа, и на использовании простейших квадратурных формул. Например, для вычисления производных применяется формула Остроградского-Гаусса для преобразования интеграла по ячейке объема V_i в интеграл по ее поверхности S_i

$$\int_{V_i} \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \int_{S_i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS$$

из которой, учитывая теорему Ролля, получаем

$$[\nabla \cdot \mathbf{F}]_{hi} = \left(\int_{S_i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS \right) \left(\int_{V_i} dV \right)^{-1},$$

Формулы для $\partial f / \partial x$, $\partial f / \partial y$, $\partial f / \partial z$ получатся путем подстановки в это соотношение выражений $\mathbf{F} = (f, 0, 0)$, $\mathbf{F} = (0, f, 0)$, $\mathbf{F} = (0, 0, f)$. При интегрировании поверхность пространственной ячейки разбивается на треугольные или четырехугольные ячейки и используются квадратуры Гаусса, например, формула прямоугольников.

Для двумерного случая эти формулы принимают вид

$$\left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{hi} = \left(\int_{I_i} f dy \right) \left(\int_{V_i} x dy \right)^{-1}, \quad \left[\frac{\partial f}{\partial y} \right]_{hi} = \left(\int_{I_i} f dx \right) \left(\int_{V_i} y dx \right)^{-1}$$

В отечественной литературе метод естественной аппроксимации производных носит название интегро-интерполяционного метода. Описание метода и его оформление в виде теорем можно найти в работах ученых Лос-Аламосской лаборатории [1], в монографии Годунова [2]. Этот метод часто используется для построения консервативных (не нарушающих законы сохранения) аппроксимаций физических уравнений.

1.4.4. Метод отображений или метод якобианов

Метод отображений или якобианов позволяет использовать простейшие аппроксимации производных для равномерной сетки и в случае неравномерных сеток. Для этого неравномерная сетка отображается на равномерную, на которой производится простейшее численное дифференцирование, а затем с результатом совершается обратное преобразование координат к исходной неравномерной сетке. Для получения расчетных формул необязательно отображать всю сетку, достаточно отобразить окрестность рассматриваемого узла или рассматриваемую ячейку на равномерные (или, как говорят, на канонические).

Рассмотрим, например, определение методом отображений производных для тетраэдральной ячейки, которая определяется 4 узлами $(x_i, y_i, z_i), i = 1, 2, 3, 4$. Отобразим ее на каноническую ячейку в трехмерном параметрическом пространстве (декартовых) координат ξ, η, θ так, что узел 1 находится в начале координат, а узлы 2, 3, 4 находятся на соответствующих осях координат на единичном расстоянии от начала координат. Для канонической ячейки операция дифференцирования тривиальна:

$$\partial_{\xi} f = f_2 - f_1, \partial_{\eta} f = f_3 - f_1, \partial_{\theta} f = f_4 - f_1$$

По цепному правилу дифференцирования легко найти связь производных в физическом и параметрическом пространствах:

$$\partial_{\xi} f = \partial_x f \partial_{\xi} x + \partial_y f \partial_{\xi} y + \partial_z f \partial_{\xi} z$$

$$\partial_{\eta} f = \partial_x f \partial_{\eta} x + \partial_y f \partial_{\eta} y + \partial_z f \partial_{\eta} z$$

$$\partial_{\theta} f = \partial_x f \partial_{\theta} x + \partial_y f \partial_{\theta} y + \partial_z f \partial_{\theta} z$$

Имеем три уравнения для определения трех искомым производных $(\partial_x f, \partial_y f, \partial_z f)$ в физическом пространстве. Коэффициенты при неизвестных вычисляются так же легко как и левые части. Получаемые таким способом формулы численного

дифференцирования выражаются по правилу Крамера через детерминанты матрицы рассматриваемой системы уравнений, являющейся матрицей Якоби преобразования координат, отсюда и произошло название способа (метод якобианов). Результат совпадает с тем, который дают формулы естественной аппроксимации при использовании квадратурных формул прямоугольников. Формулы повышенной точности можно получить наращивая точность аппроксимации в параметрическом пространстве.

1.5. Прямые методы решения СЛАУ.

При реализации численных методов важным является вопрос о том, как решать возникающие системы алгебраических уравнений. В общем случае такие системы уравнений нелинейны. Решение нелинейных уравнений как правило получается как предел последовательности решений вспомогательных линеаризованных уравнений. Поэтому сначала рассматривается решение систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида

$$Ax - b = 0$$

где A - матрица системы уравнений, x - вектор неизвестных, b - вектор правой части. Ниже дается описание наиболее важных для практического применения методов.

Под прямыми методами здесь подразумеваются различные варианты метода Гауссова исключения. Такие методы являются точными, поскольку они позволяют в принципе получить точное решение за конечное число операций.

1.5.1. Предобусловливание и масштабирование.

Еще до решения СЛАУ число обусловленности ее матрицы можно уменьшить и тем самым уменьшить чувствительность решения данной алгебраической задачи к возмущениям компонентов матрицы и правой части, а также к ошибкам округления в процессе численного решения. Для этого можно умножить рассматриваемую СЛАУ на приближенную обратную матрицу системы. Такая операция называется предобусловливанием и приводит к новой системе, имеющей то же решение, но лучшие свойства:

$$A_0^{-1}(Ax - b) = 0, \quad 1 \leq \text{cond}(A_0^{-1}A) \leq \text{cond}(A)$$

Масштабирование неизвестных является простейшим частным случаем предобусловливания, когда приближенная обратная матрица выбирается диагональной, составленной из обратных диагональных элементов исходной матрицы. Подробные примеры масштабирования приведены в книге (Форсайт и Молер, 1967).

Отметим что масштабирование неизвестных вообще в вычислительных технологиях играет важнейшую роль, поскольку делает задачу более удобной для численного анализа, позволяет избежать операций со слишком большими и слишком маленькими

числами и уменьшает влияние неизбежных при численном счете ошибок в представлении входных данных и результатов вычислений.

1.5.2. Правило Крамера

Известное из курса линейной алгебры *правило Крамера* имеет вид

$$x_i = \det A_i / \det A$$

где матрицы A_i получается из матрицы заменой ее i -го столбца столбцом свободных членов.

Правило Крамера дает пример очень неэффективного метода решения СЛАУ с большим числом неизвестных, характеризующегося неприемлемо быстрым ростом числа операций, пропорциональным четвертой степени числа неизвестных.

1.5.3. Методы исключения

Обычно гауссово исключение неизвестных производится путем комбинирования уравнений (сложения с умножением на некоторое число) и применяется с учетом структуры матрицы СЛАУ так, чтобы минимизировать число операций с нулевыми элементами и не плодить по возможности, новых ненулевых элементов. Сначала система уравнений преобразуется к виду с нижней треугольной матрицей (прямой ход), а затем она преобразуется к виду с единичной матрицей (обратный ход), в результате решение дается вектором правой части преобразованной системы. Описанная процедура исключения соответствует разложению матрицы A на нижнюю L и верхнюю U треугольные матрицы

$$A=LU$$

При этом прямой ход отвечает умножению исходной СЛАУ слева на обратную к L матрицу

$$U\mathbf{x} = L^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{c}$$

а обратный ход отвечает умножению слева полученного матричного уравнения на обратную к U матрицу

$$\mathbf{x} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{c}$$

Число операций в методе Гаусса растет пропорционально кубу числа неизвестных.

Метод Гаусса с выбором главного элемента. Устойчивость метода исключения Гаусса зависит от порядка реализации исключений. Наиболее устойчивым по отношению к возмущениям матрицы и правых частей, вызванных ошибками округления при вычислениях на ЭВМ, является порядок исключений с выбором главного элемента. Среди элементов a_{ij} ($i, j = 1, \dots, n$) матрицы системы уравнений выбирается максимальный по модулю, называемый главным элементом. Пусть им является, например, элемент a_{pq} . Строка с номером p , содержащая главный элемент, называется главной строкой.

Далее из каждой i -й неглавной строки расширенной матрицы (со столбцом правой части систему уравнений) вычитается главная строка, умноженная на $m_i = a_{iq} / a_{pq}$. В результате получается матрица, у которой все элементы q -го столбца, за исключением a_{pq} , равны нулю. Отбрасывая этот столбец и главную строку, получим новую матрицу с меньшим на единицу числом строк и столбцов. С полученной матрицей описанная выше операция повторяется пока не получится матрица содержащая одну строку. Затем все главные строки подвергаются перестановке, приводящей систему уравнений к виду с треугольной матрицей. На этом оканчивается этап прямого хода. Решение полученной системы с треугольной матрицей составляет алгоритм обратного хода.

Заметим, что СЛАУ, возникающие при реализации проекционных методов, характеризуются матрицами с диагональным преобладанием, имеющими максимальные по модулю элементы на главной диагонали. Для таких систем уравнений выбор главного элемента означает их преобусловливание путем умножения на приближенную обратную матрицу, полученную обращением диагональной матрицы, составленной из диагональных элементов исходной матрицы.

Прогонка. Для СЛАУ с ленточными матрицами метод Гаусса называется прогонкой. Например, для системы уравнений с трехдиагональной матрицей

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i \quad (i = 1, \dots, N)$$

$$x_0 = U_0, \quad x_{N+1} = U_1$$

формулы метода прогонки имеют вид:

$$x_i = X_i x_{i+1} + Y_i \quad (i = 1, \dots, N)$$

где

$$X_i = \frac{-c_i}{b_i + a_i X_{i-1}}, \quad Y_i = \frac{d_i - a_i Y_{i-1}}{b_i + a_i X_{i-1}} \quad (i = 1, \dots, N)$$

$$X_0 = 0, \quad Y_0 = U_0$$

На прямом ходе прогонки определяются коэффициенты X_i и Y_i ($i = 1, \dots, N$), а затем на обратном ходе для $i = N, \dots, 1$ по формулам метода прогонки определяется искомое решение.

Матричная прогонка. Прогонка для СЛАУ с блочно-ленточными матрицами называется матричной. При этом коэффициенты a_i , b_i , c_i , d_i из предыдущего примера являются квадратными матрицами порядка m , а искомые неизвестные x_i являются векторами размерности m . Формулы метода прогонки сохраняют свой вид, только деление надо понимать как умножение на обратную матрицу.

Алгоритм метода прогонки устойчив для матриц с диагональным преобладанием, в которых модуль диагонального элемента в строке больше суммы модулей остальных элементов данной строки.

Число операций в методе прогонки растет пропорционально $n^2 m_1$, где m_1 - ширина ленты.

Экономичное вычисление определителей. Для эффективного вычисления определителя $\det(A)$ достаточно выполнить прямой ход метода Гаусса и затем найти произведение ведущих (главных) элементов

$$\det(A) = a_{11} a_{22}^{(1)} \dots a_{nn}^{(n-1)}$$

где $a_{ii}^{(i-1)}$ - значение главного элемента в i -й строке после использования первых $(i-1)$ строк в прямом ходе процедуры исключения.

1.5.4. Оптимизация структуры и хранение матриц СЛАУ

Структура матриц СЛАУ, порождаемых при различных способах аппроксимации, зависит от выбора базисных функций и нумерации узлов. Для финитных базисных функций, матрицы получаются редкозаполненными, имеющими большое число нулевых элементов, поскольку скалярные произведения базисных функций, носители которых не пересекаются, равны нулю (носителем функции называется область, в которой она отлична от нуля). Редкозаполненные матрицы свойственны большинству сеточных методов. Напротив, в проекционных методах, использующих глобальные базисные функции, матрицы для коэффициентов разложения решения по базису получаются полностью заполненными, хотя в большинстве случаев абсолютная величина элементов матрицы убывает по мере удаления от главной диагонали. Иногда удаленными от главной диагонали элементами можно пренебрегать без заметной потери точности решения.

Имеется связь между структурой матриц (расположением ненулевых элементов) и нумерацией узлов сетки. В 70-е годы много работ было посвящено поискам алгоритмов оптимальной перенумерации узлов сетки для преобразования системы уравнений к виду с ленточной матрицей с минимальной шириной ленты.

Для больших задач со многими тысячами неизвестных актуальной является проблема экономичного формирования и хранения матриц решаемых систем уравнений. Ленточные матрицы требуют меньшей памяти машины, отсюда происходит интерес к оптимизации нумерации узлов. При хранении произвольных редкозаполненных матриц хранят обычно только ненулевые элементы вместе с информацией об их положении.

В настоящее время это направление потеряло актуальность, поскольку разработаны точные итерационные методы решения, которые в принципе сходятся к точному решению за конечное число итераций. Такие методы, рассматриваемые в следующем разделе, вообще не требуют формирования и хранения матриц СЛАУ, а лишь вычисления невязок алгебраических уравнений. Проблемы формирования, хранения матриц, оптимизации их структуры,

оптимальной нумерации узлов при реализации таких методов не существуют. Отметим, что даже задачи на собственные значения, традиционно требовавшие работы с матрицами, представлявшими свойства физических систем, все чаще реализуются безматричными итерационными методами.

Сказанное не означает, что прямые методы потеряли свою актуальность, а лишь то, что они потеряли монополию на звание точных методов и в настоящее время все больше уступают свои позиции итерационным методам типа метода сопряженных градиентов.

1.5.5. Симметризация СЛАУ

Симметризация СЛАУ необходима для функционирования некоторых методов решения и заключается в переходе к симметризованной системе уравнений

$$A^T(Ax - b) = 0$$

с симметричной матрицей $A^T A$. Симметризация увеличивает число ненулевых элементов и увеличивает ширину ленты для ленточных матриц. Обусловленность системы при этом ухудшается, так как

$$\text{cond}(A^T A) = (\text{cond}(A))^2$$

Поэтому при использовании симметризации необходимо дополнительное предобусловливание, не нарушающее симметрии. Несмотря на требующуюся дополнительную вычислительную работу, симметризация часто производится, поскольку задачи с симметричными и положительными матрицами предпочтительны для численного решения (для таких задач решение заведомо существует и единственно).

1.5.6. Метод LDL^T -факторизации

Симметричная матрица коэффициентов может быть разложена в произведение нижней треугольной, диагональной и верхней треугольной матриц, т.е.¹

¹ См. (Норри и де Фриз, 1981)

$$A=LDL^T$$

Это разложение называется тройной факторизацией. С его помощью СЛАУ решается в два этапа

$$Lc=b$$

$$DL^T x=c$$

Сначала первое из этих уравнений решается относительно с, а затем второе относительно x. Элементы матриц D и L вычисляются по формулам

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{m=1}^{i-1} l_{im}^2 d_{mm}$$

$$l_{ii} = 1$$

$$l_{ij} = (1/d_{ii}) \left(c_i - \sum_{m=i+1}^n d_{im} l_{mi} x_m \right)$$

где n - число неизвестных.

Разложение LDL^T эффективно выполняется вычислением элементов D и L по столбцам. При этом метод факторизации работает значительно быстрее простого метода исключения Гаусса.

1.5.7. Методы квадратного корня и Холецкого.

Метод квадратного корня эффективно реализует гауссово исключение для СЛАУ с симметричными положительно определенными матрицами, не меняя при этом ширину ленты исходной матрицы СЛАУ (см., например, Копченова и Марон, 1972; Уилкинсон и Райнш, 1976). Положительная симметричная матрица A представляется произведением взаимно транспонированных треугольных матриц:

$$A = \tilde{L}^T \tilde{L}$$

где компоненты матрицы $\tilde{L} = | \tilde{l}_{ij} |$ определяются формулами

$$\tilde{l}_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad \tilde{l}_{1j} = \frac{1}{\tilde{l}_{11}} a_{1j}, \quad j=2, \dots, n;$$

$$\tilde{l}_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} (\tilde{l}_{ki})^2}, \quad \tilde{l}_{ij} = \frac{1}{\tilde{l}_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{l}_{ki}^2 \right), \quad j=i+1, \dots, n.$$

Решение системы уравнений $Ax = b$ по методу квадратного корня сводится к обращению двух треугольных матриц.

Разложение (метод) Холецкого. Часто метод квадратного корня называется методом Холецкого, хотя в методе Холецкого используется другое разложение, а именно

$$A = LU$$

где отличные от нуля компоненты матриц U и L определяются так:

$$u_{i1} = a_{i1}$$

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} u_{ik} l_{kj} \quad (i \geq j > 1)$$

$$l_{ij} = 1, \quad l_{1j} = \frac{a_{1j}}{u_{11}}$$

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ik} l_{kj} \right) \quad (1 < i < j)$$

а искомый вектор x вычисляется из уравнений с треугольными матрицами

$$Uy = b, \quad Lx = y$$

Неполное разложение Холецкого, а также приближенная версия метода квадратного корня используют приближенные треугольные матрицы, вычисленные с пренебрежением компонентами матрицы A, расположенными вне ленты заданной ширины. Приближенные обратные матрицы, основанные на неполном разложении Холецкого, часто служат эффективным предобусловливателем для ускорения сходимости итерационных методов решения. При этом для эффективного предобусловливания часто достаточно использовать ширину ленты, равную единице, то есть попросту ограничиться диагональным приближением матрицы разложения Холецкого $\tilde{L} = |\tilde{l}_{ij}|$, образованным квадратными корнями диагональных элементов матрицы A. Метод Холецкого требует немного больше операций, нежели метод LDL^T -факторизации, но он также значительно быстрее простого метода исключения Гаусса.

1.5.8. Фронтальные методы

Для экономии оперативной памяти ЭВМ метод исключения Гаусса реализуется поэтапно так, что на каждой этапе прямого и обратного хода процесса исключения в оперативной памяти ЭВМ находится лишь активная часть матрицы СЛАУ.

Этот способ решения реализуют фронтальные методы решения конечноэлементных СЛАУ путем фронтального обхода конечноэлементной сетки элемент за элементом (отсюда произошло название методов). Фронтальные методы подробно разбираются в монографиях по численному решению больших разреженных СЛАУ метода конечных элементов (см. Норри и де Фриз, 1981).

1.5.9. Исключение внутренних степеней свободы.

Блочные методы исключения дают интересную возможность, о которой стоит упомянуть.

В СЛАУ, возникающих при использовании сеточных методов решения краевых задач, неизвестные \mathbf{x} можно разделить на две группы, первая из которых $\mathbf{x}_{(1)}$ содержит искомые значения на границе области решения, а вторая $\mathbf{x}_{(2)}$ содержит значения решения во внутренних узлах. Система уравнений в блочной форме принимает вид

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \mathbf{x}_{(1)} \\ \mathbf{x}_{(2)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{b}_{(1)} \\ \mathbf{b}_{(2)} \end{vmatrix}$$

Если исключить сначала все неизвестные, связанные с внутренними узлами, то получится система уравнений, содержащая связи между значениями решения на границе области решения

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{(2)} &= A_{22}^{-1} \mathbf{b}_{(2)} - A_{22}^{-1} A_{21} \mathbf{x}_{(1)} \\ (A_{11} - A_{12} A_{22}^{-1} A_{21}) \mathbf{x}_{(1)} &= \mathbf{b}_{(1)} - A_{12} A_{22}^{-1} \mathbf{b}_{(2)} \end{aligned}$$

Новая матрица СЛАУ $(A_{11} - A_{12} A_{22}^{-1} A_{21})$ при этом играет роль дискретной функции Грина, функции влияния, или роль передаточной матрицы. Порядок такой матрицы значительно

меньше порядка исходной матрицы, так как число граничных точек асимптотически на порядок меньше числа внутренних точек. Хотя такая передаточная матрица является полностью заполненной, экономия в вычислениях достигается при использовании блочного представления области решения с применением исключения внутренних переменных для каждого однотипного блока, называемого суперэлементом. Такой вариант гауссовского исключения называется методом суперэлементов. Изучаемый в математической физике метод функций влияния Грина является дифференциальным аналогом метода суперэлементов. Аналогичная идея лежит и в основе метода граничных элементов и метода граничных интегральных уравнений. Подробнее с методом суперэлементов можно познакомиться по книге (Постнов, Метод суперэлементов, 1979).

1.5.10. Итерационное уточнение.

Из-за плохой обусловленности СЛАУ решение, полученное прямыми методами, содержит погрешности, которые можно уменьшить посредством итерационного уточнения решения. Пусть $\tilde{\mathbf{x}}$ - полученное прямым методом приближенное решение СЛАУ. Используя арифметику с двойной точностью, вычисляют невязку

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}$$

а затем решают уравнение

$$\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{r}$$

относительно \mathbf{y} и определяют уточненное решение

$$\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{y}$$

Этот процесс повторяется пока поправка не станет достаточно малой. Если поправка \mathbf{y} мала, то можно ожидать, что полученное решение обладает достаточной точностью, в противном случае СЛАУ плохо обусловлена. Более подробно итерационное уточнение обсуждается в книге (Форсайт и Молер, 1969).

1.6. Итерационные методы решения СЛАУ

Значительные упрощения в алгоритмах решения СЛАУ возможны при использовании итерационных методов решения. Современные итерационные методы сильно потеснили прямые методы Гауссова исключения, особенно при решении задач с очень большим числом неизвестных, для которых итерационные методы решения не имеют альтернативы.

1.6.1. Метод простой итерации

Простейший итерационный процесс решения системы алгебраических уравнений носит название метода простой итерации и имеет следующий вид:

$$x^{n+1} = x^n - A_0^{-1}(Ax^n - b)$$

где A_0 - некоторая невырожденная матрица, аппроксимирующая матрицу системы уравнений A , для которой нетрудно найти обратную. Для ошибки $e^n = x^n - x^*$ процесс имеет вид

$$e^n = (I - A_0^{-1}A)^n e^0$$

Условие сходимости, называемое принципом сжимающих отображений, имеет вид

$$\|I - A_0^{-1}A\| < 1 \Rightarrow \|e^n\| \leq \|e^0\| \|I - A_0^{-1}A\|^n \rightarrow 0$$

Отображение $\Psi(x) = x - A_0^{-1}(Ax - b)$ преобразует решение рассматриваемой системы уравнений в себя $x = \Psi(x)$, поэтому решение называют неподвижной точкой этого отображения.

1.6.2. Метод Зейделя-Либмана

Алгоритм метода Зейделя, называемого также методом Либмана или методом последовательных смещений, имеет следующий вид.

1. задается начальное приближение $x_i^{(0)}$.
2. Цикл по уравнениям $i=1,2,\dots,N$:

$$x_i^{(n+1)} = a_{ii}^{-1} (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(n+1)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^{(n)})$$

3. Если $\max |x_i^{(n+1)} - x_i^{(n)}| > \varepsilon$, то повторить цикл 2.

Пусть D - диагональная матрица, составленная из диагональных элементов матрицы A , L - нижняя треугольная матрица, составленная из элементов матрицы A исключая главную диагональ, а U - верхняя треугольная матрица из оставшихся элементов A

$$A = L + D + U$$

тогда рассмотренный процесс можно записать кратко так:

$$(D + U)x^{(n+1)} + Lx^{(n)} = b$$

Для сходимости матрица $(D + U)^{-1}L$ должна удовлетворять принципу сжимающих отображений.

1.6.3. Методы последовательной релаксации

Для ускорения сходимости процесс последовательных смещений модифицируется.

$$(D + U)x^{(n+1)} + \omega Lx^{(n)} = b$$

Если параметр релаксации $1 \leq \omega \leq 2$, то имеем метод последовательной верхней релаксации, если $0 \leq \omega \leq 1$, то имеем метод последовательной нижней релаксации. Методы последовательных смещений и релаксации использовались довольно часто на начальной стадии развития численных алгоритмов в 50-60-70 годы 20-го столетия, пока не были вытеснены более эффективными методами исключения и сопряженных градиентов.

1.6.4. Градиентные методы

Можно построить функционалы, для которых рассматриваемая система уравнений будет выражать условия их минимума. Для положительно определенных симметричных матриц A (то есть таких, что для любого $x \neq 0$ $Ax \cdot x > 0$) существует функционал энергии

$$\Psi(x) = \frac{1}{2} Ax \cdot x - b \cdot x.$$

Для произвольной невырожденной матрицы можно построить положительно определенный функционал нормы невязок

$$\Psi(x) = (Ax - b) \cdot (Ax - b)$$

Очевидно число таких функционалов бесконечно.

Градиентный метод минимизации функционала энергии под названием метод наискорейшего спуска был предложен Коши в 1845 году и имеет вид

$$x^{n+1} = x^n - \alpha_n g^n, \quad g^n = Ax^n - b, \quad \alpha_n = \frac{g^n \cdot g^n}{Ag^n \cdot g^n}$$

Коэффициент α_n обеспечивает минимум одномерному функционалу $\Phi(x) = 0.5Ax \cdot x - b \cdot x$ вдоль линии $x(\alpha) = x^n - \alpha_n g^n$ (определяется из условия экстремума $\partial\Phi / \partial\alpha_n = 0$).

Аналогичный метод минимизации функционала невязок называется методом минимальных невязок и имеет вид

$$x^{n+1} = x^n - \alpha_n g^n, \quad g^n = Ax^n - b, \quad \alpha_n = \frac{g^n \cdot Ag^n}{Ag^n \cdot Ag^n}$$

Коэффициент α_n обеспечивает минимум одномерному функционалу $\Phi(x) = (Ax - b) \cdot (Ax - b)$ вдоль линии $x(\alpha) = x^n - \alpha g^n$.

Оба описанных градиентных метода очень быстро минимизируют функционалы на первых итерациях, а потом начинают “буксовать”, то есть дальнейшее итерирование показывает очень медленную сходимость, делающую применение градиентных методов неэффективным. Это особенно проявляется в случае, когда собственные значения матрицы A сильно различны.

1.6.5. Метод сопряженных градиентов

Недостаток эффективности градиентных методов устранен в методе сопряженных градиентов, первый вариант которого был предложен Хестенесом и Штифелем в 1952 году. Алгоритмы метода сопряженных градиентов относятся к числу наиболее эффективных методов решения СЛАУ большой размерности, возникающих при численном решении задач механики сплошных сред. Они решают систему уравнений за конечное число операций.

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Итерационный процесс метода сопряженных градиентов имеет вид

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{x}^{(n)} - \alpha_n \mathbf{s}^{(n)} \\ \mathbf{s}^{(n+1)} &= \mathbf{g}^{(n+1)} - \beta_n \mathbf{s}^{(n)}\end{aligned}$$

где $n=0,1,\dots$, вектор невязки (градиента) определяется соотношениями

$$\begin{aligned}\mathbf{g}^{(n+1)} &= \mathbf{g}^{(n)} - \alpha_n \mathbf{A} \mathbf{s}^{(n)} \\ \mathbf{g}^{(0)} &= \mathbf{A} \mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{b}\end{aligned}$$

коэффициенты α_n и β_n определяются формулами

$$\begin{aligned}\alpha_n &= \frac{\mathbf{g}^n \cdot \mathbf{s}^n}{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{s}^n) \cdot \mathbf{s}^n} \\ \beta_n &= \frac{\mathbf{A} \mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{s}^n}{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{s}^n) \cdot \mathbf{s}^n}\end{aligned}$$

если решение представлено проекциями на \mathbf{A} -ортогональный базис $\mathbf{A} \mathbf{s}^{n+1} \cdot \mathbf{s}^n = 0$, $\mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{s}^n = 0$, и формулами

$$\begin{aligned}\alpha_n &= \frac{\mathbf{g}^n \cdot \mathbf{A} \mathbf{s}^n}{\mathbf{A} \mathbf{s}^n \cdot \mathbf{A} \mathbf{s}^n} \\ \beta_n &= \frac{\mathbf{A} \mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{A} \mathbf{s}^n}{\mathbf{A} \mathbf{s}^n \cdot \mathbf{A} \mathbf{s}^n}\end{aligned}$$

если решение представлено проекциями на $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ -ортогональный базис $\mathbf{A} \mathbf{s}^{n+1} \cdot \mathbf{A} \mathbf{s}^n = 0$, $\mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{A} \mathbf{s}^n = 0$, В первом случае метод

минимизирует функционал энергии, во втором случае – функционал невязок. В первом случае матрица A должна быть знакоопределенной (положительной или отрицательной). Во втором случае матрица A должна быть невырожденной. Свойство симметричности матрицы A в обоих случаях не требуется.

Классические формулы для коэффициентов α_n и β_n , предложенные Хестенсом и Штифелем, имеют вид

$$\alpha_n = \frac{g^n \cdot s^n}{(A \cdot s^n) \cdot s^n}$$

$$\beta_n = \frac{g^{n+1} \cdot A s^n}{(A \cdot s^n) \cdot s^n}$$

Эти формулы получаются в результате решения на каждой итерации двухпараметрической задачи минимизации функционала $\Phi(x) = 0.5Ax \cdot x - b \cdot x$ и приводит к дополнительным требованиям положительности и симметричности матрицы A . В первых двух вариантах метода на каждой итерации требуется два умножения матрицы A на вектор (плата за несимметричность), в третьем (классическом) методе только одно, но матрица должна быть симметричной и положительной.

Методы сопряженных градиентов обеспечивают решение задачи за число итераций, не превосходящее числа неизвестных, поскольку одновременно вырабатывают базис в конечномерном пространстве решения. При хорошем начальном приближении число итераций резко сокращается. При хорошем предобуславливании также.

1.6.6. Безматричные итерации

Итерационные методы, основанные на вычислении невязок или градиентов, не требуют вычисления матриц СЛАУ. Основной проблемно-ориентированной операцией метода является вычисление невязки условий стационарности минимизируемого функционала, которая реализуется без формирования матрицы системы так же, как вычисляются правые части дифференциальных уравнений при использовании явных схем интегрирования задач Коши. Поэтому проблемы, связанные с хранением матриц и оптимизацией их структуры путем оптимальной перенумерации узлов сетки, в таких методах не возникают вообще, алгоритмы сильно упрощаются по сравнению с прямыми методами. При этом достигается большая экономия в использовании машинной памяти, высокая эффективность и обеспечивается основное свойство, присущее прямым методам - конечность числа операций,

необходимых для решения СЛАУ. Для задач высокой размерности как правило применяются безматричные итерационные методы. Итерационные методы вообще тесно связаны с явными схемами для нестационарных задач: каждый итерационный процесс можно трактовать как некоторый явный метод установления. Заметим, что неявные схемы для нестационарных задач часто эффективно реализуются с использованием итерационных методов. Наличие хороших начальных приближений (решение на предыдущем временном слое) делает так реализуемые неявные схемы экономичными и асимптотически столь же быстрыми как явные схемы, то есть показывающими сходную скорость роста числа операций в зависимости от размерности задачи (от числа неизвестных).

1.7. Нелинейные алгебраические уравнения.

Рассмотрим способы решения нелинейной алгебраической задачи:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = 0$$

1.7.1. Метод Ньютона

Итерационный метод Ньютона для нелинейных уравнений основан на разложении нелинейных членов уравнений в ряд Тейлора в окрестности приближенного решения $\mathbf{x}^{(n)}$ с удержанием линейной части разложения. Полученная в результате линеаризованная система алгебраических уравнений относительно нового приближенного решения $\mathbf{x}^{(n+1)}$ имеет вид:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(n)}} (\mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)}) = 0$$

Оператор линеаризованной задачи $\left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(n)}}$ изменяется на каждой итерации.

Упрощенный **модифицированный метод Ньютона** подразумевает проведение итераций с использованием постоянного оператора линеаризованной задачи, отвечающего начальному приближению:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}} (\mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)}) = 0$$

Примером модифицированного метода Ньютона является метод упругих решений для задач деформационной теории пластичности, в котором оператором линеаризованной задачи служит оператор соответствующей задачи линейной теории упругости. Сходимость итераций при переходе к модифицированному методу Ньютона ухудшается.

Линеаризацию нелинейных уравнений для получения решений итерациями по нелинейности можно проводить как на уровне исходной формулировки начально-краевой задачи (дифференциальной, интегральной, вариационной), так и на уровне ее дискретного аналога. Поскольку в общем случае операции

дискретизации и квазилинеаризации некомутативны, получаемые таким образом алгоритмы решения нелинейной задачи являются различными.

Применительно к вариационным и интегро-дифференциальным уравнением метод Ньютона называют **методом квазилинеаризации или методом Ньютона-Канторовича**. Применительно к нелинейным системам алгебраических уравнений метод Ньютона называют также методом Ньютона-Рафсона.

Обобщающий термин **квазиньютоновские методы** используется для обозначения семейства итерационных методов, которые используют линеаризацию путем разложения нелинейностей в ряд Тейлора в окрестности некоторого элемента в пространстве решений с удержанием линейных членов.

Вариант метода Ньютона, в котором линеаризованный оператор вычисляется с помощью аппроксимации производных разделенными разностями

$$\left. \frac{\partial g}{\partial x} \right|_{x=x^{(n)}} = \left\| \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \right\|_{x=x^{(n)}} \cong \left\| \frac{g_i(\dots, x_j^{(n)} + \delta, \dots) - g_i(\dots, x_j^{(n)}, \dots)}{\delta} \right\|$$

называется методом секущих или методом Стефенсона.

1.7.2. Метод дифференцирования по параметру.

Для уравнений, имеющих внешний параметр λ ($\mathbf{g}(\mathbf{x}, \lambda) = 0$), например, параметр нагружения, применяется метод продолжения по параметру, алгоритм которого имеет вид:

$$\alpha \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}, \lambda^{(n)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\substack{x=x^{(n)} \\ \lambda=\lambda^{(n)}}} (\mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \lambda} \right|_{\substack{x=x^{(n)} \\ \lambda=\lambda^{(n)}}} (\lambda^{(n+1)} - \lambda^{(n)}) = 0$$

при $\alpha = 0$ имеем **метод дифференцирования по параметру**, при $\alpha = 1$ имеем **квазиньютоновский метод**. В методе дифференцирования по параметру полагается, что начальное приближение удовлетворяет исходному нелинейному уравнению $\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(0)}, \lambda^{(0)}) = 0$.

Оба метода являются примерами **инкрементального метода** (или метода приращений, пошагового метода), применяемого для

решения задач в механике деформируемого твердого тела. Вспомогательная задача Коши метода дифференцирования по параметру

$$\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{d\lambda} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \lambda} = 0$$

$$\mathbf{x}|_{\lambda=\lambda^{(0)}} = \mathbf{x}^{(0)}$$

может быть проинтегрирована с использованием численных алгоритмов решения задач Коши типа явных методов Рунге-Кутты и Адамса или неявных методов Гира.

1.7.3. Метод погружения.

Метод погружения для решения нелинейных задач заключается в том, что вводится дополнительная эволюционная переменная (фиктивное время) t и соответствующий нестационарный член добавляется в исходное уравнение (задача "погружается" в пространство дополнительного измерения, играющего роль времени). Решение ищется как стационарное (установившееся) решение вспомогательной задачи вида

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{B} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}, \quad \mathbf{x}|_{t=0} = \mathbf{x}_0$$

где \mathbf{B} - некоторая положительная невырожденная, легко обратимая матрица. Правая часть начального условия часто полагается нулем. Уравнение метода погружения должно принадлежать параболическому типу, тогда процесс установления приводит к искомому решению. Часто этот метод решения называют **методом установления**.

1.8. Проблема единственности и ветвления решений

1.8.1. Теорема о неявной функции

В курсах функционального анализа. доказывается

Теорема о неявной функции: неявная функция $\mathbf{x}(\lambda)$ определяемая из решения нелинейного уравнения

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \lambda) = 0$$

имеет единственное продолжение в малой окрестности точки $(\mathbf{x}_0, \lambda_0)$, где $\mathbf{g}(\mathbf{x}_0, \lambda_0) = 0$, если оператор линеаризованной задачи $(\mathbf{g}'_{\mathbf{x}})$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_0, \lambda_0) + \mathbf{g}'_{\mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \mathbf{g}'_{\lambda}(\lambda - \lambda_0) + O(\Delta \mathbf{x}^2, \Delta \lambda^2) = 0$$

невырожден (то есть имеет ненулевые собственные числа).

Приведенная теорема имеет место в общем случае функциональных уравнений, так что под нелинейным уравнением, о котором идет речь, можно понимать нелинейную начально-краевую задачу, систему нелинейных интегральных уравнений, или, например, систему нелинейных алгебраических уравнений. При этом \mathbf{x} обозначает набор искомых функций рассматриваемой задачи или их дискретный аналог.

Поскольку при численном решении нелинейные задачи так или иначе приводятся к системам нелинейных алгебраических уравнений, то самым наглядным для понимания данной теоремы и обсуждаемого далее материала является именно алгебраический вариант уравнения задачи о неявной функции.

Параметр λ связывается с интенсивностью процессов в сплошной среде. Например, в механике деформируемых твердых тел роль параметра λ исполняет параметр нагрузки, в задачах механики жидкости роль λ отводится числу Рейнольдса.

Если линеаризованный оператор \mathbf{g}'_x вырождается, то точка $(\mathbf{x}_0, \lambda_0)$ называется особой и вопрос о возможном продолжении решения нетривиален и рассматривается далее. В континуальной механике анализ поведения решения в особых точках и их обнаружение составляет предмет теории устойчивости тонкостенных конструкций и теории гидродинамической устойчивости.

1.8.2. Особые точки и продолжение решений.

Особыми называются точки (\mathbf{x}, λ) в пространстве решений, в которых одно или несколько собственных значений оператора линеаризованной задачи \mathbf{g}'_x обращаются в нуль.

Если имеется только одно, равное нулю, собственное значение и соответствующая собственная функция удовлетворяет неоднородной линеаризованной задаче, то неявная функция $\mathbf{x}(\lambda)$ имеет единственное продолжение и эта собственная функция указывает направление продолжения. Соответствующая точка называется предельной точкой. Таковы точки, описывающие состояние цилиндрических панелей перед прощелкиванием к новому устойчивому положению равновесия при действии внешнего давления. Соответствующее явление хорошо известно всем, кто когда-либо играл, щелкая кусочком фото пленки.

Если же собственная функция не удовлетворяет неоднородной линеаризованной задаче, то неявная функция $\mathbf{x}(\lambda)$ не имеет продолжения в направлении данной собственной функции. При отсутствии возможных продолжений решения особая точка называется точкой умирания решения или тупиковой точкой.

Если неоднородная задача имеет несколько нулевых собственных чисел, то соответствующие собственные решения могут указывать несколько направлений продолжения неявной функции при условии, что они удовлетворяют неоднородной линеаризованной задаче. Соответствующая особая точка называется точкой ветвления решений нелинейной задачи. Такие случаи встречаются в теории устойчивости и выпучивания деформируемых тел, в теории устойчивости гидродинамических течений. Например, случай потери устойчивости сжимаемого стержня, когда при достижении критической нагрузки наряду с прямолинейной формой равновесия становится возможной и изогнутая форма равновесия.

Заметим, что могут существовать и изолированные ветви решения задачи о неявной функции, на которые нельзя попасть непрерывно продолжая решение. Иногда их удается обнаружить в численных экспериментах "методом тыка" (перебором вероятных значений).

Подробный анализ данного класса задач, называемых нелинейными задачами на собственные значения имеется в сборнике статей [Келлер, 1974].

1.9. Методы минимизации функционалов

Системы алгебраических уравнений часто представляют условия минимума или стационарности (условия Эйлера) для некоторых функционалов, возникающих в задачах оптимизации процессов и конструкций. Такие задачи составляют предмет теории математического (линейного и нелинейного) программирования.¹ Подробное изложение теории математического программирования можно найти, например, в книгах Полака (1974) и Пшеничного, Данилина (1979), а также в сборнике статей американских специалистов (Методы условной минимизации, 1977). Ниже приводятся основные положения этой теории.

1.9.1. Условная минимизация линейных функционалов

Сначала рассмотрим задачи минимизации линейных функционалов. Несмотря на линейность рассматриваемых функционалов их минимизация является существенно нелинейной задачей, так как область допустимых решений определяется набором некоторых ограничений типа равенств и неравенств.

Например, вес летательного аппарата представляется суммой весов его составных частей. Аргументами функционала веса являются параметры геометрии, удельные веса материалов и тому подобные характеристики, каждая из которых имеет определенные границы изменения, зависящие возможно от значений других параметров. Минимум функционала может быть неединственным, задача его поиска является нетривиальной и, конечно же, не сводится к решению системы линейных уравнений.

Другой пример приложения теории линейного программирования дает задача поиска равнопрочных конструкций, все составляющие которых имеют одинаковый запас прочности, т.е. отношение предела прочности к максимальному напряжению при эксплуатации. Такие функционалы как правило не имеют аналитического представления и определяются алгоритмически по результатам решения вспомогательных краевых задач, описывающих напряженно-деформированное состояние элементов конструкции.

¹ Заметим, что, несмотря на наличие слова “программирование”, данная теория не имеет никакого отношения к написанию программ для ЭВМ.

Каноническая форма задачи линейного программирования имеет вид:

найти $\min_x \mathbf{c}^T \cdot \mathbf{x}$ при ограничениях $A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$, $\mathbf{x} \geq 0$

где \mathbf{c}^T - заданный вектор, A является матрицей $m \times n$ и $m < n$, n – размерность вектора неизвестных \mathbf{x} , m – число ограничений. Наиболее распространенным способом решения этой задачи является симплекс-метод, описание которого приведено, например, в книге (Методы условной минимизации, 1977)

1.9.2. Минимизация нелинейных функционалов.

Методы безусловной минимизации квадратичных функционалов, имеющих системы линейных алгебраических уравнений в качестве условий минимума, уже рассмотрены выше в разделах по градиентным методам решения систем линейных алгебраических уравнений.

