

J. R. M. RADOK

NUMERYCZNE MODELOWANIE PROCESÓW FIZYCZNYCH

**ROZPRAWY
INŻYNIERSKIE
CLXXX**

TOM IX • ZESZYT 1 • ROK 1961

Do niedawna jeszcze wykonywanie obliczeń wiązało się ściśle z kręceniem korbki arytmometru¹. Sztuka obliczeń numerycznych wymagała z jednej strony szybkiego i wprawnego wykonywania czynności mechanicznych (np. mnożenie przez liczbę większą od 6 można wykonać szybciej za pomocą tzw. mnożenia ujemnego), z drugiej zaś strony — schematu obliczeń tak ułożonego, aby nie dopuszczał jakichkolwiek strat pracy mechanicznej. Inaczej mówiąc, dla przeprowadzenia prac numerycznych niezbędne były rozważania prowadzące do ograniczenia ilości działań arytmetycznych do bezwzględniego minimum.

Nic więc dziwnego, że przy takim nastawieniu wiele wysiłku włożono w tabularyzację funkcji specjalnych, o wyborze których decydował stopień przydatności w zagadnieniach matematyki stosowanej. Ze względu na to, z kolei, nastąpił podział pracy — obliczenia dla dowolnego problemu szczegółowego mogły ograniczyć się głównie do znajdowania współczynników występujących w kombinacjach liniowych rozwiązań, wartości własnych itp. Uważano, że zagadnienie zostało rozwiązane dokładnie z chwilą, gdy zdołano wyrazić jego rozwiązanie w terminach stabularyzowanych funkcji specjalnych.

Często równania wyprowadzane z sytuacji fizycznej okazywały się zbyt skomplikowane i należało poszukiwać rozwiązań przybliżonych.

W miarę konieczności rozwiązywania coraz trudniejszych zagadnień technicznych wzrosły wymagania stawiane metodom numerycznym i na plan pierwszy wysunęły się proste metody numeryczne. Oparte one były głównie na pojęciu różnicy skończonej, które nie tylko pozwalało na formalne przejście od równań różniczkowych do schematów rachunkowych, lecz również pozwoliło stworzyć formalny system matematyczny. W praktyce rachunkowej najbardziej znanym odkryciem była metoda relaksacyjna SOUTHWELLA, jeden z rzadkich przykładów metody nie wymagającej dużych opracowań dla uzyskania oszczędności w zakresie operacji arytmetycznych.

Sytuacja taka była przede wszystkim wynikiem dążenia do jak największej uniwersalności metody.

Pojawienie się szybkołatających maszyn elektronowych doprowadziło do zupełnego nie liczenia się z ilością użytych operacji arytmetycznych. Wylimitowane zostało nudne operowanie liczbami, natomiast pojawiły się w rozważaniach duże ilości cyfr. Jednakże nastawienie na otrzymywanie wyników rachunkowych za pomocą tych nowych maszyn nie stwarzało okazji do opracowania nowych metod

¹ Referat wygłoszony na konferencji PAN w Gdańsku dnia 24 sierpnia 1959.

numerycznych dostosowanych do dużej ilości operacji. Współczesne metody numeryczne są — z bardzo małymi wyjątkami — adaptacją metod starych powstałych w okresie, gdy działania arytmetyczne były bardzo drogie. Ocena wydajności metody — jeśli w ogóle jest dokonywana — opiera się na ogólnej oszczędności czasu pracy maszyny. Czynnikiem decydującym stał się w rzeczywistości koszt kupienia lub wynajęcia maszyny szybkoobrotowej; godziny pracy ludzkiej, zużyte na analizowanie wyników, są rzadko brane pod uwagę, a dane te nie są przeważnie badane zbyt dokładnie.

Pewne aspekty tego stanu rzeczy dobrze ilustruje książka [1], omawiająca problem dokładności rozwiązań zagadnień teorii powłok. Bardzo rzadko uzyskuje się rozwiązania dokładne równań przybliżonych teorii powłok, nawet dla zagadnień o symetrii osiowej. W przypadkach powłok elipsoidalnych i toroidalnych przybliżone rozwiązania analityczne znaleźć można za pomocą dobrze znanych metod asymptotycznych. W pracy rozpatrywane były zagadnienia brzegowe sformułowane w dwu punktach dla równań różniczkowych zwyczajnych drugiego rzędu o współczynnikach funkcyjnych. W przypadku tym rozwiązania asymptotyczne zawierały niestabularyzowane wcześniej funkcje specjalne. Wyłoniła się więc dalsza konieczność obliczeń, przy czym należało podjąć decyzję: czy tabularyzować te nowe funkcje, czy dokonać numerycznego całkowania tych równań. Zastosowane zostały obie metody, a rezultaty porównano. Schemat obliczeń numerycznych oparty był na pół-analitycznej metodzie obliczania rozwiązań liniowo niezależnych za pomocą całkowania w rozpatrywanym obszarze dla rozmaitych warunków początkowych. Okazało się, że bezpośrednio rozwiązania numeryczne były dokładniejsze i łatwiej je było otrzymać. Z tego względu w zaleceniach końcowych wyróżniono bezpośrednio metody numeryczne. Należy jednakże podkreślić, że użyta metoda numeryczna miała charakter analogiczny do metod analizy matematycznej, ponieważ prowadziła do określania rozwiązań liniowo niezależnych. Należało następnie tworzyć kombinacje liniowe tych rozwiązań ze stałymi współczynnikami.

