УДК 517.947.43: 517.949.8

О ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

А.Б. Чаадаев[@], инженер-исследователь

Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
Москва, 119991 Россия
[@]Автор для переписки, e-mail: vdcentr@rambler.ru

В дифференциальных уравнениях первого, второго и третьего порядков с граничными условиями, соответствующими их точным решениям, произведена замена неоднородного члена и дифференциального оператора соответствующего порядка на разность операторов Лапласа в прямой и повёрнутой системах координат. Численное решение, полученное при решении уравнения-заменителя, соответствует точному решению исходных уравнений.

Ключевые слова: *уравнение Пуассона, дифференциальное уравнение в частных производных, краевая задача, разность операторов Лапласа, повёрнутая система координат, метод установления, уравнение-заменитель, оператор Милна, структура функции, компьютерное моделирование.*

ABOUT SOME SUPPLEMENTARY POSSIBILITY FOR NUMERICAL SOLUTION OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS

A.B. Chaadaev[@]

A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of the Russian Academy of Sciences,
Moscow, 119991 Russia
[@]Corresponding author e-mail: vdcentr@rambler.ru

A substitution of an non-homogeneous term and of a differential operator by the difference of Laplace operators in the direct co-ordinate system and in the turned one in the partial differential equations of first, second and third order is proposed. The numerical solution obtained by solving the substituting equation corresponds to the exact solution of the initial equations.

Keywords: *Poisson equation, partial differential equation, boundary value problem, difference of Laplace operators, turned co-ordinate system, method of transition to a steady state, substituting equation, Milne operator, structure of function, computer simulation.*

Компьютерное моделирование химических процессов, основанное на решении систем дифференциальных уравнений различных порядков, нуждается в совершенствовании методов решения и проверки получаемых результатов. Развитие численных методов неизбежно требует поиска и проверки новых принципов численного представления конкретных химических объектов. Для химической технологии наиболее удобным является оформление поиска цели исследования в виде краевых задач. Такого рода подход становится необходимым в случае уточнения данных ЯМР нестабильных образцов, при проектировании и контроле процессов жидкостной экстракции редких элементов, при прогнозировании поведения материалов в случае длительного воздействия сред, недоступных для эксперимента.

При решении краевой задачи методом сеток требуется определить значения функции Ф(x,y), удовлетворяющей заданному дифференциальному уравнению в области с указанными краевыми условиями. Область поиска решения покрывается множеством равноотстоящих точек (сеткой). Расстояние до любой ближайшей точки равно шагу сетки $\Delta_{сетки}=\Delta x=\Delta y$. В дифференциальном уравнении производим замену членов, содержащих дифференцирование, на члены, содержащие алгебраические операции (построение приближенных уравнений). Далее решаем полученную систему уравнений. Требование получения высокой точности численного решения может быть удовлетворено применением более точных форм приближенных уравнений. Обычно для этого в состав производных конечно-разностного оператора наряду со значениями функций в узлах сетки (x,y), (x+Δx,y), (x,y+Δy), (x-Δx,y), (x,y-Δy) вводят значения функции в узлах (x+Δx,y+Δy), (x+Δx,y-Δy), (x-Δx,y+Δy), (x-Δx,y-Δy) [1]. Это введение при построении оператора Лапласа можно определить как одновременное использование прямого и повернутого операторов.

Возможность применения оператора Лапласа в повёрнутой системе координат была использована в работах [1] и [2], для решения уравнения Пуассона, при граничных условиях, соответствующих точному решению.

При численном решении в конечных разностях исходное дифференциальное уравнение второго порядка $\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}+f(x,y)=0$

было заменено на уравнение

$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}-\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y'^2}\right)=0$, где $\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}$ – оператор Лапласа в декартовой системе координат (*x, y*),

$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y'^2}$ – оператор Лапласа в системе координат

(x',y'), повёрнутой относительно обычной системы координат на угол 45°. Такая разность операторов Лапласа соответствует оператору Милна, приведённому в [4]. Возможность такой замены объяснялась в [2] равенством прямого и повёрнутого операторов Лапласа в системах координат (x,y) и (x',y') во всей области, включая и границы. По мере продвижения исследований от этого объяснения пришлось отказаться.