Методы минимизации нелинейных функционалов общего вида при наличии ограничений составляют предмет теории нелинейного программирования. Постановка общей задачи нелинейного программирования имеет вид:

найти $\min_x F(\mathbf{x})$ при ограничениях $c_i(\mathbf{x}) \geq 0$, $i=1,2,\dots,m$.

где размерность вектора неизвестных \mathbf{x} равна $n > m$. При $m=0$ имеем задачу безусловной минимизации, в противном случае решаем задачу условной минимизации.

Имеются методы минимизации, в которых ограничения учитываются явно. Это можно сделать, например за счет специальной замены переменных, при которой ограничения выполняются автоматически. Например, в задачах о течениях несжимаемой жидкости ограничение, выражающее условие несжимаемости (равенство дивергенции скорости нулю), можно учесть, записывая уравнения Навье-Стокса в переменных функция тока – завихренность.

Рассмотрим основные методы неявного учета ограничений путем сведения задач условной минимизации к последовательности задач безусловной минимизации. Такие методы называются методами

преобразования. Основоположником методов преобразования является американский математик Курант (1943). Наиболее известными методами преобразования являются метод множителей Лагранжа, метод штрафных функций и барьерный метод, рассматриваемые ниже.

1.9.3. Метод множителей Лагранжа

Обозначим множество номеров активных ограничений (обращающихся в нуль на решении \mathbf{x}^*) символом J . Допустимое множество значений пробных решений имеет вид:

$$R = \{\mathbf{x} : c_i(\mathbf{x}) \geq 0 (i = 1, \dots, m)\}$$

Теорема Куна-Таккера. Если \mathbf{x}^* является решением задачи нелинейного программирования, то найдется вектор λ^* размерности m такой, что

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{a}_i(\mathbf{x}^*) = 0$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i \in J$$

$$\lambda_i^* = 0, \quad i \notin J$$

где через \mathbf{g} и \mathbf{a}_i обозначены градиенты функций F и c_i . Этот результат, известный как **теорема Куна-Таккера**, распространяется и на случай ограничений типа равенств, только в этом случае соответствующие **множители Лагранжа** λ^* могут иметь произвольный знак. При дополнительном требовании независимости градиентов функций ограничений, активных на \mathbf{x}^* , множители Лагранжа определяются однозначно. Учет ограничений с помощью множителей Лагранжа носит название **метода множителей Лагранжа**. Хорошим примером этого способа решения являются расчеты несжимаемых сред, в которых давление играет роль множителя Лагранжа для условия несжимаемости.

1.9.4. Методы штрафных и барьерных функций

В методе штрафных функций вместо исходной задачи условной минимизации рассматривается модифицированная задача безусловной минимизации функционала

$$T(\mathbf{x}, \mathbf{r}) = F(\mathbf{x}) + \Phi(c(\mathbf{x}), \mathbf{r})$$

где \mathbf{r} - вектор управляющих параметров, а Φ - положительная штрафная функция, регулируемая вектором \mathbf{r} . Безусловный локальный минимум функционала T по \mathbf{x} обозначается $\mathbf{x}(\mathbf{r})$. Различные методы преобразования отличаются выбором штрафного функционала Φ и последовательности управлений $\mathbf{r}^{(k)}$, обеспечивающих сходимость $\mathbf{x}(\mathbf{r}^{(k)})$ к \mathbf{x}^* при $k \rightarrow \infty$.

В методе штрафных функций приближенные решения могут не принадлежать допустимому множеству пробных решений, то есть ограничения типа равенств выполняются с погрешностью, которая постепенно стремится к нулю с ростом k .

Метод барьерных функций применяется для выполнения ограничений типа неравенств, функция Φ подбирается так, чтобы на границе допустимого множества “построить барьер”, препятствующий нарушению ограничений в процессе безусловной минимизации функции T по \mathbf{x} , и чтобы точки $\mathbf{x}(\mathbf{r}^{(k)})$ сходились к \mathbf{x}^* изнутри допустимого множества R .

Конкретные примеры штрафных и барьерных функций приводятся далее при рассмотрении способов учета ограничений в задачах о несжимаемых средах, в контактных задачах, в задачах построения сеток с выпуклыми ячейками.

1.9.5. Метод локальных вариаций

Рассмотрим минимизацию негладких функционалов. Для их минимизации был разработан метод локальных вариаций, широко используемый в механике деформируемого тела, теории управления и оптимизации (Баничук, Картвелишвили, Черноусько, 1973). Подобно методу последовательных смещений Либмана (или Гаусса-Зейделя) на каждой итерации метода локальных вариаций функционалы минимизируются последовательно по отдельным компонентам вектора неизвестных. Для экономии вычислений при минимизации интегральных функционалов континуальной механики методом локальных вариаций используется тот факт, что вариация искомой величины в узле сетки меняет только ту часть функционала, которая определяется интегрированием по окрестности этого узла.

Метод локальных вариаций применим к произвольным негладким положительным функционалам, поскольку не содержит операций дифференцирования функционала. К сожалению, скорость сходимости метода локальных вариаций невысока, что является платой за универсальность.

1.10. Решение задач Коши для ОДУ

1.10.1. Постановка задач Коши.

Рассмотрим задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка

$$dy/dt = f(y, t), \quad y|_{t=0} = y_0$$

где t - временная координата (или независимая переменная), y - искомые функции, функция f и значение y_0 заданы. Численное решение ищется путем пошагового интегрирования уравнений для дискретных значений времени $t_0 < t_1 < t_2 < \dots$, представляющих временные слои.

О свойствах системы ОДУ судят по поведению решений однородной линеаризованной системы дифференциальных уравнений, полученной из исходной нелинейной системы уравнений с помощью операции квазилинеаризации путем разложения нелинейных членов в ряд Тейлора в окрестности некоторого приближенного решения $y = y_n$ с удержанием линейной части разложения. Линеаризованная система уравнений имеет вид

$$dy/dt = f(y_n, t) + \partial f / \partial y |_{y=y_n} (y - y_n)$$

Взаимно независимые решения однородной линеаризованной системы уравнений

$$dy/dt = \partial f / \partial y |_{y=y_n} y$$

называются фундаментальными и ищутся в виде экспонент $y = y^* e^{\lambda t}$. В результате подстановки этого выражения в однородную систему линеаризованных дифференциальных уравнений получаем однородную систему линейных алгебраических уравнений для определения вектора y^*

$$(\partial f / \partial y |_{y=y_n} - E\lambda)y^* = 0$$

Показатели экспонент λ определяются из решения характеристического уравнения:

$$\det(\partial f / \partial y - \lambda E) = 0$$

являющегося условием существования нетривиального решения алгебраической системы уравнений.

Если все фундаментальные решения убывающие, то есть, если все показатели экспонент отрицательны, то исходная система уравнений является устойчивой. В противном случае среди фундаментальных решений имеются неограниченно возрастающие и решение исходной системы уравнений имеет смысл только на ограниченном интервале времени, для которого малым изменениям в начальных данных будут отвечать достаточно малые изменения в решении (требование устойчивости задачи).

Разностные методы решения задач Коши для системы ОДУ, служащие для определения значений искомых функций для набора дискретных значений аргумента, отвечающих узлам сетки, называются разностными схемами. Приведем несколько важных определений, характеризующих основные разновидности разностных схем.

Явная схема представляется системой уравнений относительно величин на новом временном слое $t = t_{n+1}$, которая характеризуется диагональной матрицей и легко (явно) разрешается.

Неявная схема содержит значения функции правой части на новом временном слое $t = t_{n+1}$ и требует для определения величин на новом временном слое решения системы алгебраических уравнений.

Двух-, трех-, ..., много- слойная схема использует соответствующее число временных слоев для аппроксимации временных производных.

Одно-, двух-, ..., много- шаговая схема использует соответствующее число промежуточных вспомогательных шагов (промежуточных вычислений функции правой части) на каждом шаге по времени.

1.10.2. Явные методы Рунге-Кутта

Семейство методов Рунге-Кутта¹ реализует повышение точности аппроксимации дифференциального уравнения на шаге по времени ($\tau_n = t_{n+1} - t_n$) за счет увеличения числа промежуточных вычислений функции правой части. Ниже приводятся варианты методов Рунге-Кутта в порядке повышения их точности.

В явной схеме Эйлера (одношаговый метод Рунге-Кутта)

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \mathbf{f}^n \tau_n$$

ошибка убывает со скоростью $O(\tau)$.

В явной схеме Эйлера с пересчетом (двухшаговый метод, Рунге-Кутта, называемый: в западной литературе методом Хойна)

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{y}}^{n+1} &= \mathbf{y}^n + \mathbf{f}^n \tau_n \\ \mathbf{y}^{n+1} &= \mathbf{y}^n + (\mathbf{f}^n + \tilde{\mathbf{f}}^{n+1}) \tau_n / 2\end{aligned}$$

ошибка убывает со скоростью $O(\tau^2)$.

В явной схеме предиктор-корректор второго порядка точности (двухшаговая схема Рунге-Кутта)

$$\begin{aligned}\mathbf{y}^{n+1/2} &= \mathbf{y}^n + \mathbf{f}^n \tau_n / 2 \\ \mathbf{y}^{n+1} &= \mathbf{y}^n + \mathbf{f}^{n+1/2} \tau_n\end{aligned}$$

ошибка убывает со скоростью $O(\tau^2)$.

Классический метод Рунге-Кутта четвертого порядка точности выражается формулой (четырёхшаговый метод)

¹ В отечественной литературе термин “Runge-Kutta methods” переводится иногда как “методы Рунге-Кутты”, что, на наш взгляд, режет слух подобно терминам “уравнение Вольтерры” или “теорема Фермы”, которые не употребляются. Хотя правил относительно склонения латинских фамилий в русском языке нет, однако, далеко не все латинские фамилии склоняются. Да и славянские фамилии не всегда склоняются (например, фамилия автора данной книги не склоняется). Поэтому здесь используется более благозвучный термин “методы Рунге-Кутта”.

$$y^{n+1} = y^n + \frac{1}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3)$$

где

$$k_0 = \Delta t_n f(y^n, t_n)$$

$$k_1 = \Delta t_n f(y^n + k_0/2, t_n + \Delta t_n/2)$$

$$k_2 = \Delta t_n f(y^n + k_1/2, t_n + \Delta t_n/2)$$

$$k_3 = \Delta t_n f(y^n + k_2, t_n + \Delta t_n)$$

Методы Рунге-Кутты более высоких порядков точности приводятся в справочниках.

Все показанные выше двухслойные многошаговые схемы Рунге-Кутты выводятся применением квадратурных формул численного интегрирования к формуле аналитического представления решения задачи Коши на шаге по времени

$$y^{n+1} = y^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f dt$$

Например, схема Эйлера отвечает квадратурной формуле прямоугольников, схема Эйлера с пересчетом – квадратурной формуле трапеций, схему третьего порядка точности можно получить, применяя квадратурную формулу Симпсона, и так далее.

1.10.3. Явные методы Адамса

В схемах Адамса повышение точности достигается за счет увеличения числа временных слоев, используемых для аппроксимации дифференциального уравнения. Они более экономичны, так как используют уже вычисленные значения функции правой части, но требуют постоянного шага по времени. Простейшей схемой этой группы является явная двухслойная схема Эйлера первого порядка точности. Следующей является трехслойная схема квазивторого порядка точности:

$$y^{n+1} = y^n + ((1 + \alpha)f^n - \alpha f^{n-1})\tau_n$$

которая при $\alpha = 0$ отвечает схеме Эйлера первого порядка точности, а при $\alpha = 0.5$ имеет второй порядок точности и

называется схемой Адамса-Башфорта. Схемы более высокого порядка точности описаны в справочниках (см. книгу Камке) Схема Адамса 4-го порядка имеет следующий вид:
 предиктор

$$\tilde{y}^{n+1} = y^n + \Delta t / 24(55f^n - 59f^{n-1} + 37f^{n-2} - 9f^{n-3})$$

корректор

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t / 24(9\tilde{y}^{n+1} + 19f^n - 5f^{n-1} + f^{n-2})$$

Схемы Адамса выводятся с использованием интерполяции Лагранжа подинтегральной функции f

$$y^{n+1} = y^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f dt$$

по ее k значениям, $y^{n-k+1}, y^{n-k+2}, \dots, y^n$, предшествующих искомому y^{n+1} . Порядок точности равен числу использованных для интерполяции предшествующих значений подинтегральной функции.

1.10.5. Жесткие задачи и неявные схемы

Неявные аппроксимации применяются для жестких систем ОДУ, характеризующихся тем, что матрицы $\partial f / \partial y|_{y=y_n}$ соответствующих линеаризованных систем ОДУ плохо обусловлены и, следовательно, такие системы ОДУ имеют сильно различающиеся по величине скорости изменения фундаментальных решений (даже в случае устойчивых систем уравнений) или просто очень быстро меняющиеся фундаментальные решения ($y = ce^{\lambda t}$, $\max |\lambda| T \gg 1$, $[0, T]$ - интервал интегрирования).

Явные схемы для жестких систем уравнений требуют очень сильных ограничений на шаг по независимой переменной ($\Delta t < 1/|\lambda|$), диктуемых быстро меняющимися фундаментальными решениями, и неэффективны, если надо получить решение на больших интервалах T , описываемое в основном медленно меняющимися фундаментальными решениями и заданными правыми частями. Проведение расчета по явной схеме с шагом, превышающим упомянутое ограничение на шаг по времени, немедленно приводит к неустойчивости.

Простейший пример задачи Коши для жесткого дифференциального уравнения можно искусственно построить так. Пусть решением является функция $y = \cos(t)$. Хорошо обусловленное уравнение для этого решения получается непосредственным дифференцированием принятого решения: $y'_t = -\sin(t)$. Сделаем это уравнение жестким добавив член, равный на решении нулю, с большим коэффициентом:

$$\frac{dy}{dt} = -100(y - \cos(t)) - \sin(t)$$

и дополним полученное уравнение начальным условием, вид которого также диктуется желанием сделать функцию $\cos(t)$ решением рассматриваемой задачи:

$$y|_{t=0} = 1$$

Фундаментальное решение данной задачи характеризуется показателем роста $\lambda = -100$ и на интервале $t \in [0, T]$ ($T = 1$) является быстро изменяющимся ($|\lambda| T = 100 \gg 1$). Это фундаментальное решение является убывающим и, следовательно, задача Коши устойчива. Однако она является жесткой. Попытка решения такой задачи по явной схеме с шагом по времени, превышающим $1/|\lambda| = 0.01$ обречена на неудачу: небольшим изменениям в начальных данных будут отвечать громадные изменения в значении решения в конце интервала изменения независимой координаты t . Это легко проверяется непосредственным вычислением.

Ярким примером таких жестких систем уравнений является система обыкновенных дифференциальных уравнений по времени, возникающая для каркасов приближенных решений гиперболических систем уравнений в частных производных при использовании проекционных методов. В частности, для явных сеточных методов решения гиперболических уравнений шаг интегрирования по времени ограничен условием устойчивости Куранта, которое требует, чтобы за один шаг по времени сигнал от данного узла не вышел бы за пределы его окрестности, образованной соседними узлами пространственной сетки. В этом примере можно теоретически обосновать и определить ограничение на шаг по времени, гарантирующее устойчивый расчет по явным схемам ($\Delta t < h/c$, где c - скорость распространения малых возмущений).

Однако, во многих случаях, возникающих в приложениях, применение явных схем невозможно, так как требуется определить решение на интервале времени, значительно превышающем ограничение на шаг по времени в явных схемах. В этих случаях имеется потребность в специальных методах интегрирования, реализующих безусловно устойчивый расчет решений жестких систем ОДУ. Ключевым средством обеспечения безусловной устойчивости является применение неявных схем решения. Типичными примерами методов для жестких уравнений служат следующие:

1) неявная схема Эйлера (простейший вариант метода Гира, называемый также обратным методом Эйлера):

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \mathbf{f}(\mathbf{y}^{n+1}, t_{n+1})\tau_n$$

2) неявная схема Кранка-Николсона:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + ((1 - \alpha)\mathbf{f}(\mathbf{y}^n, t_n) + \alpha\mathbf{f}(\mathbf{y}^{n+1}, t_{n+1}))\tau_n$$

3) неявная квазиньютоновская схема (линеаризованная схема Кранка-Николсона)

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + (\mathbf{f}(\mathbf{y}^n, t_n) + \alpha \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}^n} (\mathbf{y}^{n+1} - \mathbf{y}^n))\tau_n$$

Для жестких дифференциальных уравнений применяются также неявные многослойные схемы Адамса-Башфорта

Схемы Кранка-Николсона безусловно устойчивы при $\alpha > 0.5$ и переходят в явную схему Эйлера при $\alpha \rightarrow 0$. Подробнее о методах решения жестких систем ОДУ можно прочитать в книге Форсайта и др. (1980).

Системы нелинейных алгебраических уравнений, к которым приводят неявные схемы, решаются обычно с помощью каких либо вариантов итерационного метода Ньютона. Если шаг по времени мал, то часто хватает одной итерации по методу Ньютона на каждом временном шаге, как это и делается в записанной выше квазиньютоновской схеме.

Помимо ограничений, связанных со скоростью изменения решений, шаг интегрирования для явных и неявных схем подчиняется *условию*

точности путем сравнения результатов расчетов на вложенных сетках (то есть на сетках с шагами τ_n и $\tau_n/2$) и поддержания разности таких решений достаточно малой за счет уменьшения шага τ_n .

1.11. Двухточечные краевые задачи для систем ОДУ.

Рассмотрим нелинейную двухточечную краевую задачу

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= \mathbf{f}(\mathbf{y}(x), x), \\ \mathbf{y} &= \{y_1, \dots, y_N\}, \mathbf{f} = \{f_1, \dots, f_N\}, x_a \leq x \leq x_b \\ y_i(x_a) &= \alpha_i, i = 1, \dots, N_0 < N \\ y_i(x_b) &= \beta_i, i = N_0 + 1, \dots, N \end{aligned}$$

1.11.1. Метод стрельбы

Рассмотрим решение двухточечной краевой задачи методом стрельбы. Обозначим неизвестные значения искомых функций на краях так

$$\begin{aligned} y_i(x_a) &= a_i, i = N_0 + 1, \dots, N \\ y_i(x_b) &= b_i, i = 1, \dots, N_0 < N \end{aligned}$$

Задавая наугад недостающие значения параметров $y_i(x_a) = \tilde{a}_i$, $i = N_0 + 1, \dots, N$ можно решить вспомогательную задачу Коши

$$\frac{dy}{dx} = \mathbf{f}(\mathbf{y}(x), x), y_i(x_a) = a_i, i = 1, \dots, N$$

одним из методов раздела 1.11. Вычисленные значения $y_i(x_b) = \tilde{b}_i$, $i = N_0 + 1, \dots, N$ на правом краю зависят от величин \tilde{a}_i , $i = N_0 + 1, \dots, N$. Если функции-невязки условий на правом краю равны нулю

$$\Phi_i(\tilde{a}_{N_0+1}, \dots, \tilde{a}_N) = \tilde{b}_i(\tilde{a}_{N_0+1}, \dots, \tilde{a}_N) - b_i = 0$$

где

$$i = N_0 + 1, \dots, N$$

то недостающие значения на левом краю найдены и исходная задача решена. В противном случае равенства нулю невязок граничных условий образуют систему нелинейных уравнений для определения недостающих граничных условий на левом краю. Для решения этой

системы нелинейных алгебраических уравнений относительно \tilde{a}_i , $i = N_0 + 1, \dots, N$, где функции невязок $\varphi_i(\tilde{a}_{N_0+1}, \dots, \tilde{a}_N)$ определены алгоритмически через решение вспомогательных задач Коши, можно применить метод Ньютона. Производные $\frac{\partial \varphi_i}{\partial a_j}$ ($i, j = N_0 + 1, \dots, N$) вычисляются по результатам решения ряда вспомогательных задач Коши с использованием простейших разностных аппроксимаций. Такой метод решения называется методом стрельбы или методом пристрелки.

К сожалению, метод пристрелки работает только для хорошо обусловленных систем ОДУ, когда выполнено условие (приблизительно)

$$\max(\lambda_i)(x_b - x_a) < 2$$

где λ_i - собственные значения матрицы $\partial f / \partial y|_{y=y_n}$ системы однородных линеаризованных уравнений, связанных с рассматриваемой задачей

$$dy/dx = \partial f / \partial y|_{y=y_n} y$$

Можно разбить отрезок, на котором ищется решение исходной задачи на части так, чтобы сделать на каждом промежуточном подинтервале задачу хорошо обусловленной и расширить соответственно число параметров стрельбы, добиваясь непрерывности решения на границах подинтервалов. Это приводит к необходимости решения нелинейной системы алгебраических уравнений относительно параметров стрельбы более высокой размерности. Такой способ решения успешно применялся рядом исследователей в 1970-е годы при решении краевых задач нелинейной теории оболочек. Другой эффективный путь решения нелинейных двухточечных краевых задач дает метод квазилинеаризации.

1.11.2. Квазилинеаризация.

Метод квазилинеаризации сводит исходную нелинейную двухточечную краевую задачу к последовательности вспомогательных линейных задач. На каждой итерации $n=0,1,\dots$ решается линеаризованная задача

$$\frac{dy^{(n+1)}}{dx} = f(y^{(n)}(x), x) + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{y=y^{(n)}} (y^{(n+1)} - y^{(n)})$$

$$y_i^{(n+1)}(x_a) = \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N_0 < N$$

$$y_i^{(n+1)}(x_b) = \beta_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N$$

Линеаризация достигается разложением правой части в функциональный ряд Тейлора в окрестности предыдущего (n -го) приближения к решению с удержанием двух первых членов разложения. Алгоритмы, использующие квазилинеаризацию, называют квазиньютоновскими по аналогии с методом Ньютона для нелинейных алгебраических уравнений.

Примечание 1. Функциональная производная $\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{y=y^{(n)}}$

определяется как линейный оператор, преобразующий изменение аргумента в изменение функции. Определение функциональной производной по Фреше имеет вид:

$$\|f(y^{(2)}, x) - f(y^{(1)}, x)\| \leq \left\| \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{y=y^{(1)}} \right\| \|y^{(2)} - y^{(1)}\|$$

На практике для вычисления функциональной производной пользуются определением Гато, которое имеет вид

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} (y^{(2)} - y^{(1)}) = \frac{\partial}{\partial \alpha} (f(y^{(1)} + \alpha(y^{(2)} - y^{(1)}), x) \right|_{\alpha=0}$$

где α - вещественный параметр. Если производная Гато существует для любых направлений $y^{(2)} - y^{(1)}$, то она совпадает с производной Фреше.

Примечание 2. Имеется по крайней мере два пути к численному решению исходной нелинейной краевой задачи, использующие

квазилинеаризацию. Первый путь заключается в дискретизации исходной нелинейной краевой задачи и сведении ее к системе нелинейных алгебраических уравнений, которые затем решаются итерированием линейризованных уравнений по методу Ньютона. Второй путь заключается в сведении исходной краевой задачи к последовательности вспомогательных квазилинеаризованных краевых задач, к которым применяется дискретизация. Получающиеся численные алгоритмы должны в результате дать близкие решения, сходящиеся к решению исходной краевой задачи, но сами алгоритмы могут и не совпадать (операции квазилинеаризации и дискретизации в общем случае некоммутируют). Выбор того или иного пути решения это вопрос удобства и поиска более эффективного алгоритма. Если кто-то умеет хорошо решать нелинейные системы алгебраических уравнений, он предпочтет первый путь. Наоборот, если кто-то преуспевает в решении линейных двухточечных краевых задач, для него второй путь покажется более привлекательным. Можно делать и так, и эдак.

1.11.3. Линейная двухточечная краевая задача

Далее рассматриваем решение *линейной* двухточечной краевой задачи для системы ОДУ

$$\frac{dy}{dx} = Ay(x) + g(x), \quad y = \{y_1, \dots, y_N\}, \quad x_a \leq x \leq x_b$$

$$y_i(x_a) = \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N_0 < N$$

$$y_i(x_b) = \beta_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N.$$

1.11.4. Конечные разности и матричная прогонка

Запишем простейшую конечно-разностную аппроксимацию уравнений и граничных условий рассматриваемой линейной двухточечной краевой задачи, например

$$\frac{y_j^{m+1} - y_j^{m-1}}{x^{m+1} - x^{m-1}} = \sum_{k=1}^N a_{jk}^m y_k^m + g_j^m \quad m = 1, \dots, M-1; \quad j = 1, \dots, N-1$$

$$y_j^0 = \alpha_j \quad j = 1, \dots, N_0 < N$$

$$\frac{y_j^1 - y_j^0}{x^1 - x^0} = \sum_{k=1}^N a_{jk}^0 y_k^0 + g_j^0 \quad j = N_0 + 1, \dots, N$$

$$\frac{y_j^M - y_j^{M-1}}{x^M - x^{M-1}} = \sum_{k=1}^N a_{jk}^M y_k^M + g_j^M \quad j=1, \dots, N_0 < N$$

$$y_j^M = \beta_j \quad j = N_0 + 1, \dots, N$$

где верхний индекс означает номер узла, а нижний индекс показывает номер искомой функции. Полученную СЛАУ с блочно-ленточной "трехдиагональной" матрицей относительно $(M+1)*N$ сеточных значений искомых функций можно решить методом матричной прогонки.

Применение конечно-разностных схем решения для достижения определенной точности приводит к алгебраическим задачам значительно более высокой размерности, нежели возникающие в рассматриваемых далее вариантах метода дифференциальной прогонки. Таким образом, конечно-разностные схемы требуют использования ЭВМ с большой оперативной памятью. Чтобы ослабить требования к размеру оперативной памяти на практике предпочтение часто отдается рассматриваемым далее методам дифференциальной прогонки, по крайней мере так было раньше, пока ресурсы компьютеров были весьма ограниченными.

1.11.5. Метод Калнинса

В методе Калнинса область решения разбивается на интервалы

$$x_a = x_0 < \dots < x_i < \dots < x_M = x_b$$

такие, что $\max_j (\lambda_j)(x_i - x_{i-1}) < 2$, где λ_j - собственные числа матрицы A . Решение на каждом интервале $i=1, \dots, M$ ищется в виде:

$$y^{(i)} = y_0^{(i)} + \sum_{j=1}^N \alpha_j^{(i)} y_j^{(i)}$$

где $y_0^{(i)}$ - решение задачи Коши для неоднородной системы уравнений с нулевыми начальными условиями

$$\frac{dy}{dx} = Ay(x) + g(x), \quad y = \{y_1, \dots, y_N\}, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i$$

$$y_j^{(i)}(x_{i-1}) = 0, \quad i = 1, \dots, M, \quad j = 1, \dots, N$$

где $y_j^{(i)}$ - N базисных решений однородной системы уравнений, являющиеся решениями вспомогательных задач Коши

$$\frac{dy}{dx} = A y(x), \quad y = \{y_1, \dots, y_N\}, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i$$

$$y_j^{(i)}(x_{i-1}) = \delta_{ij}, \quad i = 1, \dots, M, \quad j = 1, \dots, N$$

где δ_{ij} - дельта Кронеккера равная 1 для совпадающих индексов и 0 в противном случае. Коэффициенты $\alpha_j^{(i)}$ ($i = 1, \dots, M$, $j = 1, \dots, N$) определяются путем решения системы линейных алгебраических уравнений, которая состоит из граничных условий исходной задачи (N соотношений) и условий непрерывности решения исходной задачи на границах интервалов интегрирования ($N(M-1)$ соотношений).

Возникает вопрос: зачем вводить разбиение на подинтервалы, почему не обойтись одним интервалом? Дело в том, что единичная матрица, задающая на каждом подинтервале N независимых ортонормированных векторов в качестве начальных условий для определения базисных решений, при интегрировании вспомогательных задач Коши быстро портится, ее столбцы перестают быть взаимно ортогональными и все больше слипаются. Это приводит к тому, что сформированная на их основе система уравнений для удовлетворения граничным условиям оказывается очень плохо обусловленной. Введение подинтервалов расширяет число неизвестных коэффициентов разложения решения по базисным функциям, но делает систему уравнений хорошо обусловленной, так как подинтервалы достаточно малы и базисные решения не успевают “сплющиться”.

1.11.6. Метод ортогональной прогонки Годунова

С.К.Годунов предложил более экономный алгоритм борьбы с плохой обусловленностью двухточечных краевых задач, заметив, что не надо перегонять с левого края на правый все N базисных решений, а только то их число, которое равно числу условий, поставленных на правом краю.. На границах подинтервалов проводится ортогонализация вычисленных значений векторов базисных решений системы однородных уравнений и матрицы ортогонализации запоминаются. Ортогонализированные решения служат начальными условиями для вспомогательных задач Коши на

следующем подинтервале. Разрешающая система линейных алгебраических уравнений на правом краю имеет порядок $N - N_0$. Ее решение и матрицы ортогонализации на подинтервалах используются для определения решения исходной задачи на подинтервалах интегрирования при обратном ходе прогонки. Этот метод значительно сложнее в реализации, нежели метод Калнинса, но зато он более экономичен. Подробное изложение метода можно найти в учебнике Бахвалова.

1.11.7. Метод переноса граничных условий Абрамова

А.А.Абрамов (1961) вывел вспомогательные дифференциальные уравнения, которым должны удовлетворять коэффициенты матрицы и правые части граничных условий при их переносе с левого края на правый. Решение вспомогательных задач Коши для этих систем уравнений позволяет перенести недостающие граничные условия с одного края на другой, что сводит исходную двухточечную краевую задачу к задаче Коши. Метод Абрамова называют также методом дифференциальной прогонки. Поскольку коэффициентов матрицы граничных условий намного больше, чем граничных условий, то этот метод требует значительно большего объема вычислений, нежели методы Калнинса и Годунова, однако, он позволяет успешно преодолеть неприятности: связанные с плохой обусловленностью исходных краевых задач. Описание метода дано в учебнике Бахвалова.

1.11.8. Метод сплайнов

Рассмотрим кратко еще один способ решения, называемый методом сплайнов (см. книгу Алберга, Нильсена и Уолша). В соответствии с этим методом интервал интегрирования разбивается на M подинтервалов, на каждом из которых решение ищется в виде полинома степени K ($K=2,3$)

$$y^{(i)}(x) = \sum_{k=0}^K y_k^{(i)} (x - x_{i-1})^k / k!$$

где $x_{i-1} \leq x \leq x_i$ и $i = 1, \dots, M$. Система уравнений для определения $M(K+1)N$ (N - размерность вектора искомых функций) коэффициентов сплайна состоит из $(M-1)KN$ условий непрерывности сплайна на границах подинтервалов

$$\frac{d^j}{dx^j} \mathbf{y}^{(i)}(x_i) = \frac{d^j}{dx^j} \mathbf{y}^{(i+1)}(x_i)$$

$(i = 1, \dots, M-1; j = 0, \dots, K-1;)$

N граничных условий

$$y_i^{(1)}(x_a) = \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N_0 < N$$

$$y_i^{(M)}(x_b) = \beta_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N$$

и $(M+K-1)N$ условий коллокации (условий поточечного удовлетворения исходной линейной системы ОДУ)

$$\left. \frac{d\mathbf{y}}{dx} \right|_{x=\tilde{x}_j} = \mathbf{A}\mathbf{y}(\tilde{x}_j) + \mathbf{g}(\tilde{x}_j)$$

где $j=0, \dots, M+K-2$. Для сплайнов 1-й степени ($K=1$) точки коллокации совпадают с серединами подинтервалов $\tilde{x}_{i-1} = (x_{i-1} + x_i) / 2$ для $i=1, \dots, M$ и метод сплайнов совпадает с методом конечных разностей первого порядка точности. Для сплайнов 2-й степени ($K=2$) точки коллокации совпадают с границами подинтервалов $\tilde{x}_i = x_i$ ($i=0, \dots, M$) Для сплайнов 3-й степени ($K=3$) точками коллокации являются границы области интегрирования $\tilde{x}_0 = x_a$, $\tilde{x}_{M+1} = x_b$ и середины подинтервалов: $\tilde{x}_i = (x_{i-1} + x_i) / 2$ для $i=1, \dots, M$. Система алгебраических уравнений метода сплайнов имеет ленточную матрицу и может быть разрешена методом матричной прогонки. Благодаря эффективности сплайн-аппроксимации метод дает достаточно высокую точность для $K=2,3$ даже на грубых сетках. Для линейных двухточечных краевых задач с числом обусловленности метод может успешно конкурировать с методами дифференциальной прогонки.

2. Решение уравнений в частных производных.

2.1. Основные типы уравнений в частных производных.

2.1.1. Типы уравнений и поведение решений

Приведем классификацию квазилинейных уравнений в частных производных второго порядка. Такие уравнения имеют следующий вид

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} + c = 0$$

где коэффициенты A, B, C, a, b, c являются функциями независимых переменных и решения $u(x, y)$. Запишем это уравнение в виде системы уравнений первого порядка относительно функций $\mathbf{v} = (\partial u / \partial x, \partial u / \partial y, u)$:

$$\begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & dx \end{bmatrix} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} + \begin{bmatrix} B & C & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & dy \end{bmatrix} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} = \begin{bmatrix} -(av_1 + bv_2 + c) \\ 0 \\ du \end{bmatrix}$$

где $v_1 = \partial u / \partial x, v_2 = \partial u / \partial y$. Проведем через рассматриваемую точку (x, y) линию $y = y(x)$, которая в малой окрестности этой точки определяется уравнением $dy = \lambda(x, y)dx$. Пусть на этой линии решение u известно. Чтобы найти решение вне этой линии, надо определить производные от этой функции по независимым переменным. Для этого выписанная выше система уравнений первого порядка на данной линии

$$\begin{bmatrix} B + \lambda A & C & 0 \\ -1 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & dy + \lambda dx \end{bmatrix} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} = \begin{bmatrix} -(av_1 + bv_2 + c) \\ 0 \\ du \end{bmatrix}$$

должна быть разрешима относительно производных $\partial v / \partial x$ и $\partial v / \partial y$:

$$\det \begin{bmatrix} B - \lambda A & C & 0 \\ -1 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & dy - \lambda dx \end{bmatrix} = 0$$

откуда находим

$$(-(B - \lambda A)\lambda + C)(dy - \lambda dx) = 0$$

В зависимости от знака дискриминанта $D = AC - B^2$ рассматриваемое уравнение относится к одному из следующих типов: $D > 0$ - эллиптический тип, $D = 0$ - параболический тип, $D < 0$ - гиперболический тип, Тип уравнений сохраняется при любой взаимно-однозначной замене зависимых и независимых переменных.

Примеры:

Эллиптическое стационарное уравнение теплопроводности

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

Параболическое нестационарное уравнение теплопроводности

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

Гиперболическое уравнение колебаний.

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

Характеризуя различие в поведении решений уравнений основных типов, следует прежде всего отметить следующее.

В эллиптических задачах любое возмущение имеет бесконечную скорость распространения и мгновенно возмущает решение повсюду в области решения. При неизменных во времени уравнениях и

краевых условиях решение эллиптической задачи не зависит от времени. Например, простейшее уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = r$$

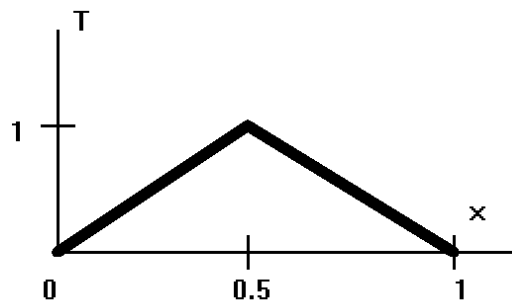
с граничными условиями

$$T|_{x=0} = 0, T|_{x=1} = 0$$

при $r = 0$ имеет единственное решение $T(x) = 0$.



Возмущению $T|_{x=0.5} = 1$ соответствует решение $T = 1 - 2|x - 0.5|$



В гиперболических задачах любое возмущение распространяется с конечной скоростью c . Например, простейшее волновое уравнение

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

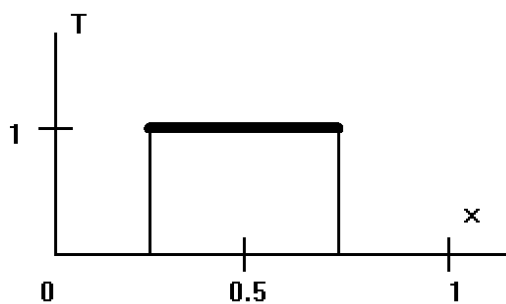
с начальными

$$T|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial t}|_{t=0} = 0$$

и граничными

$$T|_{x=0} = 0, \quad T|_{x=1} = 0$$

условиями имеет единственное решение $T(x, t) = 0$. Возмущению $T(x, t)|_{x=0.5} = 1$ соответствует решение $T = H((ct)^2 - (0.5 - x)^2)$, где H - функция Хевисайда. Это решение показано ниже для момента времени $t = 0.25/c$:



В параболических задачах любое возмущение распространяется мгновенно, но его амплитуда в отличных от источника точках нарастает постепенно и с течением времени стремится к значению, отвечающему решению соответствующей эллиптической задачи. Например для простейшего нестационарного уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

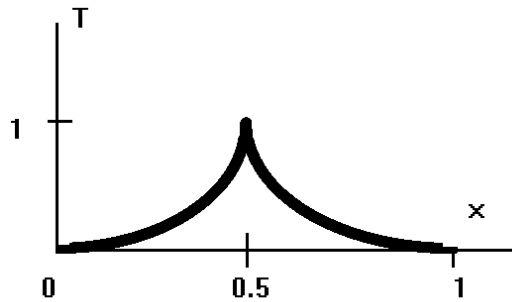
с начальным условием

$$T|_{x=0} = 0$$

и граничными условиями

$$T|_{x=0} = 0, \quad T|_{x=1} = 0$$

имеет единственное решение $T(x, t) = 0$. Возмущению $T(x, t)|_{x=0.5} = 1$ соответствует решение, показанное ниже для некоторого момента времени $t > 0$



Это решение в пределе при $t \rightarrow \infty$ стремится к решению стационарной задачи $T = 1 - 2|x - 0.5|$, то есть к уже рассмотренному выше решению эллиптического уравнения стационарной теплопроводности.

Общая система уравнений механики сплошной среды обладает всеми упомянутыми выше свойствами поведения решений: и эллиптичностью, и гиперболичностью, и параболичностью, но проявляются эти свойства в разной степени в зависимости от свойств сплошной среды, скорости протекающих процессов и масштабов времени и пространства, на которых изучаются явления. Поясним это положение на примере модельных геофизических задач.

Пример 1. При исследовании внутреннего строения Земли с помощью анализа распространения сейсмических упругих волн, Земля рассматривается как твердое деформируемое упругое тело и передача возмущений описывается гиперболическими уравнениями следующего вида

$$\rho \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right)$$

где U_i - смещение, λ и μ - модули упругости, ρ - плотность, δ_{ij} - дельта Кронекера. Масштаб времени при этом характеризуется минутами, а масштаб пространства – сотнями километров. Хотя поведение материалов, образующих Землю, описывается в общем случае сложными реологическими соотношениями, учитывающими нелинейное упругое поведение, вязкостные эффекты, явления пластичности, разрушения, неоднородность и анизотропию свойств,

для рассматриваемого в данном примере типа задач основные особенности решения ухватываются уже простейшей моделью упругого изотропного материала.

Пример 2. При анализе квазистатического напряженно-деформированного состояния горных пород вблизи выработок пользуются стационарными уравнениями теории упругости

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left(\lambda \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) = 0$$

и решают задачи эллиптического типа. Масштаб времени при этом отсутствует (стационарная задача) или велик по сравнению со временем распространения малых возмущений по области решения, а масштаб пространства – метры. Учет нестационарных инерционных членов при этом формально придает уравнениям свойство гиперболичности. Однако, на временах много больших времени пробега упругой волны по области решения расчет вынужденно проводится большими шагами по времени по неявной схеме, поскольку явные схемы требуют для получения решения нереально большого числа маленьких временных шагов, удовлетворяющих КФЛ-условию. Неявная схема Эйлера имеет вид:

$$\rho \frac{U_i^{n+1} - 2U_i^n + U_i^{n-1}}{\Delta t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left(\lambda \frac{\partial U_k^{n+1}}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial U_i^{n+1}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right)$$

где шаг по времени $\Delta t \gg L/c$, L - характерный размер области решения, c - скорость продольных упругих волн ($c^2 = \lambda + 2\mu$). При этом влияние нестационарных членов является пренебрежимо малым, поскольку знаменатель в нестационарном члене стремится к бесконечности, и решение практически совпадает с решением стационарных уравнений. Таким образом, на пространственно-временном масштабе данной задачи решение полных нестационарных уравнений гиперболического типа имеет свойства, присущие решению эллиптических уравнений.

Пример 3. Течения материала в недрах Земли рассчитывается на длительных временах в миллионы лет и на пространственных масштаб L в сотни и тысячи километров. Такие процессы описываются нестационарными уравнениями вязкой неньютоновской жидкости:

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left(\lambda_v \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu_v \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right),$$

где u_i - скорость среды, p - давление, определяемое законом сжимаемости $\partial p / \partial t - \rho c^2 \partial u_k / \partial x_k = 0$, λ_v, μ_v - коэффициенты вязкости. На больших интервалах времени $\Delta t \gg L/c$ материал ведет себя как несжимаемый, в уравнениях движения главную роль играют члены с давлением и вязкостью и поведение решения отвечает параболическому типу уравнений.