Poniżej omówione zostanie inne możliwe podejście do zagadnienia, jakim jest bezpośrednia metoda numeryczna oparta na naśladowaniu (modelowaniu) badanego procesu fizycznego.

Weźmy teraz pod uwagę ogólną postać praw fizycznych i zbadajmy, jakie warunki muszą te prawa spełniać, aby takie naśladowanie było możliwe. Wstępny podział tych zagadnień matematyki stosowanej, wiążące się z równaniami różniczkowymi, można oprzeć na występowaniu lub nie występowaniu czasu, tj. na ich ustalonym lub nieustalonym charakterze. Jednakże stan ustalony należy rozważać jako pewien stan idealny, który w rzeczywistości nigdy nie występuje, ponieważ jest stanem granicznym procesu zachodzącego w nieskończenie długim okresie czasu. Taka interpretacja znajduje gotowe poparcie w tym, że liczne efektywne metody rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych (z warunkami brzegowymi sformułowanymi w dwu punktach) i równań różniczkowych cząstkowych (z podaną wartością brzegową) opierają się na metodzie kolejnych przybliżeń. Tego rodzaju metody

iteracyjne, obecnie stanowiące chwyt matematyczny nie związany z żadnym procesem fizycznym, zawierają parametr (numer kolejnego przybliżenia), który można by interpretować jako czas. Stąd też nie będzie dużym ograniczeniem zakresu omawianych tu badań założenie, że odpowiednie równania zawierają czas. Takie podejście wprowadzi pewną dowolność do sposobu, w jaki będą zależeć od czasu te problemy, które są problemami stanu ustalonego w sensie tradycyjnym, np. w teorii sprężystości. Jeden z możliwych sposobów wprowadzenia zmiennej czasowej do takich zagadnień zostanie dokładnie omówiony nieco później.

Modelowaniem² nazwiemy postępowanie, w którym za pomocą modeli, analogów lub środków numerycznych imituje się zmiany zależnych od czasu wielkości charakteryzujących proces fizyczny. Metody użycia modeli i analogów są oczywiście dobrze znane, można tu opierać się na obszernych dawniejszych wynikach uzyskanych w wielu dziedzinach fizyki. Bardzo często dostarczają one potrzebnych informacji w sposób szybki, wygodny i niedrogi. W niektórych jednak przypadkach tylko modele w pełnej skali mogą zastąpić badania teoretyczne, a ich budowa może okazać się kosztowna i wymagać wiele czasu. Może się jednocześnie okazać, że modelowanie numeryczne oparte czy to na teorii zagadnienia, czy to na znajomości związanych z nim zjawisk fizycznych jest korzystniejsze, ponieważ przy raz opracowanym programie analiza szerokiej klasy parametrów rzadko związana jest z jakimiś większymi trudnościami i wymaga bardzo małych dodatkowych nakładów.

Będziemy przyjmować, że prawa fizyki matematycznej mają postać

$$\dot{\varphi}_i = \Phi_i \left(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1}, \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_3}, \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial x_1^2}, \dots, x_1, x_2, x_3, t \right),$$

$$\dot{\varphi}_i = \frac{\partial \varphi_i}{\partial t}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

gdzie φ_i są zmiennymi zależnymi, x_i zmiennymi przestrzennymi (współrzędnymi), a t oznacza czas. Wszystkie te zmienne mogą posiadać wymiary lub być wielkościami niemianowanymi. Ważną cechą podanych równań różniczkowych jest to, że zawierają one czas *explicite*. Na pierwszy rzut oka wydawać się może, że jest to dość duże ograniczenie, jednak przegląd znanych praw fizycznych wykazuje, że mają one na ogół tę własność. Postać podanych wyżej związków pozwala interpretować prawa fizyczne jako przekształcenia rozkładów przestrzennych zmiennych zależnych w rozkłady przestrzenne szybkości ich zmian (pochodnych względem czasu). Wobec tego metody numeryczne rozwiązywania opisywanych przez te równania zagadnień (przy podanych wartościach początkowych lub wartościach brzegowych) będą się różniły między sobą sposobem, w jaki wykorzystane w nich będą prędkości zmian rozkładów.

