Лекция 3.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ДИСКРЕТИЗАЦИЯ.
КОНЕЧНЫЕ РАЗНОСТИ

Основные способы пространственной дискретизации

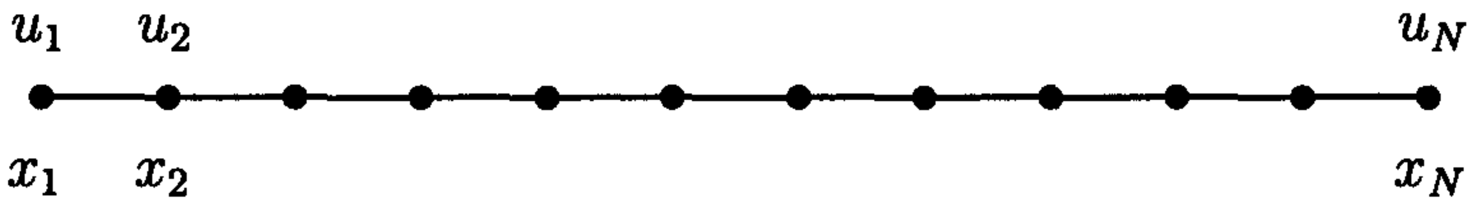
- **Метод конечных разностей.** Искомые величины — значения переменных в некоторых точках, узлах конечноразностной сетки. Ошибка уменьшается как h^N, где h — шаг сетки и N — порядок метода.
- **Метод конечных объемов.** Искомые величины — средние по некоторым объемам, ячейкам расчетной сетки. Ошибка уменьшается как h^N, где h — размер ячейки и N — порядок метода.
- **Спектральный метод.** Искомые величины — коэффициенты разложения решения по системе N ортогональных функций. Если решение бесконечно дифференцируемо, то ошибка уменьшается быстрее любой степени N (экспоненциально).
- **Метод конечных элементов.** Решение на каждом элементе записывается как суперпозиция небольшого числа базисных функций. Искомые величины — коэффициенты разложения решения на каждом элементе.

Некоторые из существующих методов дискретизации с трудом поддаются такой простой классификации. Приведем следующие примеры:

- **Метод дискретных вихрей.** Один из бессеточных методов — использует в качестве вычислительных элементов перемещающиеся вихри. Эффективен при расчете двумерных несжимаемых невязких течений.
- **Метод частиц в ячейках.** Гибридный метод — сочетает интегрирование уравнений движения частиц с решением уравнений на разностной сетке для определения действующих на частицы сил.
- **Прямое статистическое моделирование.** Используется для моделирования течений разреженных газов. Частицы, представляющие группы молекул, на одном этапе движутся по инерции, на другом этапе столкновения частиц моделируются стохастическим образом.
- **Клеточные автоматы.** Частицы находятся в узлах дискретной сетки и перемещаются по определенным правилам из одного узла в другой. В виде метода решеточных уравнений Больцмана стали мощным инструментом расчета гидродинамических течений.

Метод конечных разностей

- Для того чтобы решить уравнение в частных производных на компьютере, его необходимо прежде всего заменить неким «конечным», дискретным соотношением. Рассмотрим кратко некоторые основные используемые в вычислительной аэродинамике способы дискретизации.
- Начнем с наиболее распространенного — метода конечных разностей. Представим, что весь интервал изменения переменной x, на котором решается задача, разбит точками $x_i, i = 1, \dots, N$ на последовательность ячеек $[x_i, x_{i+1}]$. Пусть, для простоты, сетка равномерная, то есть $\Delta x \equiv x_{i+1} - x_i = \text{const}$.



- Обозначим значения функции $u(x)$ в точках x_i через u_i. Как можно аппроксимировать значения производных функции $u(x)$ в дискретных точках?