Отметим, что записанные уравнения являются частными случаями общей системы уравнений механики сплошной среды, в которой определяющие соотношения для напряжений можно сформулировать в общем виде с учетом упругих, вязких и пластических свойств. В разных процессах для разных материалов основными становятся разные члены такой общей системы уравнений и соответственно меняются преобладающие свойства уравнений и поведение решений.

Свойства уравнений и поведение решений оказывают сильное влияние на выбор эффективных методов решения, поэтому эти свойства надо себе представлять заранее и учитывать их при конструировании численных алгоритмов.

2.1.2. Модельные уравнения и краевые задачи.

Конструирование и исследование численных методов часто проводится на примерах модельных задач, поскольку провести детальный анализ реальных задач в большинстве случаев практически невозможно. Под модельными краевыми задачами подразумеваются упрощенные варианты краевых задач математической физики, сохраняющие основные свойства реальных краевых задач. Выводы анализа модельных задач облегчают понимание поведения реальных численных решений, подсказывают улучшенные варианты численных алгоритмов и условия сходимости приближенных решений.

Приведем основные формы модельного балансного уравнения (закона сохранения) для некоторой величины A .

Дифференциальная недивергентная форма модельного уравнения конвекции-диффузии имеет вид

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla A = \nabla \cdot (k \nabla A) + C,$$

где \mathbf{A} - искомая величина (скаляр, вектор или тензор), вектор \mathbf{u} - заданная скорость конвекции, $k \geq 0$ - заданный коэффициент диффузии, C - заданная (скалярная, векторная или тензорная) функция источника величины A , ∇ - оператор пространственного дифференцирования, точка между величинами означает скалярное произведение.

Рассматриваемое модельное уравнение включает конвекцию: $(\mathbf{u} \cdot \nabla A)$, диффузию: $(\nabla \cdot (k \nabla A))$, свободный член C , характеризующий удельный источник или сток величины A , и скорость ее изменения: $(\partial A / \partial t)$ в фиксированной точке эйлеровой системы координат.

Отметим, что приведенная форма балансного уравнения отвечает эйлерову подходу к описанию движения сплошной среды, использующему неподвижные в пространстве расчетные сетки. В случае произвольно подвижной расчетной сетки конвективный член принимает вид $(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla A$, где \mathbf{w} - скорость подвижной расчетной сетки (или, если мы не хотим пока никаких упоминаний о сеточных методах, то можно сказать, что \mathbf{w} является скоростью произвольно подвижной системы координат). Для лагранжева подхода к описанию движения, использующего расчетную сетку, движущуюся вместе со сплошной средой, скорости движения сетки и среды равны $\mathbf{w} = \mathbf{u}$ и конвективные члены зануляются. Для всех типов сеток $(\partial A / \partial t)$ означает скорость изменения величины A в узле сетки.

Дивергентная форма модельного балансного уравнения имеет вид

$$\frac{\partial \rho A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} A) = \nabla \cdot (\rho k \nabla A) + \rho C$$

и получается с помощью сложения уравнения неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

умноженного на A и недивергентного балансного уравнения для A , умноженного на ρ .

Интегральная форма модельного уравнения имеет вид:

$$\int_{V_*} \frac{\partial \rho A}{\partial t} dV = \int_{S_*} (-\rho u A + \rho k \nabla A) \cdot n dS + \int_{V_*} \rho C dV$$

где V_* - произвольный объем, S_* - его поверхность. Это уравнение получено интегрированием дифференциальной дивергентной формы по пространственной области решения и преобразованием объемного интеграла в интеграл по границе области решения по формуле Остроградского-Гаусса.

Вариационная галеркинская форма модельного уравнения имеет вид

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{\partial \rho A}{\partial t} \delta A + (-\rho u A + \rho v \nabla A) \cdot \nabla \delta A \right] dV = \\ = \int_S (-\rho u A + \rho v \nabla A) \cdot n \delta A dS + \int_V \rho C \delta A dV \end{aligned}$$

где δA - произвольная вариация. Эта форма получается домножением недивергентного уравнения баланса на произвольную вариацию, затем интегрированием по пространственной области решения, затем применением интегрирования по частям и преобразованием объемного интеграла в интеграл по граничной поверхности по формуле Остроградского-Гаусса.

Вариационная форма наименьших квадратов записывается так:

$$\delta \int_V \left(\frac{\partial \rho A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u A - \rho k \nabla A) - \rho C \right)^2 dV = 0$$

Это уравнение выражает условие минимума функционала невязки балансного уравнения. Величина $\rho u A - \rho k \nabla A$ называется потоком величины A , первый член характеризует конвективный поток (благодаря упорядоченному движению молекул), а второй – диффузионный (благодаря межмолекулярному взаимодействию).

Как нетрудно усмотреть из интегральной формы закона сохранения, пограничные потоки величины A ответственны за взаимодействие области решения с “внешним миром”, поэтому для корректности краевой задачи на границах надо задать либо саму величину A , либо ее поток, либо некоторое ограничение, связывающее эти величины. Аналогичный вывод можно сделать, анализируя вариационную формулировку. Условия, определяющие граничное значение величины A , называются главными. Ограничения на потоки являются по терминологии вариационного исчисления естественными граничными условиями, поскольку они, будучи подставленными в интеграл по граничной поверхности, получаются как следствия вариационного уравнения наряду с дифференциальными уравнениями закона сохранения. В начальный момент времени $t=0$ распределение величины A задается начальными граничными условиями.

Интегральные и вариационные формы уравнений нередко записываются в виде, получаемом интегрированием по четырехмерной *пространственно-временной* области решения $V_T = \{(x, t) : x \in V, t \in [0, T]\}$.

Отметим некоторые важные модельные задачи (не все возможные, конечно):

1) гиперболическое уравнение переноса содержит только нестационарный и конвективный члены.

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla A = 0$$

2) эллиптическое уравнение стационарной (решение в точке x не зависит от времени) диффузии:

$$\nabla \cdot (k \nabla A) + C = 0$$

3) параболическое уравнение нестационарной диффузии:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla A) + C$$

4) гиперболическое уравнение второго порядка

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \nabla \cdot (k \nabla A) + C.$$

5) система двух уравнений первого порядка гиперболического типа:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{B} + C$$
$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = k \nabla A$$

6) эллиптическое погранслоное уравнение

$$\nabla \cdot (k \nabla A) + u \cdot \nabla A + bA = 0$$

где $k \ll 1$ - малый параметр при старшей производной (коэффициент вязкости), b - заданная функция.

В общем случае для модельного балансного уравнения начальные и граничные условия имеют вид:

$$t = 0, \mathbf{x} \in V : A = A_0(\mathbf{x})$$

$$t \geq 0, \mathbf{x} \in S_{\text{un}} : A = A_*(\mathbf{x}, t) \quad (\text{условия типа Дирихле})$$

$$t \geq 0, \mathbf{x} \in S \setminus S_{\text{un}} : \mathbf{n} \cdot \nabla A = B_*(\mathbf{x}, t) \quad (\text{условия типа Неймана})$$

где V - пространственная область решения, $S = \partial V$ - граница. Если граничный поток B_* зависит от A , то соответствующий тип условий называют смешанным. Вопрос о корректном задании начальных и краевых условий, а также о существовании и единственности решения требует отдельного теоретического анализа и рассматривается для классических задач в курсе уравнений математической физики. Задачи, возникающие в приложениях, часто не имеют априорного теоретического обоснования и решаются в условиях, когда вопросы о существовании и единственности решения являются открытыми и исследуются в процессе численного решения. Вопрос о достоверности получаемых численных решений выясняется путем всевозможных математических проверок таких, как:

- 1) применение численного метода к модельным краевым задачам, имеющим известные решения,
- 2) сравнением численных и (искусственных) аналитических решений,
- 3) сравнением численных решений одной и той же задачи, полученных разными методами,

- 4) контролем диагностических функционалов, выражающих ожидаемые свойства решений такие, как выполнение законов сохранения или поведение ошибок,
- 5) численным исследованием сходимости решений при измельчении пространственно-временных сеток или (в случае бессеточных методов) при увеличении размерности конечномерных аппроксимирующих пространств приближенных решений,

Отметим, что вопреки распространенному заблуждению сравнение с данными физических экспериментов не дает никакой полезной информации о достоверности численных решений. Такое сравнение применяется для оценки достоверности физической теории, лежащей в основе численных решений, при условии, что достоверность численных решений проверена независимо чисто математическими средствами, упомянутыми выше.

2.1.3. Получение искусственных аналитических решений.

Имеется следующий простой способ получения аналитических решений для дальнейшего их использования при тестировании. Для того, чтобы произвольная достаточно гладкая функция $A = A^*(x, t)$ являлась аналитическим решением рассматриваемой краевой задачи, то есть в нашем случае удовлетворяла модельному уравнению, а также начальным и граничным условиям, достаточно задать функцию правой части, начальные и граничные условия в виде:

$$C(x, t) = \frac{\partial A^*}{\partial t} + u \cdot \nabla A^* - \nabla \cdot (k \nabla A^*)$$

$$x \in S_A : A(x, t) = A^*(x, t)$$

$$x \in S \setminus S_A : n \cdot \nabla A(x, t) = n \cdot \nabla A^*(x, t)$$

$$t = 0 : A = A^*(x, 0)$$

Хотя физическая ценность таких искусственных аналитических решений равна нулю, проверка алгоритмов на таких решениях позволяет смоделировать разнообразные случаи, встречающиеся в реальных численных расчетах, и практически оценить достоверность, точность и эффективность численного метода.

2.1.4. Обезразмеривание уравнений. Параметры подобия.

Для любой вычислительной машины имеется самое маленькое, отличное от нуля, число и самое большое число, с которым может оперировать данная машина. Например, для четырехбайтовых ЭВМ, к которым относятся обычные персональные компьютеры, минимальное и максимальное по модулю значения вещественных чисел равны: $\pm 8.43_{10} - 37$ и $\pm 3.37_{10} 38$, а для диапазон представления целых чисел определяется значениями ± 2147483647 , соответственно. Желательно, чтобы диапазон изменения решения и входной информации находился бы в области представимых на ЭВМ значений. Отметим, что при выполнении арифметических действий ограничения, накладываемые на величины операндов ограниченной разрядностью представления чисел, являются более жесткими. Так, “машинное эpsilon”, то есть минимальное положительное вещественное число, добавление

которого к единице приводит к результату, отличному от единицы, для четырехбайтовых ЭВМ равно примерно $1_{10} - 6$.

“Машинное эpsilon” играет важную роль при реализации неравенств в программах для ЭВМ. Если суммируются числа, величины которых отличаются более, чем на шесть порядков, то точность будет потеряна. То есть, например, добавление к единице бесконечного числа слагаемых, меньших “машинного эpsilon”, будет иметь своим результатом единицу! Желательно поэтому, чтобы функции, описывающие решение, не слишком бы отличались от единицы. Это достигается масштабированием (обезразмериванием) искомым функций.

Из теории размерности и подобия (см. Седов (1962)) известно, что числовые значения искомым переменных и коэффициентов уравнений зависят от выбора масштабов (размерностей или характерных значений). Неудачный выбор размерностей из-за ограниченного числа разрядов для представления чисел в вычислительных машинах может приводить к потере точности при выполнении арифметических операций с очень большими и очень маленькими числами. Поэтому важно хорошо отмасштабировать искомым переменные, то есть перейти от размерных к безразмерным переменным с разумным выбором масштабов размерных переменных. Выбор масштабов или, другими словами, выбор характерных значений физических величин производится так, чтобы безразмерные переменные не слишком отличались от единицы. Участвующие в безразмерных уравнениях безразмерные коэффициенты, составленные из размерных масштабов, называются параметрами подобия. Количество независимых параметров подобия определяется π -теоремой о параметрах подобия.

π -теорема: Пусть среди размерных масштабов величин $\{a_i\}_{i=1}^n$, характеризующих некоторый процесс, первые k имеют независимые размерности. Тогда с помощью этих k независимых размерных масштабов из остальных масштабов можно образовать систему $n-k$ безразмерных параметров подобия

$$\Pi_i = \frac{a_{k+i}}{a_1^{q_1} a_2^{q_2} \dots a_k^{q_k}} \quad (i=1, \dots, n-k)$$

Значения безразмерных параметров подобия ответственны за математические свойства уравнений. Знание ожидаемого диапазона изменения параметров подобия важно как на стадии конструирования численного метода, так и в процессе нахождения

численного решения. Например, сказать, что на графике показано решение задачи в момент времени, равный 15 секундам с начала процесса, это все равно, что не сказать ничего. Напротив, если сказано, что график отвечает безразмерному моменту времени, равному 0.5, где масштабом времени является время распространения возмущения по области решения, то такое высказывание уже вполне конкретно.

Явления, характеризуемые одними и теми же значениями параметров подобия являются подобными. Это означает, что в безразмерной форме подобные явления описываются одними и теми же значениями физических переменных.

Пример обезразмеривания. В случае начально-краевой задачи для модельного уравнения конвекции-диффузии безразмерные переменные вводятся так:

$$\tilde{x} = x / x_*, \quad \tilde{t} = tu_* / x_*, \quad \tilde{u} = u / u_*, \quad \tilde{\nabla} = \nabla_{x_*}, \quad \tilde{A} = A / A_*$$

где звездочки отмечают размерные константы, используемые в качестве масштабов переменных задачи, а тильды отмечают вводимые безразмерные переменные. Подставляя вместо размерных переменных их выражения, после несложных преобразований получаем запись уравнения в безразмерном виде:

$$\frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{A} = \tilde{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{\text{Re}} \tilde{\nabla} \tilde{A} \right) + \tilde{C}$$

где $\text{Re} = \frac{u_* x_*}{\kappa}$ - параметр подобия, называемый числом Рейнольдса,

а $\tilde{C} = C \frac{x_*}{u_* A_*}$ - безразмерный источниковый член. Начальные и

граничные условия аналогично преобразуются к безразмерному виду. Значки “тильда” над безразмерными переменными в дальнейшем, как правило, опускаются.

В безразмерных переменных уравнения сохраняют свою форму. Поэтому при написании алгоритмов и программ можно использовать исходную размерную форму уравнений, а безразмерные переменные использовать при проведении расчетов путем задания входных данных для коэффициентов уравнений и краевых условий в соответствии с принятым вариантом обезразмеривания переменных.

2.1.5. Консервативные формы записи уравнений.

Следующая форма записи законов сохранения называется дивергентной или консервативной

$$\partial_t Y + \sum_{i=1}^3 \partial_{x_i} F_i(Y) + G(Y) = 0$$

где искомые переменные Y называются консервативными переменными и они взаимно-однозначно связаны с основными неконсервативными переменными y . Соответствующие интегральная и вариационная формы данного закона сохранения имеют вид

$$\int_{V^*} (\partial_t Y + G(Y)) dV + \sum_{i=1}^3 \left(\int_{S^*} F_i(Y) n_i dS \right) = 0$$

и

$$\int_{V^*} (\partial_t Y + G(Y)) \delta Y dV - \sum_{i=1}^3 \left(\int_{V^*} F_i \partial_{x_i} \delta Y dV + \int_{S^*} F_i(Y) n_i \delta Y dS \right) = 0$$

где интегральное уравнение записано для произвольного объема V^* с граничной поверхностью S^* , а вариационное уравнение записано для всей пространственной области решения V с граничной поверхностью S . Величины $F_{xi}(Y)$ определяют потоки величин Y (или y) и в смысле тензорного исчисления имеют ранг на единицу выше по сравнению с величинами Y , обозначение n_i как обычно принято для компонентов внешней единичной нормали к поверхности.

Интегральная и вариационная формы законов сохранения предъявляют пониженные требования к гладкости решений и соответствующие решения называются слабыми (или обобщенными).

В качестве примера приведем выражения консервативных переменных, потоков и свободных членов при консервативной записи уравнений Навье-Стокса в декартовой системе координат для сжимаемой среды. В этом случае имеем

$$\begin{aligned}
\mathbf{y} &= (\rho, \mathbf{u}, T) \\
\mathbf{Y} &= (\rho, \rho\mathbf{u}, \rho E), \\
F_{xi} &= (\rho u_i, \rho u_i u_j, \rho E u_i + \sum_j \sigma_{ij} u_j) \\
G_i &= (0, \rho g_i, \rho(r + \sum_i g_i u_i))
\end{aligned}$$

где $E = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} / 2 + c_v T$ - полная удельная (массовая) энергия, ρ - плотность, $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \lambda_v \sum_i \partial_i u_i \delta_{ij} + \mu_v (\partial_i u_j + \partial_j u_i)$ - напряжения, u_i - декартовы компоненты скорости, $p = (\gamma - 1)\rho c_v T$ - давление, c_v - теплоемкость при постоянном объеме, T - температура, λ_v и μ_v - коэффициенты вязкости, g_i - удельные массовые силы, r - массовые источники тепла.

2.1.6. Соотношения на сильных разрывах.

Для исходной системы дивергентных уравнений

$$\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + g(Y) = 0$$

интегральная форма записи имеет вид:

$$\iint_{V_t} [\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + g(Y)] dx dt = 0$$

где Y – консервативная переменная, F – поток величины Y , g – источник величины Y , интегрирование проводится по произвольному гиперобъему $V_t = V \times [t_1, t_2]$. С использованием преобразования объемного интеграла в поверхностный получаем слабую интегральную формулировку закона сохранения

$$\int_{\partial V_t} (Y n_t + \mathbf{F}(Y) \cdot \mathbf{n}) dx dt + \int_{V_t} g(Y) dx dt = 0$$

которая в отсутствие диффузии не содержит операций дифференцирования и допускает разрывные решения.

В областях гладкости интегральное уравнение эквивалентно исходному дифференциальному уравнению. В случае, если область V_t содержит разрывные решения, переход от интегрального

уравнения к исходному дифференциальному в окрестности разрыва невозможен и справедливы соотношения, связывающие значения искомых функций по обе стороны поверхности разрыва, называемые соотношениями на скачке. Справедлива следующая теорема:

теорема. о соотношениях на скачке: в случае разрывных решений на заранее неизвестных поверхностях разрыва, определяемых уравнением $\varphi(x, t) = 0$, выполняются соотношения на скачке

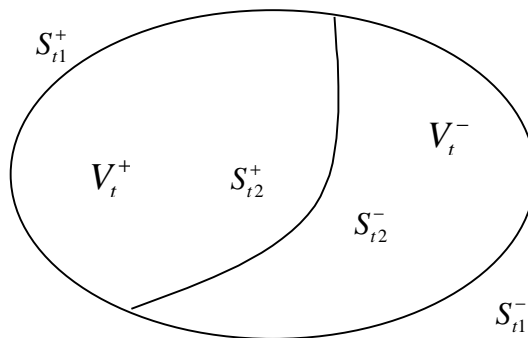
$$[Y]\varphi_t + [F(Y)] \cdot \nabla \varphi = 0$$

или

$$[Y]u_t + [F(Y)] \cdot \mathbf{n} = 0$$

где $[f] = f^+ - f^-$ - скачок величины f при переходе через поверхность разрыва, $u_t = \partial_t \varphi / |\nabla \varphi|$ - скорость движения поверхности разрыва по нормали, $\mathbf{n} = \nabla \varphi / |\nabla \varphi|$ - пространственная внешняя нормаль к поверхности разрыва.

Доказательство. Пусть гиперобъем V_t содержит поверхность разрыва, которая делит его на две подобласти $V_t = V_t^+ \cup V_t^-$.



Поверхность каждой из этих двух подобластей частично совпадает с поверхностью исходного гиперобъема $\partial V_t = S_{t1}^+ \cup S_{t1}^-$ и содержит участки поверхности S_2^+ и S_2^- , принадлежащие поверхности разрыва: $\partial V_t^+ = S_{t1}^+ \cup S_2^+$, $\partial V_t^- = S_{t1}^- \cup S_2^-$. Подвергнем интегральное уравнение цепочке преобразований с учетом аддитивности операции интегрирования и теоремы Остроградского-Гаусса:

$$\begin{aligned}
0 &= \int_{V_t} (\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + g(Y)) dx dt = \\
&= \int_{V_t^+ \cup V_t^-} (\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + g(Y)) dx dt = \\
&= \int_{S_{t1}^+ \cup S_{t2}^+} (Y n_t + \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) dx dt + \int_{\partial S_{t1}^- \cup S_{t2}^-} (Y n_t + \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) dx dt + \\
&\qquad\qquad\qquad + \int_{V_t} g(Y) dx dt = \\
&= \int_{V_t} (\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F} + g(Y)) dx dt + \int_{S_2} ([Y] n_t + [\mathbf{F}] \cdot \mathbf{n}) dx dt
\end{aligned}$$

где явно выделены составляющие поверхностных интегралов относящиеся к поверхности разрыва. В силу произвольности рассматриваемого гиперобъема отсюда следуют соотношения на сильном разрыве.

Следствие. Для частного случая систем гиперболических уравнений с постоянными коэффициентами

$$A_{(t)} \partial_t y + A_{(k)} \cdot \nabla_k y + g(y) = 0$$

необходимым условием существования скачка является условие

$$\det(A_{(t)} \phi_t + A_{(k)} \phi_{x_k}) = 0$$

иначе уравнение имеет лишь тривиальное решение и разрыв отсутствует..

Положение скачков и скорости их распространения для нелинейных систем гиперболических уравнений в общем случае зависят от интенсивности (величины) разрыва. Недифференциальные члены исходной системы уравнений не влияют на соотношения на сильном разрыве.

Более подробное обсуждение условий на скачках следует искать в курсах механики сплошных сред (см., например, Зарубин, Кувыркин (2002))

2.2. Сведение сложных задач к простым.

Любой численный алгоритм решения в конечном счете представим последовательностью вспомогательных нуль-мерных задач в виде арифметических действий над числами. Сведение сложных исходных задач к последовательности более простых вспомогательных задач является общим подходом для всех без исключения численных методов (а также общим подходом к решению задач во всех других областях человеческой деятельности). Приведем ниже список некоторых наиболее употребительных способов реализации этого общего подхода, описанию которых посвящена данная книга.

Надо заметить, что реальные методы решения начально-краевых задач представляют собой объединение целого ряда составляющих, касающихся и принятой исходной формулировки задачи, и метода аппроксимации решения, и способа вывода уравнений дискретизированной задачи, и алгоритма решения дискретизированных уравнений. Поэтому, например, выражение "задача решается методом конечных разностей" практически ничего не сообщает о методе решения ибо возможно множество различных вариантов реализации метода конечных разностей. Поэтому и те приемы, которые в данном разделе описываются, представляют лишь примеры таких общих составляющих, а не законченные описания методов решения.

2.2.1. Разделение переменных.

Метод разделения переменных состоит в поиске решения исходной задачи среди функций частного вида:

$$A(x_1, x_2, x_3, t) = A_{(1)}(x_1)A_{(2)}(x_2)A_{(3)}(x_3)A_{(0)}(t)$$

Исходная задача при этом сводится к вспомогательным задачам меньшей пространственно-временной размерности для функций $A_{(i)}(x_i)$ ($i=1,2,3$) и $A_{(0)}(t)$. В следующих разделах 2.2.2. и 2.2.3. приводятся примеры реализации метода разделения переменных.

2.2.2. Сведение начально-краевых задач к задачам Коши.

Решение эволюционных задач часто ищется в виде разложения по

пространственному базису φ_k с коэффициентами $a_{(k)}(t)$, зависящими от времени

$$A(x_1, x_2, x_3, t) = \sum \varphi_k(x_1, x_2, x_3) a_{(k)}(t)$$

Исходная начально-краевая задача при этом сводится к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений по времени относительно упомянутых коэффициентов. Трудности реализации связаны с построением базиса φ_k и удовлетворением граничным условиям в условиях сложной геометрии.

2.2.3. Метод прямых.

В методе прямых дискретизация решения вводится по всем пространственным переменным, кроме одной, и применяется неявная аппроксимация по времени, тогда исходная начально-краевая задача на каждом шаге по времени сводится к двухточечной краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений вдоль этой координаты. Метод применим к задачам с областями решения, допускающими введение регулярных сеток (односвязные области).

2.2.4. Метод интегральных соотношений

В методе интегральных соотношений для задач газовой динамики идея метода прямых получила дальнейшее развитие. В этом методе область решения разбивается на полосы с помощью кривых линий, равноотстоящих от границы области, связанной с обтекаемым телом. Дивергентная система уравнений газовой динамики интегрируется поперек этих полос, а затем подынтегральные функции интерполируются и выполняется интегрирование. Получаемая в результате система обыкновенных дифференциальных уравнений имеет пониженную пространственную размерность и интегрируется численно (см. работы Дородницына и О.Белоцерковского).

2.2.5. Покоординатная редукция уравнений.

В методе покоординатной редукции уравнений вдоль одной из координат принимается упрощенная аппроксимация решения, что позволяет исключить эту координату из рассмотрения и понизить пространственную размерность задачи на единицу.

Метод покоординатной редукции часто используется не только для численного решения задач, но и для вывода упрощенных (редуцированных) уравнений для описания поведения таких объектов как, например, оболочки (упрощенный закон изменения смещений по толщине), мелкие водоемы (осреднение скоростей по глубине) и пограничные слои (упрощенное изменение скоростей поперек пограничного слоя).

Благодаря методу покоординатной редукции появились уравнения теории оболочек, теории мелкой воды, теории пограничного слоя.

Покоординатную редукцию уравнений удастся реализовать, если имеется априорная информация о зависимости решения от редуцируемой координаты x_i^* и если поверхности $x_i^* = \text{const}$ составляют части границы области решения.

2.2.6. Методы расщепления.

Рассмотрим решение нестационарного операторного уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu$$

где пространственный оператор правой части представим в виде суммы M более простых операторов

$$Lu = L_1u + L_2u + \dots + L_Mu$$

Пусть разностная аппроксимация исходного уравнения по времени имеет вид

$$u^{n+1} = (E + \tau L)u^n$$

тогда при решении задачи методом расщепления¹ оператор правой части приближенно заменяется произведением M более простых операторов

$$u^{n+1} = (E + \tau L_1)(E + \tau L_2) \cdots (E + \tau L_M)u^n$$

погрешность такой замены равна $O(\tau^2)$, что проверяется сравнением исходного и измененного операторов правых частей. В процессе расщепления нужно удовлетворить краевым условиям.

В зависимости от выбора простых операторов различают схемы физического (по процессам) и геометрического (по направлениям) расщепления. Примерами **методов расщепления по физическим процессам**, могут служить метод крупных частиц в газодинамике, метод коррекции давления в гидродинамике, метод пластической коррекции в упругопластичности.

Для стационарных задач выписанная выше принципиальная схема расщепления применяется как итерационный процесс расщепления (n - номер итерации). Примерами в этом случае могут служить итерационные **методы геометрического расщепления**, а именно, методы дробных шагов (Яненко) и переменных направлений (Дуглас-Рекфорд), в соответствии с которыми на первом полушаге итерации (или на первом "временном" полушаге) производные по координате x определяются явно со старого слоя, а по координате y решаются двухточечные краевые задачи. На втором полушаге производные по координате y определяются явно по значениям с упомянутого полушага, а по координате x решаются двухточечные краевые задачи.

2.2.7. Метод конечных разностей.

Классический метод конечных разностей использует аппроксимацию исходных дифференциальных уравнений и начально-краевых условий на сеточных шаблонах с помощью разностных представлений производных искомых функций. Разностные аппроксимации производных определяются при этом методом неопределенных коэффициентов с использованием разложения решения в ряды Тейлора.

¹ В другой терминологии методы расщепления называются методами факторизации.

Метод конечных разностей предъявляет повышенные требования к гладкости решений рассматриваемых задач, которая необходима для сходимости аппроксимаций входящих в уравнения производных.

При наличии разрывов в решении или в коэффициентах уравнений метод конечных разностей в стандартной форме может приводить к нарушению законов сохранения и, как следствие, к неверным результатам. Поэтому в этих случаях поверхности разрывов выделяются явно и разностные решения на таких поверхностях сопрягаются с использованием условий на скачках.

Под именем метод конечных разностей скрывается обширное семейство численных методов, поэтому выражение "задача решается методом конечных разностей" несет абсолютно неопределенную информацию.

Заметим, что имеется подмножество вариантов метода конечных разностей, основанных на выводе системы алгебраических уравнений дискретизированной задачи, исходя из вариационной формулировки исходной начально-краевой задачи. Это подмножество методов имеет групповое наименование вариационно-разностного метода.

История метода конечных разностей насчитывает по меньшей мере три столетия, начиная с основополагающих работ Ньютона, Лейбница и Эйлера.

2.2.8. Метод конечных объемов.

Метод конечных объемов (или, в другой терминологии, интегро-интерполяционный метод, метод контрольных объёмов) для задач конвекции-диффузии был впервые предложен в работах Годунова (1959), Тихонова и Самарского (1962). На Западе основополагающие работы принадлежат Хирту. Этот метод применим ко всем типам задач математической физики и континуальной механики.

Метод конечных объемов основан на аппроксимации интегральной формы балансных уравнений задачи на конечных (контрольных) пространственно-временных объемах (ячейках), каждый из которых содержит окрестность определенного узла регулярной или нерегулярной сетки. Дискретизация интегральных уравнений проводится с использованием кусочно-полиномиальной или конечно-разностной аппроксимации решения.

Рассмотрим принципиальную схему метода конечных объемов на примере общего балансного уравнения, выражающего некоторый закон сохранения.

Представим область решения V набором непересекающихся конечных (контрольных) объемов $V = \bigcup_k V_{(k)}$, каждый из которых ассоциирован со своим узлом сетки. Такое разбиение производится, например, по методу Вороного, в соответствии с которым в области решения размещается N узлов сетки, окруженными так называемыми ячейками Вороного, представляющими контрольные объемы, разделенные гранями, лежащими в плоскостях, перпендикулярных ребрам сетки и делящих ребра сетки пополам. Ребрами сетки называются отрезки прямых соединяющих соседние узлы. Таким образом ячейка Вороного для каждого узла представляет его окрестность. Прилегающие к границе контрольные объемы имеют в качестве некоторых граней участки граничной поверхности области решения, на которых ставятся граничные условия.

Закон сохранения в интегральной форме для каждого конечного объема имеет вид

$$\int_{V_{(k)}} (\partial_t Y + G(Y)) dV + \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{l=1}^M \int_{S_{(k,l)}} F_i(Y) n_i dS \right) = 0,$$

где $i=1, \dots, N$. Интеграл по поверхности контрольного объема представлен суммой интегралов по всем его граням.

Детализация метода конечных объемов связана с введением интерполяционных формул для сеточных функций, применением тех, ии и иных формул численного дифференцирования при вычислении потоков $F_i(Y)$, формул численного интегрирования по объему и по граням, по способу регуляризации дискретизированной задачи, то есть по способу модификации дискретного оператора с целью обеспечения требуемых свойств, в первую очередь, свойства сходимости приближенного решения к искомому, по способу решения системы дискретных уравнений, по способу численного интегрирования по времени, и так далее. Уже данное перечисление основных альтернатив показывает, что под наименованием метода конечного объема выступает обширное семейство численных методов, столь же неисчерпаемое, как и семейство метода конечных разностей. Подробнее метод конечных объемов рассматривается

далее при описании конкретных численных алгоритмов континуальной механики.

Во многих случаях вместо пространственных конечных объемов используются пространственно-временные конечные объемы.

2.2.9. Метод конечных элементов.

Метод конечных элементов (МКЭ) представляет семейство проекционных методов с кусочно-полиномиальными финитными пробными функциями, носителями которых являются окрестности узлов нерегулярной сетки ячеек (конечных элементов). Для определения коэффициентов разложения в методе конечных элементов применяются вариационные формулировки начально-краевых задач. В нелинейных задачах применяется вариационная формулировка Галеркина

$$\int_V (\partial_t Y + G(Y)) \Psi dV - \sum_{i=1}^3 \left(\int_V F_i \partial_{x_i} \Psi dV + \int_S F_i(Y) n_i \Psi dS \right) = 0$$

$$t = 0, x \in V : Y = Y_0(x)$$

$$t \geq 0, x \in S_Y : Y = Y_g(x, t)$$

$$t \geq 0, x \in S_F : F_i(Y) n_i = F_n(x, t)$$

где Ψ - произвольная достаточно гладкая функция, $S_F = S \setminus S_Y$, $S = \partial V$. Здесь выписаны вариационное уравнение Галеркина, начальные условия, граничные главные и граничные естественные условия.

Решение ищется в виде разложения по кусочно-полиномиальным финитным пробным функциям аппроксимационного базиса

$$Y = \sum_{i=1}^N a_i(t) \varphi_i(x)$$

связанных с узлами конечно-элементной сетки.

Заметим, что нередко для кусочно-линейных пробных функций уравнения дискретизированной задачи в методах конечных элементов и конечных объемов совпадают и алгоритмы отличаются только последовательностью операций, реализующих одну и ту же расчетную схему.

2.2.10. Бессеточные методы Галеркина.

Классический метод Галеркина, использующий глобальные базисные функции, испытывает трудности, связанные с удовлетворением граничным условиям в случае областей решения сложной геометрии.

В методе конечных элементов трудности, связанные со сложной геометрией, преодолеваются путем построения локальных полиномиальных базисных функций, удовлетворяющих главным граничным условиям с использованием сетки конечных элементов..

Метод R-функций позволяет адаптировать классические глобальные пробные функции (например, тригонометрические) к граничным условиям при сложной геометрии. Для этого Рвачевым разработаны алгоритмы автоматизированного построения функций области, принимающих положительные значения внутри области решения и отрицательные значения вне ее и предложены способы модификации произвольных систем глобальных базисных функций для удовлетворения граничных условий при сложной геометрии.

В бессеточных методах Галеркина применяются финитные базисные функции, связанные со свободными узлами (частицами). Такие функции строятся без объединения узлов в ячейки, что позволяет описывать сложные движения сплошной среды, избегая трудности, связанные с искажениями подвижных сеток..

2.2.11. Бессеточные спектральные методы

Подмножеством бессеточных методов Галеркина являются методы, использующие в качестве пробных функций набор собственных функций приближенного оператора задачи. Такой выбор базиса обеспечивает ускоренную сходимость приближенных решений с ростом числа базисных функций.

2.2.12. Бессеточные методы частиц.

В бессеточных методах Галеркина, называемых методами частиц, применяются финитные базисные функции, отличные от нуля в малой окрестности данного свободного узла, называемого частицей или свободной точкой, и определяемые в зависимости от положения этой частицы и ее соседей. При этом допускается

изменение соседства узлов в процессе их движения вместе с физической сплошной средой.

2.2.13. Метод граничных элементов

Метод граничных элементов или метод граничных интегральных уравнений состоит в сведении краевой задачи для дифференциальных уравнений к интегральным уравнениям по границе области (или ее части) с последующим применением конечно-элементной (кусочно-полиномиальной) аппроксимации и решением системы алгебраических уравнений дискретизированной задачи. Сведение исходной задачи к граничной позволяет понизить пространственную размерность области решения на единицу, что упрощает алгоритм решения (сетка нужна только на границе!) и делает его более эффективным. Это качество метода граничных элементов рассматривается как основное его преимущество перед методами конечных разностей и конечных элементов. При решении нелинейных задач применяются варианты метода простой итерации, основанные на выделении линейного оператора, допускающего сведение краевой задачи к граничному интегральному уравнению. Нелинейные члены при этом вычисляются по решению на предыдущей итерации и трактуются как распределенные по области источники. К сожалению, в нелинейных задачах преимущество, связанное с понижением пространственной размерности задачи, теряется из-за плохой сходимости итераций по нелинейности и из-за необходимости введения объемных сеток для учета распределенных по области решения источников.

2.3. Теоремы о сходимости разностных схем.

2.3.1. Порядок аппроксимации

Разностная схема представлена системой алгебраических уравнений

$$L_h u_h = f_h$$

где L_h - матрица системы алгебраических уравнений относительно вектора сеточных значений искомой функции u_h , f_h - вектор правых частей.

Выписанная разностная схема аппроксимирует дифференциальное уравнение

$$Lu = f$$

с порядком аппроксимации $n > 0$, если на решении исходной задачи u выполнено условие

$$\|L_h P_h u - P_h f\| = O(h^n)$$

где P_h - сеточный оператор проектирования.

2.3.2. Устойчивость

Под устойчивостью разностной схемы понимается ограниченность обратного оператора дискретизированной задачи $\|L_h^{-1}\| \leq O(h^{-k})$.

2.3.3. Теорема Лакса.

Теорема. *Решение разностного уравнения сходится к сеточной проекции решения дифференциального уравнения*

$$\|P_h u - u_h\| = O(h^m)$$

если разностное уравнение аппроксимирует дифференциальное

$$\|L_h P_h u - P_h f\| = O(h^n)$$

и разностный оператор имеет ограниченный обратный

$$\|L_h^{-1}\| \leq O(h^{-k})$$

и

$$m = n - k > 0$$

Доказательство. Учитывая, что $P_h f = f_h = L_h u_h$ получен

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \|P_h u - u_h\| = \|L_h^{-1} L_h (P_h u - u_h)\| \leq \\ &\leq \|L_h^{-1}\| \|L_h P_h u - P_h f\| = O(h^{m-k}) \end{aligned}$$

При $m - k > 0$ и $h \rightarrow 0$ ошибка $\varepsilon \rightarrow 0$.

2.3.3. Теорема сходимости для МКЭ.

В случае метода конечных элементов теорема о сходимости формулируется так (см. Стренг и Фикс, 1978)

Теорема сходимости для МКЭ. Приближенное решение метода конечных элементов сходится к решению исходной вариационной задачи, если система пробных функций полна в пространстве решений, аппроксимация вариационного уравнения согласованна (т.е. интегрирование обеспечивает точное вычисление объемов, площадей и производных от базисных функций, входящих в вариационное уравнение) и матрица разрешающей системы алгебраических уравнений имеет ограниченную обратную.

2.3.4. Теорема Лакса-Вендроффа.

Для слабых решений нелинейных задач, которые моделируют разрывы в решении узкими зонами больших градиентов, имеет место теорема Лакса-Вендроффа¹: консервативность является достаточным условием сходимости устойчивой аппроксимирующей конечно-разностной схемы к слабому решению нелинейной системы уравнений.

¹ см. Lax, Wendroff (1960)

Пояснение: Разностная схема, аппроксимирующая закон сохранения, обладает свойством консервативности, если она поддерживает этот закон на дискретном уровне для каждого малого дискретного объема сетки.

2.4. Приемы исследования устойчивости разностных схем

Рассмотрим ВВЦП-схему (Вперед по Времени, Центральные разности по Пространству) для основного модельного уравнения

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = \nu \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

На примере этой схемы рассмотрим основные приемы исследования устойчивости разностных схем.

2.4.1. Метод гармонических возмущений

Метод гармонических возмущений Фурье-Неймана применяется при исследовании разностных схем для линейных уравнений в частных производных. Для этого

- 1) произвольное возмущение подставляется в каждую точку сетки в некоторый момент времени
- 2) возмущение раскладывается в ряд Фурье
- 3) отдельно прослеживается эволюция каждой гармоники Фурье.

Если какая-либо гармоника растёт, то схема неустойчива; если ни одна гармоника не растёт, то схема устойчива.

Пример. Рассмотрим явную схему для уравнения теплопроводности

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

где $i = 1, 2, \dots, N + 1$. Вводим возмущения

$$\frac{(A + \delta A)_i^{n+1} - (A + \delta A)_i^n}{\tau_n} = \alpha \frac{(A + \delta A)_{i+1}^n - 2(A + \delta A)_i^n + (A + \delta A)_{i-1}^n}{h^2}$$

вычитание уравнений даёт уравнение для возмущений

$$\frac{\delta A_i^{n+1} - \delta A_i^n}{\tau_n} = \alpha \frac{\delta A_{i+1}^n - 2\delta A_i^n + \delta A_{i-1}^n}{h^2}$$

разложение возмущения в ряд Фурье имеет вид

$$\delta A_i^n = \sum_{j=-m}^{j=m} \delta a_j^n \exp(ik_j x_i), \quad m = N/2, \quad k_j = \frac{\pi j}{(mh)}, \quad I = \sqrt{-1}$$

где длина волны λ_j и волновое число k_j связаны соотношением

$$\lambda_j = \frac{2\pi}{k_j}$$

Подставляя это разложение в уравнение для возмущений и учитывая, что

- 1) $e^{ik_j x_{i\pm 1}} = e^{ik_j(x \pm h)} = e^{ik_j x} e^{\pm ik_j h}$,
- 2) знак суммы можно опустить, так как уравнение линейно и отдельные гармоники между собой не взаимодействуют,
- 3) $e^{I\varphi} = \cos \varphi + I \sin \varphi$, где $I = \sqrt{-1}$, получаем

$$\delta a_j^{n+1} = \delta a_j^n \left(1 - 4 \frac{\alpha \tau_n}{h^2} \sin^2 \frac{k_j h}{2} \right)$$

Условие устойчивости имеет вид

$$\left| \frac{a_j^{n+1}}{a_j^n} \right| \leq 1 \Rightarrow -1 \leq 1 - 4 \frac{\alpha \tau_n}{h^2} \sin^2 \frac{k_j h}{2} \leq 1 \quad \text{для всех } j.$$

или

$$0 \leq \frac{2\alpha \tau_n}{h^2} \leq 1$$

2.4.2. Спектральный (матричный) метод.