Postawimy teraz następujące pytanie: jakie własności ma posiadać poszukiwana przez nas metoda o szerokim zakresie stosowalności? Oczywiście metoda taka musi umożliwiać rozpatrywanie zagadnień przestrzeni wielowymiarowej. Musi

² Ang. simulation.

być poza tym stosowalna do równań nieliniowych, tj. do przypadków, w których prawe strony równań praw fizycznych zawierają zmienne zależne i ich pochodne względem współrzędnych w sposób nieliniowy. Dalej, metoda taka powinna dostarczać wyników w postaci numerycznej tylko wtedy, gdy jest to niezbędne; powinna natomiast podawać wyrażenia analityczne w każdym przypadku, gdy mogą być one otrzymane dokładnie lub w przybliżeniu za pomocą rozważań analitycznych. Powinna wreszcie istnieć możliwość stosowania tej metody do tak specjalnych problemów, jak np. problemy, w których występują ruchome brzegi.

Poszukiwanie takiej metody można by zapoczątkować badając wszystkie istniejące metody numeryczne pod względem możliwości spełnienia przez nie wszystkich tych wymagań. Jednakże większość istniejących metod numerycznych ma silnie doraźny charakter — takie badania byłyby i nudne, i zniechęcające. Zamiast tego lepiej będzie sklasyfikować te metody ze względu na ich pośredni³ lub bezpośredni⁴ charakter. Metody pierwszego rodzaju prowadzą zawsze do układów równań algebraicznych, które należy rozwiązać, aby móc określić stan w późniejszym stadium procesu. W metodach pośrednich wartości w punktach siatki różnicowej związane są z wartościami poprzednimi zmiennymi za pomocą numerycznych odpowiedników praw fizycznych. W metodach o charakterze bezpośrednim stan chwilowy służy do określenia nowego stanu: zespół wartości danych lub wcześniej określonych wyznacza poprzez równania różniczkowe nowy stan. Można więc stwierdzić, że metody bezpośrednie naśladują czasowy przebieg procesu, podczas gdy takie stwierdzenie nie byłoby całkiem prawdziwe w stosunku do metod pośrednich. Łatwo to stwierdzić wyobraziwszy sobie, że warunki brzegowe uległy naglej zmianie. Zmiana ta może wypaść pomiędzy dwiema chwilami, w których następuje wyznaczanie stanu; wtedy metoda o charakterze pośrednim będzie naśladować proces fizyczny w taki sposób, jakby przewidywała zmiany warunków brzegowych mających nastąpić później. Natomiast w przypadku takiej zmiany warunków brzegowych reakcja metody naśladowującej proces w sposób bezpośredni będzie opóźniona. Wydaje się, że ze względu na dowolność zmian omawianego rodzaju prawo przyczynowości uzasadniłoby raczej bezpośrednią interpretację równań różniczkowych (por. [2]).

Bardzo szczegółowo zbadano obydwie typy metod numerycznych stosując je do równania dyfuzji jednowymiarowej. Szerokie badania teoretyczne wykazały, że wiele metod pośrednich przewyższa odpowiadające im metody bezpośrednie tym, że są stabilne (por. [3]), tj. że w metodach pośrednich okres czasu zawarty pomiędzy dwiema kolejnymi chwilami wyznaczania stanu ograniczony jest jedynie względami dokładności, natomiast w przypadku metod bezpośrednich dla zapewnienia rozwiązaniu stabilności wymaga się określonego związku pomiędzy siatką przestrzenną a długością tego okresu czasu. Zjawisko uzyskiwania rozwiązań niestabilnych w wyniku numerycznego modelowania procesu, o którym wiadomo, że jest stateczny lub dąży monotonicznie do stanu ustalonego, pozwala przypuszczać,

³ Ang. implicit.

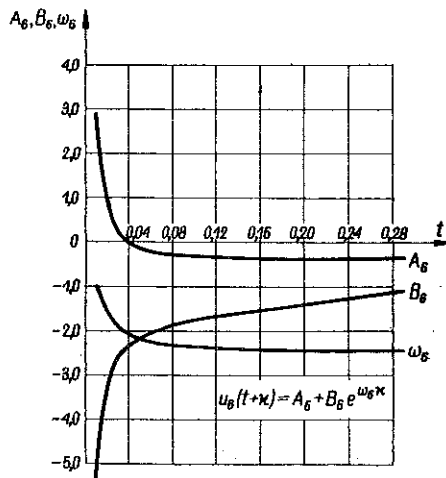
⁴ Angl. explicit.

że przy formułowaniu metody zbyt powierzchownie potraktowano jej stronę matematyczną; np. zależność od czasu zmiennych zależnych, w szczególności ich asymptotyczne zachowanie się dla dużych wartości t nie zostało, być może, dostatecznie uwzględnione przy układaniu schematów numerycznych.

Można ogólnie stwierdzić, że matematyk zajmujący się zastosowaniami bardzo często spotyka się z problemami, które dotyczą albo wyidealizowanych stanów ustalonych, albo procesów dążących do takiego stanu i wobec tego, od pewnego momentu, niektóre części rozwiązań takiego problemu nabierają charakteru monotonicznego i asymptotycznego. Metody numeryczne, opierające się na formalnym reprezentowaniu równań różniczkowych za pomocą różnic skończonych i wobec tego na aproksymowaniu rozwiązań wielomianami, nie mogą modelować procesów, których rozwiązania mają taki charakter. Należy zatem oczekiwać, że metody te nie będą mogły doprowadzić do opisu zjawiska w nieograniczonym okresie czasu. Z tej sytuacji zupełnie jasno wynika zapotrzebowanie na metody asymptotyczne, tj. na metody mogące naśladować w długich okresach czasu monotoniczny i asymptotyczny charakter dowolnego procesu szczegółowego.