Так, было установлено, что конечно-разностное равенство $\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta x^2}+\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta y^2}=\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta x'^2}+\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta y'^2}$ выполняется только

для некоторых функций и при условиях $\Delta x=\Delta y;\ \Delta x'=\Delta y'=\sqrt{\Delta x^2+\Delta y^2}$. Но значения Δx и Δy могут быть как стремящимися к нулю, так и конечными величинами. Очевидно, что речь идет о наличии у таких функций структуры, выраженной указанным равенством. Применение этого равенства позволило получать точные решения при помощи только значений соответствующей функции на границе, без использования в конечно-разностных уравнениях функций источников $f(x,y)$, присутствующих в уравнении Пуассона. В более общем случае структура функций выражается равенством $\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta x^2}+\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta y^2}=\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta x'^2}+\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta y'^2}+F(x,y,\Delta x,\Delta y)$

где $F(x,y,\Delta x,\Delta y)$ – функция, зависящая от величин x, y, Δx, Δy. Например, для функции $f(x,y)=x^2y^2$ (при условии $\Delta x=\Delta y;\ \Delta x'=\Delta y'=\sqrt{\Delta x^2+\Delta y^2}$) структурное равенство приобретает вид $\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta x^2}+\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta y^2}=\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta x'^2}+\frac{\Delta^2\Phi}{\Delta y'^2}+\Delta x^2+\Delta y^2$. Причём Δx и Δy могут как стремиться к нулю, так и стремиться к большим числам.

В настоящем исследовании предлагается развитие предложенного в [1] и [2] способа решения краевых задач.

Мы имеем дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}+f_1(x,y)=0, \qquad (1)$$

обладающее точным решением $\Phi(x,y)$. Это решение может являться решением ряда других дифференциальных уравнений. Такими уравнениями являются, например:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial x}+\frac{\partial\Phi}{\partial y}+f_2(x,y)=0, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial^3\Phi}{\partial x^3}+\frac{\partial^3\Phi}{\partial y^3}+f_3(x,y)=0, \qquad (3)$$

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}-\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y'^2}\right)=0,$$

где $\partial x'=\partial y'=\sqrt{\partial x^2+\partial y^2}$. (4)

Решение каждого из уравнений представляет собой самостоятельную краевую задачу с выбором соответствующей разностной схемы, но граничные условия для данных задач одинаковы и решение тоже должно быть получено одно и то же. Это предоставляет возможность выбора наиболее удобного уравнения. Можно предположить, что таким окажется,применённое в [1] и [2] уравнение (4).

Применения такого способа проиллюстрируем примером.

Функция $\Phi(x,y)=x^4+y^4-4x^3y-4xy^3-\sin^5(x^3-2)-\exp(\alpha y^2+1)$ (5)

является точным решением следующих дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial x}+\frac{\partial\Phi}{\partial y}+12x^2y+12y^2x+15x^2\sin^4(x^3-2)\cos(x^3-2)+2\alpha y\exp(\alpha y^2+1)=0; \qquad (6)$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}+48xy+12x^2+12y^2+30x\sin^4(x^3-2)\cos(x^3-2)+\\ 180x^4\sin^3(x^3-2)\cos(x^3-2)+45x^4\sin^5(x^3-2)+(2\alpha+4\alpha^2y^2)\exp(\alpha y^2+1)=0\end{gathered}; \qquad (7)$$

$$\frac{\partial^3\Phi}{\partial x^3}+\frac{\partial^3\Phi}{\partial y^3}+1620x^6\sin^2\left(x^3-2\right)\cos^3\left(x^3-2\right)-1755x^6\sin^4\left(x^3-2\right)\cos\left(x^3-2\right)+$$
$$1080x^3\sin^3\left(x^3-2\right)\cos^2\left(x^3-2\right)-270x^3\sin^5\left(x^3-2\right)+30\sin^4\left(x^3-2\right)\cos\left(x^3-2\right)+ .\qquad (8)$$
$$\left(8\alpha^3y^3+12\alpha^2y\right)\exp\left(\alpha y^2+1\right)=0$$

Численное решение этих уравнений затруднительно. Уравнения первого и третьего порядков не могут быть решены из-за неустойчивости разностных схем. Решению дифференциального уравнение второго порядка препятствует громоздкая функция источника. В данном случае мы заранее знаем, что решение любого из предложенных уравнений является решением уравнения (4). Воспользуемся возможностью замены. Процедура решения этого уравнения-заменителя не представляет затруднений. Такие особенности, как отсутствие функции источника, возможность совпадения численного решения с точным решением и независимость получаемого решения от величины шага по пространству, облегчают проверку решения.