Для исследования разностных схем для линейных уравнений в частных производных также применяется матричный или, в другой терминологии, спектральный метод. В отличие от метода гармонических возмущений, этот метод позволяет учитывать

влияние граничных условий, которые также предполагаются линейными.

В соответствии с матричным методом поступают так:

1) Разностная схема записывается в матричной форме

$$A^{(n+1)} = L \cdot A^{(n)} + b$$

где L - матрица перехода, $A^{(n)}$ - вектор сеточных значений искомой функции на n -м временном слое, b - вектор правых частей. По рекурсии получаем другую запись разностной схемы:

$$A^{(n+1)} = L^{n+1} \cdot A^{(0)} + (L^n + L^{n-1} + \dots + I) \cdot b$$

где L^n обозначает n -ю степень матрицы L , I - единичная матрица.

2) В начальный момент времени в каждую точку сетки вводится возмущение, связь возмущенных решений на n -м и $(n+1)$ -м временных слоях устанавливается в соответствии с рассматриваемой разностной схемой

$$(A + \delta A)^{(n+1)} = L^{n+1} \cdot (A + \delta A)^{(0)} + (L^n + L^{n-1} + \dots + I) \cdot b$$

после вычитания невозмущенного уравнения для возмущения получается уравнение

$$\delta A^{(n+1)} = L^{n+1} \cdot \delta A^{(0)}$$

Если матрица L сжимающая ($\|L\| < 1$), то схема устойчива. Условие устойчивости может быть ослаблено

$$\|L\| < 1 + O(\tau)$$

где τ - шаг по времени.

2.4.3. Метод дифференциальных приближений

В соответствии с методом дифференциальных приближений значения искомой сеточной функции в разностной схеме заменяются на значения искомой непрерывной функции в узлах. Например, в случае центрально-разностной схемы

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + U \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2h} = v \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2} + C_i^n$$

делается следующая замена

$$u_{i\pm 1}^{n\pm 1} \Rightarrow u(x_{i\pm 1}, t^{n\pm 1})$$

Для всех таких значений записываются разложения в ряд Тейлора в окрестности узла, для которого записано сеточное уравнение. В рассматриваемом примере разложение в ряд Тейлора имеет вид

$$\begin{aligned} u(x_{i\pm 1}, t^{n\pm 1}) &= u \Big|_{x=x_n}^{t=t^n} \pm \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=x_i}^{t=t^n} \Delta t_n \pm \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_i}^{t=t^n} h + \\ &+ \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_{x=x_i}^{t=t^n} \frac{\Delta t_n^2}{2} \pm \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x=x_i}^{t=t^n} \frac{h^2}{2} + O(h^3, \Delta t_n^3) \end{aligned}$$

В результате подстановки разложения в разностное уравнение получается гиперболическая форма (Г-форма) возмущенного (заменой производных разностями) дифференциального уравнения задачи. В нашем примере Г-форма имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \frac{\Delta t}{2} + U \frac{\partial u}{\partial x} = v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(h^2, \Delta t^2)$$

Затем с помощью исходного дифференциального уравнения исключаются все временные производные более высокого порядка, нежели присутствующие в исходном уравнении. В нашем случае вторая производная по времени выражается через пространственные производные так

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -U \frac{\partial}{\partial x} \left(-U \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) + v \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-U \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)$$

или

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = U^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2UV \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + v^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$$

В результате получается параболическая форма (П-форма) возмущенного (заменой производных разностями) дифференциального уравнения задачи

$$\frac{\partial u}{\partial t} + U \frac{\partial u}{\partial x} = \left(v - \frac{U^2 \Delta t}{2} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Uv \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta t - v^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \frac{\Delta t}{2} + O(h^2, \Delta t^2)$$

Возмущенные уравнения задачи в Г- и П- форме называются дифференциальными приближениями разностной схемы. Разностная схема наследует свойства возмущенного уравнения, которое и подлежат анализу вместо исходной разностной схемы.

Основные приемы определения необходимых условий устойчивости по методу дифференциальных приближений заключаются в следующем (Шокин, 1974). Общий вид П-формы таков

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \sum_{p=0}^{\infty} \mu_{2p+1} \frac{\partial^{2p+1} A}{\partial x^{2p+1}} + \sum_{p=1}^{\infty} \mu_{2p} \frac{\partial^{2p} A}{\partial x^{2p}}$$

Решение возмущенного уравнения ищется в виде некоторой Фурье компоненты

$$A(x, t) = \exp(at) \exp[ikx]$$

Подставляя это решение в П-форму и приравнивая мнимые и вещественные части, получим

$$\operatorname{Re}(a) = f(\mu_{2p}) = \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p k^{2p} \mu_{2p}$$

$$\operatorname{Im}(a) = f(\mu_{2p+1})$$

Далее П-форма интерпретируется так:

1) члены с четными пространственными производными представляют диффузию¹ (2p=2) и диссипацию².

¹ Диффузия сглаживает искомые функции вследствие хаотического движения и взаимодействия частиц среды.

² Диссипация обозначает необратимый процесс рассеяния энергии.

- 2) члены с нечетными производными отвечают за конвекцию¹ ($2p+1=1$) и дисперсию² ($2p+1=3$)
- 3) так как рост решения зависит только от $\text{Re}(a)$, эта величина должна быть неположительной. Значит П-форма устойчива, если

$$\sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p k^{2p} \mu_{2p} \leq 0 \quad \text{для любого } k.$$

Упрощенный критерий устойчивости требует выполнения данного неравенства только для первого ненулевого члена низшего четного порядка.

В нашем примере для устойчивости центрально-разностной схемы необходимо, чтобы эффективный коэффициент диффузии был неотрицателен, то есть

$$\Delta t_n \leq \frac{2\nu}{U^2}$$

Критерии метода дифференциальных приближений представляют необходимые, но недостаточные условия устойчивости схемы.

¹ Конвекция обозначает перенос характеристик сплошной среды с упорядоченным потоком массы.

² Дисперсия обозначает зависимость фазовой скорости распространения возмущения от его частоты.

2.4.4. Принцип замороженных коэффициентов

Для преодоления трудностей априорного анализа разностных схем, связанных с нелинейностью уравнений и переменностью коэффициентов уравнений, изложенные выше методы исследования устойчивости применяются к приближенным разностным уравнениям с постоянными коэффициентами. Такие приближенные («замороженные») значения коэффициентов уравнений определяются по их значениям в окрестности данной точки для локальных методов исследования или по некоторым наиболее неудачным для численного решения («мажорирующим») значениям этих коэффициентов в области решения.

2.4.5. Принцип расщепления по процессам

В практических задачах исследование устойчивости для простоты часто проводится отдельно для различных процессов. Например, можно отдельно проверить устойчивость аппроксимации вязких членов, отбрасывая конвективные члены, а затем можно пролверить устойчивость аппроксимации конвективных членов, опуская в исходных уравнениях вязкие члены. Можно раздельно анализировать устойчивость аппроксимации уравнений движения, теплопроводности, переноса примеси, электродинамики и тому подобных.

2.4.6. Учет влияния источниковых членов.

В нелинейных задачах с интенсивными объемными источниками импульса¹, энергии, примеси и других величин, для которых записываются балансные соотношения, шаг по времени приходится ограничивать в зависимости от интенсивности этих воздействий, а также в зависимости от интенсивности заданных граничных потоков искоемых величин. Распространенным приемом, позволяющим избавиться от этих подчас обременительных ограничений, является применение неявных аппроксимаций для упомянутых групп членов, которые часто не нарушают порядок вычислений по явным схемам (матрица системы уравнений на шаге по времени остается диагональной).

¹ Имеются в виду члены в уравнениях движения, связанные с ускорениями Кориолиса, действием электромагнитных и гравитационных полей.

2.4.7. Практический выбор шага по времени

Поскольку в практических задачах исследование устойчивости всегда проводится приближенно, то значения допустимого шага по времени дополнительно уменьшаются умножением на положительный и меньший единицы коэффициент запаса устойчивости, значение которого подбирается эмпирически и лежит обычно в пределах 0.1-0.9. Этот коэффициент является характеристикой приближенности анализа устойчивости. Чем более точен априорный анализ устойчивости, предсказывающий величины допустимого шага по времени, тем ближе коэффициент запаса к единице.

В нелинейных задачах помимо условий устойчивости даже для формально безусловно устойчивых неявных разностных схем шаг по времени, как правило, ограничивается еще и условиями точности. Распространенными рецептами условий точности является требование ограниченного изменения нормы решения на шаге по времени, которое часто можно увязать с априорными теоретическими оценками скорости изменения термомеханических параметров состояния моделируемых процессов. Например, в задачах механики деформируемого твердого тела роль условия точности исполняет требование малости приращений деформации на шаге по времени. При проверке условий точности надо учитывать все члены уравнений, включая недифференциальные. При наличии источников большой интенсивности шаг по времени из соображений точности может быть меньше шага, обеспечивающего устойчивость, во много раз.

Одно затруднение в реализации условий устойчивости связано с вопросом о том, что использовать в качестве шагов сетки в условиях устойчивости в случае нерегулярных пространственных сеток. Ответ таков. Для некоторого шаблона (для узла и его соседей) или для некоторой ячейки сетки разностная формула для дифференцирования по направлению x имеет вид

$$\left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_k = \sum_{j \in \omega_k} d_{xj} f_j$$

тогда соответствующая величина пространственного шага сетки по направлению x определяется так

$$h_{x(k)} = \left(\sum_{j \in \mathcal{O}_k} \max(d_{xj}, 0) \right)^{-1}$$

2.5. Основные конечно-разностные схемы

Данная глава посвящена описанию основных классических разностных схем, предложенных для задач гидродинамики. Более детальная информация о классических схемах приводится в монографии Роуча по вычислительной гидродинамике.

2.5.1. Схема ВВЦП

Явная двухслойная центрально-разностная схема для уравнения конвекции-диффузии (схема ВВЦП - вперед по времени, центральная по пространству) имеет вид

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

Роль *схемной* или *аппроксимационной вязкости* играет в этой схеме член с отрицательным коэффициентом аппроксимационной вязкости $v_s^n = -U^2 \tau_n / 2$, который появляется в первом дифференциальном приближении:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = (\alpha + v_s^n) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2)$$

Первое дифференциальное приближение показывает, что поведение численного решения описывается параболическим уравнением с коэффициентом эффективной вязкости $v_e = \alpha + v_s^n$. Для устойчивости шаг по времени должен обеспечивать положительность эффективной вязкости

$$\tau_n \leq \frac{2\alpha}{U^2}$$

Отсюда видно, что в отсутствие физической вязкости схема ВВЦП неустойчива для любого шага по времени. Отметим, что даже для устойчивого расчета эффективная вязкость всегда меньше физической, что снижает точность схемы до первого порядка $O(\tau, h)$.

При большой физической вязкости явное представление вязких членов накладывает дополнительное ограничение на шаг по времени

$$\tau_n \leq \frac{h^2}{2\alpha}$$

так что в присутствии конвекции и диффузии окончательное условие устойчивости принимает вид

$$\tau_n \leq \min\left(\frac{2\alpha}{U^2}, \frac{h^2}{2\alpha}\right)$$

2.5.2. ВВЦП-схема с искусственной вязкостью

Для уравнивания эффективной и физической вязкостей можно явно ввести в схему ВВЦП член с *искусственной вязкостью* ν_i :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = (\alpha + \nu_s^n + \nu_a^n) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2)$$

Если потребовать, чтобы *эффективная (суммарная) вязкость* $\alpha + \nu_s^n + \nu_a^n$ равнялась бы физической α , то для коэффициента искусственной вязкости получаем $\nu_a^n = -\nu_s^n > 0$. Схема при этом приобретает второй порядок точности.

К сожалению, в реальных задачах из-за неравномерности сетки в дифференциальных приближениях появляется много дополнительных членов первого порядка точности, которые трудно представить аналитически (особенно в многомерном случае, да еще и на нерегулярных сетках) и невозможно исключить. Поэтому в общем случае уравнивать физическую и эффективную вязкости не удается.

2.5.3. Схема Лакса

Следующая разностная схема для уравнения конвекции-диффузии:

$$\frac{A_i^{n+1} - (A_{i-1}^n + A_{i+1}^n)/2}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

которая отличается от схемы ВВЦП аппроксимацией временной производной, называется схемой Лакса¹. В этой схеме временная производная вычисляется с использованием осредненного значения $(A_{i-1}^n + A_{i+1}^n)/2$ вместо значения A_i^n . Благодаря такой аппроксимации в П-форме первого дифференциального приближения схемы Лакса появляется дополнительный вязкий член с положительным коэффициентом вязкости $h^2/(2\tau_n)$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = (\alpha + \nu_a) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2), \quad \nu_a = \frac{h^2}{2\tau_n} - \frac{U^2 \tau_n}{2}$$

Условие устойчивости схемы Лакса имеет вид

$$\tau_n \leq \min \left(\frac{h}{|U|}, \frac{h^2}{2\alpha} \right)$$

где учтено требование положительности аппроксимационной вязкости и диффузионное ограничение шага по времени для явных схем расчета диффузии.

Схема Лакса настолько проста и робастна, что при написании новой программы для решения задач о течениях сплошной среды по явной схеме часто сначала реализуют схему Лакса в качестве исходного варианта, чтобы заставить программу хоть как-то разумно работать. Такая программа дает отказ только при ошибках в записи разностных аппроксимаций исходных уравнений и граничных условий. Далее более точные схемы реализуются уже как модификации этой исходной программы.

Конечно, ожидать решений высокой точности от схемы Лакса не приходится: К существенным недостаткам схемы Лакса следует

¹ Иногда эта схема называется схемой Лакса-Фридрикса.

отнести то, что она очень быстро и сильно размывает не только распространяющиеся возмущения, и ударные волны, но и контактные разрывы¹, и межфазные границы. Применение сеток с большим числом узлов не дает заметного улучшения качества решений, поскольку скорость сходимости схемы Лакса очень медленная: ошибка убывает пропорционально первой степени шагов по времени и пространству.

2.5.4. ВВЦП-схема со сглаживанием.

Еще один способ регуляризации схемы ВВЦП предоставляет *сглаживание решений*. Расчет шага по времени состоит из двух этапов: на первом этапе вычисляется по схеме ВВЦП предварительное решение на новом временном слое, а затем на втором этапе полученное предварительное решение подвергается сглаживанию. Порядок вычислений может быть изменен: можно сначала сгладить решение на старом временном слое, а затем с его помощью по схеме ВВЦП найти решение на новом временном слое. Можно усмотреть, что обе описанные схемы со сглаживанием реализуют расщепление схемы Лакса на оператор сглаживания и оператор схемы ВВЦП.

Обозначим значения сеточной функции на новом временном слое, посчитанные по схеме ВВЦП как предварительные "с волной": \tilde{A}_i^{n+1} . Этап сглаживания записывается так

$$A_i^{n+1} = (1 - \omega)\tilde{A}_i^{n+1} + \omega(\tilde{A}_{i-1}^{n+1} + \tilde{A}_{i+1}^{n+1}) / 2.0$$

где $0 \leq \omega \leq 1$ - параметр сглаживания. Границы изменения значений параметра сглаживания соответствуют условию устойчивости сглаживания. Процедура сглаживания может быть переписана так:

$$\frac{A_i^{n+1} - \tilde{A}_i^{n+1}}{\tau_n} = \frac{\omega h^2}{2\tau_n} \frac{\tilde{A}_{i+1}^{n+1} - 2\tilde{A}_i^{n+1} + \tilde{A}_{i-1}^{n+1}}{h^2}$$

¹ Контактный разрыв характеризуется непрерывностью нормальной к поверхности разрыва составляющей скорости материальной среды, сама поверхность контактного разрыва при этом движется вместе с материальной средой, то есть является лагранжевой поверхностью.

откуда видно, что сглаживание эквивалентно явному интегрированию параболического уравнения с коэффициентом вязкости $\omega h^2 / 2\tau_n$

Если применять сглаживание вместо явной искусственной вязкости и потребовать, чтобы эффективная вязкость равнялась бы физической, то для параметра сглаживания получим выражение

$$\omega = \frac{U^2 \tau_n^2}{h^2}$$

Ясно, что такая формула обеспечивает равенство физической и эффективной вязкости только для линейного модельного уравнения конвекции-диффузии при условии использования равномерной сетки.

2.5.5. Схема с разностями против потока.

Причина появления членов с отрицательным коэффициентом вязкости в первых дифференциальных приближениях схем ВВЦП заключается в явной аппроксимации конвективных членов центральными разностями. Такие схемы для уравнения конвективного переноса не только неустойчивы в отсутствие регуляризаторов¹, но еще и нарушают свойство транспортности, то есть передают возмущения не только по направлению течения, как положено решениям уравнения переноса, но также против течения.

Для обеспечения свойств транспортности и устойчивости расчета конвекции по явной схеме можно аппроксимировать производные в конвективных членах односторонними разностями против потока:

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + \frac{(U + |U|)(A_i^n - A_{i-1}^n) + (U - |U|)(A_{i+1}^n - A_i^n)}{2h} = \\ = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

где выбор левой или правой односторонней производной осуществляется в зависимости от знака конвективной скорости U .

¹ Регуляризаторами называют дополнительные члены в разностных уравнениях, обеспечивающие устойчивость разностной схемы,

Схему с разностями против потока можно переписать в следующем виде

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{(A_{i+1}^n - A_{i-1}^n)}{2h} = \left(\alpha + \frac{|U|h}{2} \right) \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

откуда видно, что схема с разностями против потока первого порядка на равномерной сетке совпадает с центрально-разностной схемой с коэффициентом искусственной вязкости $|U|h/2$. Интерпретация схем с разностями против потока как центрально-разностных схем со специальным выбором искусственной вязкости облегчает их обобщение и реализацию при использовании неравномерных и нерегулярных сеток, на которых наиболее просто реализуются симметричные по направлениям центрально-разностные аппроксимации.

Первые дифференциальные приближения схем с разностями против потока первого порядка точности имеют дополнительный вязкий член (регуляризатор) с положительным коэффициентом вязкости $|U|h/2$, который для достаточно малых шагов по времени обеспечивает неотрицательность эффективной вязкости и устойчивость аппроксимации конвективного члена:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = (\alpha + v_a) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2),$$

$$v_a = \frac{|U|h}{2} - \frac{U^2 \tau_n}{2}$$

Аппроксимация конвективных членов разностями против потока используется во многих схемах.

Условие устойчивости, получаемое из требования неотрицательности аппроксимационной вязкости, и учитывающее ограничение на шаг по времени из-за явной аппроксимации диффузионного члена, имеет вид

$$\tau_n \leq \min \left(\frac{h}{U}, \frac{h^2}{2\alpha} \right)$$

Отметим, что для равномерной сетки и постоянной скорости потока при выборе шага по времени на границе области устойчивости и схема Лакса, и схема с разностями против потока имеют второй порядок точности.

В реальных задачах из-за неравномерности сеток и переменности скорости конвекции по пространству шаг по времени выбирается равным максимальному значению, удовлетворяющему условиям устойчивости для всех узлов сетки. В большинстве узлов неравномерной сетки при этом коэффициент аппроксимационной вязкости

$$v_a = \frac{|U|h}{2} - \frac{U^2\tau_n}{2}$$

не равен нулю. Поэтому такие схемы имеют только первый порядок точности и обладают избыточной эффективной вязкостью, что приводит к нефизичному излишнему сглаживанию решений. Улучшенный выбор искусственной вязкости реализован в методах экспоненциальной подгонки и уравновешенной вязкости (см. далее соответствующие разделы).

2.5.6. Явные и неявные схемы расчета диффузии

Для больших значений коэффициента физической вязкости α явные аппроксимации диффузионных членов приводят к диффузионному ограничению на шаг по времени

$$\tau_n \leq \frac{h^2}{2\alpha}$$

В многомерном случае это диффузионное ограничение становится еще более строгим, а именно, числовой коэффициент в знаменателе принимает значения 2^N , где N - число пространственных переменных. Для больших значений коэффициента физической вязкости α это ограничение становится обременительным.

Один из возможных способов избавиться от диффузионного ограничения на шаг по времени заключается в применении неявной аппроксимации диффузионных членов, а именно

$$\begin{aligned} \frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{(A_{i+1}^n - A_{i-1}^n)}{2h} = \\ = \left(\alpha + \frac{|U|h}{2} \right) \frac{(A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n)(1-\beta) + (A_{i+1}^{n+1} - 2A_i^{n+1} + A_{i-1}^{n+1})\beta}{h^2} \end{aligned}$$

При $\beta \geq 0.5$ такая явно- неявная схема устойчива при обычном конвективном ограничении шага по времени:

$$\tau_n \leq \frac{h}{|U|}$$

Расчет диффузии при этом проводится по неявной схеме Эйлера первого порядка точности при $\beta = 1$ и по схеме Кранка-Николсона второго порядка точности при $\beta = 0.5$.

2.5.7. Схема чехарда

Схема чехарда имеет вид

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^{n-1}}{2\tau_n} + u \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = 0$$

Анализируя дифференциальные приближения, легко показать, что трехслойная схема чехарда имеет второй порядок аппроксимации. Для начала расчета первый шаг по времени надо рассчитать с помощью какой-либо другой (разгонной) двухслойной схемы. К недостаткам схемы чехарда можно отнести то обстоятельство, что она генерит два семейства сеточных решений на четных и на нечетных шагах по времени, которые могут быть рассогласованы. Анализ этого счетного эффекта имеется в книге Роуча по вычислительной гидродинамике.

Вязкость в схеме чехарда можно учесть, но устойчивая явная аппроксимация вязкого члена будет иметь место только, если его отнести к слою (n-1)

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n-1)}}{\tau_n} + U_i^{(n)} \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_{i-1}^{(n)}}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^{(n-1)} - 2A_i^{(n-1)} + A_{i-1}^{(n-1)}}{h^2}$$

при этом, конечно, надо учитывать конвективное и диффузионное ограничения на шаг по времени

$$\tau_n \leq \min\left(\frac{h}{|U|}, \frac{h^2}{2\alpha}\right)$$

2.5.8. Схема Дюфорты-Франкела

Оригинальный аппроксимационный регуляризатор предложен в схеме Дюфорты-Франкела, который позволяет устойчивый расчет диффузии по явной схеме и позволяет в то же время избавиться от обременительного диффузионного ограничения шага по времени. Схема Дюфорты-Франкела (схема "ромб") имеет вид:

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n)}}{\tau_n} + U_i^{(n)} \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_{i-1}^{(n)}}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^{(n)} - (A_i^{(n)} + A_i^{(n+1)}) + A_{i-1}^{(n)}}{h^2}$$

где по сравнению с базисной ВВЦП схемой изменена аппроксимация диффузионного члена., а именно, как говорят, использована «чехарда со средней точкой». Аппроксимация диффузионного члена содержит черты неясности, но поскольку значение на новом временном слое записано только для центрального узла I, то схема не нарушает диагональности матрицы СЛАУ относительно новых значений на (n+1)-м слое и, таким образом, остается явной. Условие устойчивости ограничивает шаг по времени только скоростью конвекции

$$\tau_n \leq \frac{h}{|u|}$$

Первое дифференциальное приближение показывает, что схема Дюфорты-Франкела аппроксимирует уравнение гиперболического типа

$$\alpha \left(\frac{\tau_n}{h} \right)^2 \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2)$$

Если приближенное решение определяется при стремлении шагов по пространству и времени к нулю, но при сохранении их отношения постоянным, то член со второй производной по времени не мал и может заметно исказить решение, придавая ему свойства гиперболичности. Поэтому контроль точности решений надо проводить устремляя шаг по времени к нулю с большей скоростью, нежели шаг по пространству: $\tau_n / h \rightarrow 0$.

Отметим, что схему типа Дюфорты Франкела можно реализовать применяя стандартные явные центрально-разностные аппроксимации производных, если член со второй производной

добавить в исходные уравнения явно, в соответствии с выписанным выше первым дифференциальным приближением:

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n)}}{\tau_n} + \alpha \left(\frac{\tau_n}{h} \right)^2 \frac{A_i^{(n+1)} - 2A_i^{(n)} + A_i^{(n-1)}}{\tau_n^2} + \\ + U_i^{(n)} \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_{i-1}^{(n)}}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^{(n)} - 2A_i^{(n)} + A_{i-1}^{(n)}}{h^2}$$

2.5.9. Схема Лакса-Вендроффа

Лакс и Вендрофф предложили следующую схему:

$$\frac{A_{i+1/2}^{n+1/2} - (A_i^n + A_{i+1}^n)/2}{\tau_n/2} + u \frac{A_{i+1}^n - A_i^n}{h} = 0 \\ \frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + u \frac{A_{i+1/2}^{n+1/2} - A_{i-1/2}^{n+1/2}}{h} = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

или, в другой записи:

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + u \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = \left(\frac{u^2 \tau_n}{2} + \alpha \right) \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

Схема Лакса-Вендроффа имеет выписанные выше два представления: в виде двухшаговой двухслойной схемы предиктор-корректор и в виде одношаговой двухслойной схемы с явной искусственной вязкостью. В качестве предиктора используется схема Лакса для невязкой (конвективной) части уравнения, а на корректоре применяется схема чехарда для конвекции и учитывается диффузия. Надо обратить внимание на то, что диффузия учитывается только на корректоре и вычисляется по значениям на исходном временном слое. Учет диффузии по явной схеме на предикторе приводит к неустойчивости.

Схема Лакса-Вендроффа имеет второй порядок аппроксимации на гладких решениях. При расчете скачков (разрывных решений) она дает заброс и затухающие колебания решения за фронтом движущегося разрыва, то есть является немонотонной. Контактные разрывы эта схема размывает только за счет физической вязкости, что является ее достоинством. Немонотонность схемы Лакса-

Вендроффа для задач упругопластического деформирования приводит к дополнительным ошибкам в расчете истории напряженно-деформированного состояния из-за нефизических смен режимов нагружение-разгрузка за ударными волнами. Поэтому для исключения таких ошибок ее используют совместно с какими-либо процедурами дополнительной монотонизации решений, которые рассматриваются далее.

Отметим, что в окрестности скачков в невязких течениях решение недифференцируемо и, поэтому, погрешность аппроксимации любых схем сквозного счета в окрестности скачков имеет асимптотику $O(1)$ и сходимость может иметь место только в смысле обобщенного решения в интегральных нормах.

2.5.10. Схема Мак-Кормака

Еще один способ достижения второго порядка аппроксимации реализован в схеме предиктор-корректор, предложенной Мак-Кормаком:

$$\frac{A_{i+1/2}^{n+1/2} - A_i^n}{\tau_n / 2} + u \frac{A_{i+1}^n - A_i^n}{h} = 0$$

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + u \frac{A_i^{n+1/2} - A_{i-1}^{n+1/2}}{h} = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

В отличие от схемы Лакса Вендроффа вместо осреднения Лакса на предикторе и центральных разностей здесь вместо осреднения применены односторонние разности и на предикторе, и на корректоре, но в разные стороны. То есть на одном из таких полушагов схема заведомо неустойчива, а на другом наоборот обладает избыточным запасом устойчивости. В сумме двух шагов получается устойчивая для линейных уравнений схема второго порядка точности. Следует отметить, что устойчивость схемы для задач с переменными коэффициентами и, тем более, для нелинейных задач, не устанавливается, и известно, что схема проявляет признаки локальной неустойчивости («болтанка» вплоть до аварийного переполнения арифметического устройства из-за неограниченного роста решения) в сверхзвуковых зонах разрежения и в зонах возвратно-циркуляционного течения.

Как и схема Лакса-Вендроффа схема Мак-Кормака немонотонна. Введением монотонизаторов схему можно заставить работать устойчиво и в случае нелинейных задач. Отметим, что

эквивалентная по дифференциальным приближениям схема с центрально-разностной аппроксимацией содержит дополнительную искусственную вязкость на предикторе и корректоре с альтернирующим по знаку коэффициентом вязкости $\pm Uh/2$.

Схема Мак-Кормака дает пример схемы с антидиффузией, которая используется для устранения лишней схемной вязкости (диффузии) для повышения точности. То обстоятельство, что схема неустойчива при некоторых режимах течения, если говорить о задачах гидродинамики, обусловлено отсутствием адаптации схемной диффузии и антидиффузии к режиму течения. Такая адаптация схемной вязкости реализуется в схемах коррекции потоков. Наиболее обоснованный подход к адаптации схемной вязкости к режиму течения воплощен в схемах, использующих на предикторе алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва (семейство схем Годунова). Описание этих подходов приводится далее.

2.7. Схемы метода характеристик.

Для гиперболических уравнений в частных производных обширное семейство классических схем порождается рассматриваемым здесь методом характеристик. Описание метода характеристик требует значительного места, поэтому оно помещено в отдельном разделе.

2.7.1. Квазилинейные уравнения гиперболического типа

Квазилинейная система дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка в общем случае записывается так

$$(A_{(t)}U)_t + (A_{(k)}U)_{x_k} + B(U) = 0$$

Здесь матрицы $A_{(t)}^{-1}A_{(k)}$ не зависят от компонентов вектора искомых функций U , вектор свободных членов B является заданной функцией от U , координат x_k ($k=1,2,3$) и времени t , по k подразумевается суммирование от 1 до 3. Если матрицы $A_{(t)}^{-1}A_{(k)}$ имеют вещественные собственные числа, то система относится к гиперболическому типу.

2.7.2. Характеристическая форма уравнений

В четырехмерном пространстве (x,t) рассмотрим характеристические гиперповерхности или гиперповерхности слабого разрыва (разрыва производных), с которых решение не может быть продолжено вглубь области решения (задача Коши а начальными данными на таких поверхностях не имеет решения). Чтобы такое продолжение было бы осуществимо, нужно по заданному на рассматриваемой гиперповерхности решению определить его временную и пространственные производные, то есть, разрешить систему следующих уравнений.

$$U_t + \sum_{k=1}^3 \tilde{A}_{(k)} U_{x_k} + \tilde{B}(U) = 0$$

$$d_{(k)} U - U_t dt - U_{x_k} dx_k = 0 \quad (k=1,2,3)$$

где первое соотношение представляет исходную систему уравнений в так называемой нормальной (разрешенной относительно временных производных) недивергентной форме, а следующие три соотношения ($k=1,2,3$) представляют дифференциалы решения вдоль сечений характеристической гиперповерхности координатными плоскостями (t, x_k) и соотношения

$$\frac{dx_k}{dt} = \lambda_{(k)} = - \frac{\partial \varphi}{\partial t} / \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}$$

являются уравнениями линий пересечения характеристической гиперповерхности координатными плоскостями (t, x_k) .

В общем нелинейном случае задача отыскания характеристических гиперповерхностей сопряжена с отысканием решения исходной системы уравнений, так как коэффициенты уравнений $A=A(U)$ зависят от решения. Априорное определение характеристик возможно лишь в случае квазилинейных систем гиперболических уравнений с постоянными коэффициентами (например, в теории упругости и в теории упруговязкопластичности). Поэтому чаще применяется более простой подход, основанный на отыскании не характеристических поверхностей, а их следа на координатных плоскостях: линий пересечения характеристических и координатных поверхностей. Такой подход допускает простую численную реализацию, рассматриваемую ниже.

Рассматриваем гиперболическую систему уравнений в разрешенном относительно временных производных форме (так называемая нормальная форма)

$$U_t + \sum_{k=1,2,3} A_{(k)} U_{x_k} + B = 0$$

Собственные числа $\lambda_{(i)}^{(k)}$ матриц $A_{(k)}$ (т.е. корни уравнений $\det(A_{(k)} - \lambda^{(k)} E) = 0$) вещественны, что обеспечивает гиперболичность.

Левые собственные векторы $l_{(i)}^{(k)}$ (для $i=1,2,\dots,N$) матрицы $A_{(k)}$, соответствующие собственным значениям $\lambda_{(i)}^{(k)}$, определяются следующими уравнениями:

$$l_{(i)}^{(k)} \cdot A_{(k)} = \lambda_{(i)}^{(k)} l_{(i)}^{(k)}$$

где $k=1,2,3$. Умножая исходную систему уравнений для U слева на собственные векторы, преобразуем ее к *характеристической форме*

$$l_{(i)}^{(k)} \cdot (U_{l_{(i)}^{(k)}} + \sum_{j \neq k} A_{(j)} U_{x_j} + B) = 0$$

которая содержит операторы дифференцирования

$$(\dots)_{l_{(i)}^{(k)}} = (\dots)_t + \lambda_{(i)}^{(k)} (\dots)_{x_k} = \frac{\partial(\dots)}{\partial t} + \lambda_{(i)}^{(k)} \frac{\partial}{\partial x_k}$$

вдоль i -х характеристических кривых в координатных плоскостях (t,k) :

$$\frac{dx_k}{dt} = \lambda_{(i)}^{(k)}$$

Если матрица A имеет постоянные коэффициенты, то соотношения вдоль характеристической кривой можно переписать так:

$$(l_{(i)}^{(k)} \cdot U)_{l_{(i)}^{(k)}} = -l_{(i)}^{(k)} \cdot (\sum_{j \neq k} A_{(j)} U_{x_j} + B)$$

Величины $r_{(i)}^{(k)} = l_{(i)}^{(k)} \cdot U$ называются *инвариантами Римана* и при равенстве нулю правых частей сохраняются вдоль характеристик.

Замечание: подчеркнем, что *характеристики в каждой из координатных плоскостей* (t,k) , где $k=x,y,z$, определяются как линии, с которых нельзя продолжить решение, т.е, нельзя по известным значениям функции U на этих линиях определить производные U_t U_{x_k} . Задача определения производных U_t U_{x_k} имеет вид

$$U_t + A_{(k)} U_{x_k} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^3 A_{(j)} U_{x_j} - B$$

$$U_t dt + U_{x_k} dx_k = d_{(k)} U$$

и вырождена на характеристике $\frac{dx_k}{dt} = \lambda_{(i)}^{(k)}$, так как на ней вырождена матрица $A_{(k)} - \frac{dx_k}{dt} E$ разрешающей системы уравнений ($\lambda_{(i)}^{(k)}$ - ее собственные числа), которая имеет вид

$$\left(A_{(k)} - \frac{dx_k}{dt} E \right) \cdot U_{x_k} = - \left(B + \sum_{\substack{j=1,2,3 \\ j \neq k}} A_{(j)} U_{x_j} - \frac{d_{(k)} U}{dt} \right).$$

и получена исключением временных производных (производных по гиперболической координате).

2.7.3. Основные задачи для гиперболических уравнений.

Задача Гурса. Функция U задана на нехарактеристической поверхности, требуется найти продолжение решения в область.

Задача Коши-Римана. Функция U задана на пересекающихся характеристических поверхностях, требуется найти продолжение решения в область.

2.7.4. Прямой метод характеристик.

В прямом методе характеристики и решение находятся одновременно. Сетку характеристик в линейных задачах можно построить только для двумерного случая (x - u или x - t) и если число различных собственных ненулевых значений матрицы системы не больше двух. В нелинейных задачах уравнения характеристических линий (поверхностей) зависят от решения, поэтому сетки характеристик неравномерны во времени и пространстве и строить их удастся лишь в простых двумерных (x - u или x - t) случаях при условии, что число различных характеристик не больше двух. Примеры применения прямого метода характеристик к задачам о деформации жестко пластической среды можно найти, например, в книге Соколовского по теории пластичности. Для упруговязкопластических сред примеры даны в монографиях Новацкого и Кукуджанова.

2.7.5. Обратнo-характеристический метод.

Обратнo-характеристический метод представляет сочетание метода характеристик и метода конечных разностей. Классический вариант известен как метод Куранта-Изаксона-Риса. Из узлов пространственной сетки на новом временном слое назад по времени выпускаются характеристики до пересечения со старым временным слоем. В точках "встречи" характеристик со старым временным слоем значения U определяются линейной или квадратичной интерполяцией. Значения на новом временном слое для каждого узла определяются из системы уравнений, которая получается в результате аппроксимации характеристических соотношений. На краях характеристические соотношения, отвечающие уходящим за границы области характеристикам, заменяются граничными условиями. Применяется итерационное уточнение (пересчет): вновь найденные значения решения на новом временном слое используются для уточнения положения характеристик и расчет повторяется до сходимости.

Наличие операций интерполяции решения в обратнo-характеристических схемах вносит аппроксимационную вязкость и позволяет рассчитывать разрывные решения сквозным счетом без введения дополнительных вязких членов.

2.7.6. Характеристические соотношения для стационарных сверхзвуковых течений.

Стационарные задачи газовой динамики для сверхзвуковых течений относятся к гиперболическому типу, причем роль гиперболической координаты играет пространственная переменная, вдоль которой газ движется со сверхзвуковой скоростью.

Двумерные стационарные течения описываются системой квазилинейных уравнений вида

$$A_x \partial_x \mathbf{u} + A_y \partial_y \mathbf{u} = \mathbf{f}$$

где матрицы A_x , A_y и вектор \mathbf{f} являются заданными функциями независимых переменных x , y и вектора искомых функций \mathbf{u} . Для определенности положим, что координата x является гиперболической.

Пусть на некоторой кривой $y(x)$ решение $\mathbf{u}(x,y)$ известно. Посмотрим, можно ли в некоторой точке x этой кривой определить первые производные от решения $\partial_x \mathbf{u}$ и $\partial_y \mathbf{u}$, зная которые можно определить решение в окрестности данной кривой. Для этого дополним систему уравнений задачи соотношением для дифференциала решения \mathbf{u} вдоль данной кривой

$$dx \partial_x \mathbf{u} + dy \partial_y \mathbf{u} = d\mathbf{u}$$

Основная система уравнений и соотношение для дифференциала образуют расширенную замкнутую систему алгебраических уравнений для определения производных от решения по координатам x и y . Исключим из расширенной системы уравнений производные по x , получим систему алгебраических уравнений для производных по y

$$(A_y - \lambda A_x) \partial_y \mathbf{u} = \mathbf{f} - A_x d\mathbf{u} / dx$$

где $\lambda = dy/dx$. Из условия, называемого характеристическим уравнением

$$\det(A_y - \lambda A_x) = 0$$

найдем направления $\lambda = dy/dx$, при которых расширенная система уравнений для определения производных вырождается. По определению исходная система уравнений является гиперболической, если корни характеристического уравнения λ_i вещественны. Соответствующие направления в плоскости (x, y) называют характеристическими, а сами характеристические линии подчинены уравнениям

$$\frac{dy}{dx} = \lambda_i(x, y, \mathbf{u})$$

На характеристических линиях расширенная система уравнений для определения производных вырождается. При этом неоднородная система уравнений с вырожденной матрицей имеет нетривиальное решение, если ранг расширенной матрицы

$$(A_y dx - A_x dy, \mathbf{f} dx - A_x d\mathbf{u})$$

равен $n-1$, где n - число искомых функций. Для этого необходимо,

чтобы определители n -го порядка расширенной системы уравнений были бы равны нулю. Соответствующие равенства носят название соотношений на характеристиках.

2.7.7. Маршевые характеристические методы для стационарных сверхзвуковых течений

В окрестности обтекаемого тела, ограниченной с одной стороны поверхностью тела, а с другой стороны головной ударной волной, сверхзвуковой поток можно рассчитать решая гиперболическую начально-краевую задачу явным шаговым методом по гиперболической координате x , как бы маршируя по координате x в направлении потока, как по времени, откуда и пошло название этой группы методов. Маршевые методы были широко внедрены еще в 60-е годы 20-века для расчета обтекания корпусов ракет и самолетов.

Для начала расчета надо стартовать с некоторого известного решения от границ сверхзвуковой зоны в головной части обтекаемого тела. Расчет продолжается, пока уравнения сохраняют гиперболичность, то есть до кормы, за которой наступает срыв потока и потеря гиперболичности при образовании зон возвратно-циркуляционного течения непосредственно за кормой.

Для реализации начальных условий надо располагать данными о решении в дозвуковой и трансзвуковой зонах головной части. Получение таких стартовых решений затруднено тем, что уравнения газовой динамики для стационарного дозвукового течения принадлежат эллиптическому типу.

Стационарное решение в дозвуковой и трансзвуковой зонах получают, решая вместо стационарной задачи соответствующую нестационарную задачу газовой динамики, решение которой на больших временах стремится к решению стационарной задачи. Поскольку система уравнений газовой динамики для нестационарного течения принадлежит гиперболическому типу, то ее решение получается по явным схемам, в частности тем же методом характеристик. Такой способ решения стационарной задачи называется методом установления. В принципе метод установления можно было бы применить и для определения стационарного течения во всей области течения и около головной части, и около корпуса и за кормой, это, однако, потребовало бы применения очень мощных высокопроизводительных ЭВМ.

Экономичный комплексный метод реализует расчет дозвуковых областей методом установления и, затем, использует полученное решение в качестве начальных данных для быстрых маршевых методов расчета зоны стационарного сверхзвукового течения. Затем к расчету дозвуковых зон в кормовой части опять применяется метод установления. Такая технология расчета позволила получить решение сложных стационарных задач о трехмерных невязких течениях на машинах малой производительности еще в 1960е годы.

2.7.7. Область применимости метода характеристик

Область применимости метода характеристик ограничивается задачами гиперболического типа, к которым относятся нестационарные задачи теории упругости и упругопластичности, задачи о стационарном течении жестко-пластической среды, стационарные сверхзвуковые течения невязкого газа, нестационарные задачи газовой динамики. Метод характеристик нередко включается в качестве составляющей общих методов расчета вязких течений, отвечающей за расчет вспомогательного решения гиперболической части уравнений (без учета вязких членов). Нередко метод характеристик включается в состав других конечно-разностных и конечно-элементных алгоритмов для расчета значений искомых функций на границах.