Rozpatrzmy teraz typowy przebieg zależnych od czasu zmian wartości zmiennej zależnej w pewnym punkcie przestrzeni (rys. 1). Poczynając od mniej lub więcej dowolnej wartości początkowej rozwiązanie przechodzi przez skończoną ilość wartości ekstremalnych. Możliwe są również nieciągłości, jeśli np. nastąpiły zmiany stanu fizycznego. W ostatnim z punktów przegięcia rozpoczyna się asymptotyczna część rozwiązania. W ten sposób uzyskuje się podział rozwiązania na «część efektu brzegowego» i «część membranową» — jeśli przyjąć terminologię teorii powłok. Bardzo mało można powiedzieć w przypadku ogólnym o zachowaniu się rozwiązań w warstwie brzegowej, co wynika z dowolnego charakteru wartości brzegowej. Jednakże część asymptotyczna będzie całkowicie określona przez równania różniczkowe i warunki brzegowe, i będzie ona w sposób jednoznaczny określała charakter pierwszych przybliżeń rozwiązania i funkcji ekstrapolacyjnych (w bezpośredniej metodzie numerycznej). Te własności stały się podstawą metody ekstrapolacji funkcyjnej zaproponowanej dwa lata temu w pracy [4]. W okresie późniejszym została opracowana szczegółowo specjalna wersja takiej metody, wykorzystująca funkcje wykładnicze.

Łatwo jest uzasadnić korzyści, jakie do rozwoju metod asymptotycznych wnosi użycie funkcji wykładniczych. Wiadomo przede wszystkim, że funkcja wykładnicza



Rys. 1

opisuje stadia asymptotyczne wielu procesów fizycznych. Po drugie, kombinacje liniowe funkcji wykładniczych są rozwiązaniami równań różniczkowych liniowych o stałych współczynnikach, więc istnieje tu możliwość uzyskania teoretycznych oszacowań dokładności rozwiązań otrzymanych metodą ekstrapolacji wykładniczej. Po trzecie, dokładnymi rozwiązaniami równań różniczkowych o pochodnych cząstkowych (po przekształceniu ich w równania różnicowo-różniczkowe zawierające tylko pochodne względem czasu) są kombinacje liniowe funkcji wykładniczych i wobec tego, jeśli rozwiązania tych równań są asymptotyczne, to ich zachowanie się będzie określone głównie przez jeden ze składników wykładniczych. W związku z tym należy podkreślić, że użycie różnic skończonych do aproksymowania pochodnych przestrzennych jest, przynajmniej w przypadku punktów wewnętrznych obszaru ograniczonego, w pełni uzasadnione tym, że rozpatruje się jedynie lokalne własności chwilowych rozkładów przestrzennych. W przypadku problemów o danej wartości początkowej, których rozwiązania wykazują charakter asymptotyczny zarówno w obszarze, jak i w pobliżu brzegów, należy z większą ostrożnością używać różnic do przybliżania pochodnych względem współrzędnych przestrzennych.

Zilustrujemy teraz na przykładzie sposób użycia ekstrapolacji wykładniczej. Dla uproszczenia rozważmy równanie różniczkowe zwyczajne pierwszego rzędu (por. [4])

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t).$$

Przy warunku początkowym

$$y(0) = 0$$

poszukiwać będziemy rozwiązania przybliżonego $Y(t)$ w postaci

$$Y(t) = A_0 + \sum_{j=1}^n A_j e^{\omega_j t},$$

gdzie A_0, A_j, ω_j są nieznanymi parametrami [w ilości $(2n+1)$].

Rozwiązanie przybliżone Y będzie spełniało równanie różniczkowe zwyczajne o stałych współczynnikach

$$\frac{d^{n+1}Y}{dt^{n+1}} + \sum_{j=1}^n a_j \frac{d^j Y}{dt^j} = 0,$$

gdzie a_j są funkcjami elementarnymi i symetrycznymi zmiennych ω_j takimi, że miejscami zerowymi wielomianu

$$\sum_{j=1}^{n+1} a_j \lambda^j$$

są liczby ω_j . Różniczkując równanie wyjściowe $(2n-1)$ razy względem t i wykorzystując warunek początkowy $y(0) = 0$ znajdujemy wartości początkowe pochodnych $d^j y/dt^j$ dla $t = 0$ oraz $j = 1, 2, \dots, 2n$. Występujące powyżej liczby ω_j określimy tak, aby zachodziły równości

$$\left[\frac{d^j Y}{dt^j} \right]_{t=0} = \left[\frac{d^j y}{dt^j} \right]_{t=0} \quad (j = 0, \dots, 2n).$$