Граничные условия для уравнения (4) остаются прежними. Расчёты проводились по конечно-разностной схеме

$$\frac{1}{\Delta t}\left(\Phi^{j+1}_{x,y}-\Phi^{j}_{x,y}\right)=\frac{1}{(\Delta x)^2}\left(\Phi^{j}_{x+1,y}-2\Phi^{j}_{x,y}+\Phi^{j}_{x-1,y}\right)+\frac{1}{(\Delta y)^2}\left(\Phi^{j}_{x,y+1}-2\Phi^{j}_{x,y}+\Phi^{j}_{x,y-1}\right)-$$
$$-\frac{1}{(\Delta x)^2+(\Delta y)^2}\left(\Phi^{j}_{x+1,y-1}-2\Phi^{j}_{x,y}+\Phi^{j}_{x-1,y+1}\right)-\frac{1}{(\Delta x)^2+(\Delta y)^2}\left(\Phi^{j}_{x+1,y+1}-2\Phi^{j}_{x,y}+\Phi^{j}_{x-1,y-1}\right)\qquad (9)$$

для прямоугольной области $0\le x\le 6$, $0\le y\le 6$ методом установления. Шаг по пространству $\Delta x = \Delta y = 1$.

Отклонение приближённого решения от точного (невязка) вычислялось по формуле

$$\sigma=\sum\left\|\Phi\textit{точное}\right|-\left|\Phi\textit{расчётное}\right\|,\qquad (10)$$

где сумма бралась по всем расчётным точкам области. Для проверки было проведено численное решение при шаге по пространству $\Delta x = \Delta y = 0.5$.

Результаты расчётов приведены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты численного решения уравнений (6), (7), (8), (4)

Дифференциальное уравнение	Точное решение	Невязка
$\frac{\partial\Phi}{\partial x}+\frac{\partial\Phi}{\partial y}+12x^2y+12y^2x+$ $15x^2\sin^4\left(x^3-2\right)\cos\left(x^3-2\right)+$ $2\alpha y\exp\left(\alpha y^2+1\right)=0$	$\Phi(x,y)=$ $x^4+y^4-4x^3y-$ $4xy^3-\sin^5\left(x^3-2\right)-$ $\exp\left(\alpha y^2+1\right)$	численное решение не получено
$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}+48xy+12x^2+12y^2+$ $30x\sin^4\left(x^3-2\right)\cos\left(x^3-2\right)+$ $180x^4\sin^3\left(x^3-2\right)\cos\left(x^3-2\right)+$ $45x^4\sin^5\left(x^3-2\right)+\left(2\alpha+4\alpha^2y^2\right)\exp\left(\alpha y^2+1\right)=0$		численное решение не получено
$\frac{\partial^3\Phi}{\partial x^3}+\frac{\partial^3\Phi}{\partial y^3}+1620x^6\sin^2\left(x^3-2\right)\cos^3\left(x^3-2\right)-$ $1755x^6\sin^4\left(x^3-2\right)\cos\left(x^3-2\right)+$ $1080x^3\sin^3\left(x^3-2\right)\cos^2\left(x^3-2\right)-$ $270x^3\sin^5\left(x^3-2\right)+30\sin^4\left(x^3-2\right)\cos\left(x^3-2\right)+$ $\left(8\alpha^3y^3+12\alpha^2y\right)\exp\left(\alpha y^2+1\right)=0$		численное решение не получено
$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}-\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y'^2}\right)=0$		< 1.0·10-14 $\Delta x = \Delta y = 1.0$ $\Delta t = 0.257$ < 3.0·10-12 $\Delta x = \Delta y = 0.5$ $\Delta t = 0.06$

Проведённая замена исходного уравнения на более простое может быть полезной при создании алгоритмов численного решения уравнений в частных производных.

Автор выражает благодарность доценту А.С. Литвиновичу за необходимую критику исследуемого метода и помощь при обсуждении результатов, а также всему коллективу кафедры физики МИТХТ за поддержку в течение всего периода работы.

Список литературы:

1. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы численного анализа. М.-Л.: Гос. изд-во физ.-мат. Литературы, 1962. 199 с.

2. Чаадаев А.Б. // Вестник МИТХТ. 2011. Т. 6. № 4. С. 111−112.

3. Чаадаев А.Б. // Вестник МИТХТ. 2013. Т. 8. № 2. С. 101−102.

4. Милн В.Е. Численное решение дифференциальных уравнений. М.: Изд-во ИЛ, 1955. 143 с.

References:

1. Kantorovich L.V., Krylov V.I. Priblijennye metody chislennogo analisa [Approximative methods of numerical analysis]. Moscow-Leningrad: Gosudarstvennoe izdatelstvo fiziko-matematicheskoi literatury, 1962. 199 p.

2. Chaadaev A.B. // Vestnik MITHT (Fine Chem. Technologies). 2011. Vol. 6. № 4. P. 111–112 (in Russ.).

3. Chaadaev A.B. // Vestnik MITHT (Fine Chem. Technologies). 2013. Vol. 8. № 2. P. 101–102 (in Russ.).

4. Miln W.E. Chislennoe reshenie differencialnyh uravntnii [Numerical solution of differential equations]. Moscow.: Izdatelstvo inostrannoi literatury, 1955. 143 p. (in Russ.).