МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

УДК 517.947.43: 517.949.8

ОБ ОДНОЙ ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

А.Б. Чаадаев, инженер-исследователь

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

e-mail:vdcentr@rambler.ru

Для уравнения Пуассона с граничными условиями, соответствующими его точному решению, получена расчётная формула, в которой неоднородный член заменён оператором Лапласа в повернутой системе координат. Численное решение, полученное по этой формуле, оказалось значительно ближе к точному, чем решение по традиционной формуле, включающей неоднородный член.

A calculating formula to solve Poisson equation with boundary conditions conforming to its exact solution is proposed. In this formula an inhomogeneous term is replaced by Laplace operator in a revolved coordinate system. The numerical solution received by this formula is considerably more accurate than the solution with using of the tradition form inclusive the inhomogeneous term.

Ключевые слова: *уравнение Пуассона, конечно-разностный метод, дифференциальное уравнение в частных производных, краевая задача, производная по направлению, оператор Лапласа, повёрнутая система координат, метод установления.*

Key words: *Poisson equation, finite-difference method, partial differential equation, boundary value problem, directional derivative, Laplace operator, revolved coordinate system, method of transition to a steady state.*

Исследовались краевые задачи для уравнения Пуассона

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

в двумерной области. Рассматривались точные решения этих задач при соответствующих этим решениям граничных условиях. Решениями этих задач являлись функции, имеющие вторые производные и выше [1].

Рассмотрим оператор Лапласа

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} \qquad (2)$$

в обычной (декартовой) системе координат (x,y) и в системе координат (x',y') повёрнутой относительно исходной на угол α. Оказывается, что для дважды дифференцируемой функции оператор Лапласа

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y'^2} \qquad (3)$$

в повёрнутой системе координат равен оператору Лапласа в исходной системе координат, т.е. выполняется равенство:

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y'^2}=\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} \qquad (4)$$

Действительно, формула для второй производной по направлению x' имеет вид [2]:

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x'^2}=\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\cos^2\alpha+2\frac{\partial^2\Phi}{\partial x\partial y}\cos\alpha\cos\beta+ +\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}\cos^2\beta \qquad (5)$$

где $cos\alpha$ и $cos\beta$ − направляющие косинусы с осями x и y, соответственно. Аналогично для направления y' имеем

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial y'^2}=\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\cos^2\alpha'+2\frac{\partial^2\Phi}{\partial x\partial y}\cos\alpha'\cos\beta'+ +\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}\cos^2\beta' \qquad (6)$$

(рис. 1). Складывая эти два равенства и учитывая тригонометрические соотношения между углами, получим искомое утверждение. Важно, что в исследуемых краевых задачах при граничных условиях, соответствующих их точным решениям, равенство операторов Лапласа в системах координат (x, y)и (x', y') выполняется во всей области, включая и границы.

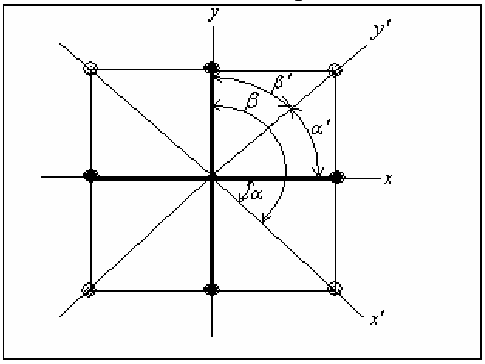

Рис.1. Исходная и повёрнутая на угол 45° системы координат.

Так как из уравнения Пуассона следует, что неоднородный член f (x, y) равен оператору Лапласа в декартовой системе координат (x, y), взятому с обратным знаком и он же равен оператору Лапласа в повёрнутой системе координат (x', y') с тем же знаком, то, решая численно уравнение Пуассона методом установления, можно в расчётной формуле заменить неоднородный член f (x, y) оперататором Лапласа, расписанному в конечных разностях по направлениям (x', y'), составляющим угол α по отношению к исходным (x, y).

Хотя полученная расчётная формула имеет формально такую же ошибку аппроксимации, как и традиционная [3], содержащая неоднородный член f (x, y), однако численное решение, полученное по этой формуле, оказалось значительно ближе к точному, чем по традиционной.