Uzyskamy to różniczkując równanie różniczkowe z niewiadomą Y ($n-1$) razy względem t i rozwiązując otrzymany układ n równań liniowych względem a_j ; znajdziemy ω_j jako pierwiastki podanego powyżej wielomianu. Znajdziemy ostatecznie ($n+1$) współczynniki A_j rozwiązując układ ($n+1$) równań otrzymanych z warunków

$$\left[\frac{d^j Y}{dt^j} \right]_{t=0^+} = \left[\frac{d^j Y}{dt^j} \right]_{t=0} \quad (j = 0, 1, \dots, n).$$

Łatwo zauważyć, że w rozwiązaniu przybliżone Y otrzymane w ten sposób wchodzi błąd rzędu $O(t^{2n+1})$, tj. błąd wynikający jedynie z przybliżenia równania pierwotnego przez równanie o współczynnikach stałych. Powtarzając takie postępowanie w dogodnie dobranych przedziałach czasu otrzymamy ciągle rozwiązanie przybliżone o pierwszych pochodnych nieciągłych w punktach podawania wartości początkowej (w końcach przedziałów), [4].

Gdy rozwiązanie dokładne składa się jedynie z funkcji wykładniczych, a liczba n funkcji wykładniczych występujących w rozwiązaniu przybliżonym Y jest większa od ilości funkcji wykładniczych występujących w y , to metoda ekstrapolacji wykładniczej da rozwiązanie dokładne już za pierwszym krokiem. Jeśli n jest mniejsze niż liczba funkcji wykładniczych w rozwiązaniu dokładnym i wszystkie te funkcje mają wykładniki ujemne, to wartości n wykładników w Y będą dążyć asymptotycznie do wartości wykładników mających największy wpływ na zachowanie się rozwiązania dokładnego. Właśnie ta ostatnia cecha omówionej metody rozwiązywania przybliżonego powoduje, że jest ona tak wygodna dla numerycznego modelowania pewnych procesów fizycznych.

Zanim omówimy szczegółowo pewne zastosowanie ekstrapolacji eksponentialnej zwrócimy na chwilę uwagę na zagadnienie zależności od czasu, aby powiązać je z problemami stanu ustalonego w sensie tradycyjnym. Rozważmy dla przykładu problem zginania belki z wartościami brzegowymi podanymi w dwu punktach

$$\frac{d^4 w}{dx^4} - p(x) = 0,$$

$$w(-1) = w(+1) = \left[\frac{d^2 w}{dx^2} \right]_{x=-1} = \left[\frac{d^2 w}{dx^2} \right]_{x=1} = 0,$$

gdzie w jest ugięciem, x współrzędną liczoną wzdłuż belki, a $p(x)$ jest pochodną obciążenia. Problem ten zbliżony jest charakterem do pewnych problemów teorii sprężystości, np. teorii płyt, teorii powłok, płaskich zagadnień teorii sprężystości itp. Wszystkie te problemy prowadzą do równań eliptycznych o pochodnych cząstkowych, a dotychczas nie zostały opracowane całkowicie zadowalające metody numerycznego rozwiązywania tych równań.

Te ostatnie problemy mogą się różnić od problemów zginania belek obecnością w równaniach dodatkowych wyrazów. Jednakże w każdym przypadku tylko jedno z podstawowych równań różniczkowych będzie zawierało czwarte pochodne wzglę-

dem współrzędnych, a pozostałe równania będą zawierały jedynie drugie pochodne względem współrzędnych. Ta różnica rzędów równań różniczkowych daje numeryczny efekt nierównoważności błędów zaokrąglania, tj. błędów wynikających z faktu, że w obliczeniach występują jedynie skończone ilości cyfr znaczących. Dla ominięcia tej trudności wygodnie jest prowadzić zmienną pomocniczą, która sprowadzała pochodne względem współrzędnych we wszystkich równaniach do tego samego rzędu.

Postępowanie takie wypróbowano po raz pierwszy w zagadnieniu belki, zastępując równanie podstawowe układem dwu równań różniczkowych zwyczajnych,

$$\frac{d^2u}{dx^2} - p(x) = 0, \quad \frac{d^2w}{dx^2} - u(x) = 0.$$

Dodając teraz do prawych stron składniki

$$\frac{\partial u}{\partial t}, \quad \frac{\partial w}{\partial t}$$

otrzymuje się układ parabolicznych równań różniczkowych cząstkowych

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - p(x) = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - u(x, t) = \frac{\partial w}{\partial t}.$$

Własności rozwiązań takich równań zostały wyczerpująco zbadane. Wiadomo w szczególności, że zdużają one do funkcji opisujących stany ustalone. Jak łatwo z powyższego zauważyć, w omawianym przypadku takie funkcje opisujące stan ustalony muszą być równe rozwiązaniom równania wyjściowego przy odpowiednich nałożonych warunkach brzegowych.

