

О НЕКОТОРЫХ ВОЗМОЖНЫХ ПРИМЕНЕНИЯХ В ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТАХ ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА В ПОВЕРНУТОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

А.Б. Чаадаев, инженер-исследователь

Лаборатория фосфорорганических соединений, ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН,

Москва, 119991 Россия

e-mail: vdcentr@rambler.ru

Оператор Лапласа в повернутой системе координат («повернутый» оператор Лапласа) вводится в численном методе сеток вдоль диагональных линий. В данной работе сделана попытка использовать его для численного решения двумерного уравнения Пуассона. Обсуждаются преимущества и недостатки такого подхода и трудности, связанные с его реализацией.

Ключевые слова: уравнение Пуассона, конечно-разностный метод, краевая задача, «повернутый» оператор Лапласа, метод установления.

Исследуется уравнение Пуассона, имеющее точное решение, при граничных условиях, соответствующих этому решению. Как показано в [1], оператор Лапласа для дважды дифференцируемой функции $\Phi(x, y)$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2},$$

в обычной (декартовой) системе координат (x, y) равен оператору Лапласа

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y'^2}.$$

В системе координат (x', y') , повернутой относительно исходной на произвольный угол α , выполняется равенство

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y'^2}. \quad (1)$$

Другими словами: любая дважды дифференцируемая функция удовлетворяет дифференциальному уравнению (1), т.е. уравнение (1) имеет, в некотором смысле, фундаментальный характер.

В [1] это равенство было использовано для численного решения уравнения Пуассона

$$\Phi(x+\Delta x, y) + \Phi(x-\Delta x, y) + \Phi(x, y+\Delta y) + \Phi(x, y-\Delta y) - 0.5\Phi(x+\Delta x, y-\Delta y) - 0.5\Phi(x-\Delta x, y+\Delta y) - 0.5\Phi(x+\Delta x, y+\Delta y) - 0.5\Phi(x-\Delta x, y-\Delta y) - 2\Phi(x, y) = 0, \quad (5)$$

в которой шаги по пространству, при их равенстве, отсутствуют и организовать итерационный процесс по формуле

$$\Phi(x, y)_{\text{новое}} = (1-\alpha)\Phi(x, y)_{\text{старое}} + \alpha \Phi(x, y), \quad (6)$$

где $\Phi(x, y)$ – значение функции в рассчитываемой точке, вычисленное по формуле (5), α – демпфер. Такой демпфер для обеспечения устойчивости счёта был впервые введён Б.В. Алексеевым в работе [2]. Величина α выбирается экспериментально в пределах от 0 до 1.

Для примера рассматривалось уравнение (7)

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + f(x, y) = 0. \quad (2)$$

Функция источника $f(x, y)$ заменялась оператором Лапласа в повернутой на угол 45° системе координат

$$f(x, y) = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y'^2}\right), \quad (3)$$

и численно в конечных разностях методом установления решалось дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y'^2}\right) = 0, \quad (4)$$

т.е. использовалось в конечно-разностном виде равенство (1).

Так как ошибки аппроксимации при численной реализации (4) входят с противоположными знаками, то суммарная ошибка аппроксимации становится меньше и полученное численное решение оказывается значительно ближе к точному, чем при использовании традиционного подхода.

В продолжение [1] отметим следующее:

1) вместо метода установления можно сразу для получения расчётной формулы использовать конечно-разностную запись уравнения (4)

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} - 0.25 \exp(-0.5 \cdot x) - 0.16 \cdot \exp(-0.4 \cdot y) = 0. \quad (7)$$

с граничными условиями:

$$\Phi(0, y) = 1.0 + \exp(-0.4 \cdot y), \quad \Phi(2, y) = \exp(-1.0) + \exp(-0.4 \cdot y),$$

$$\Phi(x, 0) = \exp(-0.5 \cdot x) + 1.0, \quad \Phi(x, 3) = \exp(-0.5 \cdot x) + \exp(-1.2), \quad (8)$$