Следует иметь в виду, что метод характеристик неконсервативен. В двухшаговых схемах предиктор-корректор неконсервативный предиктор часто реализуется методом характеристик, а на корректоре применяются консервативные аппроксимации метода конечных объемов или метода конечных элементов.

2.7.8. Примеры определения характеристик

Пример 2.7.8.1. Рассмотрим нестационарное одномерное течение сжимаемого газа, описываемое следующей системой уравнений гиперболического типа:

$$\partial_t p + u \partial_x p + \rho c^2 \partial_x u = 0$$

$$\rho \partial_t u + \rho u \partial_x u + \partial_x p = 0$$

$$\partial_t \eta + u \partial_x \eta = 0$$

где u - скорость течения, $p = p(\rho, \eta)$ - давление, являющееся

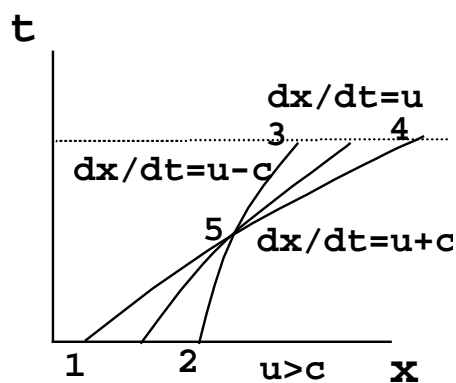
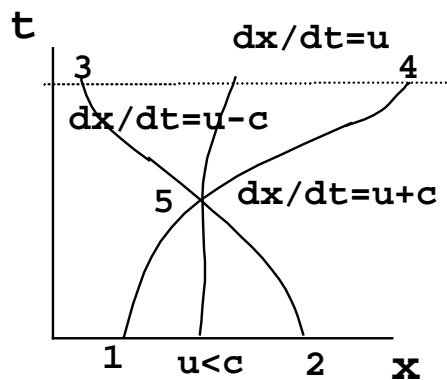
заданной функцией плотности ρ и энтропии η , $c = \sqrt{\gamma p / \rho}$ - скорость звука. Характеристики определяются соотношениями

$$dx/dt = u, \quad dx/dt = u \pm c$$

а решение на характеристиках удовлетворяет характеристическим соотношениям

$$d\eta = 0, \quad dp \pm \rho c du = 0$$

На следующем рисунке показана конфигурация характеристик для дозвукового и сверхзвукового течений



Решение в точке 5 зависит только от решения в области влияния, представленной криволинейным треугольником (1-5-2). Криволинейный треугольник (5-3-4) выделяет область распространения возмущения, приложенного в точке 5.

Пример 4. Рассмотрим двумерное стационарное сверхзвуковое изэнтропическое течение, описываемое уравнениями

$$u \partial_x u + v \partial_y u + c^2 / \rho \partial_x \rho = 0$$

$$u\partial_x v + v\partial_y v + c^2 / \rho \partial_y \rho = 0$$

$$u\partial_x \rho + v\partial_y \rho + \rho \partial_x u + \rho \partial_y v = 0$$

Дополним эти уравнения выражениями дифференциалов искомым функций вдоль искомым характеристик

$$d\rho = \partial_x \rho dx + \partial_y \rho dy$$

$$du = \partial_x u dx + \partial_y u dy$$

$$dv = \partial_x v dx + \partial_y v dy$$

Получаем 6 алгебраических уравнений относительно 6 значений производных по пространственным переменным от искомым функций. Характеристики определяются из условия разрешимости однородной системы уравнений, то есть из условия обращения детерминанта матрицы системы в нуль. Уравнения характеристик и соотношения на характеристиках имеют вид, соответственно

$$\frac{dy}{dx} = \frac{v}{u}$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{uv \pm c\sqrt{u^2 + v^2 - c^2}}{u^2 - c^2}$$

и

$$(u^2 - c^2) \frac{dy}{dx} du + (v^2 - c^2) dv = 0$$

2.8. Расчет сжимаемых течений

Рассмотрим подробнее наиболее распространенные методы расчета сжимаемых течений.

2.8.1. Система уравнений и постановка задачи.

Система уравнений¹ для расчета однокомпонентных сжимаемых течений имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \boldsymbol{\sigma}) &= \rho \mathbf{g} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(\rho E + \boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{q}) &= \rho \gamma \\ \boldsymbol{\sigma} &= -p\mathbf{I} + \lambda_v (\mathbf{e} : \mathbf{I}) + 2\mu_v \mathbf{e} \\ p &= (\gamma - 1)\rho U \\ U &= c_v T \\ E &= U + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} / 2 \\ \mathbf{e} &= (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) / 2 \\ \mathbf{q} &= -k_T \nabla T\end{aligned}$$

где выписаны основные законы сохранения массы, импульса и полной энергии и определяющие соотношения для вязкого теплопроводного газа. Основными искомыми функциями можно выбрать плотность ρ , скорость \mathbf{u} и температуру T . Остальные величины можно найти по основным в любой данный момент времени. Под остальными искомыми величинами подразумеваются внутренняя энергия U , давление p , скорость деформации \mathbf{e} , напряжение $\boldsymbol{\sigma}$, тепловой поток \mathbf{q} . Следующие функции полагаются заданными функциями координат, времени и основных искомым функций: ускорение внешних массовых сил \mathbf{g} , внешние массовые источники тепла γ , коэффициенты динамической вязкости λ_v и μ_v ,

¹ Данная система уравнений называется уравнениями Эйлера в случае идеального газа (вязкие напряжения и теплопроводность отсутствуют) и уравнениями Навье-Стокса сжимаемого газа в противном случае.

коэффициент теплопроводности k_T , показатель адиабаты γ , единичный тензор обозначен \mathbf{I} .

Режим течения определяется следующими параметрами подобия.

- числом Маха, показывающим отношение скорости течения к скорости звука: $M = |\mathbf{u}|/c$, где $c^2 = \gamma(\gamma-1)c_v T$. Течения называются сверхзвуковыми при $M > 1$, дозвуковыми при $M < 1$, трансзвуковыми при наличии в течении дозвуковых и сверхзвуковых зон и гиперзвуковыми при $M \gg 1$.
- числом Рейнольдса, показывающим влияние динамической вязкости: $Re = \rho |\mathbf{u}| L / \mu_v$
- числом Прандтля, характеризующим отношение коэффициентов диффузии для импульса и для тепла: $Pr = \mu_v c_v / k_T$
- показателем адиабаты (отношением удельных теплоемкостей) $\gamma = c_p / c_v$.

Расчет невязких течений проводится по уравнениям с отброшенными диффузионными членами ($\lambda_v = \mu_v = k_T = 0$) и характеризуется только числом Маха и показателем адиабаты.

Влияние внешних массовых сил характеризуется числами Релея, Грасгофа и Фруда, которые будут определены в следующей главе при описании методов расчета несжимаемых термогравитационных течений.

Уравнения невязкого течения называются уравнениями Эйлера, а уравнения для вязких течений. называются уравнениями Навье-Стокса.

2.8.2. Подходы к расчету разрывных течений

Различают следующие типы разрывов. Слабые разрывы это разрывы в производных, в гиперболических задачах они распространяются по характеристикам, в параболических и эллиптических задачах они могут вызываться разрывами в коэффициентах уравнений, граничных и начальных условий.

Сильные разрывы (разрывы функции) с перетоком массы через поверхность разрыва называются ударными волнами (переходами) в отличие от контактных разрывов, распространяющихся вместе со средой. Сильные разрывы могут возникать как вследствие разрывов в начальных и граничных условиях, так и вследствие критических

режимов течения при непрерывных коэффициентах уравнений и условий.

Оценки погрешности численных решений основаны на предположениях о достаточной гладкости решения, поэтому на скачках такие оценки несправедливы. В идеальном алгоритме решения следовало бы применять сеточные методы в областях гладкого решения, а на поверхностях разрыва сопрягать такие решения с использованием соотношений на разрывах. В относительно простых случаях при наличии одной головной ударной волны такой подход к решению удается реализовать.

Однако, в реальных течениях благодаря отражениям и взаимодействию ударных волн число разрывов может быть очень большим и ни одна вычислительная машина не справится с задачей их явного выделения и расчета. Поэтому выделение разрывов в численном решении если и делается, то только для основного разрыва типа головной ударной волны, контактной или межфазной границы. Положение такого основного сильного разрыва определяется с использованием соотношений на скачке, на контактной границе или на фазовом переходе, соответственно. Вторичные ударные волны и контактные разрывы, возникающие при отражениях скачка от границ и при взаимодействии ударных волн между собой, размножаясь создают сложную картину взаимодействующих сильных разрывов, которые уже, как правило, рассчитываются по схемам сквозного счета, в которых сильные разрывы моделируются как узкие зоны больших градиентов решения.

В последнее время появились алгоритмы сквозного счета, реализующие автоматизированное выделение множественных движущихся сильных разрывов, обеспечивающие выполнение условий на скачках и заметно повышающие точность численных решений. Это консервативные схемы расчета на подвижных адаптивных сетках. Они рассматриваются далее в специальной главе.

2.8.3. Схемы с искусственной вязкостью

Схемами сквозного счета называют такие схемы, в которых решение полагается непрерывным и сильные разрывы моделируются как зоны с большими градиентами решения. Такие схемы реализуются с использованием интегральных или вариационных постановок, определяющих слабые или обобщенные решения начально-краевых задач.

Для подавления локальной неустойчивости в зоне больших градиентов обычно вводится дополнительная аппроксимационная (схемы Лакса, Годунова) или явная искусственная (метод крупных частиц) вязкость, играющая роль регуляризатора, то есть добавка к уравнениям, обеспечивающего устойчивость и монотонность (по возможности) решения. Регуляризованные для расчета скачков схемы называются методами улавливания скачков.

В качестве регуляризатора разрывных решений часто используется линейное и/или квадратичное вязкостное давление:

$$p_v = -K_{(1)}[\tau_n \operatorname{div}(\mathbf{u})] + K_{(2)}[\tau_n \operatorname{div}(\mathbf{u})]^2$$

где $K_{(i)}$ положительные функции, зависящие в общем случае от решения. Нередко применяется тензорная вязкость, например:

$$\sigma_v = K_{(3)} \tau_n |\nabla \mathbf{u}| \nabla \mathbf{u}$$

Отметим, что дополнительная вязкость может потребоваться не только на скачках, но и в зонах резкого разрежения. Для корректного расчета ударных волн тепло, генерируемое искусственными вязкими напряжениями

$$Q_* = -p_v \operatorname{div}(\mathbf{u}) + \sigma_v : \nabla \mathbf{u}$$

должно учитываться в балансе энергии, как и то обстоятельство, что присутствие искусственной вязкости влияет на условия устойчивости.

В первых классических методах улавливания скачков диссипативные (вязкие) члены являлись обычно линейными и характеризовались постоянными значениями коэффициентов искусственной вязкости по всей сетке. Такие методы демонстрируют приемлемые по точности результаты только для гладких решений со слабыми скачками, но в присутствии сильных ударных волн дают неудовлетворительные результаты в виде сильно осциллирующих и даже неустойчивых по нелинейности решений. Неустойчивость по нелинейности часто проявляется не только на скачках, но и в сверхзвуковых зонах сильного разрежения, а также в зонах возвратно-циркуляционного течения.

Современные методы улавливания скачков используют нелинейную вязкость, автоматически подстраивающуюся к решению. Первыми в этом направлении явились гибридные схемы, использующие нелинейный переключатель значений коэффициентов вязкости или

даже типа вязкостного регуляризатора в зависимости от режима течения. Типичными переключателями служат число Маха (дозвуковое или сверхзвуковое течение), дивергенция скорости (разрежение или уплотнение), вектор скорости (направление течения) и так далее.

Современные методы улавливания скачков обычно используют разности против потока в отличие от классических методов, использующих центральные разности. Разности против потока лучше передают возмущения вниз по потоку, в то время как центрально-разностные схемы игнорируют это свойство (свойство транспортности) уравнений течения. Исторически первым методом, использующим разности против потока явилась схема метода характеристик Куранта, Изаксона, Риса (1952).

2.8.4. Схема Годунова

Чемпионом по учету физических свойств, заложенных в исходные уравнения газодинамики и по переносу этих свойств в дискретные аналоги уравнений для численного решения является схема Годунова¹ (1959), давшая начало обширному семейству методов конечных объемов, описанию которого посвящено множество книг и статей (подробности можно найти в монографии Куликовского, Погорелова, Семенова, 2001). Популярность схемы Годунова и ее многочисленных модификаций во многом обязана тому, что в отличие от множества других схем она обладает свойством робастности, то есть практически не дает отказов в широком диапазоне входных параметров общей газодинамической задачи.

Подход Годунова к конструированию методов расчета сжимаемых течений включает следующие ключевые составляющие:

консервативная аппроксимация законов сохранения на основе интегральной формулировки в смысле обобщенных решений

Применение интерполяции для описания поведения решения внутри ячеек

Расчет потоков на границах ячеек с использованием точных или приближенных решений задачи Римана о распаде произвольного разрыва

Явное интегрирование по времени по какой-либо из схем Рунге-Кутты

¹ Схема распада разрыва была предложена С.К.Годуновым в 1955 году и первоначально изложена в закрытых отчетах.

Рассмотрим эти составляющие подробнее.

2.8.4.1. Консервативная аппроксимация законов сохранения

В семействе методов Годунова используется следующая интегральная форма закона сохранения:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V^*} Y dV + \int_{V^*} G(Y) dV + \int_{S^*} (\mathbf{F}(Y) + Y(\mathbf{u} - \mathbf{w})) \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

где V^* - ячейка сетки (контрольный объем), Y - консервативная переменная, $G(Y)$ - источник (сток) консервативной переменной, $\mathbf{F}(Y)$ - диффузионный поток консервативной переменной, \mathbf{n} - вектор внешней единичной нормали к границе ячейки, \mathbf{u} - скорость материальной сплошной среды, \mathbf{w} - скорость произвольных подвижных координат (скорость сетки). Обычно интегралы по границе вычисляются на промежуточном временном слое по значениям \tilde{Y} , найденным из задачи Римана о распаде разрыва решения между смежными ячейками.

Простейший вариант метода Годунова на произвольной движущейся сетке получается при аппроксимации искомых функций постоянными по пространству значениями в каждой ячейке и при использовании явной схемы первого точности по времени. Такая простейшая схема Годунова записывается в виде:

$$\frac{(YV)_i^{n+1} - (YV)_i^n}{\Delta t_n} + (G(Y)V)_i^n + \sum_{j=1}^{m(i)} [(\mathbf{F}(Y) + Y(\mathbf{u} - \mathbf{w})) \cdot \mathbf{n} S]_j^{n+1/2} = 0$$

где целый нижний индекс обозначает значение величины в ячейке с этим номером, целый верхний индекс обозначает номер временного слоя, суммирование проводится по граням, ограничивающим ячейку, $m(i)$ - число граней для ячейки i , дробный верхний индекс обозначает значения величин на грани в момент времени $t_n + \Delta t_n / 2$, полученные из решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва искомых функций Y на этой границе между ячейками.

2.8.4.2. Расчет значений на границах ячеек

Реализация формул точного аналитического решения задачи Римана для определения решения и вычисления потоков на границах ячеек связано с большими затратами вычислительной работы. В зависимости от начальных значений решения по обе стороны от произвольного разрыва, общее решение задачи Римана описывается набором элементарных решений, описывающих движущиеся ударные волны и контактные разрывы и волны Римана (слабые разрывы, волны разрежения), разделенные областями с постоянными значениями искомым функций. Для уравнений со сложной физикой, в частности для уравнений, учитывающих влияние электро-магнитных эффектов, фазовых превращений, сложной реологии типа, например, пластичности, аналитическое решение задачи Римана вообще сопряжено с большими трудностями и во многих случаях не найдено. Поэтому предложено большое число вариантов метода Годунова (десятки, если не сотни вариантов), использующих приближенные решения задачи Римана. Так, например, метод Куранта-Изаксона-Ривса (метод КИР, см. Курант, Изаксон, Ривс, 1952; Холодов, 1978) основан на приближенном решении задачи Римана для локально-линеаризованной исходной системы уравнений, состоящем из движущихся разрывов, которые разделяют области с постоянными значениями величин. Метод КИР реализуется для гиперболических систем уравнений, записанных в консервативной, частично-консервативной и неконсервативной формах.

Метод Роу (Roe, 1981) основан на точном решении задачи Римана для специальным образом линеаризованной исходной системы уравнений. Отличие этого решения от используемого в методе КИР состоит в том, что оно точно воспроизводит нелинейное решение задачи Римана для движущегося сильного разрыва.

Метод Ошера (Osher, 1981) основан на приближенном решении задачи Римана в виде комбинаций волн Римана.

Заметим, что различия в модификациях схемы Годунова проявляются только на нелинейных уравнениях. Для линейной системы гиперболических уравнений с постоянными коэффициентами, все модификации схемы Годунова эквивалентны и совпадают с какой-либо из классических схем.

2.8.4.3. Повышение порядка точности

Построение схем высокого порядка точности в методе Годунова достигается путем сочетания использования кусочно-полиномиальной аппроксимации решения внутри ячеек с различными схемами Рунге-Кутты интегрирования по времени. Отметим, что чаще всего используются кусочно-линейная аппроксимация решения по пространству и двухшаговая схема предиктор-корректор интегрирования по времени, обеспечивающие почти второй порядок точности (van Leer, 1984ж Borrel, Montagne, 1985; Родионов, 1987). Запишем общий вид таких схем:

- предиктор реализуется по некоторой обычной конечно-объемной схеме на полшаге по времени:

$$\frac{(YV)_i^{n+1/2} - (YV)_i^n}{\Delta t_n / 2} + (G(Y)V)_i^n + \sum_{j=1}^{m(i)} [(F(Y) + Y(u - w)) \cdot nS]_j^n = 0$$

корректор представляет схему Годунова на полном шаге, в которой полученные на предикторе значения используются в качестве начальных данных для решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва на гранях и последующего вычисления граничных потоков:

$$\frac{(YV)_i^{n+1} - (YV)_i^n}{\Delta t_n} + (G(Y)V)_i^n + \sum_{j=1}^{m(i)} [(F(Y) + Y(u - w)) \cdot nS]_j^{n+1/2} = 0$$

Для дальнейшего повышения порядка точности методов Годунова используются более точные квадратурные формулы при аппроксимации интегралов и многшаговые процедуры Рунге-Кутты интегрирования по времени.

Явные схемы Годунова устойчивы при обычных для явных схем ограничениях шага по времени (ограничение по гиперболичности или КФЛ-условие или условие Куранта, Фридрикса, Леви или просто условие Куранта + диффузионное ограничение для вязких течений).

2.8.4.4. Расчет вязких течений

Метод Годунова предназначен для гиперболических уравнений. Поэтому при решении уравнений с вязкостью, которые являются

параболическими, применяется расщепление по физическим процессам. На первом этапе вычислений каждого шага по времени рассчитывается невязкая гиперболическая часть уравнений по схеме Годунова, а вязкость учитывается отдельно на втором этапе.

2.8.5. Гибридные схемы

Двухслойная монотонная линейная схема имеет вид:

$$Y_i^{n+1} = \sum_{j \in J(i)} \gamma_j Y_j^n, \quad \gamma_j \geq 0$$

где $J(i)$ – множество номеров узлов, образующих шаблон для аппроксимации уравнения в узле i (множество соседей узла i). В монотонной схеме при $\delta Y_j^n \geq 0$ ($j \in J(i)$) выполняется условие $\delta Y_i^{n+1} \geq 0$. Типичным примером монотонной схемы служит схема с разностями против потока для уравнения переноса

$$Y_i^{n+1} = (1 - C)Y_i^n + CY_{i-1}^n, \quad C = \Delta t U / h$$

имеющая первый порядок точности. Годуновым (1959) было показано, что не существует линейных двухслойных схем второго порядка точности, обеспечивающих монотонное изменение решения. Примером немонотонной схемы может служить двухслойная одношаговая схема Лакса-Вендроффа

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n - C/2(Y_{i+1}^n - Y_{i-1}^n) + C^2/2(Y_{i+1}^n - 2Y_i^n + Y_{i-1}^n)$$

или

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n(1 - C^2) + C/2(C - 1)Y_{i+1}^n + C/2(C + 1)Y_{i-1}^n$$

имеющая второй порядок точности. Эта схема устойчива при $C < 1$, но немонотонна, то есть допускает образование нефизических осцилляций решения вблизи разрывов.

Для устранения нефизических осцилляций в схемах высокого порядка точности необходимо использовать нелинейную вязкость, зависящую от поведения решения. Заметим, что схемы Годунова повышенного порядка точности, использующие приближенные решения задачи о распаде разрыва также страдают от

немонотонного поведения решений вблизи разрывов и нуждаются в специальных мерах по монотонизации.

Первыми нелинейными схемами явились “гибридные схемы”, которые образуются при сложении с весом (с параметром гибридности) монотонной схемы первого порядка и немонотонной схемы повышенного порядка точности типа схемы Лакса-Вендроффа. Например, складывая записанные выше схемы первого и второго порядков точности с весом $0 \leq \gamma \leq 1$, получаем простейшую гибридную схему квазивторого порядка точности:

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n [(1-C)\gamma + (1-C^2)(1-\gamma)] + \\ + C/2(C-1)Y_{i+1}^n(1-\gamma) + [(1-\gamma)C/2(C+1) + \gamma C]Y_{i-1}^n$$

которая при $\gamma = 0$ имеет второй порядок точности и немонотонна, а при $\gamma = 1$ имеет первый порядок точности и монотонна. В области мало меняющегося решения применяют схему второго порядка, а в зоне больших градиентов переходят на схему первого порядка. В первых схемах гибридизация проводилась формальными полуэмпирическими способами без учета характеристических свойств гиперболических систем уравнений. В дальнейшем отбор областей гладкости и областей с большими изменениями решения был увязан с поведением собственных чисел и инвариантов Римана для линеаризованной системы уравнений или с физическими характеристиками типа течения. Например, различные значения параметра гибридности принимаются в зонах сжатия/разрежения, в дозвуковых/сверхзвуковых зонах, в зависимости от величины компонентов тензора градиентов скорости (в погранслоях) и так далее. Подробный анализ гибридных схем можно найти в монографии Куликовского, Погорелова, Семенова (2001).

2.8.6. Схемы коррекции потоков

Для отдельного этапа учета процессов переноса был разработан специальный метод коррекции потоков (FCT – flux correction technique; Boris, Book, 1973). Этот метод является двухшаговым гибридным методом вида

$$gS_1 + (1-g)S_2 = S_1 + (1-g)(S_2 - S_1)$$

2.8.7. Схемы уравновешенной вязкости

2.8.8. Схемы экспоненциальной подгонки для погранслоев

За основу оригинальной схемы экспоненциальной подгонки, предложенной А.А.Самарским, берется схема с направленными разностями первого порядка точности, в которой для того, чтобы уменьшить сильную диффузию, присущую этой схеме, корректируется (уменьшается) физическая вязкость. В результате схема сохраняет свойство монотонности и дает лучшее описание зон больших градиентов в пограничных слоях.

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{A_i^n - A_{i-1}^n}{2h} = \alpha \frac{1}{1 + \alpha_* / \alpha} \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

где $\alpha_* = 0.5|u|h$. Вместо физической вязкости в расчете используется скорректированная («подогнанная») вязкость

$$\alpha_{\text{соп}} = \alpha \frac{1}{1 + \alpha_* / \alpha}$$

Идея Самарского развита в семействе схем экспоненциальной подгонки. Пример скорректированной вязкости метода экспоненциальной подгонки дается выражением

$$\alpha_{\text{соп}} = \alpha \frac{Uh}{2\alpha} \operatorname{cth} \left(\frac{Uh}{2\alpha} \right) \cong \alpha \left[1 + \frac{1}{3} \left(\frac{\alpha_*}{\alpha} \right)^2 - \frac{1}{45} \left(\frac{\alpha_*}{\alpha} \right)^4 + \dots \right]$$

2.8.9. Применение неявных схем.

2.8.10. Описание стандартных тестовых задач

2.9. Расчет несжимаемых вязких/невязких течений

2.9.1. Формулировка начально-краевой задачи

2.9.1.1. Переменные скорость-давление

Трёхмерные течения. В переменных скорость-давление (или, как говорят, в примитивных переменных) несжимаемые вязкие течения описываются следующей системой дифференциальных уравнений Навье-Стокса, содержащих уравнение неразрывности (имеющее в данном случае вид условия несжимаемости), уравнение движения, уравнение распространения тепла и уравнение переноса примеси

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \rho(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) &= \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_v) + \rho \mathbf{g} \\ \rho c_v (\partial_t T + \mathbf{u} \cdot \nabla T) &= \nabla \cdot [k_T \nabla T] + \rho r_T \\ \partial_t C + \mathbf{u} \cdot \nabla C &= \nabla \cdot [v_C \nabla C] + r_C\end{aligned}$$

где \mathbf{u} - скорость, ρ - плотность, p - давление, $\boldsymbol{\sigma}_v$ - тензор вязких напряжений, \mathbf{I} - тензорная единица, \mathbf{g} - ускорение, вызванное массовыми силами, T - температура, C - концентрация примеси, r_T - массовый источник/сток тепла, r_C - массовый источник примеси, $k_T(T)$ - коэффициент теплопроводности, v_C - коэффициент диффузии примеси. Выписанная система уравнений замыкается определяющими соотношениями, выражающими ньютоновский закон вязкого трения

$$\boldsymbol{\sigma}_v = \lambda_v (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu_v (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$$

где λ_v и μ_v - коэффициенты вязкости. Для несжимаемой жидкости второй коэффициент вязкости λ_v значения не имеет. Для учета эффектов гравитационной конвекции, вызванных изменением плотности из-за изменений температуры и примеси в выражении для внешних сил используется соотношение слабой сжимаемости

$$\rho = \rho_0 (1 + \beta_T (T - T_0) + \beta_C (C - C_0))$$

где $\rho_0 = \text{const}$ - плотность несжимаемой жидкости, β_T и β_C -

коэффициенты, определяющие влияние изменений температуры и примеси на плотность, то есть определяющие силы плавучести, благодаря которым более холодная и более соленая жидкость является более тяжелой. Уравнения Навье-Стокса, записанные с использованием предположения о слабой сжимаемости, называются уравнениями Навье-Стокса-Буссинеска.

В случае электропроводящей жидкости в систему уравнений включаются уравнения Максвелла для электромагнитного поля. Соответствующая формулировка рассматривается отдельно далее. Система уравнений для несжимаемых течений дополняется начальными

$$t = 0, \mathbf{x} \in V: \mathbf{u} = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), T = T_0(\mathbf{x}), C = C_0(\mathbf{x})$$

и граничными условиями

$$t > 0, \mathbf{x} \in S_u: \mathbf{u} = \mathbf{u}_*(\mathbf{x}, t)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S \setminus S_u: \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\sigma}_{n*}(\mathbf{x}, t)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S_T: T = T_*(\mathbf{x}, t)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S \setminus S_T: k \nabla T \cdot \mathbf{n} = q_{n*}(\mathbf{x}, t, T)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S_C: C = C_*(\mathbf{x}, t)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S \setminus S_C: k_C \nabla C \cdot \mathbf{n} = q_{C*}(\mathbf{x}, t, C)$$

Конечно, приведенные условия не охватывают все возможные случаи, в частности, условия на контактных и межфазных границах, которые рассматриваются далее отдельно.

Двумерные плоские и осесимметричные течения. Обозначим пространственные переменные, используемые для описания двумерного течения, буквами r и z . Третью редуцированную пространственную переменную назовем θ . Для плоских течений это декартова координата, для осесимметричных это окружная координата. В осесимметричных течениях помимо осевой w и радиальной u скоростей отличной от нуля является окружная скорость закрученного потока v .

Введем параметр типа геометрии α , равный нулю для плоского и единице для осесимметричного течения. Уравнения в примитивных переменных имеют вид:

Уравнение неразрывности

$$\frac{\partial u}{\partial r} + \alpha \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

Уравнения движения

$$\rho \left(\frac{du}{dt} - \alpha \frac{v^2}{r} \right) = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_r) + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} - \alpha \frac{\sigma_\theta}{r}$$

$$\rho \left(\frac{dw}{dt} + g(\beta_T(T - T_0) + \beta_C(C - C_0)) \right) = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_{rz}) + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z}$$

$$\rho \left(\frac{dv}{dt} + \alpha \frac{uv}{r} \right) = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_{r\theta}) + \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial z} + \alpha \frac{\sigma_{r\theta}}{r}$$

где оператор материальной производной имеет вид

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial r} + w \frac{\partial}{\partial z}$$

Напряжения в ньютоновской жидкости определяются так

$$\sigma_r = 2\rho\nu \frac{\partial u}{\partial r} - p, \quad \sigma_\theta = 2\rho\nu\alpha \frac{u}{r} - p, \quad \sigma_z = 2\rho\nu \frac{\partial w}{\partial z} - p,$$

$$\sigma_{rz} = \rho\nu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right)$$

$$\sigma_{r\theta} = \alpha\rho\nu \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right), \quad \sigma_{z\theta} = \alpha\rho\nu \frac{\partial v}{\partial z}$$

После подстановки выражений для напряжений, уравнения движения принимают вид:

$$\frac{du}{dt} - \alpha \frac{v^2}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \nu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \alpha \nu \frac{u}{r^2}$$

$$\frac{dw}{dt} + g\beta(T - T_0) + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial z} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \nu \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

$$\frac{dv}{dt} + \alpha \frac{uv}{r} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \nu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \alpha \nu \frac{v}{r^2}$$

Уравнение теплопередачи и переноса примеси имеют вид:

$$c_v \frac{dT}{dt} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \nu_T \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_T \frac{\partial T}{\partial z} \right) + r_T$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \nu_C \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_C \frac{\partial C}{\partial z} \right) + r_C$$

2.9.1.2. Переменные функция тока-завихренность.

В этой формулировке скорость \mathbf{u} определяется через векторную функцию тока Ψ

$$\mathbf{u} = \nabla \times \Psi$$

благодаря чему уравнение неразрывности, которое в данном случае выражает условие несжимаемости, удовлетворяется тождественно. Уравнения для функции тока и вихря. Определение вихря

$$\nabla \times \mathbf{u} = \boldsymbol{\omega}$$

и уравнение движения через функцию тока и вихрь записываются в виде

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times (\nabla \times \Psi)$$
$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \mathbf{u} = \nabla \cdot (\nu_v \nabla \boldsymbol{\omega}) + \nabla \times (\rho \mathbf{g} / \rho_0)$$

где $\nu_v = \mu_v / \rho_0$ - кинематическая вязкость. Эти два уравнения используются в этой формулировке вместо уравнения неразрывности и уравнения движения. Заметим, что давление в данной формулировке не входит в разрешающую систему уравнений для функции тока и вихря.

Граничные условия для функции тока и вихря имеют вид ограничений на значения этих функций или их нормальных к границе производных. Эти условия должны быть согласованы с распределением граничных скоростей

$$\nabla \times \Psi^* = \mathbf{u}^*$$

и представляют затруднение данной формулировки, поскольку не существует единого подхода к записи таких граничных условий, она всегда является приближенной. Конкретные варианты граничных условий рассматриваются далее на частных примерах.

Уравнение для давления. Для определения давления из уравнений движения с учетом уравнения неразрывности выводится отдельное уравнение, имеющее вид уравнения Пуассона и получаемое скалярным умножением уравнения движения на оператор пространственного дифференцирования

$$\nabla^2 p = -\rho_0 \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\nabla \cdot (\mu_v \nabla \mathbf{u})) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{g})$$

при этом граничные условия для давления на той части границы, где оно неизвестно, определяются проектированием (скалярным умножением) векторного уравнения движения на нормаль к границе

$$\mathbf{n} \cdot \nabla p = \mathbf{n} \cdot [-\rho(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_v) + \rho \mathbf{g}]$$

Плотность в несжимаемом течении. Подстановка условия несжимаемости в уравнение закона сохранения массы дает для плотности несжимаемой среды транспортное уравнение

$$\partial_t \rho + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0$$

В случае приближения Буссинеска (слабая сжимаемость) в транспортном уравнении для плотности имеет смысл использовать индекс нулик, чтобы поддержать принятые обозначения. Транспортное уравнение показывает, что значение плотности несжимаемой среды постоянно вдоль лагранжевых траекторий или траекторий материальных частиц. Обычно постоянные значения плотности принимаются для всего объема занятой несжимаемой средой. Однако, при рассмотрении многофазных несмешивающихся сред плотность несжимаемой среды может иметь разные значения для различных фаз. В этом случае для расчета движения фаз и идентификации их взаимного положения в рамках континуальной модели необходимо интегрировать транспортное уравнение и отслеживать межфазные подвижные границы. Соответствующие методы рассматриваются далее в разделе про контактные алгоритмы.

Уравнения для двумерных плоских и осесимметричных течений в переменных функция тока - завихренность.

В случае двумерных течений отличными от нуля являются только один компонент вихря

$$\omega_\theta = \omega = \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial r}$$

называемый завихренностью, и один компонент функции тока

$\Phi_\theta = \Phi$, с помощью которого определяются компоненты скорости

$$u_r = u = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad \text{и} \quad u_z = w = -\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial \Phi}{\partial r}$$

так, что уравнение неразрывности удовлетворяется тождественно. Будучи подставленными в определение завихренности, выражения для скоростей дают уравнение для функции тока

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = \omega$$

Уравнение завихренности имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} - \alpha \frac{\omega u}{r^\alpha} - \alpha \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{v^2}{r^\alpha} \right) - g\beta \frac{\partial T}{\partial r} = \\ = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(v r^\alpha \frac{\partial \omega}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial \omega}{\partial z} \right) - \alpha v \frac{\omega}{r^2} \end{aligned}$$

Другой способ определения функции тока имеет вид:

$$\psi = \varphi / r^\alpha$$

тогда скорости определяются соотношениями

$$u_r = u = \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad \text{и} \quad u_z = w = -\frac{\partial \psi}{\partial r} - \alpha \frac{\psi}{r}$$

и уравнение функции тока выглядит так

$$\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \alpha \frac{\psi}{r^2} = \omega$$

2.9.2. Методы в переменных функция тока – завихренность

2.9.2.1. Метод дискретных вихрей

Двумерные течения. Метод дискретных вихрей для расчета двумерных несжимаемых нестационарных течений идеальной (невязкой) среды, рассматривался многими авторами (Розенхед (1931), С. Белоцерковский, Ништ(1978) и др.). В основе метода лежит представление поля скоростей течения суперпозицией (наложением) потоков, обусловленных движущимися вместе с этим течением дискретными вихрями. Для невязкого течения

завихренность подчиняется транспортному уравнению

$$\frac{d\omega}{dt} = 0$$

что означает сохранение завихренности вдоль траекторий движения материальных частиц и, соответственно, сохранение интенсивности дискретных вихрей вдоль траекторий $\mathbf{x}_i = \overset{\circ}{\mathbf{x}}_i(\mathbf{x}_i, t)$, определяемых уравнениями

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_i, t), \quad \mathbf{x}_i|_{t=0} = \overset{\circ}{\mathbf{x}}_i$$

Суммарное поле скоростей $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, создаваемое дискретными вихрями, описывается функцией тока

$$\phi = -\frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N k_i \ln[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2]$$

где поле скоростей от отдельного дискретного вихря бесконечного размаха (по z) интенсивности (напряженности, циркуляции) k_i , расположенного в точке (x_i, y_i) характеризуется функцией тока

$$\phi_i = -\frac{1}{2\pi} k_i \ln r = -\frac{1}{4\pi} k_i \ln[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2]$$

Таким образом, суммарное поле скоростей определяется формулами

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} = u_x(\mathbf{x}_i, t) &= \frac{\partial \phi}{\partial y} = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N k_i \frac{(y_j - y_i)}{r_{i,j}^2} \\ \frac{dy_i}{dt} = u_y(\mathbf{x}_i, t) &= -\frac{\partial \phi}{\partial x} = +\frac{1}{2\pi} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N k_i \frac{(x_j - x_i)}{r_{i,j}^2} \end{aligned}$$

где

$$r_{i,j} = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$$

Интегрирование уравнений лагранжевых траекторий позволяет проследить движение дискретных вихрей и эволюцию поля

скоростей.

Трехмерные течения.

[1] Leonard A. Computing three-dimensional incompressible flows with vortex filaments. *Annu Rev Fluid Mech* 1985;17:523–59.

[2] Beale JT, Majda A. Higher order accurate vortex methods with explicit velocity kernels. *J Comput Phys* 1985;58:188–208.

[3] Hess JL. Calculation of potential flow about arbitrary three-dimensional lifting bodies. McDonnell Douglas Rep., MDC J5679-01 1972.

В методе дискретных вихрей имеются следующие трудности:

1) система дифференциальных уравнений по времени недостаточно устойчива из-за сингулярности полей скорости точечных вихрей..

2) в исходном варианте методе не учитываются какие-либо граничные условия, то есть твердые границы отсутствуют.

Проблема недостаточной устойчивости уравнений движения свободных точечных вихрей устраняется (Чорин и Бернар, 1973) заменой точечных дискретных вихрей вихрями малого, но конечного радиуса δ

$$\varphi_i = -\frac{1}{2\pi} k_i \ln r \quad \text{для } |r| \geq \delta$$

$$\varphi_i = -\frac{1}{2\pi} k_i \frac{r}{\delta} \quad \text{для } |r| < \delta$$

Учет твердых границ. Принципы учета твердых границ пока до конца неясны. Для имитации твердых границ используются присоединенные вихри, движущиеся или покоящиеся вместе с границей. Для вязких течений твердые границы являются источником завихренности.

Метод отражения. В этом методе условие непротекания на твердой границе обеспечивается путем введения в рассмотрение зеркально отображенных относительно граничной плоскости вихрей равнопротивоположной циркуляции

Панельный метод. Панельный метод расчета течений с твердыми границами использует теорему Грина и метод граничных интегральных уравнений. Важной чертой метода является введение расчета вихревой пелены в зоне отрыва потока от обтекаемого тела. Вихревая пелена вводится в расчет в рамках модели потенциального вихревого течения как поверхность разрыва функции потенциала и ее можно интерпретировать как подвижную поверхность, несущую

поверхностную завихренность. Интенсивность вихревой пелены определяется так называемым условием Кутта-Жуковского, которое определяет скорость, с которой поверхностная завихренность высвобождается в поток с острых кромок поверхности обтекаемого тела..

Варианты метода дискретных вихрей для вязких течени:

[5] Chorin AJ. Numerical study of slightly viscous flow. J Fluid Mech 1973;57:785–96.

[6] Choquin JP, Huberson S. Particle simulation of viscous flows. Comput Fluids 1988;2:397–410.

[7] Cottet GH, Mas-Gallic S. A particle method to solve the Navier–Stokes system. Numer Math 1990;57:805–27.

[8] Koumoutsakos P, Leonard A. Highresolution simulations of the flow around an impulsively started cylinder using vortex methods. J Fluid Mech 1985;296:1–38.

Вопросы сходимости.

[12] Hald O, Mauceri del Prete V. Convergence of vortex methods for Euler's equations. Maths Comp 1979;32:791–809.

[13] Beale JT, Majda A. Vortex methods I, II. Math Comput 1982;39:1–27, and 29–52.

[16] Caish R, Lowengrub J. Convergence of the vortex method for vortex sheets. SIAM J Numer Anal 1989;26:1060–80.

[28] Cottet GH. Convergence of a vortex in cell method for the two-dimensional Euler equations. Math Comp 1987;49:407.

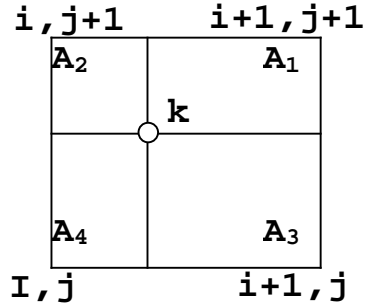
2.9.2.2. Метод "Облако в ячейке"

Применение метода дискретных вихрей осложняется с одной стороны источниками сингулярности, с другой стороны необходимостью использовать большое число дискретных вихрей для достижения достаточной точности. Подход, который заимствует лучшие черты метода дискретных вихрей и методов, использующих формулировку "функция тока - завихренность", предложен Робертсом и Кристиансенем (Roberts and Christiansen, 1972). В этом методе, называемом схемой "облака в ячейке", интегрируется уравнение траектории движения каждого дискретного вихря, то есть

$$\frac{dx_k}{dt} = \mathbf{u}_k$$

скорости вычисляются по значениям функции тока, которая в отличие от метода дискретных вихрей определяется не путем суммирования (наложения, суперпозиции) вкладов от отдельных дискретных вихрей, а из решения уравнения для функции тока с использованием сеточной функции завихренности, определенной путем осреднения вкладов дискретных вихрей по ячейке сетки.

Сетка должна покрывать область движения дискретных вихрей. Вклады дискретного вихря расположенного в точке x_k, y_k , в значение завихренности в узлах прямоугольной ячейки (i, j) , в которой он находится (см. рисунок),



определяются следующими интерполяционными формулами, использующими площадные координаты $\Delta\omega_{i,j} = \Omega_k A_1 / A$, $\Delta\omega_{i+1,j} = \Omega_k A_2 / A$, $\Delta\omega_{i,j+1} = \Omega_k A_3 / A$, $\Delta\omega_{i+1,j+1} = \Omega_k A_4 / A$, где $A = A_1 + A_2 + A_3 + A_4$.