Warunki brzegowe dla problemu pomocniczego wyrażone w terminach funkcji u i w mają postać

$$u(-1, t) = u(1, t) = w(-1, t) = w(1, t) = 0.$$

Stąd wynika również, że

$$\frac{\partial u(\pm 1, t)}{\partial t} = \frac{\partial w(\pm 1, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(\pm 1, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 w(\pm 1, t)}{\partial t^2} = \dots = 0,$$

podczas gdy pomiędzy punktami -1 i 1 pochodne $\partial u/\partial t$, $\partial w/\partial t$, $\partial^2 u/\partial t^2$, ... będą określone przez równania różniczkowe, w których wystąpią pochodne chwilowych rozkładów zmiennych u i w względem współrzędnych przestrzennych. Tak więc dla rozpoczęcia procesu obliczeniowego potrzebne są warunki początkowe.

Problem pomocniczy różni się pod tym względem od pierwotnego zagadnienia stanu ustalonego. W każdym problemie praktycznym za rozkład początkowy będzie się przyjmować najlepsze, najłatwiej osiągalne rozwiązanie przybliżone, ponieważ interesujący jest jedynie końcowy stan ustalony. Wybór taki ogranicza jedynie możliwości zmniejszenia ilości obliczeń. Dla rozważanego problemu wybrano warunki początkowe

$$u(x, 0) = -\frac{\pi^2}{4} \cos \frac{\pi}{2} x, \quad w(x, 0) = \cos \frac{\pi}{2} x,$$

które należy interpretować jako przybliżenie rozwiązań dokładnych dla stanu ustalonego, a więc

$$u(x) = \begin{cases} \frac{1}{6}(-2+3x^2+x^3) & \text{dla } x \leq 0, \\ \frac{1}{6}(-2+3x^2-x^3) & \text{dla } x > 0; \end{cases}$$

$$w(x) = \begin{cases} \frac{1}{120}(16-20x^2+5x^4+x^5) & \text{dla } x \leq 0, \\ \frac{1}{120}(16-20x^2+5x^4-x^5) & \text{dla } x > 0. \end{cases}$$

Zanim podamy szczegóły numerycznego rozwiązywania tego problemu, będzie rzeczą interesującą przedyskutować różne możliwe interpretacje rozważanego zagadnienia pomocniczego. Ma ono trojakiemu rodzaju związki z procesami fizycznymi — i to jest jedną z przyczyn, dla których ten właśnie przykład został podany.

Po pierwsze, zagadnienie to można uważać za przykład schematu procesu iteracyjnego służącego do rozwiązania problemu stanu ustalonego za pomocą formalnego postępowania matematycznego. Podstawą takiego postępowania jest znajomość własności rozwiązań równania parabolicznego.

Po drugie, eliminując u z podanych wyżej równań otrzymamy

$$\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} - p(x) = -\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + 2\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}\right),$$

tj. równanie ruchu belki zginanej poddanej działaniu siły tłumiącej proporcjonalnej do szybkości zmian krzywizny belki. Wobec tego zależnym od czasu zmianom funkcji w można nadać sens fizyczny, co usprawiedliwia mówienie tu o numerycznym naśladowaniu (modelowaniu) procesu fizycznego. Widać również teraz, dlaczego równanie belki nie tłumionej nie byłoby wystarczające dla naszych celów.

Po trzecie, występuje tu typ układu równań, który ma duże znaczenie w teorii przepływu cieczy przez ośrodki porowate. W tym przypadku zmienne u i w mają znaczenie gęstości i ciśnienia płynu. Znajomość zależności od czasu rozwiązań tych problemów jest zagadnieniem pierwszorzędnej wagi dla przemysłu naftowego, ponieważ rozwiązania te opisują proces opróżniania się zbiorników paliw płynnych, [5].

Powróćmy teraz do rozważanego problemu. Zbadane zostaną pewne rezultaty numeryczne uzyskane za pomocą funkcji wykładniczych. Poprzednie rozważania teoretyczne bardzo pomagają w zrozumieniu metody ekstrapolacji eksponentialnej, lecz w praktyce niemożliwe jest posługiwanie się dużą ilością funkcji wykładniczych. Użycie ich staje się nonsensowne ze względu na ograniczoną ilość miejsc znaczących we współczesnych maszynach liczących: błędy zaokrąglania pozbawiają jakiegokolwiek znaczenia pochodne numeryczne wyższych rzędów.

Oznaczając teraz przez u_j^l, w_j^l wartości zmiennych u, w w chwili $t = lk$ i punkcie $x = jh$, gdzie k i h są odpowiednio wymiarami siatki różnicowej w przestrzeni i przedziałów czasu, uzyskujemy równania różnicowo-różniczkowe dla przedziału $lk \leq t < (l+1)k$ w następującej postaci:

$$\frac{du_j^l}{dt} = \frac{u_{j+1}^l - 2u_j^l + u_{j-1}^l}{h^2} - p_j,$$

$$\frac{dw_j^l}{dt} = \frac{w_{j+1}^l - 2w_j^l + w_{j-1}^l}{h^2} - u_j^l.$$

Odpowiednimi warunkami brzegowymi są

$$u_1^l = u_N^l = \frac{du_1^l}{dt} = \frac{du_N^l}{dt} = \dots = 0,$$

$$w_1^l = w_N^l = \frac{dw_1^l}{dt} = \frac{dw_N^l}{dt} = \dots = 0,$$

gdzie $j = 1$ i $j = N$ odpowiadają odpowiednio wartościom $x_1 = -1$ oraz $x_N = 1$ oraz $N = 2/h + 1$.