имеющее точное решение:

$$\Phi(x, y) = \exp(-0.5 \cdot x) + \exp(-0.4 \cdot y), \quad (9)$$

и исследовалась зависимость численного решения от величины шага сетки по про-

странству. Были проведены расчёты для прямоугольной области $0 \leq x \leq 2$, $0 \leq y \leq 3$ с помощью предложенного метода и классического метода установления. Отклонение приближённого решения от точного (невязка) вычислялось по формуле где сумма бралась по всем расчётным точкам внутри области. Величина демпфера принималась равной 0.5. Шаг по времени

составлял $\Delta t = 0.257 \div 0.0000257$. Результаты расчётов приведены в таблице.

$$\sigma = \frac{\sum \left| \frac{\Phi_{\text{точное}} - \Phi_{\text{расчётное}}}{\Phi_{\text{точное}}} \right|}{(\text{число расчётных точек})} \quad (10)$$

Таблица 1. Результаты численного решения уравнения (7)

Шаг по пространству	Число расчётных точек внутри области	Невязка для предложенного метода	Невязка для метода установления
1.0	2	$2.054 \cdot 10^{-15}$	$7.069 \cdot 10^{-3}$
0.5	15	$7.969 \cdot 10^{-15}$	$5.900 \cdot 10^{-4}$
0.25	77	$3.774 \cdot 10^{-14}$	$7.183 \cdot 10^{-5}$
0.125	345	$5.853 \cdot 10^{-13}$	$1.584 \cdot 10^{-5}$
0.0625	1457	$7.599 \cdot 10^{-12}$	$3.402 \cdot 10^{-6}$
0.03125	5640	$9.710 \cdot 10^{-11}$	$6.672 \cdot 10^{-7}$

Из табл.1 видно, что точность расчётов по предложенному методу остаётся значительно выше, чем по классическому, во всём диапазоне изменения величины шага сетки, хотя поведение невязки противоположно классическому, а именно, она возрастает с уменьшением шага сетки;

2) увеличение точности решения уравнения Пуассона получается за счёт уменьшения точности задания функции источника с помощью «повёрнутого» оператора Лапласа, имеющего свою ошибку аппроксимации, что при решении ряда задач не всегда может быть оправдано;

3) функция источника, точное решение и граничные условия уравнения Пуассона взаимосвязаны и, судя по всему, при численном счёте, зная граничные условия, «повёрнутый» оператор Лапласа как бы восстанавливает из гранич-

ных условий одну из возможных функций источника, и численный счёт приводит к соответствующему этой функции точному решению уравнения Пуассона, т.е., в некотором смысле, решается обратная задача для уравнения Пуассона.

Предложенный подход может быть полезен при решении краевых задач, связанных с уравнением Пуассона, а также, возможно, привлечь других вычислителей к использованию оператора Лапласа в повёрнутой системе координат в своих расчётах.

Автор выражает благодарность заведующему кафедрой физики МИТХТ Б.В. Алексею за руководство этой работой, доценту кафедры А.С. Литвиновичу за обсуждение результатов и конструктивную критику предложенного подхода.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Чаадаев А.Б. Об одной особенности численного решения уравнения Пуассона // Вестник МИТХТ. 2011. Т. 6. № 4. С. 111–112.
2. Алексеев Б.В. Ламинарный пограничный слой у сублимирующей поверхности // Журн. вычислительной математики и математической физики. 1964. Т. 4. № 3. С. 512–524.

ON SOME POSSIBLE APPLICATIONS OF LAPLACE OPERATOR IN A REVOLVED COORDINATE SYSTEM FOR NUMERICAL CALCULATIONS

A.B. Chaadaev

A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119571 Russia

@Corresponding author e-mail: vdcentr@rambler.ru

The Laplace operator in a revolved coordinate system (the “revolved” Laplace operator) is introduced in numerical mesh method along diagonal lines. In this paper an attempt is made to use it for numerical solution of the two-dimensional Poisson equation. Advantages and disadvantages of this approach and difficulties in its realization are discussed.

Key words: poisson equation, finite-difference method, boundary value problem, ‘revolved’ Laplace operator, method of transition to a steady state.