Расчёты проводились по конечно-разностной схеме со вторым порядком аппроксимации для прямоугольной области *0≤x≤2*, *0≤y≤3*. Был использован метод установления. Шаг по времени Δt изменялся от 0.05 до 0.3, угол α составлял 45°. Отклонение приближённого решения от точного (невязка) вычислялась по формуле

$$\sigma = \sum \left\| \Phi_{\text{точное}} \right| - \left| \Phi_{\text{расчётное}} \right\| \qquad (7)$$

где сумма бралась по всем расчётным точкам области. Результаты расчётов приведены ниже.

Уравнение:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} - 2 = 0 \qquad (8)$$

Точное решение:

$$\Phi(x,y) = 2x^2 - y^2. \qquad (9)$$

Граничные условия:

$$\Phi(0,y) = -y^2,\ \Phi(2,y) = 8-y^2,\ \Phi(x,0) = 2x^2,\ \Phi(x,3) = 2x^2-9. \qquad (10)$$

Шаги по пространству: $\Delta x = \Delta y = 1$.

Таблица 1. Результаты решения уравнения (8).

Конечно-разностная схема	Шаг по времени	Невязка
Традиционная (*шаблон «крест»*)	0.1	0
	0.2	0
	0.25	0
Исследуемая (*шаблон «крест минус крест с поворотом»*)	0.1	0
	0.2	0
	0.25	0

Уравнение:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} - 0.25 \cdot \left[\exp(-0.5 \cdot x) + \exp(-0.5 \cdot y)\right] = 0 \qquad (11)$$

Точное решение:

$$\Phi(x,y) = \exp(-0.5 \cdot x) + \exp(-0.5 \cdot y). \qquad (12)$$

Граничные условия:

$$\Phi(0,y)=1.0+\exp(-0.5 \cdot y),\ \Phi(3,y)=\exp(-1.5)+\exp(-0.5 \cdot y),\ \Phi(x,0) = \exp(-0.5 \cdot x)+1.0,\ \Phi(x,4) = \exp(-0.5 \cdot x)+\exp(-2.0). \qquad (13)$$

Шаги по пространству: $\Delta x = \Delta y = 1$.

Таблица 2. Результаты решения уравнения (11).

Конечно-разностная схема	Шаг по времени	Невязка
Традиционная (*шаблон «крест»*)	0.1	0.019978
	0.2	0.019978
	0.25	0.019978
Исследуемая (*шаблон «крест минус крест с поворотом»*)	0.1	$1.52 \cdot 10^{-13}$
	0.2	$9.12 \cdot 10^{-16}$
	0.3	0

Уравнение:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} - 12x^2 + 2 = 0 \qquad (14)$$

Точное решение: (15)

$$\Phi(x,y) = x^4 - y^2. \qquad (15)$$

Граничные условия:

$$\Phi(0,y) = -y^2,\ \Phi(2,y) = 16-y^2,\ \Phi(x,0) = x^4,\ \Phi(x,3) = x^4-9. \qquad (16)$$

Шаги по пространству: $\Delta x = \Delta y = 0.5$.

Таблица 3. Результаты решения уравнения (14).

Конечно-разностная схема	Шаг по времени	Невязка
Традиционная (*шаблон «крест»*)	0.05	0.058405
Исследуемая (*шаблон «крест минус крест с поворотом»*)	0.05	$3.46 \cdot 10^{-15}$
	0.07	$1.22 \cdot 10^{-15}$

Ошибка аппроксимации второй производной центральными разностями определяется по формуле

$$\frac{h^2}{12}\Phi^{(IV)} \qquad (17),$$

где h – величина шага по пространству, а $\Phi^{(IV)}$ – четвёртая производная от функции $\Phi(x, y)$. Для первого уравнения с точным решением $\Phi(x,y)=2x^2-y^2$ она равна нулю, поэтому процесс установления выходит на точное решение, и невязка везде нулевая. Для двух других уравнений ошибка аппроксимации отлична от нуля, и возникает ненулевая невязка. Из полученных расчётов следует, что с увеличением шага по времени точность решения возрастает, (невязка уменьшается), а для второго уравнения при шаге по времени 0.3 она даже достигает нуля (в машинном представлении). Обнаруженные особенности, связанные с решением уравнения Пуассона, могут представлять интерес для дальнейшего исследования и быть использованы при конструировании расчётных схем повышенной точности.

Автор выражает благодарность заведующему кафедрой физики МИТХТ Б.В. Алексееву за руководство этой работой, доценту кафедры А.С. Литвиновичу за обсуждение численных методов решения уравнения Пуассона.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Ши Д. Численные методы в задачах теплообмена. – М.: Мир, 1988. 544 с.
2. Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. – М.: Наука, 1966. Т. 1. 608 с.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1983. 616 с.