Rozwiązania przybliżone otrzymamy teraz w postaci

$$\varphi_j^{l+1} = A_j^l + B_j^l e^{\omega_j^l t},$$

gdzie

$$\omega_j^l = \left(\frac{d^2 \varphi_j^l}{dt^2} \right) \left/ \left(\frac{d\varphi_j^l}{dt} \right) \right.,$$

$$B_j^l = \left(\frac{d\varphi_j^l}{dt} \right)^2 \left/ \left(\frac{d^2 \varphi_j^l}{dt^2} \right) \right.,$$

$$A_j^l = \varphi_j^l - B_j^l.$$

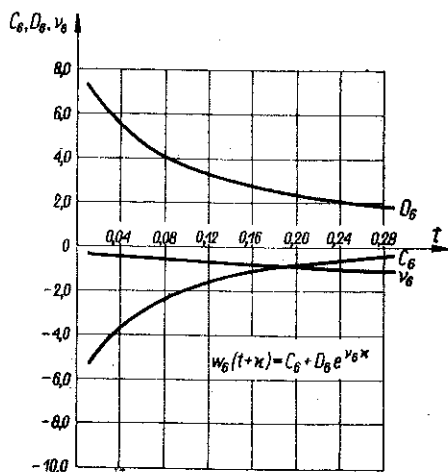
Łatwo zauważyć, że wzory te gwarantują właściwe zachowanie się rozwiązań w chwilach określania stanu, (por. [4]).

Rysunki 2 i 3 ukazują typowe zmiany zawierających parametr t współczynników występujących w tych przybliżeniach. Można wykazać, dokonując rozdzielenia

zmiennych, że dokładne rozwiązania problemu pomocniczego będą zawierały składniki wykładnicze o wykładnikach

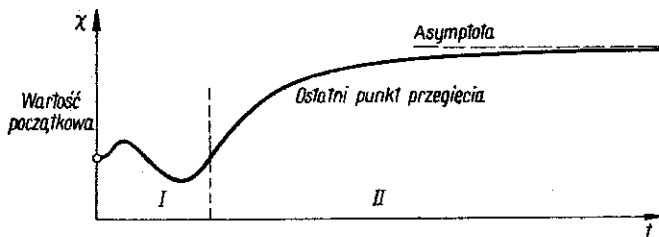
$$\omega t = -(\pi^2/4)t.$$

Zbieżność wykładników rozwiązań przybliżonych do tej wartości dobrze ilustrują rezultaty numeryczne.



Rys. 2

Dokonawszy pewnej ilości całkowań maszyna zatrzyma się w chwili, gdy wykładniki osiągną swoje wartości graniczne i wydrukuje formuły analityczne określające zmienne u_j i w_j . Jeśli interesujący jest jedynie końcowy stan ustalony, to żądany



Rys. 3

rezultat określają części stałe A_j tych rozwiązań. Dane takie dla problemu zginania belki zawarte są w tabelicy 1.

Tablica 1

Punkty		Wartości rozwiązań przybliżonych		Wartości rozwiązań dokładnych		Błędy	
j	x	A_j	B_j	u_j	w_j	u	w
2	-0,8	-0,1000016	0,0419699	-0,098667	0,041003	1,35%	2,36%
3	-0,6	-0,1919976	0,0799622	-0,189333	0,078085	1,41%	2,40%
4	-0,4	-0,2680025	0,1102406	-0,264000	0,107648	1,52%	2,41%
5	-0,2	-0,3199974	0,1298605	-0,314667	0,126731	1,69%	2,47%
6	0,0	-0,3400028	0,1366204	-0,333333	0,133333	2,00%	2,47%

Dwie ostatnie kolumny tej tabelicy zawierają wartości rozwiązań dokładnych oraz błędy względne wyrażone w procentach.

Dotychczas nic nie mówiliśmy o stabilności metody ekstrapolacji eksponentialnej. Jedyne dostępne obecnie rezultaty dotyczą równania dyfuzji jednowymiarowej

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

dla którego wzór ekstrapolacyjny (w bezpośredniej ekstrapolacji eksponentialnej) ma postać

$$U_j^{l+1} = U_j^l + \frac{\omega_{j-1}^l k}{\omega_j^l} \Delta_h^2 U_j^l,$$

gdzie

$$\omega_j^l = \frac{\Delta_h^4 U_j^l}{\Delta_h^2 U_j^l}, \quad \Delta_h^2 U_j^l = \Delta_h^1 \frac{U^l \left(x_j + \frac{h}{2} \right) - U^l \left(x_j - \frac{h}{2} \right)}{h}.$$