После учета вкладов всех дискретных вихрей завихренность оказывается определенной во всех узлах сетки и функция тока может быть найдена из уравнения

$$\nabla^2 \Psi + \omega = 0$$

любым из множества имеющихся численных методов. Затем определяется поле скоростей и для каждого дискретного вихря определяется его скорость

$$\mathbf{u}_k = (A_1 \mathbf{u}_{i,j} + A_2 \mathbf{u}_{i+1,j} + A_3 \mathbf{u}_{i,j+1} + A_4 \mathbf{u}_{i+1,j+1}) / A$$

и далее интегрированием по времени уравнения траекторий вихрей определяются их новые положения. Этот метод был успешно применен и оказался значительно более эффективным, нежели метод дискретных вихрей (при числе вихрей 1000 наблюдался выигрыш в объеме вычислений в 20 раз (Christiansen 1973; Milinazzo, Saffman, 1977)).

2.9.3. Методы в переменных скорость-давление.

2.9.3.1. Методы искусственной сжимаемости.

Заметим, что дивергенция скорости $\nabla \cdot \mathbf{u}$ является шаровой составляющей тензора скорости деформации, она положительна в зонах разрежения и отрицательна в зонах всестороннего сжатия. В несжимаемой среде дивергенция скорости должна обращаться в нуль.

Методы искусственной сжимаемости для расчета несжимаемых течений дают приближенное решение с не равной нулю, но близкой к нулю дивергенцией скорости.

Метод Чорина. В работе (Chorin, 1967) условие несжимаемости было заменено условием слабой сжимаемости

$$\partial_t p + \rho_0 c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

где c - фиктивная скорость звука. Такая замена придает уравнениям несжимаемых течений при отсутствии вязкости свойство гиперболичности. Для установившегося течения условие несжимаемости выполняется в методе Чорина точно. Метод дает приемлемые результаты при $t \gg L/c$, где L - характерный пространственный размер области решения, L/c - время пробега слабого возмущения по области решения.

Метод Владимировой-Ладыженской-Яненко (основан на представлении закона искусственной сжимаемости в виде

$$p + \rho_0 c^2 \tau_0 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

где τ_0 - постоянная, имеющая размерность времени. Дивергенция скорости в этом методе стремится к нулю с увеличением коэффициента $\rho_0 c^2 \tau_0$. Практически это означает, что фиктивная скорость звука должна быть много больше максимальной скорости рассматриваемого несжимаемого течения ($c^2 \gg \max |\mathbf{u}|^2$). К сожалению, обусловленность задачи при этом ухудшается.

Замечание. С позиций вариационного исчисления оба рассмотренных выше метода можно вывести как варианты методов множителей Лагранжа и штрафных функций, если уравнение движения записать в виде вариационного уравнения виртуальных работ

$$\int_V (\rho_0 (\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{u} + (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_v) : \nabla \delta \mathbf{u} - \rho \mathbf{g} \cdot \delta \mathbf{u}) dV =$$

$$= \int_{S_u} \mathbf{n} \cdot (-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_v) \cdot \delta \mathbf{u} dS$$

а условие несжимаемости

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

рассматривать как ограничение, для которого давление играет роль множителя Лагранжа.

Замечание. При практической реализации в оба уравнения искусственной сжимаемости имеет смысл ввести малый эллиптический член со второй производной от давления, что позволяет улучшить обусловленность дискретных уравнений и получить гладкие распределения давления без счетных осцилляций. Методы искусственной сжимаемости сводят исходную задачу о течениях несжимаемой жидкости к задаче расчета сжимаемых дозвуковых течений.

2.9.3.2. Метод коррекции давления.

Варианты метода коррекции давления (pressure correction method, projection method) были предложены в работах (Chorin, 1968), (Temam, 1969), (Fortin, 1971), (Гушин, Щенников, 1974). Он может рассматриваться также как метод расщепления по физическим процессам или метод дробных шагов (fractional step method) и реализуется на каждом шаге по времени в три этапа.

1-й этап. Определение новой скорости без учета давления:

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t_n} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_v}{\rho_0} \nabla \mathbf{u}^n \right) + \frac{\rho^n}{\rho_0} \mathbf{g}^n$$

где (важно!) на скорость $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ главные (в смысле вариационного исчисления) граничные условия не накладываются (то есть, другими словами, на 1-м этапе кинематические условия игнорируются). Поэтому новая скорость с тильдой это просто обозначение суммы всех членов уравнения движения за исключением градиента давления.

При записи аппроксимаций уравнения 1-го этапа в граничных ячейках ограничения на касательные внешние силы на границах области решения, то есть условия трения

$$x \in S \setminus S_{\alpha\alpha} : \quad (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha = p_{\alpha\alpha}^*(x, t, \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha)$$

должны быть учтены. Здесь $\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau}_\alpha (\alpha=1,2)$ - единичные векторы нормали и касательных к границе, $p_{\alpha\alpha}^*$ - заданные функции, определяющие силы трения на границе. Проще всего эти условия учитываются при формировании дискретных аналогов вариационного уравнения движения (уравнения виртуальных работ):

$$\begin{aligned} \int_V \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t_n} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n - \frac{\rho^n}{\rho_0} \mathbf{g}^n \right) \delta \mathbf{u} dV + \int_V \frac{\mu_V}{\rho_0} \nabla \mathbf{u}^n : \nabla \delta \mathbf{u} dV = \\ = \int_S (\mathbf{n} \cdot (\frac{\mu_V}{\rho_0} \nabla \mathbf{u}^n)) \cdot \mathbf{n} (\delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS + \sum_{\alpha=1}^2 \int_S p_{\alpha\alpha}^* (\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha) dS \end{aligned}$$

где первый интеграл в правой части полагается равным нулю, что означает пренебрежение нормальной производной от нормальной к границе скорости ("мягкие" граничные условия)¹ на тех участках границы, где задано давление. На остальных участках этот интеграл также равен нулю, так как если давление не задано, то задается либо сама нормальная скорость или опять "мягкие" граничные условия.

2-й этап. На 2-м этапе решается краевая задача для уравнения Пуассона: для давления

$$\frac{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\Delta t_n} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_0} \nabla p^{n+1} \right)$$

с учетом главных граничных условий для давления (если давление задано на какой-то части границы $S_p \subset S$)

¹ Равенство нулю нормальных производных от искомым функций представляет распространенный простейший вариант так называемых **"мягких" граничных условий**, утверждающих, что функция при переходе через границу сохраняет свое значение. В вариационных схемах это условие в свою очередь выполняется приближенно (формулировка обобщенного решения), что делает его "еще более мягким". Мягкие граничные условия применяются на искусственных границах, проведенных мысленно по сплошной среде, для продолжения решения через такие границы и для имитации неотражающих условий, пропускающих возмущения и не производящих новых возмущений.

$$x \in S_p : \quad p^{n+1} = p^*$$

и естественных граничных условий для давления, получаемых проектированием уравнения движения на нормаль к границе. При этом проектируется уравнение движения в форме, записанной далее для третьего этапа,

$$x \in S \setminus S_p : \quad \mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1} = \rho_0 \frac{(\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}) \cdot \mathbf{n}}{\Delta t_n}$$

и учитывается, что для той части границы, где давление неизвестно, задается нормальная проекция граничной скорости:

$$x \in S \setminus S_p = S_{un} : \quad \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{n} = u_n^*$$

3-й этап. На 3-м этапе определяется новая скорость, удовлетворяющая условию несжимаемости и граничным условиям. Для этого используется уравнение движения

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\Delta t_n} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p^{n+1}$$

и учитываются главные (кинематические) граничные условия.

Замечание. Уравнения 1-го и 3-го этапов в сумме составляют аппроксимацию уравнений движения. Уравнение 2-го этапа является результатом скалярного умножения уравнения 3-го этапа на оператор пространственного дифференцирования с учетом условия несжимаемости $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$.

Очевидно, имеется бесконечное множество способов дискретизации уравнений метода коррекции давления.

2.9.3.3. Метод штрафных функций

2.9.4. Расчет течений многокомпонентной смеси

2.9.5. Учет гравитационного и электро-магнитного полей

2.9.6 Расчет турбулентных течений

2.9.6.1. Эмпирические модели турбулентности

2.9.6.2. Теория Рейнольдса осредненного течения

2.9.6.3. Модель крупных Эдди-вихрей

2.9.6.4. Прямое моделирование турбулентности.

2.9.7. Описание стандартных тестовых задач

2.10. Лагранжевы методы для задач упругопластичности

2.10.1. Формулировка задач упругопластичности

2.10.2. Явные схемы

2.10.3. Неявные схемы

2.10.4. Расчет контакта деформируемых тел.

2.10.5. Расчет тонкостенных конструкций.

2.10.6. Расчет составных конструкций

2.10.7. Расчет процессов разрушения

2.10.8. Описание стандартных тестовых задач

2.11. Расчет свободных и межфазных границ

2.11.1. Расчет течений мелкой воды

2.11.1.1. Формулировка начально-краевой задачи

2.11.1.2. Методы расчета

2.11.2. Метод произвольно подвижных координат

2.11.3. Методы маркеров и ячеек.

2.11.4. Методы непрерывного маркера.

2.11.5. Сквозной расчет межфазных границ

2.11.6. Метод свободных точек. Методика “Медуза”

2.11.7. Метод фиктивных областей

2.11.8 Метод перекрывающихся сеток

2.11.9. Многосеточные методы

2.11.10. Консервативность и сглаживание

2.11.11. Спектральные методы

2.11.12. Бессеточные методы Галеркина

2.11.13. SPH - метод

Гидродинамический метод гладких частиц (SPH - Smoothed particle hydrodynamics)¹ является полностью лагранжевым методом частиц

¹ R. A. Gingold and J. J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics—Theory and application to nonspherical stars, Mon. Not. R. Astron. Soc. **181**, 375 (1977).

используемым для описания гидродинамических явлений. Дагранжевы методы частиц разработаны для задач гидродинамики с областями решения, имеющими переменную связность и подвижные границы. Такие задачи возникают в инженерной практике, в гео и астрофизике. Множество астрофизических задач решено с помощью SPH - метода благодаря простоте его реализации для 2х и 3х мерных задач и легкостью учета таких эффектов как взаимное гравитационное взаимодействие частиц, радиационный теплообмен и химические реакции. Широкое обсуждение метода можно найти в обзоре Монагана (Monaghan)¹. Впрочем, inconsistency метода была подчеркнута Dilts [3, 4], который модифицировал метод путем moving-least-squares базисных функций для получения точных производных независимо от позиций SPH частиц. Другой слабостью метода является его бедное описание сильных ударных волн. В двумерных и трехмерных вычислениях сталкивающихся газов, частицы часто проникают через мекфазную границу. Этот нефизичный эффект может быть частично устранен в методе XSPH [17] который не вносит требующуюся дополнительную диссипацию, но вводит дополнительную дисперсию волн. Поэтому весьма желательно, построить метод который является простым и способным описать сильные ударные волны точно. В статье Inutsuka предложен новый метод для расчета ударных волн в рамках гидродинамического метода частиц. Сила действующая на каждую частицу определена путем решения задачи Римана. Решение Римана учтено по аналогии с сеточным методом [6]. В предшествующих попытках учета решения задачи Римана в гидродинамические методы частиц не удавалось обеспечить точную консервативную форму [9, 10].

Альтернативным подходом к включению небольшой но достаточной диссипации в численное решение является подбор хорошего ограничителя потоков для переключения более и менее диссипативного метода [5, 21]. В принципе, впрочем, переключатель является всегда индивидуальным для каждой схемы и его обсуждение выходит за рамки данного рассмотрения. Реализация решения задачи Римана аналогична сеточной схеме Годунова второго порядка точности [24]. (далее по 75310647.pdf)
Формулировка задачи. Рассматривается течение идеального газа

Shu-ichiro Inutsuka, Reformulation of Smoothed Particle Hydrodynamics with Riemann Solver // *Journal of Computational Physics* **179**, 238–267 (2002)

¹ J. J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **30**, 543 (1992).

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad (2)$$

$$\frac{dU}{dt} = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (3)$$

$$p = (\gamma - 1)\rho U \quad (4)$$

где U - удельная внутренняя энергия, γ - отношение теплоемкостей, остальные обозначения традиционны.

В стандартном SPH методе каждая частица имеет свою массу m_i и плотность в окрестности частицы определяется соотношением

$$\rho_i = \sum_{j \in \omega_i} m_j W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \quad (5)$$

где W - нормированная сферически симметричная функция ядра (ядро)

$$W(\mathbf{x}, h) = W(-\mathbf{x}, h) \quad (6)$$

$$\int W(\mathbf{x}, h) d\mathbf{x} = 1 \quad (7)$$

и h является параметром ядра. Для дальнейшего определяется также эффективный радиус ядра

$$h_{eff}^2 = \int |\mathbf{x}|^2 W(\mathbf{x}, h) d\mathbf{x} \quad (8)$$

Хотя имеется много определений ядра, здесь используется Гауссово ядро:

$$W(\mathbf{x}, h) = \left[\frac{1}{h\sqrt{\pi}} \right]^d e^{-|\mathbf{x}|^2/h^2} \quad (9)$$

где d - число пространственных координат, h называется радиусом сглаживания. Для Гауссова ядра $h = h_{eff}$ и принимается постоянной,

если не оговорено противного. В общем случае радиус сглаживания может быть переменным.

Стандартный вывод эволюционных уравнений SPH метода описан в [18]. Здесь эволюционные уравнения выводятся непосредственно из исходных дифференциальных уравнений. Ключевая идея вывода состоит в следующем. В общем случае любой метод вычислительной механики дает приближенное решение исходных уравнений. Поэтому существенными характеристиками любого такого метода являются источники ошибок получаемых численных решений. Например, в сеточных методах источниками ошибок являются усеченные¹ ряды Тейлора, используемые при выводе разностных соотношений. В SPH методе таким источником ошибок является переход от функций, характеризующих сплошную среду, к характеристикам частиц с помощью операции свертки с функцией ядра..

$$\langle f \rangle (\mathbf{x}) = \int f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) d\mathbf{x}' \quad (10)$$

где символ $\langle \rangle$ обозначает свертку. Разложение Тейлора функции f в окрестности точки \mathbf{x} показывает, что

$$\langle f \rangle (\mathbf{x}_i) = f(\mathbf{x}_i) + \frac{h_{eff}^2}{4} \nabla^2 f(\mathbf{x}_i) + O(h_{eff}^4) \quad (11)$$

следовательно, если $\langle f \rangle (\mathbf{x}_i)$ используется как приближение к решению $f(\mathbf{x}_i)$, то свертка вносит ошибки второго порядка относительно радиуса сглаживания h_{eff} .

Для производных имеет место соотношение

$$\begin{aligned} \langle \nabla f \rangle (\mathbf{x}) &= \int \nabla' f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) d\mathbf{x}' = \\ &= - \int f(\mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) d\mathbf{x}' = \\ &= \nabla \int f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (12)$$

¹Ошибками усечения называют ошибки, возникающие из-за отбрасывания членов разложений (рядов), используемых при аппроксимации решений и оператора задачи.

где использовано интегрирование по частям и симметрия ядра по знаку первого аргумента.

Если плотность определяется суммированием ядер частиц

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{j \in \omega_i} m_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \quad (13)$$

то справедливы следующие равенства

$$1 = \sum_{j \in \omega_i} \frac{m_j}{\rho(\mathbf{x})} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \quad (14)$$

$$0 = \sum_{j \in \omega_i} m_j \nabla \left[\frac{W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)}{\rho(\mathbf{x})} \right] \quad (15)$$

где ω_i - номера узлов соседей узла i . Используя соотношение (14) перепишем соотношение для свертки функции f :

$$f_i = \langle f \rangle(\mathbf{x}_i) = \int f(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = \sum_{j \in \omega_i} \Delta f_{i,j} \quad (16)$$

где вклады от соседних частиц имеют вид

$$\Delta f_{i,j} = \int m_j \frac{f(x)}{\rho(x)} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) dx \quad (17)$$

В стандартном SPH методе выражения для вкладов соседних частиц имеют вид

$$\Delta f_{i,j} \approx m_j \frac{f(x_i)}{\rho(i)} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \quad (18)$$

а соотношение (14) принимается таким

$$1 = \sum_{j \in \omega_i} \frac{m_j}{\rho(\mathbf{x}_j)} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \quad (19)$$

Уравнение движения. Применяя операцию свертки к уравнению движения, получаем

$$\int \frac{d\mathbf{v}(\mathbf{x})}{dt} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x} = - \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \nabla p(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x} \quad (20)$$

Правая часть преобразуется так:

$$\begin{aligned} & - \int \left\{ \nabla \frac{p(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) + \frac{p(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \nabla \rho(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \right\} d\mathbf{x} = \\ & = - \int \left\{ \nabla \frac{p(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \right\} d\mathbf{x} - \\ & - \int \left\{ \frac{p(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \left[\nabla \sum_{j \in \omega_i} m_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \right\} d\mathbf{x} = \\ & = \sum_{j \in \omega_i} m_j \int \frac{p(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \{ \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) - W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \} d\mathbf{x} \quad (21) \end{aligned}$$

Для уравнения лагранжевой траектории отдельной частицы получается следующее уравнение

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \int \frac{d\mathbf{v}(\mathbf{x})}{dt} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = - \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \nabla p(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} \quad (22)$$

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \in \omega_i} m_j \int \frac{p(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \{ \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) - W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \} d\mathbf{x} \quad (23)$$

Антисимметричность по номерам частиц обеспечивает свойство консервативности. В отличие от стандартного SPH метода здесь постоянному полю давления отвечает нулевое ускорение каждой из частиц.

Уравнение энергии. Применяя операцию свертки к уравнению внутренней энергии

$$\begin{aligned} \frac{dU_i}{dt} &= \int \frac{dU(\mathbf{x})}{dt} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = - \int \frac{p(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} [\nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x})] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = \\ &= - \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\nabla \cdot (p(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{x}))] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla p(\mathbf{x})] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = \\
= & - \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\nabla \cdot (p(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{x}))] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} + \\
& + \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \left[\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \cdot \nabla p(\mathbf{x}) \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} + O(h^2) = \\
= & \int p(\mathbf{x}) \left[\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right] \cdot \nabla \left[\frac{W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h)}{\rho(\mathbf{x})} \right] d\mathbf{x} = \\
= & \sum_{j=\omega_i} m_j \int \frac{p(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \left[\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right] \cdot [\nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)] d\mathbf{x} - \\
& - \sum_{j=\omega_i} m_j \int \frac{p(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \left[\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right] \cdot [W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)] d\mathbf{x} \\
= & \sum_{j=\omega_i} m_j \int \frac{p(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \left[\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right] \cdot \{ \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) - \\
& - W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \} d\mathbf{x}
\end{aligned}$$

получаем уравнение внутренней энергии, ассоциированной с частицей i :

$$\begin{aligned}
\frac{dU_i}{dt} = \sum_{j=\omega_i} m_j \int \frac{p(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \left[\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right] \cdot \{ \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) - \\
- W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \} d\mathbf{x} \quad (27)
\end{aligned}$$

Поскольку правая часть антисимметрична по номерам частиц, то при суммировании по всем частицам их вклады взаимно уничтожаются. Поэтому уравнения для эволюции внутренней энергии, ассоциированной с частицами, обеспечивают консервативность внутренней энергии.

Численное интегрирование по пространству. Сначала надо построить интерполянт для члена $\rho^{-2}(\mathbf{x})$ для любой пары частиц i и j . Определим вспомогательную ось координат s вдоль вектора $\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ с началом координат в точке $(\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j)/2$ и единичным вектором \mathbf{e}_{ij} и расстоянием $\Delta s_{ij} = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$. Введем в рассмотрение удельный объем (обратную массовую плотность) $V = 1/\rho$ и ее градиент

$$\nabla V(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\rho^2(\mathbf{x})} \nabla \rho(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\rho^2(\mathbf{x})} \sum_{j \in \omega_i} m_j \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \quad (47)$$

Аппроксимация этой функции строится для направления s . В случае линейной интерполяции имеем

$$V(s) = \frac{1}{\rho(s)} = C_{i,j}s + D_{i,j} \quad (48)$$

где

$$C_{i,j} = \frac{V(\mathbf{x}_i) - V(\mathbf{x}_j)}{\Delta s_{i,j}}, \quad D_{i,j} = \frac{V(\mathbf{x}_i) + V(\mathbf{x}_j)}{2} \quad (49)$$

тогда

$$V^2(s) = \frac{1}{\rho^2(s)} = [C_{i,j}s + D_{i,j}]^2 \quad (50)$$

Интеграл принимает вид

$$\int \rho^{-2}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x} = V_{i,j}^2(h) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h) \quad (51)$$

где

$$V_{i,j}^2(h) \cong \frac{1}{4} h^2 C_{i,j}^2 + D_{i,j}^2 \quad (52)$$

Интеграл, включающий произвольную функцию $f(\mathbf{x})$, вычисляется так

$$\begin{aligned} & \int f(\mathbf{x}) \rho^{-2}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x} = \\ & = f_{i,j}^* \int \rho^{-2}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (55)$$

где

$$f_{i,j}^* = \frac{f_i - f_j}{\Delta s_{i,j}} s_{i,j}^* + \frac{f_i + f_j}{2}, \quad s_{i,j}^* = \frac{h^2 C_{i,j} D_{i,j}}{2V_{i,j}^2} \quad (56)$$

Эволюционные уравнения теперь принимают вид

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = -2 \sum_{j \in \omega_i} m_j p^* V_{i,j}^2(h) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h) \quad (58)$$

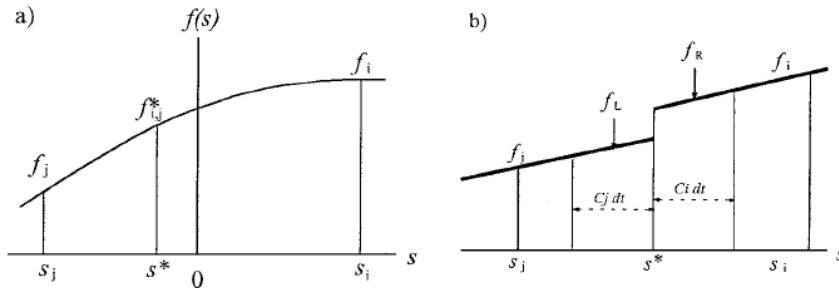
$$\frac{dU_i}{dt} = -2 \sum_{j \in \omega_i} m_j ([p\nabla]^* - p^* \frac{d\mathbf{x}_i}{dt}) V_{i,j}^2(h) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h) \quad (59)$$

где p^* и $[p\nabla]^*$ - значения в точке $s_{i,j}^*$.

Использование решения задачи Римана. Описание сильных ударных волн без использования соотношений на скачках требует введения в исходные уравнения диссипации энергии. Схема Годунова первого порядка и ее модификация схема MUSCL второго порядка и схема PPM третьего порядка точности используют точное решение задачи Римана, чтобы включить наименьшую достаточную диссипацию. Рассмотрим введение точного решения задачи Римана в SPH метод второго порядка точности по пространству.

Схема Годунова использует решение задачи Римана для вычисления потоков на границах ячеек. Аналогично, в рассматриваемом методе решение задачи Римана используется для вычисления потоков в средних точка между соседними частицами i и j . Это достигается модификацией величин p^* и $[p\nabla]^*$ в эволюционных уравнениях для скорости и внутренней энергии.

Рисунок показывает график функции $f(s)$ в окрестности узлов i и j .



Граница между окрестностями частиц расположена в точке $s_{i,j}^*$. По аналогии со схемой MUSCL второго порядка точности использована кусочно-линейная интерполяция решения в обеих i -ой и j -ой окрестностях. Градиент $f(s)$ в каждой окрестности определяется по значению градиента в позициях частиц. Начальные значения по обе стороны разрыва в задаче Римана представлены средними значениями в каждой области зависимости:

$$\begin{aligned} \rho_R &= \rho_i + \left(\frac{\partial \rho}{\partial s} \right)_i \left[s_{i,j}^* + c_{s,i} \frac{\Delta t}{2} - s_i \right] \\ p_R &= p_i + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_i \left[s_{i,j}^* + c_{s,i} \frac{\Delta t}{2} - s_i \right] \\ U_R &= U_i + \left(\frac{\partial U}{\partial s} \right)_i \left[s_{i,j}^* + c_{s,i} \frac{\Delta t}{2} - s_i \right] \\ \rho_L &= \rho_i + \left(\frac{\partial \rho}{\partial s} \right)_j \left[s_{i,j}^* - c_{s,j} \frac{\Delta t}{2} - s_i \right] \\ p_L &= p_i + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_j \left[s_{i,j}^* - c_{s,j} \frac{\Delta t}{2} - s_i \right] \\ U_L &= U_i + \left(\frac{\partial U}{\partial s} \right)_j \left[s_{i,j}^* - c_{s,j} \frac{\Delta t}{2} - s_i \right] \end{aligned}$$

где

$$v_i = \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_{i,j} \quad v_j = \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{e}_{i,j}$$

и $c_{s,j}$ - означает скорость звука в точке \mathbf{x}_j . Решение задачи Римана уже было рассмотрено ранее. Обозначим $p_{i,j}^*$ и $v_{i,j}^*$ решение задачи Римана в точке $s_{i,j}^*$. Вектор скорости на границе $s_{i,j}^*$ определяется так

$$\mathbf{v}_{i,j}^* = v_{i,j}^* \mathbf{e}_{i,j} + [\mathbf{v}_{i,j} - v_{i,j} \mathbf{e}_{i,j}]$$

где

$$\mathbf{v}_{i,j} = \mathbf{v}_i [1/2 + \varepsilon] + \mathbf{v}_j [1/2 - \varepsilon]$$

$$v_{i,j} = v_i [1/2 + \varepsilon] + v_j [1/2 - \varepsilon]$$

$$\varepsilon = \frac{s_{i,j}^*}{\Delta s_{i,j}}$$

$p_{i,j}^*$ и $v_{i,j}^*$ используются для вычисления потоков на границе между окрестностями в правых частях эволюционных уравнений для скорости и внутренней энергии. В приведенной формуле член в квадратных скобках ортогонален к $\mathbf{e}_{i,j}$ и исчезает при подстановке в эволюционные уравнения.

В сеточных схемах высокого порядка таких, как MUSCL и PPM необходимо ввести монотонизирующие ограничители градиентов физических величин для устойчивого описания разрывов. Это требуется и в начтоящем методе. Численные эксперименты показывают, что монотонизирующий ограничитель требуется только для скорости. Таким образом, ограничение по монотонности имеет вид

$$\left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_i = \left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_j = 0 \text{ при } \left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_i \left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_j < 0$$

Численная схема должна быть первого порядка по пространству на скачке. Соответствующий переключатель имеет вид

$$\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)_i = \left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)_j = 0 \text{ при } c_{shock} \mathbf{e}_{i,j} \cdot (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) > \min(c_{s,i}, c_{s,j})$$

где $f = \rho, p, v$ и c_{shock} является счетной постоянной отвечающей числи частиц в окрестности скачка. В данном методе полагается $c_{shock} = 3$.

Переменный радиус сглаживания. Выше полагалось, что радиус сгдаживания h постоянен. В реальных расчетах h определяет область пространственного разрешения метода и может быть переменным. При выводе эволюционных соотношений надо учитывать, что $h = h(\mathbf{x})$.

Эволюционные уравнения теперь принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x_i}{dt^2} = & - \sum_{j \in \omega_i} m_j p^* [V_{i,j}^2(h_i) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_i) + \\ & + V_{i,j}^2(h_j) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_j)] \\ \frac{dU_i}{dt} = & - \sum_{j \in \omega_i} m_j ([p\mathbf{v}]^* - p^* \frac{d\mathbf{x}_i}{dt}) [V_{i,j}^2(h_i) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_i) + \\ & + V_{i,j}^2(h_j) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_j)] \end{aligned}$$

где полагается, что h не очень сильно меняется для соседних частиц. Одним и простых способов определения радиуса сглаживания выражается формулой

$$h_i = \eta \left[\frac{m_i}{\rho_i^*} \right]^{1/d}$$

где

$$\rho_i^* = \sum_{j \in \omega_i} m_j W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h_i^*), \quad h_i^* = h_i c_{smooth}$$

функция ρ^* более гладкая, чем ρ при $c_{smooth} > 1$. Численные эксперименты показывают, что $\eta \approx 1$ с $c_{smooth} = 2$ дают хорошие результаты. Эффективное число соседей вокруг каждой частицы зависит от отношения радиуса сглаживания к среднему расстоянию до соседней частицы. Например взаимными вкладами частиц i и j можно пренебречь, если $|x_i - x_j| > 3 \min(h_i, h_j)$, так как $\exp(-3^2) \approx 1.234 \cdot 10^{-4}$. Таким образом число соседей равно $6\eta C_{smooth}$ при $d=1$, $28\eta^2 C_{smooth}^2$ при $d=2$ и $128\eta^3 C_{smooth}^3$ при $d=3$.

Свойство консервативности. Окончательная дискретная форма уравнения движения имеет вид:

$$\Delta \mathbf{v}_i / \Delta t = - \sum_{j \in \omega_i} m_j p_{i,j}^* [V_{i,j}^2(h_i) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_i) + V_{i,j}^2(h_j) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_j)]$$

Это уравнение гарантирует сохранение количества движения системы частиц

$$\sum_i m_i \Delta \mathbf{v}_i = 0$$

так как члены в квадратных скобках антисимметричны по номерам частиц i и j . Аналогичный факт имеет место для полной энергии

$$\Delta \sum_i m_i \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 + U_i \right] = 0$$

при использовании окончательной формы уравнения внутренней энергии

$$\Delta U_i / \Delta t = - \sum_{j \in \omega_i} m_j p_{i,j}^* (\mathbf{v}_{i,j}^* - \frac{d\mathbf{x}_i^*}{dt}) [V_{i,j}^2(h_i) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_i) + V_{i,j}^2(h_j) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_j)]$$

где

$$\frac{d\mathbf{x}_i^*}{dt} = \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} + \frac{1}{2} \Delta \frac{d\mathbf{x}_i}{dt}$$

так как

$$\begin{aligned} & \Delta \sum_i m_i \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2 + U_i \right] = \\ & = \sum_i m_i \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} + \Delta \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right]^2 + [U_i + \Delta U_i] - \frac{1}{2} \left[\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right]^2 - [U_i] \right\} = \\ & = \sum_i m_i \left\{ \Delta \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \left[\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} + \frac{1}{2} \Delta \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right] + \Delta U_i \right\} = \\ & = - \sum_i \sum_j m_i m_j p_{i,j}^* \mathbf{v}_{i,j}^* [V_{i,j}^2(h_i) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_i) + V_{i,j}^2(h_j) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_j)] = 0 \end{aligned}$$

Заметим, что в стандартном методе SPH имеет ошибку по консервативности энергии первого порядка относительно шага по времени или среднего радиуса окрестности частицы.

Порядок вычислений по методу SPH. На каждом шаге по времени выполняются следующие вычисления:

1) *Этап 0. Постановка задачи.* Сначала надо расположить частицы в области решения так, чтобы согласовать их с начальным распределением плотности. Это может потребовать специально релаксационной процедуры определения начальных положений частиц.

2.12. Метод граничных интегральных уравнений

Рассмотрим метод граничных интегральных уравнений на примере смешанной краевой задачи для уравнения Лапласа

$$\Delta\varphi = 0 \text{ внутри } \Omega$$

с граничными условиями

$$\varphi = f_* \text{ на } \partial\Omega_\varphi$$

или

$$\partial\varphi/\partial n = g_* \text{ на } \partial\Omega_g$$

Представим решение в виде разложения по базису

$$\varphi = \sum \alpha_i \phi_i$$

Фундаментальное решение. Уравнение Лапласа имеет сингулярное (фундаментальное) решение $\varphi = 1/(4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$. Здесь $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ является расстоянием между произвольными точками \mathbf{X} и \mathbf{X}' в области решения. Это решение отвечает точечному источнику единичной интенсивности, приложенному в точке \mathbf{x}' :

$$\Delta\varphi = \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$$

где $\delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$ - δ -функция Дирака, определяемая соотношением

$$\int_{\Omega} \Phi(\mathbf{x}) \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) d\Omega = \Phi(\mathbf{x}')$$

Убедиться в справедливости этого решения для точек с $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$ можно непосредственной его подстановкой в уравнение Лапласа. Проще всего это можно сделать, записав это уравнение в сферической системе координат для центрально-симметричного и зависящего только от радиальной координаты $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ решения

$$\frac{\partial^2 u^*}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u^*}{\partial r} - \delta(r) = 0$$

При $r = 0$ фундаментальное решение имеет особенность и трактуется в смысле обобщенного решения в соответствии с определением Дирака.

Граничное интегральное уравнение. Используем теперь это фундаментальное решение для приведения исходной краевой задачи для уравнения Лапласа к соответствующему граничному интегральному уравнению. Умножим уравнение Лапласа на произвольную функцию w и проинтегрируем его по частям дважды, получим

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} \nabla^2 \varphi w d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\nabla \varphi w) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \nabla w d\Omega = \\ &= \int_{\partial\Omega} n \cdot \nabla \varphi w ds - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\varphi \nabla w) d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \nabla^2 w d\Omega \end{aligned}$$

или

$$\int_{\partial\Omega} n \cdot \nabla \varphi w ds - \int_{\partial\Omega} \varphi n \cdot \nabla w d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \nabla^2 w d\Omega = 0$$

Подставим сюда вместо произвольной функции w сингулярное решение получаем так называемое исходное интегральное тождество метода граничных интегральных уравнений, которое дает выражение

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\partial\Omega} \left\{ g(\mathbf{x}') \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - f(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial n} \left[\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right] \right\} ds'$$

где $\mathbf{x} \in \Omega$, $\mathbf{x}' \in \partial\Omega$, $g(\mathbf{x}') = \mathbf{n} \cdot \nabla \varphi|_{\mathbf{x}'}$, $f(\mathbf{x}') = \varphi|_{\mathbf{x}'}$. Устремлением $x \in \Omega \rightarrow x \in \partial\Omega$ это тождество сводится к интегральному граничному уравнению

$$f(x'') = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega} \left\{ g(x') \frac{1}{|x'' - x'|} - f(x') \frac{\partial}{\partial n_Q} \left[\frac{1}{|x'' - x'|} \right] \right\} ds'$$

где $f(x'') = \lim \varphi(x)$ при $x \in \Omega \rightarrow x'' \in \partial\Omega$. Это граничное интегральное уравнение устанавливает связь между граничными значениями искомой функции f и ее потока g и обеспечивает

соответствие обеих этих функций одной и той же гармонической функции φ . В каждой точке границы задано одна из функций f и g , а другая подлежит определению. После решения этого уравнения искомое решение φ в области Ω определяется с помощью исходного интегрального тождества.

Численная реализация. Граница представляется набором N граничных элементов (отрезков). Значения f и g ищутся в классе кусочно-постоянных функций, принимающих постоянные значения на каждом из отрезков. Интегральное уравнение записывается для каждого из отрезков. На каждом отрезке искомым является значение одной из функций f и g , в то время как другое задано граничными условиями. Основанная на этих предположениях запись интегрального уравнения в точке x_i имеет вид

$$\left\{ \delta_{ij} + \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega_j} \frac{\partial}{\partial n'} \left[\frac{1}{|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'|} \right] ds' \right\} f_j = \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega_j} \frac{\partial}{\partial n'} \left(\frac{1}{|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'|} \right) ds' \right\} g_j$$

где $\partial\Omega_j$ - граничный элемент, $i, j = 1, \dots, N$. Краткая форма записи системы уравнений имеет вид

$$A_{ij} f_j = B_{ij} g_j$$

Здесь матрицы A_{ij} и B_{ij} размера $N \times N$ содержат интегралы, указанные в записи интегрального уравнения выше. На каждом граничном элементе одно из значений f_i и g_i задано в соответствии с граничными условиями задачи, а другое определяется выписанной системой алгебраических уравнений. Искомая функция $\varphi(x)$ в любой внутренней точке \mathbf{x} определяется затем при помощи подстановки полученных граничных значений f_i и g_i в исходное интегральное тождество

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\partial\Omega} \left\{ g(\mathbf{x}') \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - f(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial n} \left[\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right] \right\} ds'$$

Производные от решения определяются непосредственным дифференцированием интегрального тождества по \mathbf{x} (дифференцируются подинтегральные выражения, содержащие $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$).

Описанный способ решения носит название метода граничных интегральных уравнений (метода ГИУ) или метода граничных элементов (МГЕ). Для большинства задач он хорошо работает при малом числе граничных элементов N даже для самых простых аппроксимаций функций f и g . Повышение точности достигается за счет увеличения числа граничных элементов N и за счет применения аппроксимаций более высокого порядка точности (квадратичных, кубических и так далее). Интегралы в выражениях для коэффициентов матриц системы алгебраических уравнений определяются численно с использованием квадратурных формул. Матрицы МГЕ являются полностью заполненными с диагональным преобладанием. С ростом числа граничных элементов N обусловленность матрицы системы уравнений ухудшается, что может потребовать операции предобуславливания для обеспечения устойчивости процесса решения системы алгебраических уравнений метода, которая проводится путем умножения на приближенную обратную матрицу системы уравнений.

Ключевой особенностью метода ГИУ является то обстоятельство что при отсутствии распределенных источников для решения задачи надо аппроксимировать только граничную поверхность. То есть, метод позволяет в таком случае понизить на единицу размерность задачи. К сожалению, учет распределенных по области источников приводит к необходимости вводить сетку не только на границе но и в области, так что в более общих задачах с ненулевыми свободными членами понижение размерности относится только к тому факту, что разрешающая система уравнений содержит только искомые граничные значения, но сетку уже надо иметь и внутри области. Далее, для уравнений с переменными коэффициентами и, тем более, для нелинейных уравнений определение исходных интегральных тождеств практически невозможно, поэтому приходится прибегать к итерационным методам решения нелинейных уравнений, основанным на выделении такого линейного оператора, для которого исходные интегральные тождества можно вывести. При этом нелинейные члены относятся в свободный член правой части линеаризованного уравнения и определяются по значениям решения на предыдущей итерации. Сходимость таких итерационных процессов имеет место только для слабо нелинейных уравнений. С ростом влияния нелинейности сходимость замедляется и может вообще быть утеряна. Это накладывает ограничения на область применения МГЕ.

Классификация методов граничных элементов. Под прямым методом граничных элементов подразумевают метод, использующий в качестве искомого переменные, фигурирующие в

исходных уравнениях. Например, рассмотренный выше вариант метода граничных элементов является прямым, поскольку граничное интегральное уравнение сформулировано непосредственно для основной искомой функции. Под полупрямым методом подразумевают метод, в котором граничные уравнения формулируются для вспомогательных переменных типа потенциала скоростей или функции напряжений. И, наконец, под непрямым методом граничных элементов понимают метод, использующий граничные уравнения для функций плотности основных переменных, которые сами по себе не представляют физические свойства, а служат вспомогательными переменными.

2. Прямой МГЭ для теории упругости.

Для теории упругости прямой метод граничных элементов основан на замене исходных уравнений в частных производных интегральным тождеством для упругих перемещений

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(p)}) + \int_{\partial V} \mathbf{T}(\mathbf{x}^{(p)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)} = \int_{\partial V} \mathbf{U}(\mathbf{x}^{(p)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)} \quad (2.1)$$

здесь $\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(p)})$ - вектор перемещений в произвольной внутренней точке $\mathbf{x}^{(p)}$; $\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(Q)})$ и $\mathbf{t}(\mathbf{x}^{(Q)})$ - значения векторов перемещений и напряжений в точке границы $\mathbf{x}^{(Q)}$. Ядра $\mathbf{T}(\mathbf{x}^{(p)}, \mathbf{x}^{(Q)})$ и $\mathbf{U}(\mathbf{x}^{(p)}, \mathbf{x}^{(Q)})$ определяют проекции векторов напряжений и перемещений во внутренней точке $\mathbf{x}^{(p)}$, вызванные приложением единичных возмущений (перемещений и напряжений, соответственно) в точке границы $\mathbf{x}^{(Q)}$. При стремлении $\mathbf{x}^{(p)}$ к точке на границе $\mathbf{x}^{(p)}$ интегральное тождество (2.1) переходит в интегральное граничное уравнение

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(p)})/2 + \int_{\partial V} \mathbf{T}(\mathbf{x}^{(p)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \mathbf{u}(\mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)} = \int_{\partial V} \mathbf{U}(\mathbf{x}^{(p)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \mathbf{t}(\mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)} \quad (2.2)$$

здесь компоненты ядер $\mathbf{T} = T_{ij}(\mathbf{x}^{(p)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$ и $\mathbf{U} = U_{ij}(\mathbf{x}^{(p)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$, отвечающие фундаментальному решению Кельвина-Соммиана для задачи с сингулярным источником

$$\frac{\partial \sigma_{i,j}}{\partial x_j} = \delta(|\mathbf{x}^{(P)} - \mathbf{x}^{(Q)}|)$$

имеют вид

$$U_{ij}(P, Q) = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)} \left[\frac{(3-4\nu)\delta_{ij}}{r} + \frac{(x_i^{(P)} - x_i^{(Q)})(x_j^{(P)} - x_j^{(Q)})}{r^3} \right] \quad (2.3)$$

$$T_{ij}(P, Q) = \frac{1}{8\pi(1-\nu)} \left[\frac{(1-2\nu)}{r^3} (-(x_i^{(P)} - x_i^{(Q)})\delta_{jk} + (x_j^{(P)} - x_j^{(Q)})\delta_{ik} + \right. \\ \left. + (x_k^{(P)} - x_k^{(Q)})\delta_{ij} \right) + \frac{1}{8\pi(1-\nu)} \frac{3(x_i^{(P)} - x_i^{(Q)})(x_j^{(P)} - x_j^{(Q)})(x_k^{(P)} - x_k^{(Q)})}{r^5} \Big] n_k \quad (2.4)$$

где n_k - проекции единичной внешней нормали к поверхности ∂V .