Конечные разности

Разности вперед:

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i \simeq \frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta x}, \qquad \frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta x} = \frac{u_i+\Delta x u_i'+\Delta x^2 u_i''/2+\ldots-u_i}{\Delta x} \approx u_i' + \frac{\Delta x}{2}u_i''$$

Разности назад:

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i \simeq \frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta x}, \qquad \frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta x} = \frac{u_i-u_i+\Delta x u_i'-\Delta x^2 u_i''/2+\ldots}{\Delta x} \approx u_i' - \frac{\Delta x}{2}u_i''$$

Центральные разности:

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i \simeq \frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2\Delta x}, \qquad \frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{1}{2\Delta x}\left(u_i+\Delta x u_i'+\frac{\Delta x^2}{2}u_i''+\frac{\Delta x^3}{6}u_i'''+\ldots\right.$$
$$\left.-u_i+\Delta x u_i'-\frac{\Delta x^2}{2}u_i''+\frac{\Delta x^3}{6}u_i'''-\ldots\right) \approx$$
$$\approx u_i' + \frac{\Delta x^2}{6}u_i'''.$$

Метод неопределенных коэффициентов

- Рассмотрим два простых метода получения разностных формул — метод неопределенных коэффициентов и метод, основанный на использовании интерполяционных полиномов. В качестве примера выведем обоими способами трехточечную несимметричную разностную формулу для первой производной.

$$u_i' = c_0 u_i + c_1 u_{i-1} + c_2 u_{i-2} \approx c_0 u_i + c_1 \left(u_i - \Delta x u_i' + \Delta x^2 u_i''/2\right) + \\ + c_2 \left(u_i - 2\Delta x u_i' + 2\Delta x^2 u_i''\right)$$

$$\begin{cases} c_0 + c_1 + c_2 = 0 \\ -\Delta x c_1 - 2\Delta x c_2 = 1 \\ \dfrac{\Delta x^2}{2} c_1 + 2\Delta x^2 c_2 = 0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad c_1 = -4c_2, \quad c_2 = \frac{1}{2\Delta x}, \quad c_0 = \frac{3}{2\Delta x}$$

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i \simeq \frac{3u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}}{2\Delta x}$$

Интерполяционный полином

- Построим сначала три полинома, каждый их которых равен 1 в одной из точек шаблона и 0 — во всех остальных:

$$p_i(x) = \frac{(x - x_{i-2})\,(x - x_{i-1})}{(x_i - x_{i-2})\,(x_i - x_{i-1})} = \frac{1}{2\Delta x^2}\,(x - x_{i-2})\,(x - x_{i-1})\,,$$
$$p_{i-1}(x) = \frac{(x - x_{i-2})\,(x - x_i)}{(x_{i-1} - x_{i-2})\,(x_{i-1} - x_i)} = -\frac{1}{\Delta x^2}\,(x - x_{i-2})\,(x - x_i)\,,$$
$$p_{i-2}(x) = \frac{(x - x_{i-1})\,(x - x_i)}{(x_{i-2} - x_{i-1})\,(x_{i-2} - x_i)} = \frac{1}{2\Delta x^2}\,(x - x_{i-1})\,(x - x_i)\,.$$

- Теперь **интерполяционный полином Лагранжа**, проходящий через все три точки, и его первую производную можно записать в виде

$$P(x) = u_i\,p_i(x) + u_{i-1}\,p_{i-1}(x) + u_{i-2}\,p_{i-2}(x),$$
$$P'(x) = u_i\,p'_i(x) + u_{i-1}\,p'_{i-1}(x) + u_{i-2}\,p'_{i-2}(x)$$

- Вычисляя производные, получим искомую формулу:

$$p_i'(x_i) = \frac{1}{2\Delta x^2}\left[(x - x_{i-1}) + (x - x_{i-2})\right]_{x=x_i} = \frac{3}{2\Delta x},$$

$$p_{i-1}'(x_i) = -\frac{2}{\Delta x} = -\frac{4}{2\Delta x}, \qquad p_{i-2}'(x_i) = \frac{1}{2\Delta x}$$

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i \simeq \frac{3u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}}{2\Delta x}$$

- Данный подход легко обобщить на шаблон произвольной величины. Интерполяционный полином Лагранжа для функции $u(x)$, принимающей в точках $x_1, \ldots, x_N$ значения $u_1, \ldots, u_N$ запишется в виде

$$P(x) = \sum_{i=1}^{N} u_i p_i(x) = \sum_{i=1}^{N} u_i \frac{\prod\limits_{j\neq i}(x - x_j)}{\prod\limits_{j\neq i}(x_i - x_j)}.$$

Неравномерные сетки

- Оба рассмотренных способа легко применить и для построения аппроксимаций производных на неравномерной сетке, когда длина интервалов $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ не обязательно одинакова. Например, трехточечная центральноразностная, второго порядка аппроксимация первой производной приобретет вид

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i \simeq \frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} u_{i+1} + \frac{\Delta x_{i-1} - \Delta x_i}{\Delta x_{i-1}\Delta x_i} u_i - \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} u_{i-1}$$