В двумерных задачах теории упругости ядра интегрального тождества имеют следующий вид:

$$U_{ij}(x^{(P)}, x^{(Q)}) = \frac{1}{8\pi\mu(1-\nu)} \left[(3-4\nu)\delta_{ij} \ln\left(\frac{1}{r}\right) + \frac{\partial r}{\partial x_i} \frac{\partial r}{\partial x_j} \right]$$

$$T_{ij}(x^{(P)}, x^{(Q)}) = \\ = \frac{1}{4\pi(1-\nu)r} \left[\frac{\partial r}{\partial n} \left((1-2\nu)\delta_{ij} + 2 \frac{\partial r}{\partial x_i} \frac{\partial r}{\partial x_j} \right) + (1-2\nu) \left(\frac{\partial r}{\partial x_i} n_j - \frac{\partial r}{\partial x_j} n_i \right) \right] \quad (2.5)$$

Чтобы решить уравнение (2.2), вводится сетка граничных элементов с узлами в центрах тяжести элементов. В каждом граничном элементе граничные перемещения и напряжения принимают постоянные значения, равные значениям в узлах. Уравнение (2.2) записывается для каждого узла, причем интегралы по границе вычисляются как суммы интегралов по граничным элементам с использованием введенной аппроксимации решения. При $\mathbf{x}^{(P)} = \mathbf{x}^{(Q)}$ граничный интеграл имеет особенность, которая раскрывается предельным переходом, который во многих случаях исследуется аналитически, но существуют и разнообразные приближенные численные приемы вычисления интегралов, содержащих сингулярности.

Аналогично тому, как это было сделано в краевой задаче для уравнения Лапласа, применение граничных элементов приводит граничное интегральное уравнение к системе линейных алгебраических уравнений дискретизированной задачи следующего вида

$$(0.5\mathbf{E} + \mathbf{A}) \cdot \mathbf{d} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{s} \quad (2.6)$$

где \mathbf{E} - единичная матрица, $\mathbf{d} = \{\mathbf{u}_\alpha\}_{\alpha=1}^N$ и $\mathbf{s} = \{\mathbf{t}_\alpha\}_{\alpha=1}^N$ векторы дискретных переменных, содержащие граничные значения компонентов векторов перемещений и напряжений в центрах тяжести граничных элементов, размерность этих векторов равна $3N$, N – число граничных элементов, Выражения для компонентов матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} представляются интегралами от ядер Сомилиана, которые удобно выписать рассматривая эти матрицы как блочные, содержащие $N \times N$ блоков 3×3 отвечающих векторных дискретным переменным \mathbf{u}_α и \mathbf{t}_α , каждая из которых имеет три компонента. Блочное представление матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} имеет вид

$$A_{\alpha\beta} = \int_{\partial V_\beta} \mathbf{T}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)}$$

$$B_{\alpha\beta} = \int_{\partial V_\beta} \mathbf{U}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)}$$

Интегралы можно вычислять как аналитически, так и путем применения квадратурных формул. При $\alpha = \beta$ подынтегральные выражения (ядра) имеют особенность, которая раскрывается путем предельного перехода. Матрицы \mathbf{A} и \mathbf{B} являются сплошь заполненными и несимметричными. Система $N \times 3$ уравнений (2.6) содержит $2N \times 3$ граничных параметров \mathbf{u}_α и \mathbf{t}_α , она замыкается с помощью $N \times 3$ граничных условий, формулируемых для каждого граничного элемента в виде ограничений типа равенств, которым должны удовлетворять граничные значения векторов перемещений и напряжений.

Историческая справка. Рассмотренные кусочно-постоянные аппроксимации решения на границах применялись в первых работах по методу граничных элементов, выполненных Риццо и Крузом. В этих работах граница представлялась отрезками прямых в двумерном случае и плоскими треугольниками в трехмерном случае. Для достижения достаточной точности требовалось большое количество граничных элементов, поэтому на

низкопроизводительных компьютерах в 1970-е годы решались только очень простые задачи. В дальнейшем в работах Рикарделло и Круза эффективность МГЕ была улучшена путем применения линейных по граничному элементу аппроксимаций решения. В нашей стране методы граничных интегральных уравнений и граничных элементов активно развивались начиная с 1940-х годов в работах Д.И.Шермана, В.Д.Купрадзе, П.И.Перлина, Р.В. Гольдштейна, А.Я. Александрова, В.С.Рябенкого и других

Имеется большое разнообразие вариантов сведения исходных краевых задач к граничным интегральным уравнениям и, соответственно, большое разнообразие вариантов реализации метода граничных элементов, подробное рассмотрение которых возможно лишь в рамках специального курса теории граничных интегральных уравнений и методов их численного решения. Заинтересованным в подробностях читателям рекомендуются следующие монографии по методу граничных элементов [1-3].

1. Н. Бреббиа, С. Уокер Применение метода граничных элементов в технике. М.: Мир, 1982. 248 с.
2. Метод граничных интегральных уравнений. Сб. статей. Ред. А.Ю.Ишлинский и Г.Г.Черный. М.:Мир, 1978. 210 с.
3. П. Бенерджи, Р. Баттерфилд Методы граничных элементов в прикладных науках. М. Мир: 1984. 494 с.

2.13. Методы генерации сеток

Рассмотрим основные методы построения сеток. Сетка представляет собой аппроксимирующее область решения множество узловых точек с заданной топологией, которая определяет отношение соседства внутренних и граничных узлов. Задание сетки способом шаблонов означает определение позиций узлов сетки и задание для каждого внутреннего и граничного узла его соседей. Узел и его соседи образуют шаблон сетки. Второй способ задания сетки называется способом ячеек (элементов). Он подразумевает задание позиций узлов и наборов номеров узлов, образующих внутренние и граничные ячейки.

Проще всего сетка вводится, если область решения представляет собой прямую линию, прямоугольник или параллелепипед. В этом случае в системе координат с осями, параллельными образующим области решения, вводится равномерная расстановка узлов с последовательной их нумерацией по координатным направлениям (i -сетка на прямой, ij -сетка на прямоугольнике, и ijk -сетка на параллелепипеде). Сетки, допускающие такую ijk -нумерацию узлов, называются регулярными. Соседи узла i , ij , ijk , имеют номера с индексами, отличающимися на единицу от индексов этого узла.

Регулярную сетку можно ввести и в области с кривыми границами при условии, что такая область (образ) взаимно-однозначно отображается на каноническую область (прообраз) имеющую вид прямой линии, прямоугольника или параллелепипеда. Закон отображения при этом определяет расстановку узлов в (физической) области-образе. Методы построения сеток с помощью отображений называются методами отображений.

В нерегулярных сетках отношения соседства задаются информационными массивами соседства, задающими либо номера узлов для внутренних и граничных шаблонов, либо номера узлов для внутренних и граничных ячеек. Алгоритмы построения нерегулярных сеток обычно реализуют варианты фронтального метода послойной генерации узлов и шаблонов или ячеек от границ вглубь области с учетом управляющих параметров, регулирующих размер и форму выстраиваемых ячеек.

2.13.1. Простейшие регулярные сетки.

Рассмотрим определение простейших регулярных сеток. Пусть область решения представлена отрезком прямой, параллельной оси

х. Координаты $N+1$ узлов равны

$$x_i = x_a + (i-1)(x_b - x_a) / N$$

где $i=1, \dots, N+1$. Шаблоны для внутренних узлов $i=2, \dots, N$ являются треугольными (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) , а для граничных узлов - двухузловыми (x_0, x_1) и (x_{N-1}, x_N) . N двухузловых ячеек определяются так: (x_{i-1}, x_i) , где $i=2, \dots, N+1$.

Пусть область решения имеет вид прямоугольника со сторонами, параллельными осям x и y . Координаты $(N_x + 1)(N_y + 1)$ узлов равны

$$x_{ij} = x_a + (i-1)(x_b - x_a) / N_x$$

$$y_{ij} = y_a + (j-1)(y_b - y_a) / N_y$$

где $i = 1, \dots, N_x + 1$; $j = 1, \dots, N_y + 1$. $N_x N_y$ ячеек определяются так: ячейка (i, j) образована узлами со следующими номерами

$$(i, j), (i, j+1), (i+1, j+1), (i+1, j)$$

где $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$.

Пусть область решения имеет вид параллелепипеда со сторонами, параллельными осям x , y и z . Координаты $(N_x + 1)(N_y + 1)(N_z + 1)$ узлов равны

$$x_{ij} = x_a + (i-1)(x_b - x_a) / N_x$$

$$y_{ij} = y_a + (j-1)(y_b - y_a) / N_y$$

$$z_{ij} = z_a + (k-1)(z_b - z_a) / N_z$$

где $i = 1, \dots, N_x + 1$; $j = 1, \dots, N_y + 1$. $k = 1, \dots, N_z + 1$. $N_x N_y N_z$ ячеек определяются так: ячейка (i, j, k) образована узлами со следующими номерами

$$(i, j, k), (i, j+1, k), (i+1, j+1, k), (i+1, j, k) \\ (i, j, k+1), (i, j+1, k+1), (i+1, j+1, k+1), (i+1, j, k+1)$$

где $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$, $k = 1, \dots, N_z$.

2.13.2. Методы отображений.

Рассмотрим задачу построения отображения регулярной равномерной прямоугольной сетки в области- прообразе $\overset{o}{V}$, имеющей вид квадрата или куба, на сетку в (физической) области-образе V , имеющей криволинейные границы. Такое отображение можно получить преобразованием координат

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi)$$

где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ - координаты в (физическом) пространстве образа, а $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ - (параметрические) координаты в (параметрическом) пространстве прообраза. Причем преобразование границ считается заданным

$$\mathbf{x}|_{\xi \in \partial \overset{o}{V}} = \mathbf{x}_*(\xi)$$

где звездочкой помечена заданная функция.

Никаких общих подходов к решению задачи построения таких отображений нет [Иваненко,1997], но определенное понимание основных черт общего подхода выработано в последние десятилетия благодаря усилиям ряда математиков в России и за рубежом.

Естественными требованиями, предъявляемыми к преобразованиям координат, являются их взаимная однозначность и невырожденность.

Необходимым, но недостаточным условием невырожденности преобразования координат является положительность якобиана преобразования

$$J = \partial \mathbf{x} / \partial \xi > 0$$

всюду в области решения.

2.13.3. Методы построения нерегулярных сеток.

2.13.4. Построение сеток на поверхностях

2.14. Физически адаптивные сетки

2.14.1. Адаптивные встраиваемые сетки

2.14.2. Адаптивные подвижные сетки

2.15. О программном обеспечении задач МСС

2.15.1. Устройство пакета программ

2.15.2. Правила проведения вычислений

2.15.3. Обзор пакетов программ для задач МСС

2.15.3.1. ABAQUS

Конечноэлементный пакет программ ABAQUS предназначен для моделирования производственных технологических процессов. Он позволяет анализировать широкий класс задач механики на всех основных компьютерных платформах (операционные системы UNIX и WINDOWS-NT, суперкомпьютеры).

Общие приложения

Статический анализ напряжений и деформаций

Расчет вязко-упругих и вязко-пластических деформаций

Нестационарный анализ напряжений и деформаций

Стационарные задачи переноса

Нестационарные и стационарные задачи теплопроводности

Нестационарные и стационарные задачи диффузии

Задачи акустики

Взаимосвязанные задачи:

Задачи термомеханики

Задачи термо-электродинамики

Задачи о поведении пьезоэлектриков

Течения в пористых средах

Задачи диффузии

В комбинации с пакетом программ FLUENT (см. далее) ABAQUS позволяет моделировать процессы взаимодействия твердых деформируемых и жидких сред. Взаимодействие этих пакетов программ обеспечивается промышленным стандартом MpCCI от Fraunhofer SCAI, одобренным экспертами-разработчиками пакетов Fluent и ABAQUS.

2.15.3.2. ADAMS

MSC.Software имеет определяющее соглашение о приобретении с Mechanical Dynamics Inc. (MDI) относительно ее флагманского пакета программ ADAMS, который является лидером в смысле широты использования инженерами в таких областях техники как

авто, судо и авиастроение, железнодорожный транспорт, общее машиностроение, и во многих других. ADAMS используется для построения и тестирования функциональности виртуальных прототипов сложных технических устройств. Технология ADAMS имитирует движение, вибрацию, прочность составных конструкций. ADAMS использует компонентные модели систем автоматизированного проектирования (CAD) для организации входной информации о геометрии устройств, граничных и начальных условий, а также для импорта полученных расчетных данных для дальнейшего анализа. .

2.15.3.3. ADINA

Конечно-элементный пакет программ ADINA предназначен для научно-исследовательского инженерного линейного и нелинейного анализа термомеханических процессов деформирования конструкций, механики жидкости и газа. В пакете реализован набор эффективных методов решения и сделана удобная пользовательская оболочка.

ADINA является пакетом, решающим связанные задачи механики жидкости и твердого деформируемого. Он позволяет моделирует нестационарные 1- и 2-фазные течения при взаимодействии потоков жидкости и твердых деформируемых тел. Для моделирования волн давления в ADINA применяются модели слегка сжимаемой жидкости.

2.15.3.4. ANSYS

Пакет программ ANSYS¹ обеспечивает моделирование взаимодействия течений жидкости с деформируемыми конструкциями путем решения взаимосвязанных задач механики жидкости и твердого деформируемого тела. Подход сохраняет независимо протестированные компоненты программы, предназначенные для задач механики жидкости и задач механики деформируемого тела, обеспечивая взаимодействие между указанными компонентами. Прямая взаимосвязь компонентов программы, одностороннее и двустороннее взаимодействие "твердотельных" и "жидкостных" фрагментов программы разрешается в зависимости от потребностей физики задач.

Для более сложных случаев взаимодействия потоков жидкости и структурированных деформируемых сред, при больших деформациях твердых тел, ANSYS может динамически (в процессе

¹ ANSYS Inc.

решения) взаимодействовать с гидродинамическим пакетом программ CFX-5.

Имеется три различных способа моделирования взаимодействия потоков жидкости и газа с деформируемыми конструкциями..

1)Прямая взаимосвязанная модель: в соответствии с этим наиболее корректным математически способом уравнения физики жидкости и деформируемых тел решаются совместно с учетом контактных граничных условий.

2)Односторонне связанная модель: этот способ используется, если деформации твердых тел малы. При этом деформации твердого тела не влияют на область течения газа и жидкости. Поэтому сначала можно рассчитать течение газа и жидкости, определить нагрузки на твердое тело, а затем отдельно произвести расчет деформируемого тела..

3)Двусторонне связанная модель: этот способ моделирования взаимодействия "жидкость-деформируемая конструкция" применяется при значительном взаимовлиянии процессов в жидкости и в деформируемой конструкции. В отличие от прямо связанной модели, уравнения механики жидкости и твердого деформированного тела решаются по отдельным программам, которые обмениваются пограничными данными через определенные интервалы времени.

2.15.3.5. CFX

Пакет программ CFX¹ предназначен для решения задач о течениях теплопроводных жидкости и газа.

2.15.3.6. COSMOS

2.15.3.7. COYOTE

Программа COYOTE является программой общего назначения для нестационарных задач диффузии и теплопроводности. Реализована Галеркинская форма метода конечных элементов. Предусмотрена возможность учета радиационного обмена теплом между разделенными телами, возможность расчета химически реагирующих материалов. Программа используется также для расчета фильтрационных течений жидких фракций в пористых средах, потенциальных течений жидкости, задач электростатики, электропроводности, диффузии примесей, задач теории смазки.

¹ AEA Technology Engineering Software

2.15.3.8. DYNA2D/3D

DYNA2D/3D является явной, нелинейной, КЭ программой для моделирования переходных динамических деформаций трехмерных твердых тел и конструкций, при которых инерция и волновые процессы играют определяющую роль.

DYNA2D/3D может быть применена в расчетах квазистатических процессов путем приложения медленно меняющихся внешних нагрузок или путем использования опции динамической релаксации (установления) и интегрируя уравнения динамики деформируемой среды пока все существенные нестационарные процессы установятся. В отличие от неявных кодов DYNA2D/3D использует большое количество маленьких временных шагов, рассчитываемых по экономичной явной схеме. Таким образом, DYNA2D/3D не решает и не формирует матричные уравнения, характерные для неявных кодов, и не требует итераций на каждом временном шаге.

2.15.3.9. FIDAP

FIDAP¹ (Fluid Dynamics Analysis Package) использует метод конечных элементов для анализа задач тепломассопереноса, включая сжимаемые и несжимаемые течения, ламинарные и турбулентные режимы течения, одно- и двухфазные течения, Ньютоновская и не-Ньютоновские реологические модели сплошной среды, теплообмен путем теплопроводности, конвекции и радиационного излучения, наличие источников тепла и примеси, явления кристаллизации и плавления, и многое другое.

Пакет включает генерацию сеток, процессор входных данных, решалки, и программы обработки и визуализации численных решений.

Версии пакета FIDAP разработаны для следующих компьютеров: CONVEX, CRAY, DEC, FUJITSU, HEWLETT-PACKARD, IBM, SILICON GRAPHICS, STARDENT, и SUN. Имеются также версии для персонального компьютера.

2.15.3.10. FLUENT

Коммерческий пакет программ FLUENT предназначены для моделирования методом контрольных объемов стационарных и нестационарных течений жидкости с учетом конвективного и

¹ Fluid Dynamics International, Inc.

радиационного теплообмена и химических реакций в двумерной и трехмерной геометрии.

FLUENT позволяет моделировать ламинарные и турбулентные несжимаемые течения. Подробная информация о течениях делает численные решения, получаемые при использовании пакета FLUENT, полезными в практике конструирования. В пакете предусмотрена возможность модификации расчетных схем путем подключения пользовательских подпрограмм на языке Фортран. FLUENT работает на различных компьютерных платформах от персоналок до суперкомпьютеров.

2.15.3.11. JAS3D

Пакет программ JAS3D¹ является конечно-элементной программой, предназначенной для решения трехмерных квази-статических задач о наапряженно-деформированном состоянии нелинейно-упругих, вязко-упругих, ползучих, упругопластических и упруговязкопластических, сжимаемых и несжимаемых разрушающихся твердых тел при больших деформациях и поворотах. с учетом контактных взаимодействий.

2.15.3.12. LINFLOW

Пакет программ LINFLOW предназначен для решения задач о невязких, бехвихревых течениях. LINFLOW реализует метод граничных элементов.

LINFLOW runs as a standalone package or as a module within ANSYS, a general-purpose finite element analysis system for design verification and optimization. When LINFLOW is used in the ANSYS environment, pre-processing, solution, and post-processing can all be done in ANSYS. LINFLOW includes a full set of ANSYS macros and other software needed for full and tight integration with ANSYS. Special LINFLOW commands for ANSYS are created with menu entries. These commands are used to set up input, run LINFLOW, and perform post-processing. LINFLOW can also run with other software through its FEMAP interface or through its general interface program and GUI.

2.15.3.13. LS-DYNA3D

LS-DYNA3D является явным трехмерным КЭ пакетом программ для

¹ Более подробная информация дана на сайте [Mark Blanford \(mlblanf@sandia.gov\)](mailto:mlblanf@sandia.gov).

анализа больших динамических деформаций неупругих твердых тел и конструкций. Ударные контактные взаимодействия рассчитываются с учетом возможного отлипания и скольжения контактирующих тел с учетом сил трения и переменности зоны контакта.. Пространственная дискретизация достигается использованием 8-ми узловых объемных элементов, 2-х узловых балочных элементов, 4-х узловых оболочечных элементов, 8-ми узловых оболочечных объемных элементов, композитных составных элементов, мембранных элементов, дискретных элементов и жестких тел.

Уравнения движения интегрируются по времени центрально-разностной схемой. LS-DYNA3D в настоящее время содержит более, чем пятьдесят моделей материала и одиннадцать вариантов уравнений состояния для того, чтобы покрыть широкий круг материалов

2.15.3.14. MARC/AUTOFORGE

MARC является коллекцией конечно-элементных пакетов программ общего назначения для решения инженерных задач, разработанных MARC (analysis research corporation).

В частности, неявная "решалка" MARC/AutoForge предназначена для расчета процессов формования таких штамповка, прокатка, экструзия и так далее. Используя AutoForge, моделирование с перестройкой сеток реализуется с использованием трехмерных элементов в форме топологического куба. Перестройка сетки реализуется автоматически при достижении определенного уровня деформации. AutoForge учитывает взаимовлияние термомеханических эффектов и способна анализировать долговременные процессы охлаждения в комбинации с анализом переходных процессов. Препроцессор поддерживает некоторые альтернативные входные форматы данных программы MARC и это облегчает ее использование.

2.15.3.15. NASTRAN

С начала 1970-х, MSC/NASTRAN {MacNeal-Schwendler Corporation (MSC) и Mechanical Dynamics Inc. (MDI)} развивают подходы к решению проблем взаимодействия газов и жидкостей с твердыми деформируемыми телами. Результатом этих разработок является главный продукт MSC - пакет программ MSC/NASTRAN. NASTRAN является одним из лучших пакетов программ на рынке программных систем, реализующих метод конечных элементов. В сфере, где ненадежные результаты могут обернуться миллионами

долларов дополнительных расходов на разработку, MSC/NASTRAN позволяет получать необходимую точность и эффективность. Постоянно развиваясь, он аккумулирует в себе достоинства новых методик и алгоритмов и поэтому остается одной из ведущих программ конечноэлементного анализа.

MSC/NASTRAN обеспечивает полный набор расчетов, включая расчет напряженно-деформированного состояния, собственных частот и форм колебаний, анализ устойчивости, решение задач теплопередачи, исследование установившихся и неустойчивых процессов, акустических явлений, нелинейных статических процессов, нелинейных динамических переходных процессов, анализ частотных характеристик при воздействии случайных нагрузок, спектральный анализ и исследование аэроупругости. Предусмотрена возможность моделирования практически всех типов материалов, включая композитные и гиперупругие. Расширенные функции включают технологию суперэлементов (подконструкций), модальный синтез и макроязык DMAP для создания пользовательских приложений.

Наряду с расчетом конструкций MSC/NASTRAN используется для оптимизации проектов, которую можно проводить для задач статики, устойчивости, установившихся и неустойчивых динамических переходных процессов, собственных частот и форм колебаний, акустики и аэроупругости. И все это делается одновременно, путем вариации параметров формы, размеров и свойств проекта. Алгоритмы оптимизации обрабатывают неограниченное число проектных параметров и ограничений. Вес, напряжения, перемещения, собственные частоты и многие другие характеристики могут рассматриваться либо в качестве целевых функций проекта – в этом случае их можно минимизировать или максимизировать, либо в качестве ограничений. Алгоритмы анализа чувствительности позволяют исследовать влияние различных параметров на поведение целевой функции и управлять процессом поиска оптимального решения. Кроме того, целевые параметры и ограничения могут быть определены пользователем в виде функциональных зависимостей расчетных и экспериментальных данных, что дает возможность получать модификацию модели в соответствии с данными испытаний - провести идентификацию модели. MSC/NASTRAN - одна из немногих конечноэлементных программ, способных делать все это автоматически.

2.15.3.16. NIKE2D/3D

NIKE2D/3D является неявным КЭ кодом для анализа конечных деформаций при квазистатическом и динамическом нагружении твердых деформируемых тел и конструкций. Конечно-элементная

формулировка учитывает и материальную (физическую) и геометрическую нелинейности. Значительное число моделей материала реализованы для того, чтобы имитировать поведение широкого набора материалов включая упругопластичность, анизотропию, ползучесть, термоэффекты и зависимость от скорости деформации. Произвольный контакт между независимыми твердыми деформируемыми телами моделируется с помощью набора алгоритмов скольжения. Эти алгоритмы моделируют отлипание и скольжение контактирующих тел, включая учет контактного трения и явления самоконтакта. Интерактивная графическая поддержка и перестройка сеток включены для контроля больших искажений сеток при деформациях.

2.15.3.17. ProEngineer

2.15.3.18. PRONTO3D

PRONTO 3D является программой для решения трехмерных нестационарных высокоскоростных процессов деформирования твердых тел с учетом больших деформаций и нелинейного поведения материалов. Эта лагранжева конечно-элементная программа использует явные схемы интегрирования уравнений движения по времени. Используются восьмиузловые шестигранные пространственные и четырехугольные оболочечные элементы с кусочно-постоянной аппроксимацией деформаций. Шаг по времени выбирается условиями устойчивости и точности. Неустойчивость песочных часов исключается путем использования специальных схем численного интегрирования типа схемы Фланагана-Беличкою. Все реологические модели материалов в PRONTO сформулированы с учетом полярного разложения градиента деформации. Безаварийный контактный алгоритм реализован для расчета ударных взаимодействий деформируемых тел весьма общей геометрии. Метод SPH (The Smooth Particle Hydrodynamics method) реализован в пакете программ PRONTO для расчета движения жидкостей и газов, контактирующих с рассчитываемыми методом конечных элементов твердыми деформируемыми телами.

2.15.3.19. PHOENICS

2.15.3.20. SEACAS/ACCESS

Коллекция программ SEACAS¹ (Sandia Engineering Analysis Code Access System), известная также под именем системы ACCESS для параллельных компьютеров является коллекцией программ и утилит для задач континуальной термомеханики, используемой учеными и инженерами Национальными лабораториями корпорации Сандия (США). Коллекция включает пре- и пост-процессоры, "решалки", программы преобразования данных, библиотеки вспомогательных подпрограмм. В частности, в эту коллекцию программ входят пакеты прикладных программ PRONTO-2D и PRONTO-3D.

2.15.3.21. STAR-CD

2.15.3.22. SYSWELD

SYSWELD это коммерческий пакет программ от компании FRAMASOFT, предназначенный для расчета процессов обработки поверхностей, процессов сварки и охлаждения. Пакет SYSWELD использует МКЭ для моделирования технологических процессов в металлургии с взаимосвязанных процессов теплопередачи, фазовых превращений, моделирования тепловыделения при фазовых превращениях, вычисления напряжений и деформаций с учетом пластических эффектов.

2.15.3.23. TOPAZ2D/3D

Программа TOPAZ2D/3D является неявным КЭ пакетом программ для анализа температурных и электромагнитных полей.

2.15.4. Гидрокоды

Общее введение

Варианты метода конечных элементов для численного моделирования высокоскоростных переходных процессов в сплошных средах развивались начиная с начала 1950-х годов. Так называемые гидрокоды или программы волновой динамики позволяют моделировать распространение акустических и ударных волн при ударе, проникании и детонации взрывчатых веществ в жидкостях и твердых деформируемых телах.

¹ . Разработка Sandia National Laboratories.

В 1952 году первый гидрокод ХЕМП (HEMP) был разработан Марком Уилкинсом (Marc L. Wilkins) [1]. Эта и другие подобные программы основываются на пространственно-временной дискретизации законов сохранения массы, импульса и энергии в рамках лагранжева описания движения, которые в адиабатическом приближении принимают вид

$$\frac{dp}{dt} = -\rho \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \quad \frac{du_\alpha}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} \quad \frac{de}{dt} = -\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{\rho} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta}$$

Здесь опущены члены, описывающие теплопроводность (диффузионный теплообмен), которые на малых временах являются пренебрежимо малыми, а также члены описывающие влияние гравитации. Замыкается эта система уравнений определяющими соотношениями для тензора напряжений. Название "Гидрокоды" подчеркивает то обстоятельство, что в рассматриваемом классе задач давление значительно превосходит по величине все остальные составляющие тензора напряжений и независимо от типа среды играет определяющую роль подобно тому, как это имеет место в гидродинамике. Учет вязких, пластических эффектов и разрушения (потери материалом способности сопротивления деформации) реализуется с использованием расщепления тензора напряжений на сумму гидродинамического давления, определяемого законом сжимаемости, и девиаторной составляющей напряжения, подчиненной закону вязкопластического течения.

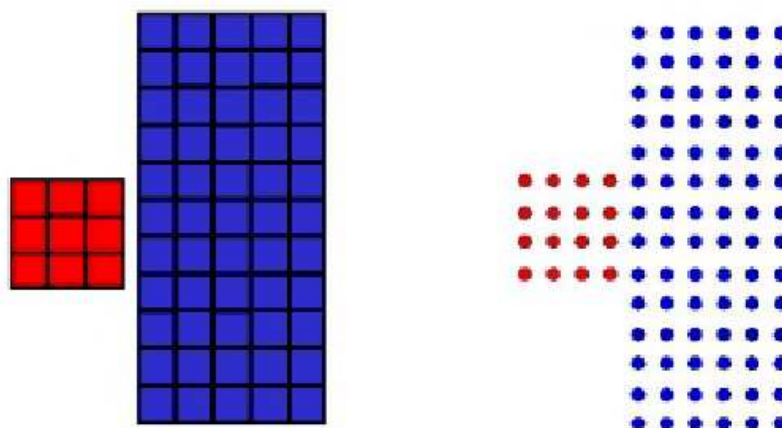
Пространственная дискретизация

Стандартный подход к решению уравнений в частных производных в инженерных приложениях основан на применении конечно-элементных, конечно-разностных или конечно-объемных схем. Эти сеточные методы допускают два различных способа описания движения материальной среды, использующие лагранжевы подвижные вместе со средой сетки или Эйлеровы неподвижные сетки. Лагранжевы сетки главным образом используются в механике деформируемого твердого тела. Эйлеровы сетки более употребительны в механике жидкости и газа.

Лагранжевы сетки позволяют описать малые перемещения материальных границ более точно чем Эйлеровы сетки. История нагружения отдельной лагранжевой ячейки сетки учитывается в сложных реологических соотношениях, описывающих свойства среды. Такие соотношения нелегко применять на Эйлеровых сетках. Большие деформации приводят к нежелательным искажениям лагранжевых сеток.

Эйлеровы сетки позволяют рассчитывать движение жидкости через неподвижную сетку. Таки образом большие деформации жидкости не создают проблем при расчете. Описание границ раздела несмешивающихся сред и точное отслеживание движения материальных частиц требует применения схем более высокого порядка точности в эйлеровых методах и поэтому является более трудоемким. Некоторые гидрокоды обеспечивают совместное использование эйлеровых и лагранжевых сеток при решении задач о взаимодействии твердых деформируемых тел с движущейся жидкостью.

Численное моделирование явлений множественной фрагментации при высокоскоростном ударе требует разработки алгоритмов расчета больших деформаций с учетом фазовых переходов. Относительно новый лагранжев бессеточный метод, называемый гидродинамическим методом сглаженных частиц (SPH method) оказывается наилучшим для приложений к высокоскоростным соударениям. Впервые предложенный астрофизиками (Monaghan [2], Benz [3]) в 70'х SPH-метод был распространен на задачи механики деформируемого твердого тела в конце 80'х (Libersky [4]) путем учета девиатора напряжений и сопротивления материалов.



Фигура 1. Сеточная и бессеточная дискретизация соударяющихся твердых деформируемых тел.

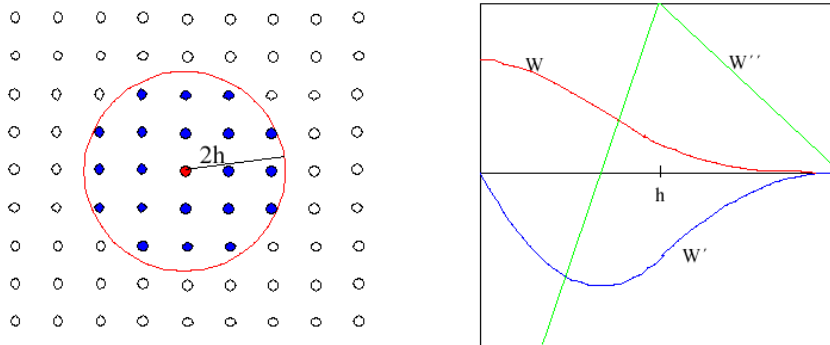
Для SPH алгоритмов физическое описание поведения материала является таким же как и в стандартных гидрокодах. Алгоритмы математического описания сопротивления материала, разрушения и сопутствующих переменных может быть легко заимствовано из других алгоритмов. Единственное отличие состоит в SPH дискретизации массы. Вместо узлов и элементов этот метод использует свободные подвижные точки с фиксированной массой,

называемые частицами, взаимодействующие друг с другом с помощью интерполяционных функций

Например, величина функции $u(\bar{x})$ и ее пространственного градиента $\nabla u(\bar{x})$ в окрестности некоторой частицы i аппроксимируется в SPH методе путем использования N соседних частиц следующим образом

$$\begin{aligned} \langle u(\bar{x}) \rangle &= \sum_i u(\bar{x}_i) W(\bar{x} - \bar{x}_i, h) \frac{m_i}{\rho_i} \\ \langle \nabla u(\bar{x}) \rangle &= \sum_i u(\bar{x}_i) \nabla W(\bar{x} - \bar{x}_i, h) \frac{m_i}{\rho_i} \end{aligned}$$

Типичная интерполяционная функция W , также называемая ядром, и ее производные W' и W'' показаны на Фигуре 2 вместе с интерполяционной схемой для SPH частицы.



Фигура 2: Взаимодействие частиц и интерполяционная функция W с первыми и вторыми производными.

Привеленные выше уравнения позволяют описать законы сохранения массы, импульса и энергии в терминах интерполяционных сумм :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} &= \rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (u_i^\beta + u_j^\beta) W_{ij,\beta} \\ \frac{du_i^\alpha}{dt} &= - \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) W_{ij,\beta} \end{aligned}$$

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} \sum_j m_j (u_i^\alpha + u_j^\alpha) W_{ij,\beta}$$

где обозначено $W_{ij} = W(\bar{x}_i - \bar{x}_j, h)$ и $W_{ij,\beta} = \partial W_{ij} / \partial x_i^\beta$

Вычислительные проблемы, возникающие в рамках метода SPH, связаны с неустойчивостью метода, проявляющейся в виде осцилляций решения при больших скоростях частиц. Swegle с соавторами [5] и Balsara [9] продемонстрировали и проанализировали приемы борьбы с этими проявлениями неустойчивости путем применения консервативного сглаживания (Guenther с соавторами [8]) и ядерной перенормализации (Johnson [7]).

Предполагается, что проблема неустойчивости в методе SPH имеет единственную причину, которая заключается в неспособности в рамках метода SPH осуществить достаточно точно интерполяцию при неудачно расположившихся частицах (Dilts [12]). С математической точки зрения причина заключается в том, что дискретные уравнения метода SPH могут терять свойства аппроксимации и сходимости к уравнениям механики сплошной среды при стремлении размеров частиц и расстояний между ними к нулю (Belytschko с соавторами. [10]).

До некоторой степени проблемы неустойчивости могут быть разрешены путем подвижных кусочно-полиномиальных интерполяций (MLS – moving least-square interpolants, Lancaster и Saulkaskas [13]), которые используются в методах конечных элементов (Nayroles, Touzot и Villon [14]) и в бессеточных методах Галеркина (Belytschko, Lu и Gu [11]), элементы которых были использованы для улучшения устойчивости алгоритмов метода SPH (Dilts [12]).

Схема интегрирования по времени

В гидрокодах используется как правило явная аппроксимация временных эволюционных уравнений. Явная аппроксимация уравнений применяется в случаях, когда процессы распространения волн напряжений находятся в центре внимания, например, в задачах о соударениях деформируемых тел.

Явные схемы требуют ограничения величины шага по времени в соответствии с необходимым условием устойчивости Куранта-Леви-Фридрихса [17]. Предельно допустимый шаг по времени

определяется как минимальное по всем ячейкам отношение характерного размера ячейки к местной скорости звука

$$\Delta t = \min \frac{\Delta x}{c}$$

Это означает что мелкая сетка и высокая скорость звука приводят к очень маленьким величинам шага по времени и, следовательно, к большим затратам вычислительной работы на решение задач, сравнимым с теми, которые требуются при использовании неявных схем.

Дополнительные ограничения на величину шага по времени диктуются анализом устойчивости. Они определяются с учетом сжимаемости материала и искусственной вязкости (v. Neumann [22])

Определяющие соотношения

Простейшим примером уравнения состояния для твердых деформируемых тел может служить линейное уравнение, в котором давление пропорционально изменению плотности ρ относительно плотности отсчетного состояния ρ_0 с нулевым уровнем давления

$$p = K \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 \right)$$

Для расчета ударных нагрузений учитываются соотношения Гюгоню на скачках. Например, применяются уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена и используются табличные экспериментальные зависимости давления от плотности и температуры из базы данных SESAME, созданной в Лос-Аламосской Лаборатории.

В зависимости от скорости соударения и материалов соударяющихся тел при соударениях могут наблюдаться фазовые превращения (например, плавление или испарение твердой фазы). При учете таких явлений уравнения состояния должны учитывать фазовые переходы, например, переход из твердого в газообразное состояние описывается определяющими уравнениями Гиллотсона. При низких давлениях они эквивалентны уравнениям состояния Ми-Грюнайзена, а для очень высоких давлений переходят в уравнения теории Томаса-Ферми.

Вместо уравнению состояния для давления в программах расчета деформируемых тел требуются определяющие соотношения для тензора напряжений.

Литература по методу SPH

1. **Wilkins M. L.**, Computer Simulation of Dynamic Phenomena, Springer, 1999
2. **Monaghan J.J.**, Shock Simulation by the Particle Method SPH, Journal of Computational Physics 52 (1983), S. 374-389.[3] **Benz**, Smooth Particle Hydrodynamics: A Review, Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Preprint No. 2884, 1989
3. **Libersky L.D., Petschek A.G., Carney T.C., Hipp J.R., Allahdadi F.A.**, 1995, High Strain Lagrangian Hydrodynamics, *J. Comp. Phys.* 109: 67-75
4. **Swegle J.W., Hicks D.L., Attaway S.W.**, Smooth Particle Hydrodynamics Stability Analysis, Journal of Computational Physics 116 (1995), pp. 123-134
5. **Randles P.W., Libersky L.D.**, Smooth Particle Hydrodynamics: Some recent improvements and applications, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 139, 1996, pp. 375-408
6. **Johnson G.R., Stryk R.A., Beissel S.R.**, SPH for High Velocity Impact Computations, Submitted for Publication in Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering
7. **Guenther C., Hicks D.L., Swegle**, Conservative Smoothing Versus Artificial Viscosity, Sandia Report SAND94-1853, 1994, Albuquerque, NM 87185
8. **Balsara D.S.**, Von Neumann Stability Analysis of Smooth Particle Hydrodynamics -Suggestions for Optimal Algorithms, Journal of Computational Physics, 121, pp. 357-372, 1995
9. **Belytschko T., Krongauz Y., Organ D., Fleming M., Krysl P.**, 1996, Meshless Methods: An Overview and Recent Developments, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 139: 3-47
10. **Belytschko T, Lu Y.Y. & Gu L.**, 1994, Element-Free Galerkin Methods, *Int. J. Num. Meth.Eng.* 37: 229-256
11. **Dilts G.**, 1996, Moving-Least-Squares-Particle Hydrodynamics 1: Consistency and Stability, *Hydrodynamics Methods Group, Los Alamos National Laboratory*
12. **Lancaster P. & Saulkaskas K.**, 1981, Surfaces Generated by Moving Least Squares Methods, *Math. Comp.* 37: 141-158
13. **Nayroles B., Touzot G. & Villon P.**, 1983, Generalizing the Finite Element Method: Diffuse Approximation and Diffuse Elements, *Comp. Mech.* 10: 307-318

14. **Scheffer U., Hiermaier S.**, Improving a SPH code by alternative interpolation schemes, 7. Fachtagung Baustatik/Baupraxis, Aachen, 18./19.3.1999
15. **Johnson G.R., Cook W.H.**, A Constitutive Model and Data for Metals Subjected to Large Strains, High Strain Rates and High Temperatures, 7th Int. Symposium on Ballistics, Den Haag, 1983
16. **Courant R., Friedrichs K. Lewy H.** Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik, Math. Annalen. 1928. 100. H. 1/2. 32-74.
17. **Zerilli F.J., Armstrong R.W.**, Journal of Applied Physics, 61, (1987), p. 1816
18. **Steinberg D.J., Cochran S.G., Guinan M.W.**, A Constitutive Model for Metals Applicable at High Strain Rate, Journal of Applied Physics, 51 (1980), p. 1498
19. **Tillotson**, Metallic Equations of State for Hypervelocity Impact, GA-3216, General Atomic, San Diego, CA, July 1962
20. **SESAME '83**, Report on the Los Alamos Equation of State Library, LANL-83-4, February 1983.
21. **v. Neumann J., Richtmeyer R.D.**, A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks, J. Appl. Phys. 21, 232-237, 1957
22. **Hiermaier S.**, "Numerische Simulation von Impaktvorgängen mit einer netzfreien Lagrangemethode (Smooth Particle Hydrodynamics)", Mitteilungen des Instituts für Mechanik und Statik 8, Universität der Bundeswehr München, 1996, ISSN 0944-8381

2.16. Применение ускорителей вычислений

2.16.1. Векторизация

При анализе контактных взаимодействий в сложных конструкциях дискретные модели имеют очень высокую размерность и для получения решения в разумное время используются векторные и многопроцессорные компьютеры. Поэтому многие работы по контакту специально посвящены вопросам векторизации и распараллеливания имеющихся контактных алгоритмов. Вопросы векторизации контактных алгоритмов рассмотрены в \cite{hallquist76, hallquist83, hallquist92, bur87-vector, burkuk88, burkuk91, ginsberg89}.