- С другой стороны, часто в этом случае проще использовать некоторое отображение $x(\xi)$, предполагая, что неравномерная по x сетка является равномерной по ξ: $\xi_{i+1} - \xi_i = \Delta\xi = const$, и используя для аппроксимации производных по ξ известные формулы на равномерной сетке:

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i = \frac{1}{(dx/d\xi)_i} \left(\frac{du}{d\xi}\right)_i .$$

Аппроксимации первой производной

Двухточечные:

$$\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta x} \simeq u_i' + \frac{\Delta x}{2} u_i''$$

$$\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta x} \simeq u_i' - \frac{\Delta x}{2} u_i''$$

Трехточечные:

$$\frac{-u_{i+2}+4u_{i+1}-3u_i}{2\Delta x} \simeq u_i' - \frac{\Delta x^2}{3} u_i'''$$

$$\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2\Delta x} \simeq u_i' + \frac{\Delta x^2}{6} u_i'''$$

$$\frac{3u_i-4u_{i-1}+u_{i-2}}{2\Delta x} \simeq u_i' - \frac{\Delta x^2}{3} u_i'''$$

Четырехточечные:

$$\frac{2u_{i+3}-9u_{i+2}+18u_{i+1}-11u_i}{6\Delta x} \simeq u_i' + \frac{\Delta x^3}{4} u_i^{(4)}$$

$$\frac{-u_{i+2}+6u_{i+1}-3u_i-2u_{i-1}}{6\Delta x} \simeq u_i' - \frac{\Delta x^3}{12} u_i^{(4)}$$

$$\frac{2u_{i+1}+3u_i-6u_{i-1}+u_{i-2}}{6\Delta x} \simeq u_i' + \frac{\Delta x^3}{12} u_i^{(4)}$$

$$\frac{11u_i-18u_{i-1}+9u_{i-2}-2u_{i-3}}{6\Delta x} \simeq u_i' - \frac{\Delta x^3}{4} u_i^{(4)}$$

Аппроксимации первой производной

Пятиточечные:

$$\frac{-3u_{i+4} + 16u_{i+3} - 36u_{i+2} + 48u_{i+1} - 25u_i}{12\Delta x} \simeq u'_i - \frac{\Delta x^4}{5} u_i^{(5)}$$

$$\frac{u_{i+3} - 6u_{i+2} + 18u_{i+1} - 10u_i - 3u_{i-1}}{12\Delta x} \simeq u'_i + \frac{\Delta x^4}{20} u_i^{(5)}$$

$$\frac{-u_{i+2} + 8u_{i+1} - 8u_{i-1} + u_{i-2}}{12\Delta x} \simeq u'_i - \frac{\Delta x^4}{30} u_i^{(5)}$$

$$\frac{3u_{i+1} + 10u_i - 18u_{i-1} + 6u_{i-2} - u_{i-3}}{12\Delta x} \simeq u'_i + \frac{\Delta x^4}{20} u_i^{(5)}$$

$$\frac{25u_i - 48u_{i-1} + 36u_{i-2} - 16u_{i-3} + 3u_{i-4}}{12\Delta x} \simeq u'_i - \frac{\Delta x^4}{5} u_i^{(5)}$$

Аппроксимации первой производной

Шеститочечные:

$$\frac{12u_{i+5} - 75u_{i+4} + 200u_{i+3} - 300u_{i+2} + 300u_{i+1} - 137u_i}{60\Delta x} \simeq u'_i + \frac{\Delta x^5}{6} u_i^{(6)}$$

$$\frac{-3u_{i+4} + 20u_{i+3} - 60u_{i+2} + 120u_{i+1} - 65u_i - 12u_{i-1}}{60\Delta x} \simeq u'_i - \frac{\Delta x^5}{30} u_i^{(6)}$$

$$\frac{2u_{i+3} - 15u_{i+2} + 60u_{i+1} - 20u_i - 30u_{i-1} + 3u_{i-2}}{60\Delta x} \simeq u'_i + \frac{\Delta x^5}{60} u_i^{(6)}$$

$$\frac{-3u_{i+2} + 30u_{i+1} + 20u_i - 60u_{i-1} + 15u_{i-2} - 2u_{i-3}}{60\Delta x} \simeq u'_i - \frac{\Delta x^5}{60} u_i^{(6)}$$

$$\frac{12u_{i+1} + 65u_i - 120u_{i-1} + 60u_{i-2} - 20u_{i-3} + 3u_{i-4}}{60\Delta x} \simeq u'_i + \frac{\Delta x^5}{30} u_i^{(6)}$$

$$\frac{137u_i - 300u_{i-1} + 300u_{i-2} - 200u_{i-3} + 75u_{i-4} - 12u_{i-5}}{60\Delta x} \simeq u'_i - \frac{\Delta x^5}{6} u_i^{(6)}$$

Аппроксимации второй производной

- Казалось бы очевидно, что аппроксимацию второй производной можно получить, дважды применяя формулу для первой:

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_i \simeq \frac{\left(\frac{du}{dx}\right)_{i+1} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{\frac{u_{i+2}-u_i}{2\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-2}}{2\Delta x}}{2\Delta x} = \frac{u_{i+2} - 2u_i + u_{i-2}}{4\Delta x^2}$$
$$+\frac{\Delta x^2}{3} u_i^{(4)}.$$

- Видно, однако, что полученная формула соответствует аппроксимации на «прореженной» сетке, из которой точки удалены через одну. Легко догадаться, что переобозначив $2\Delta x \to \Delta x$, $i-2 \to i-1$, $i+2 \to i+1$, мы получим более компактную и более точную формулу для второй производной:

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_i \simeq \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \frac{\Delta x^2}{12} u_i^{(4)}.$$

- Разумеется, ее можно вывести, используя метод неопределенных коэффициентов, дифференцирование интерполяционного полинома, или введя временно вспомогательные точки с полуцелыми индексами:

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_i \simeq \frac{\left(\frac{du}{dx}\right)_{i+1/2} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{i-1/2}}{\Delta x} = \frac{\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \frac{\Delta x^2}{12} u_i^{(4)}$$

- К сожалению, трюк с введением полуцелых точек не проходит для получения формул более высокого порядка, таких как пятиточечная формула 4-го порядка для второй производной:

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_i \simeq \frac{-u_{i+2} + 16u_{i+1} - 30u_i + 16u_{i-1} - u_{i-2}}{12\Delta x^2} - \frac{\Delta x^4}{90} u_i^{(6)}.$$

Использование систем компьютерной алгебры

- Для исследования точности различных конечноразностных формул удобно пользоваться системами компьютерной алгебры, то есть программами, разработанными для выполнения на компьютере символьных вычислений, такими как Maple, Mathematica, Maxima, Reduce и др. Вот простой пример использования Maple для вычисления главного остаточного члена пятиточечных формул для первой и второй производных:

$$taylor\left(\frac{(-u(x+2\cdot h)+8\cdot u(x+h)-8\cdot u(x-h)+u(x-2\cdot h))}{12\,h}, h\right)$$

$$\mathrm{D}(u)(x)-\frac{1}{30}\,\mathrm{D}^{(5)}(u)(x)\,h^4+\mathrm{O}(h^5)$$

$$taylor\left(\frac{-u(x+2\cdot h)+16\cdot u(x+h)-30\cdot u(x)+16\cdot u(x-h)-u(x-2\cdot h)}{12\,h^2}, h, 8\right)$$

$$\mathrm{D}^{(2)}(u)(x)-\frac{1}{90}\,\mathrm{D}^{(6)}(u)(x)\,h^4+\mathrm{O}(h^6)$$

Матрицы дифференцирования

Иногда удобно для операции вычисления производной сеточной функции использовать матричные обозначения.

$$u'_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}, \qquad \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ \vdots \\ u'_N \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 & \dots & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \iddots & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}$$

Функция $u(x)$ здесь полагается периодической: $u_0 = u_N$, $u_{N+1} = u_1$.

$$\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_N)^T, \qquad \mathbf{u}' = (u'_1, u'_2, \dots, u'_N)^T, \qquad \mathbf{u}' = \mathsf{D}_N \mathbf{u}.$$

$$u''_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}, \qquad \begin{pmatrix} u''_1 \\ u''_2 \\ \vdots \\ u''_N \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \iddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{u}'' = (u''_1, u''_2, \dots, u''_N)^T, \qquad \mathbf{u}'' = \mathsf{D}_N^{(2)} \mathbf{u}, \qquad \mathsf{D}_N^{(2)} \neq \mathsf{D}_N \cdot \mathsf{D}_N = \mathsf{D}_N^2.$$