2.16.2. Распараллеливание

В 80-е и 90-е годы были разработаны и испытаны параллельные компьютеры различных типов и в настоящее время наиболее подходящими для распараллеливания алгоритмов решения задач математической физики являются многопроцессорные компьютеры с локально распределенной памятью в комбинации с MIMD (Multiple instruction, multiple data) технологией вычислений см. обзоры \cite{rodriga86, oishi99}. Были испытаны способы распараллеливания, ориентированные на группы узлов сетки, на группы элементов и на подобласти. Наиболее эффективным признан способ распараллеливания по подобластям (DDM - domain decomposition method), элементы которого применительно к контактным задачам можно найти в \cite{malone88, carter89, farhat91, farhat94, farhat95, oishi99}.

Фиктивные подобласти имеют перекрывающиеся границы, на которых обеспечивается непрерывность решения путем межпроцессорного обмена пограничными данными в процессе реализации итерационных методов. Одним из наиболее эффективных и удобных для распараллеливания и векторизации является итерационный метод сопряженных градиентов, вопросам реализации которого применительно к контактным алгоритмам посвящены работы \cite{bur78, bur79-constr, marks83, May86, bur87-vector, burkuk88, burkuk91, yagawa91, yagawa93, oishi99}.

Рассматривавшиеся выше алгоритмы поиска зон контакта (в том числе глобальные LPOCA, НТА и локальные (пинболл, господин-слуга и др.) в исходной форме плохо приспособлены к

параллельным вычислениям и их подключение значительно снижает выигрыш от использования параллельных процессоров. При распараллеливании контактная поверхность разбивается на подобласти, для расчета которых подключаются дополнительные процессоры, отличные от тех, что задействованы для расчета внутренних подобластей контактирующих тел (см. \cite{hoover97, oishi99}). Распараллеленные контактные алгоритмы представлены также в работах \cite{ginsberg88, praskacz95, malone94a, malone94b, attaway97, attaway98}.

Наивысшее в смысле быстродействия достижение в распараллеливании контактных задач о высокоскоростных соударениях за 2001 год принадлежит американской государственной исследовательской организации Sandia National Laboratories (SNL), достигнутое при использовании распараллеленного пакета программ PRONTO на компьютере Intel Teraflop Computer (3600 процессоров). Было достигнуто быстродействие порядка 1/10 секунды на шаг по времени для задач размерностью более 10-15 миллионов трехмерных 8-узловых конечных элементов. Рассчитан ряд примеров от простых тестов до практически важной и еще недавно абсолютно безнадежной для численного решения задачи о крушении самолета с учетом деформаций составной конструкции, гидродинамики топлива (метод частиц) и деформаций грунта. В данной задаче собраны все элементы явления контакта, обсуждавшиеся выше, и самоконтакт, и множественный контакт деформируемых тел, и элементы методов сквозного счета и т.д., и т.п. Описание этого уникального расчета приведено в отчете SNL \cite{attaway01}.

Учитывая интенсивное развитие параллельных компьютеров, сопровождающееся изменениями в их архитектуре и математическом обеспечении, их возможную экспансию в мир персональных компьютеров можно ожидать, что проблема адаптации контактных алгоритмов к параллельным компьютерам в ближайшее время будет весьма актуальной.

Не следует, однако, переоценивать значение данного направления. Дело в том, что параллельные компьютеры пока составляют весьма малую часть имеющегося компьютерного парка и используются, как правило, в режиме удаленного доступа. Это резко увеличивает время ожидания решения и создает парадоксальную ситуацию: формально время расчета резко сокращается, а фактически время ожидания решения увеличивается из-за малой скорости передачи данных по сети и из-за возможной конкуренции, поскольку параллельные машины являются компьютерами коллективного пользования. По сравнению с традиционным скалярным программи-

рованием распараллеливание программ требует значительно больших усилий, кардинального перепрограммирования и ревизии обычных скалярных алгоритмов. Поэтому для успешного распараллеливания требуется очень хорошая материальная база и мощная финансовая поддержка, посильные пока только большим исследовательским центрам, выполняющим крупные государственные заказы.

При планировании работ по распараллеливанию (контактных) алгоритмов необходимо учитывать и временные факторы, а именно время жизни параллельного компьютера и его математического обеспечения, время, требующееся на разработку параллельного варианта программы и время, в течение которого параллельный компьютер является суперкомпьютером. Последнее обстоятельство обусловлено тем, что скалярные (в частности, персональные) компьютеры, также быстро прогрессируют, и нередко успешно конкурируют по всем статьям со многими параллельными еще недавно "суперкомпьютерами". Например, сравнение современного персонального Pentium/4 с 5-ти летней давности параллельным "8-головым" Parcytec'ом будет не в пользу Parcytec'a.

Заключение

Список литературы

1. Абрамов А.А. Вариант метода прогонки. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1, N2, 1961, с. 349-351.
2. Агошков В.И. Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики. М.: ИВМ РАН, 2003. 256с
3. Агошков В.И., Дубовский П.Б., Шутяев В.П. Методы решения задач математической физики. М.: Физматлит, 2002. 320с
4. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения. М.: Мир, 1972.
5. Бабенко К.И. (Ред.) Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики. М.: Наука, 1979. 295 с.
6. Бабенко К.И. Основы численного анализа. – М.: Наука, 1986. – 374 с.
7. Баничук Н. В., Картвелишвили В. А., Черноусько Ф. Л. Вариационные задачи механики и управления. М.:Наука, 1973.
8. Бате К., Вилсон Е. Численные методы анализа и метод конечных элементов /Пер. с англ. А.С. Алексеева и др.; Под ред. А.Ф. Смирнова. М.: Стройиздат, 1982
9. Бахвалов Н.С. Численные методы, Т. 1. М.: Наука, 1973, 631 с.
10. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.:Наука, 1987.
11. Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М. Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982. 391 с.
12. Белоцерковский О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М.: Наука, 1984, 520 с.
13. Белоцерковский О. М., Андрущенко В. А., Шевелев Ю. Д. Динамика пространственных вихревых течений в неоднородной атмосфере. М.: "Янус-К", 2000. 455 с.
14. Белоцерковский С. М., Ништ М. И. Отрывное и безотрывное обтекание тонких крыльев идеальной жидкостью. М.: Наука, 1978. 351 с.
15. Бенерджи П., Баттерфилд Р. Методы граничных элементов в прикладных науках. М.: Мир, 1984. 494 с.
16. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений, том 1 (2-е издание). М.: Наука, 1962
17. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений, том 2. М.: Наука, 1959
18. Быкова Е.Г., Калпуш Т.В., Карпова Е.Д., Киреев И.В., Пятаев С.Ф., Рюде У., Шайдуров В.В. Уточнённые численные методы для задач конвекции-диффузии. (на англ. яз.). Том 1-2. Под ред. У.Рюде, В. В. Шайдурова. — Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2001. — 252 с.

19. Ванько В. И., Ермошина О. В., Кувыркин Г. Н. Вариационное исчисление и оптимальное управление. М.: МГТУ, 1999. Т. 15. 487 с.
20. Власова Е. А., Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Приближенные методы математической физики. М.: МГТУ, 2001. Т. 13. 699 с.
21. Воеводин В.В. Вычислительные основы линейной алгебры. М.: Наука, 1977.
22. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.
23. Волков Е.А. Численные методы.–М.: Наука, 1987. – 248 с.
24. Ворожцов Е.В. Разностные методы решения задач механики сплошных сред (учебное пособие). Новосибирск: НГТУ, 1998.
25. Ворожцов Е.В., Яненко Н.Н. Методы локализации особенностей в вычислительной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1985
26. Вычислительные методы в гидродинамике, Б. Олдер, С. Фернбах, М. Ротенберг (Ред.), М., Мир, 1967. 383 с.
27. Гавурин М. К. Лекции по методам вычислений. М.: Наука, 1971. 248 с.
28. Гильманов А. Н. Методы адаптивных сеток в задачах газовой динамики. М.: Физматлит, 2000. 247 с.
29. Годунов С. К. Метод ортогональной прогонки. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2, №6, 1962, с. 972-982.
30. Годунов С. К., Рябенький В. С. Разностные схемы. М.: Наука, 1973, 400 с.
31. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики, М.: Наука, 1976.
32. Демидович Б. П., Марон И. А., Шувалова Э. З. Численные методы анализа. М.: Наука, 1967. 368 с.
33. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. М.: Мир, 1984, 333 с.
34. Довгий С.А., Лифанов И.К. Методы решения интегральных уравнений. Теория и приложения. Киев: Наукова думка, 2002. 344с.
35. Дулан Э., Миллер Дж., Шилдерс У. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. М.: Мир, 1983, 199 с.
36. Дьяченко В. Ф. Основные понятия вычислительной математики. М., Наука, 1972, 119 с.
37. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций, Москва: Наука 1980.
38. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Математические модели термомеханики. М.: Физматлит, 2002. 167 с.
39. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. М. Мир. 1975. 641 с. (О. С. Zienkiewicz. The Finite Element Method in Engineering Science. McGraw-Hill, London, 1971)

40. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация.– М.: Мир, 1986. – 149 с.
41. Ильгамов М.А., Гильманов А.Н. Неотражающие условия на границах расчетной области. М.: Физматлит, 2003
42. Ильин В.П. Численные методы решения задач строительной механики СПбГАСУ,АСВ 2005 425с
43. Калиткин Н.Н. Численные методы. -М.:Наука,1978. 512с.
44. Калнинс А. Исследование оболочек вращения при действии симметричной и несимметричной нагрузок // Тр. амер. общ. ииж. мех. «Прикладная механика».1964. Т. 31. No. 3
45. Ковеня В. М., Яненко Н. Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука, 1981. 304 с.
46. Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. М., Наука,1972, 496 с.
47. Коннор Дж., Бреббия К. Метод конечных элементов в механике жидкости. Л.: Судостроение,1979. 204 с.
48. Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырский П.И. Вычислительные методы, II тома, Москва: Наука 1977.
49. Кукуджанов В. Н. Численное решение неоднородных задач распространения волн напряжений в твердых телах. М.: ВЦ АН СССР, 1976, 67 с.
50. Кукуджанов В. Н. Разностные методы решения задач механики деформируемых тел. М.: Московский физико-технический институт, 1991, 123 с.
51. Кукуджанов В.Н. Численные методы МСС. М.: Наука, 2005.
52. Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений.М.: Физматлит, 2001. 608 с.
53. Курант Р., Фридрихс К. Сверхзвуковое течение и ударные волны. М.: Иностранная литература, 1950, 426с.
54. Ладыженская О. А. Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1970. 288 с.
55. Магомедов К. М., Холодов А. С. О построении разностных схем для уравнений гиперболического типа на основе характеристических соотношений. ЖВМиМФ, 1969, 9, N2, ц. 373-386.
56. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977, 456 с.
57. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.:Наука,1989. 608с.
58. Марчук Ан. Г. Чубаров Л.Б. Шокин Ю.И. Численное моделирование волн цунами. Новосибирск: Наука, 1983. 175 с.
59. Меткалф М. Оптимизация в Фортране. М.: Мир, 1985. 264 с.
60. Метод граничных интегральных уравнений. / Ред. Т. Круз и Ф. Риццо // М.: Мир, 1978. 209 с.

61. Митчелл Э., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными. М.: Мир. 1981. 216 с. (Mitchell A. R. and Wait R. The finite element method in partial differential equations. Wiley. N.-Y. 1977)
62. Михлин С. Г. Прямые методы в математической физике, М.-Л.: ГИТТЛ, 1950, 452 с.
63. Новацкий В.К. Волновые задачи теории пластичности. М.: Мир, 1978. 307 с.
64. Норри Д., де Фриз Ж. Введение в метод конечных элементов. М.: "Мир", 1981. 304 с.
65. Оден Дж. Конечные элементы в нелинейной механике сплошных сред.– М.: Мир, 1976. – 358 с.
66. Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975, 558 с.
67. Пасконов В. М., Полежаев В. И., Чудов Л. А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. М.: Наука, 1984, 285 с.
68. Полак Э. Численные методы оптимизации. М.: Мир, 1974, 376 с.
69. Полежаев В.И., Бунэ А.В., Везуб Н.А. и др. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье - Стокса. М.: Наука, 1987
70. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975, 392с.
71. Приклонский В.И. Численные методы. МГУ.:Физфак, 1999. 146с.
72. Проблемы турбулентности. / Ред. М. А. Великанов, Н. Т. Швейковский // М.-Л.: ОНТИ, 1936. 332 с.
73. Пшеничный, Б. Н., Данилин, Ю. М. Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1979, 319 с.
74. Пэжина П. Основные вопросы упруговязкопластичности. М.: Мир, 1968, 176 с.
75. Рекач В. Г. Руководство к решению задач по теории упругости. М.: "Высшая школа", 1966. 227 с.
76. Рихтмайер Р.Д. Разностные методы решения краевых задач, М., ИЛ, 1960.
77. Рихтмайер Р.Д., Мортон К.В. (Richtmyer R.D., Morton K.W., 1967) Разностные методы решения краевых задач, М., Мир, 1972. .
78. Рихтмайер Р. Принципы современной математической физики. Ч.1.– М.: Мир, 1982. – 312 с.
79. Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. Системы квазилинейных уравнений. М.: Наука, 1978. 687 с.
80. Росляков Г. С., Чудов Л. А. Численные методы в механике сплошных сред. Ч. 1-3, М.: ВЦ МГУ, 1968.
81. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980, 616 с.

82. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
83. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.:Наука, 1989. 432с.
84. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование. М.: Физматлит, 1997.
85. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979, 392 с
86. Седов .Л. И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1965. 386 с.
87. .Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Ред. Дж. Холл, Дж. Уатт // М.: Мир, 1979, 312 с.
88. Стренг Г. Фикс Г. Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1980.
89. Теория ветвления и нелинейные задачи на собственные значения. / Редакторы Дж. Б. Келлер, С. Антман.М.: Мир, 1974. 254 с.
90. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач, Наука 1979.
91. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Однородные разностные схемы на неравномерных сетках. ЖВМиМФ. 1962. N.2. С. 812-832.
92. Турчак Л.И. Основы численных методов. – М.: Наука, 1987. – 250с.
93. Уилкинсон, Райнш Справочник алгоритмов линейной алгебры на языке АЛГОЛ-60. М.: Мир,1976.
94. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. М.: Мир, 1988. 352 с.
95. Фокс А., Пратт М. Вычислительная геометрия. М.: Мир, 1982. 304 с.
96. Форсайт Дж., Молер К. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений, М.: Мир, 1969, 167 с.
97. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980. 280 с.
98. Численное решение задач гидромеханики. / Ред. Р. Рихтмайер // М.: Мир, 1977. 207 с.
99. Численные методы в динамике жидкостей. / Ред. Г. Вирц и Ж. Смолдерен // М.: Мир, 1981. 407 с
100. Численные методы в механике жидкостей. / Ред. О. М. Белоцерковский. // М.: Мир, 1973. (Proc. of the second Intern. Conf. On Numer. Meth. In Fluid Dynamics. / Eds. J. Ehlers, K. Hepp and H. A. Weldenmuller. Springer-Verlag, N.Y. 1973)
101. Численные методы условной оптимизации / Ред. Ф. Гилл, У. Мюррей // М.: Мир, 1977. 290 с.
102. Шокин Ю. И. Метод дифференциального приближения. Новосибирск: Наука, 1979.

103. Якушев В. Л. Нелинейные деформации и устойчивость тонких оболочек. М: Наука, 2004. 275 с.
104. Boris J. P., Book D. L. Flux corrected transport. I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works. // J. Comput. Phys. 1973. V. 11. No. 1. P. 38-69.
105. Courant R., Friedrichs K. Lewy H. Uber die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik, Math. Annalen. 1928. 100. H. 1/2. 32-74. [Рус. пер.: Курант Р., Фридрихс К., Леви Г. (1940) О разностных уравнениях математической физики, Успехи матем. наук, 8, 125-160.]
106. Courant R., Isaacson E., Rees M. On the solution of nonlinear hyperbolic equations by finite differences // Comm. Pure Appl. Math. 1952. V. 5. No. 3. P. 243-255.
107. DuFort E. C., Frankel S. P. Stability conditions in the numerical treatment of parabolic differential equations. // Math. Tables and Other Aids to Computation. 1953. V. 7. P. 135-152.
108. A. Jameson, T. Baker. Solution of the Euler equations for complex configurations. In AIAA, pages Paper 83-1929. AIAA, 1983.
109. MacCormack R. W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering // AIAA Paper. No. 69-354.
110. Lax P. D. Weak solution of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. // Comm. Pure Appl. Math. 1954. V. 7, No. 1. P. 159-193.
111. Lax P. D. Wendroff B. Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy. // Comm. Pure Appl. Math. 1964. V. 17. No. 3. P. 381-398.
112. Monaghan J.J., Shock Simulation by the Particle Method SPH, Journal of Computational Physics 52 (1983), S. 374-389
113. Peyrot R. and Taylor T.D. Computational Methods for Fluid Flow. Springer-Verlag, N.-Y. 1983.
114. Wilkins M. L., Computer Simulation of Dynamic Phenomena, Springer, 1999
115. Yanenko N. N. The Method of Fractional Steps. Springer, N.Y., 1971 (in French, Methodes a Pas Fractionnaires, Armand Colin, Paris, 1968)
116. Yee H. C. A class of high-resolution explicit and implicit shock-capturing methods. Technical Report Lecture Series 1989-04, von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1989.

Приложение 1. Сведения из функционального анализа

Ниже напоминаются некоторые основные понятия функционального анализа, использованные в изложении. Для более подробного чтения рекомендуются книги Колмогорова и Фомина (1972) и Михлина (1950).

1.1. Линейное множество

Линейное множество или линейное пространство образуется элементами, сложение которых и умножение на число дает элемент того же множества.

Примеры: 1) пространство векторов. 2) пространство функций имеющих общую область определения и непрерывные производные до какого-то определенного порядка n (обозначается $C^{(n)}$, по первой букве слова непрерывный - continuous).

1.2. Норма

Норма в линейном пространстве это аналог длины вектора, вводится для оценки величины элементов линейного множества и расстояний между ними и превращает линейное множество в нормированное пространство. Свойства нормы имеют вид:

$$\begin{aligned} \|f\| &\geq 0, \\ \|\lambda f\| &= |\lambda| \|f\| \\ \|f + g\| &\leq \|f\| + \|g\| \end{aligned}$$

где последнее неравенство называется неравенством треугольника. Из $\|f\| = 0$ следует $f = 0$, в противном случае $\|f\|$ называется полунормой.

Например, в функциональном пространстве непрерывных функций C для любого (\forall) элемента $f(x)$ ($x \in V$) норма ($\|f\|$) определяется так

$$\forall f \in C, : \|f\| = \max_{x \in V} |f(x)|$$

в функциональном пространстве "интегрируемых с квадратом" функций L_2 норма вводится так:

$$f \in L_2 : \|f\| = \left(\int_V f^2(x) dV \right)^{1/2}$$

в трехмерном пространстве векторов $a = (a_x, a_y, a_z) \in A$ модуль отдельного компонента дает пример полунормы:

$$a \in A : \|a\| = |a_x|$$

1.3. Гильбертовы пространства

Гильбертовы пространства это линейные пространства, в которых определено *скалярное произведение* любых двух элементов, а нормой элемента является корень квадратный от скалярного произведения элемента на себя. Если, например, скалярное произведение определить так

$$(f_1, f_2) = \int_V f_1(x) f_2(x) dV, \quad \|f\| = [(f, f)]^{1/2}$$

то имеем гильбертово функциональное пространство интегрируемых с квадратом функций L_2 . Другим примером может служить N-мерное пространство векторов со скалярным произведением

$$(a, b) = a \cdot b = \sum_{i=1}^N a_i b_i, \quad \|a\| = [(a, a)]^{1/2}$$

называемое гильбертовым пространством N-мерных векторов.

Скалярное произведение удовлетворяет неравенству Коши-Буняковского:

$$|(f \cdot g)| \leq \|f\| \|g\|$$

и имеет следующие свойства:

$$(f \cdot g) = (g \cdot f)$$

$$\alpha(f \cdot g) = (\alpha g \cdot f)$$

$$(f \cdot (g_1 + g_2)) = (f \cdot g_1) + (f \cdot g_2)$$

$$(f \cdot f) > 0 \text{ если } f \neq 0$$

$$(f \cdot f) = 0 \text{ если } f = 0$$

Элементы гильбертова пространства ортогональны, если их скалярное произведение равно нулю.

1.4. Линейная зависимость и базис

Говорят, что элемент f *линейно зависит* от элементов f_i , если найдутся отличные от нуля вещественные числа α_i такие, что

$$f = \sum_{i=1}^N \alpha_i f_i$$

Последовательность линейно-независимых элементов $\{u_i\}_{i=1}^{\infty}$ считается *полной*, если можно найти такое целое положительное число N и набор чисел $\{\alpha_i\}_{i=1}^N$, при которых для произвольного элемента линейного пространства справедливо неравенство

$$\|u - \sum_{i=1}^N \alpha_i u_i\| < \varepsilon$$

для любого наперед заданного малого числа $\varepsilon > 0$. При этом элементы $\{u_i\}_{i=1}^{\infty}$ называются *базисом*, а числа $\{\alpha_i\}_{i=1}^N$ называются *коэффициентами Фурье*.

Важными для дальнейшего изложения являются следующие определения и утверждения:

- *Базис* это совокупность всех линейно-независимых элементов пространства.
- Число базисных элементов определяет *размерность пространства*.
- Любой элемент пространства есть линейная комбинация (суперпозиция) базисных элементов. Коэффициенты такой линейной комбинации называются *коэффициентами разложения* этого элемента по базисным элементам.

- В нормированном базисе норма каждого из базисных элементов равна единице.
- В ортогональном базисе скалярные произведения базисных векторов между собой равны нулю.

1.5. Оператор и функционал

Оператор преобразует один элемент линейного пространства в другой элемент (возможно, в элемент другого пространства).
Примеры: дифференцирование, умножение на число..

Положительно определенный оператор A для любого элемента x удовлетворяет неравенству

$$(Ax, x) > 0$$

Самосопряженный оператор удовлетворяет равенству

$$(Ax, y) = (x, Ay)$$

для любых элементов x и y .

Функционалом называют оператор, который преобразует элемент пространства в число. Примеры: норма, скалярное произведение.

Последовательность элементов $f_i (i = 1, 2, \dots)$ имеет предел f тогда и только тогда, когда для любого $\varepsilon > 0$ найдется такой номер $i_* > 0$, что для всех больших номеров $i > i_*$ будет выполнено неравенство $\|f_i - f\| < \varepsilon$.

1.6. Полнота

Последовательность элементов $f_i (i = 1, 2, \dots)$ имеет предел f тогда и только тогда, когда для любого $\varepsilon > 0$ найдется такой номер $i_* > 0$, что для всех больших номеров $i > i_*$ будет выполнено неравенство $\|f_i - f\| < \varepsilon$.

Полнота пространства означает, что пределы любых последовательностей элементов этого пространства принадлежат этому же пространству. *Полнота базиса* означает, что любой

элемент пространства представим в виде предела последовательности линейных комбинаций базисных функций..

1.7. Подпространство

Подпространство определяется отношениями: $H' \subset H$, или $f \in H' \Rightarrow f \in H$. Оболочка это конечномерное подпространство $H^{(N)}$, образованное линейными комбинациями N векторов $\varphi_i(x)$

$$H^{(N)} = \{f(x): f = \sum_{i=1}^N a_i \varphi_i(x), \forall a_i \in R^{(1)}\}$$

где $R^{(1)}$ - одномерное арифметическое пространство (множество вещественных чисел).

Приложение 2. Запись основных операторов в абстрактной тензорной нотации.

Обозначения: f, g – скаляры, a, b, \dots – векторы, T – тензор второго ранга, I – единичный тензор, e_i ($i=1,2,3$) – ортонормальный базис декартовой системы координат, по повторяющимся индексам подразумевается суммирование, заключенный в скобки индекс не суммируется, $\mathbf{r} = x_i e_i$ – радиус-вектор, V – область трехмерного пространства, ограниченная поверхностью S , \mathbf{n} – вектор единичной внешней нормали. В ряде формул рассмотрена поверхность S , ограниченная контуром C с элементом dl . Подчеркнем, что, вопреки распространенному заблуждению, приводимые ниже выражения, кроме использующих индексно-компонентную запись, справедливы для любой системы координат, а не только для декартовой.

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \mathbf{b} \times \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b} = \mathbf{c} \times \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{c} \times \mathbf{b}) \times \mathbf{a} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c}$$

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) + \mathbf{b} \times (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) + (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times \mathbf{b} = 0$$

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$$

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{d})\mathbf{c} - (\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c})\mathbf{d}$$

$$\nabla = e_i \partial / \partial x_i$$

$$\nabla(fg) = \nabla(gf) = f\nabla g + g\nabla f$$

$$\nabla \cdot (f\mathbf{a}) = f\nabla \cdot \mathbf{a} + \mathbf{a} \cdot \nabla f$$

$$\nabla \times (f\mathbf{a}) = f\nabla \times \mathbf{a} + \nabla f \times \mathbf{a}$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{a} - \mathbf{a} \cdot \nabla \times \mathbf{b}$$

$$\nabla \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{a}(\nabla \cdot \mathbf{b}) - \mathbf{b}(\nabla \cdot \mathbf{a}) + (\mathbf{b} \cdot \nabla)\mathbf{a} - (\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b}$$

$$\mathbf{a} \times (\nabla \times \mathbf{b}) = (\nabla \mathbf{b}) \cdot \mathbf{a} - (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b}$$

$$\mathbf{a} \times (\nabla \times \mathbf{b}) = (\nabla \mathbf{b}) \cdot \mathbf{a} + \mathbf{b} \times (\nabla \times \mathbf{a}) + (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b} + (\mathbf{b} \times \nabla) \mathbf{a}$$

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f$$

$$\nabla^2 \mathbf{a} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{a}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{a}$$

$$\nabla \times \nabla f = 0$$

$$\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{a} = 0$$

$$\mathbf{T} = T_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$$

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = \partial T_{ij} / \partial x_j$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{a} \mathbf{b}) = (\nabla \cdot \mathbf{a}) \mathbf{b} + (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b}$$

$$\nabla \cdot (f \mathbf{T}) = (\nabla \cdot f) \mathbf{T} + f \nabla \cdot \mathbf{T}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{r} = 3$$

$$\nabla \times \mathbf{r} = 0$$

$$\nabla |\mathbf{r}| = \mathbf{r} / |\mathbf{r}|$$

$$\nabla (1/|\mathbf{r}|) = -\mathbf{r} / |\mathbf{r}|^3$$

$$\nabla \otimes \mathbf{r} = \mathbf{I}$$

$$\int_V \nabla f dV = \int_S f \mathbf{n} dS$$

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \int_S \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} dS$$

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{T} dV = \int_S \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} dS$$

$$\int_V \nabla \times \mathbf{a} dV = \int_S \mathbf{a} \times \mathbf{n} dS$$

$$\int_V (f \nabla^2 g - g \nabla^2 f) dV = \int_S (f \nabla g - g \nabla f) \cdot \mathbf{n} dS$$

$$\int_V (\mathbf{a} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{b} - \mathbf{b} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{a}) dV = \int_S (\mathbf{b} \times \nabla \times \mathbf{a} - \mathbf{a} \times \nabla \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n} dS$$

$$\int_S \nabla f \times \mathbf{n} dS = \int_C f \mathbf{n} dl$$

$$\int_S (\nabla \times \mathbf{a}) \cdot \mathbf{n} dS = \int_C \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} dl$$

$$\int_S (\nabla f \times \nabla g) \cdot \mathbf{n} dS = \int_C f dg = - \int_C g df$$

Приложение 3. Запись основных дифференциальных операторов в криволинейных координатах

3.1. Цилиндрические координаты

Дивергенция

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r a_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial a_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial a_z}{\partial z}$$

Градиент

$$(\nabla f)_r = \frac{\partial f}{\partial r}; \quad (\nabla f)_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta}; \quad (\nabla f)_z = \frac{\partial f}{\partial z}$$

Вихрь (Ротор)

$$(\nabla \times \mathbf{a})_r = \frac{1}{r} \frac{\partial a_z}{\partial \theta} - \frac{\partial a_\theta}{\partial z};$$

$$(\nabla \times \mathbf{a})_\theta = \frac{\partial a_r}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial r};$$

$$(\nabla \times \mathbf{a})_z = \frac{1}{r} \frac{\partial (r a_\theta)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial a_r}{\partial \theta}$$

Лапласиан

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

Лапласиан вектора

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_r = \nabla^2 a_r - \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_\theta}{\partial \theta} - \frac{a_r}{r^2};$$

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_\theta = \nabla^2 a_\theta + \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_r}{\partial \theta} - \frac{a_\theta}{r^2}$$

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_z = \nabla^2 a_z$$

Компоненты $(\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b}$

$$\begin{aligned} ((\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b})_r &= a_r \frac{\partial b_r}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_r}{\partial \theta} + a_z \frac{\partial b_r}{\partial z} - \frac{a_\theta b_\theta}{r} \\ ((\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b})_\theta &= a_r \frac{\partial b_\theta}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_\theta}{\partial \theta} + a_z \frac{\partial b_\theta}{\partial z} + \frac{a_\theta b_r}{r} \\ ((\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b})_z &= a_r \frac{\partial b_z}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_z}{\partial \theta} + a_z \frac{\partial b_z}{\partial z} \end{aligned}$$

Дивергенция тензора

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \mathbf{T})_r &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r T_{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta r}}{\partial \theta} + \frac{\partial T_{zr}}{\partial z} - \frac{T_{\theta\theta}}{r} \\ (\nabla \cdot \mathbf{T})_\theta &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r T_{r\theta}) + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial T_{z\theta}}{\partial z} + \frac{T_{\theta r}}{r} \\ (\nabla \cdot \mathbf{T})_z &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r T_{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial T_{zz}}{\partial z} \end{aligned}$$

3.2. Сферические координаты

Дивергенция

$$(\nabla \cdot \mathbf{a}) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 a_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta a_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_\phi}{\partial \phi}$$

Градиент

$$(\nabla \cdot f)_r = \frac{\partial f}{\partial r}, \quad (\nabla \cdot f)_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta}, \quad (\nabla \cdot f)_\phi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi}$$

Вихрь

$$\begin{aligned} (\nabla \times \mathbf{a})_r &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta a_\phi) - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_\theta}{\partial \phi} \\ (\nabla \times \mathbf{a})_\theta &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_r}{\partial \phi} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r a_\phi) \end{aligned}$$

$$(\nabla \times \mathbf{a})_\varphi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r a_\theta) - \frac{1}{r} \frac{\partial a_r}{\partial \theta}$$

Лапласиан

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial f}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$$

Лапласиан вектора

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_r = \nabla^2 a_r - \frac{2a_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_\theta}{\partial \theta} - \frac{2 \cot \theta a_\theta}{r^2} - \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial a_\varphi}{\partial \varphi}$$

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_\theta = \nabla^2 a_\theta + \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_r}{\partial \theta} - \frac{a_\theta}{r^2 \sin^2 \theta} - \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial a_\varphi}{\partial \varphi}$$

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_\varphi = \nabla^2 a_\varphi - \frac{a_\varphi}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial a_r}{\partial \varphi} + \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial a_\theta}{\partial \varphi}$$

Компоненты $(\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b}$

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b})_r = a_r \frac{\partial b_r}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_r}{\partial \theta} + \frac{a_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial b_r}{\partial \varphi} - \frac{a_\theta b_\theta + a_\varphi b_\varphi}{r}$$

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b})_\theta = a_r \frac{\partial b_\theta}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_\theta}{\partial \theta} + \frac{a_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial b_\theta}{\partial \varphi} + \frac{a_\theta b_r}{r} - \frac{\cot \theta a_\varphi b_\varphi}{r}$$

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b})_\varphi = a_r \frac{\partial b_\varphi}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_\varphi}{\partial \theta} + \frac{a_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial b_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{a_\varphi b_r}{r} + \frac{\cot \theta a_\theta b_\theta}{r}$$

Дивергенция тензора

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 T_{rr}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta T_{\theta r})$$

$$+ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T_{\varphi r}}{\partial \varphi} - \frac{T_{\theta\theta} + T_{\varphi\varphi}}{r}$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_\theta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 T_{r\theta}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta T_{\theta\theta})$$

$$+ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T_{\varphi\theta}}{\partial \varphi} + \frac{T_{\theta r}}{r} - \frac{\cot \theta T_{\varphi\varphi}}{r}$$

$$\begin{aligned}
(\nabla \cdot \mathbf{T})_\varphi &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 T_{r\varphi}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta T_{\theta\varphi}) \\
&+ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T_{\varphi\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{T_{\varphi r}}{r} - \frac{\cot \theta T_{\varphi\theta}}{r}
\end{aligned}$$

Приложение 4. Сводка основных свойств разностных схем

Аппроксимация это приближенное представление функций и соотношений между ними.

Ошибка аппроксимации это разность между точным и приближенным выражениями.

Порядок аппроксимации это показатель степенной функции, характеризующей скорость убывания ошибки аппроксимации в зависимости от числа базисных элементов или от величины шага сетки.

Устойчивость (корректность) это существование и ограниченность оператора, обратного исходному оператору задачи, что необходимо для непрерывной зависимости решения от входных данных.

Сходимость это стремление нормы ошибки (разности между точным и приближенным решениями) к нулю при наращивании числа используемых базисных элементов аппроксимирующего пространства.

Транспортность это правильное описание распространения возмущений благодаря конвекции. (Конвекция это процесс переноса субстанции вместе с потоком массы).

Диссипация (рассеяние энергии) это наличие (не)физической диффузии в схеме.

Диффузия это вязкое сглаживание (обмен субстанцией без перетока массы, в реальности обеспечивается благодаря хаотичному движению и взаимодействию молекул) диффузионный поток пропорционален антиградиенту диффундирующей величины с коэффициентом пропорциональности, называемым коэффициентом диффузии.

Основными типами вязкости являются: физическая вязкость, аппроксимационная (схемная) вязкость, явная искусственная вязкость, вязкость сглаживания, эффективная (суммарная) вязкость.

Дисперсия это зависимость скорости распространения возмущений от длины волны.(от частоты)

Консервативность это выполнение законов сохранения
дивергентность это дифференциальная запись балансных соотношений, в которой скорость изменения сохраняемой величины определяется дивергенцией ее потока.

Монотонность это свойство схем не производить новые минимумы и максимумы для рассчитываемой функции (при отсутствии источников и стоков)

Однородность это одинаковость алгоритма для всех ячеек (узлов, шаблонов) сетки

Робастность это способность алгоритма найти решение при произвольных входных данных

Эффективность это способность схемы выдать решение в разумный срок.

Экономичность это уменьшенный объем вычислений для достижения определенной точности. Более экономичная схема требует меньшего объема вычислений для достижения той же точности. Для оценки экономичности важна асимптотическая скорость возрастания объема вычислений при увеличении числа базисных элементов.

Точность характеризует величину ошибки приближенного решения при ограничении на число базисных функций (членов ряда, числа конечных элементов/объемов, числа узлов сетки). Более точная схема имеет меньшую ошибку решения при том же числе базисных элементов.

Предметный указатель

- Аппроксимация, 236
Безразмерные переменные, 104
Векторизация, 214
Граничные условия
 главные, 100
 для закона сохранения, 101
 естественные, 100
 типа Дирихле, 101
 типа Неймана, 101
Грань, 31
Диффузия, 98
Достоверность численных решений, 102
Жесткие системы ОДУ, 79
Закон сохранения
 вариационная форма Галеркина, 99
 вариационная форма наименьших квадратов, 99
 дифференциальная дивергентная форма, 98
 дифференциальная недивергентная форма, 98
 интегральная форма, 99
Интерполяция, 25
 глобальная, 25
 конечно-элементная, 32
 локальная, 25
 покоординатная, 31
 полиномами Лагранжа, 26
 степенными функциями, 27
Исследование устойчивости
 метод гармонических возмущений, 121
 метод дифференциальных приближений, 124
 принцип замороженных коэффициентов, 127
 Спектральный или матричный метод, 123
Конвекция, 98
Консервативность
 способы обеспечения, 105
Координаты
 объемные, 32
 площадные, 32
Масштабирование неизвестных, 47
Матрица Гильберта, 28
Машинное epsilon, 103
Метод
 Адамса, 78
 Адамса-Башфорта, 78
 барьерных функций, 73
 Бубнова-Галеркина, 19
 Галеркина, 19
 Галеркина-Петрова, 18
 Годунова, 45, 157, 158, 159, 160, 161, 162
 градиентный, 60
 искусственных аналитических решений, 102
 итерационный безматричный, 63
 Калнинса, 86, 87
 квадратного корня, 54
 квазилинеаризации, 85
 квазиньютоновский, 64
 Лакса-Вендроффа, 162
 Либмана или Гаусса-Зейделя, 59
 локальных вариаций, 73
 маршевый, 149
 минимальных невязок, 60
 множителей Лагранжа, 72
 моментов, 20
 наименьших квадратов, 21
 наискорейшего спуска, 60
 Ньютона, 64
 Ньютона модифицированный, 64
 Ньютона-Канторовича, 65
 ортогональной прогонки Годунова, 89
 погружения, 66
 последовательной релаксации, 59
 последовательных смещений, 59
 предиктор-корректор, 77
 прогонки Абрамова, 89
 продолжения по параметру, 65
 простой итерации, 58
 прямых, 110
 разделения переменных, 109
 распада разрыва, 45
 расщепления, 111, 112, 115, 116, 117
 Рунге-Кутта, 77
 Рэля-Ритца, 20
 сопряженных градиентов, 61
 сплайнов, 90
 стрельбы или пристрелки, 83
 суперэлементов, 57
 упругих решений, 64
 установления, 149
 фронтальный, 55
 штрафных функций, 73
 Эйлера с пересчетом (метод Хойна), 77
 Эйлера явный, 77
Неподвижная точка отображения, 58

Оптимизация структуры матриц
 СЛАУ, 51
 Параметры подобия, 104
 Покоординатная редукция
 уравнений, 111
 Правило Крамера, 48
 Предобусловливание, 47
 Принцип
 сжимающих отображений, 58, 59
 Прогонка
 матричная, 50
 Программирование
 линейное, 70
 математическое, 70
 нелинейное, 71
 Распараллеливание, 214
 Ребро, 31
 Сверхсходимость, 36
 Сетка, 30
 Лагранжева, 98
 неоднородная, 31
 неравномерная, 31
 нерегулярная, 31
 неструктурированная, 31
 однородная, 31
 произвольно подвижная, 98
 равномерная, 31
 регулярная, 30, 31
 структурированная, 31
 Эйлера, 98
 Симметризация СЛАУ, 52
 Сингулярные числа матрицы, 28
 Сплайны, 29
 Схема
 аппроксимирующая, 118
 ВВЦП, 121
 квазиньютоновская неявная, 81
 Кранка-Николсона, 81
 Лакса, 132, 140
 Лакса-Вендроффа, 140
 Мак-Кормака, 141
 многослойная, 76
 многошаговая, 76
 неявная, 76, 79
 Холесского, 54
 явная, 76
 Теорема
 Куна-Таккера, 72
 Лакса, 118
 о неявной функции, 67
 о параметрах подобия, 104
 о соотношениях на скачке, 107
 о сходимости каркасов, 15
 о сходимости приближенных
 решений, 15
 сходимости МКЭ, 119
 Точка
ветвления, 68
 особая, 68
 предельная, 68
 умирания решения, 68
 Турбулентность, 10, 180
 Уравнение
 гиперболическое второго порядка,
 101
 неразрывности, 99
 нестационарной диффузии, 101
 обезразмеривание, 103
 переноса, 100
 погранслойное, 101
 Функционал
 энергии, 60
 Хранение матриц СЛАУ, 51
 Численное дифференцирование
 использование интерполянтов, 42
 метод естественной
 аппроксимации, 44
 метод неопределенных
 коэффициентов, 42
 метод отображений, 45
 Численное интегрирование, 35
 формула прямоугольников, 35
 формула Симпсона, 36
 формулы Гаусса, 36
 Число обусловленности, 28
 Экстраполяция, 25

Именной указатель

Абрамов А.А.....	89
Гавурин М.К.....	14, 19, 218
Галеркин Б.Г.....	18, 19, 22
Годунов С.К.....	45, 89, 113
Колмогоров А.Н.....	219, 224
Михлин С.Г.....	24, 220, 224
Фомин С.В.	219, 224