Po zapisaniu tego wzoru w postaci

$$U_j^{l+1} = U_j^l + k \Delta_h^2 U_j^l + \frac{k^2}{2!} \Delta_h^4 U_j^l + O(k^3)$$

widać, że dla małych wartości można go zapisać w przybliżeniu w formie klasycznego wzoru (por. [3])

$$U_j^{l+1} = U_j^l + k \Delta_h^2 U_j^l.$$

Stabilność tej formuły została zbadana szczegółowo po raz pierwszy w znanej pracy COURANTA, FRIEDRICHSA i LEVY'EGO w roku 1928. W ostatnich latach Fritz JOHN dowiódł, że dla równania (por. [7])

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a_0(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

kryterium stabilności ma postać

$$\max_{x,t} a_0(x, t) \frac{h}{k^2} < \frac{1}{2}.$$

Dla $a_0 \equiv 0$ redukuje się ono do warunku otrzymanego w roku 1928. Porównując podane powyżej równanie różniczkowe z formułą wykładniczą widzimy, że czynnik

$$\frac{\omega_{j-1}^k}{\omega_j^l}$$

można związać ze współczynnikiem a_0 w pracy JOHNA. Ponieważ ω_j^l jest przybliżeniem granicy ω , więc otrzymamy

$$\frac{1 - e^{-\omega k}}{\omega h^2} < \frac{1}{2}.$$

Wobec tego istnieją takie szerokości siatki różnicowej, przy których metoda będzie stabilna dla dowolnych k , mianowicie h takie, że

$$h^2 < \frac{2}{\omega}.$$

Należy zaznaczyć, że JOHN nakłada na $a_0(x, t)$ warunek

$$a_0 > a > 0.$$

W ogólności wzór wykładniczy będzie podlegał temu ograniczeniu jedynie w stadium asymptotycznym, czego należało oczekiwać. Rezultat ten wskazuje, że zakres stabilności metody ekstrapolacji wykładniczej jest zmienny i może być nieograniczony.

Literatura cytowana w tekście

- [1]. J.R.M. RADOK and G.D. GALLETLY, *On the Accuracy of Some Shell Solutions*, ASME Paper No. 59-APM-30. Presented at the 22nd Applied Mechanics Division National Conference at Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, N.Y., June 1959.
- [2]. L. HOPF, *Einführung in die Differentialgleichungen der Physik*, Sammlung Göschen, Vol. 1070.
- [3]. Robert D. RICHTMYER, *Difference Methods for Initial Value Problems*, Interscience Publishers Inc., N.Y., New York 1957.
- [4]. J.R.M. RADOK, *Method of Functional Extrapolation for the Numerical Integration of Ordinary Differential Equations*, J. Soc. Ind. Appl. Math., December 1959.

- [5]. M. MUSKAT, *Physical Principles of Oil Production*, McGraw-Hill Book Co., New York 1949.
- [6]. R. COURANT, K.O. FRIEDRICHS and H. LEVY, *Mathematische Annalen*, 100, 32-74 1928, *Über die Partiiellen Differentialgleichungen der Mathematischen Physik*.
- [7]. J. FRITZ, *On Integration of Parabolic Equations by Difference Methods*, *Comm. Pure Appl. Math.*, Vol. 5, 1952, 155—211.

Резюме

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Специально удобным способом представления многих физических процессов является использование дифференциальных уравнений в частных производных, связывающих скорости изменений зависимых переменных, производных по отношению к времени с пространственными распределениями переменных. После наложения начальных или краевых условий, количество которых зависит только лишь от самых уравнений, получаем подробные решения задач, описываемых этими уравнениями.

До появления быстродействующих счетных электронных машин, дающих возможность проводить почти неограниченное количество арифметических операций, этот вопрос считался решенным в момент, когда его решение можно было выразить раньше в специальных функциях представленных в таблицах. Одновременно с расширением области исследований прикладной математики и с усложнением практических задач большее внимание было обращено на численный аспект, однако все еще численные стороны решения подчинялись методам анализа. Лицо проводящее расчет в очень малой степени могло влиять на способ формулирования решаемой проблемы. Следует учесть, что в это время принимались во внимание только лишь дифференциальные уравнения и системы алгебраических уравнений, количество которых следовало ограничить так, чтобы решения их не требовало слишком большого числа арифметических операций.

Кажется, что изобретение электронных машин в таком положении вызвало меньше изменений, чем бы это следовало из выше приведенных рассуждений. В особенности численные методы в небольшой степени изменились с тех пор, когда основанием расчетов были специальные функции. И так, возникают два вопроса основного характера:

1. Пригодны ли численные методы, приспособленные к малому количеству арифметических операций и к максимальному использованию специальных функций в условиях использования специальных функций в условиях использования электронных машин.

2. На каких критических следует опираться при разработке численных методов, приспособленных к новым условиям.

Эти вопросы были подробно продискутированы.

На примере применений к проблемам диффузии и теории балок рассматриваются некоторые аспекты использования показательных функций, как осно-

вания асимптотических методов интегрирования. Выбранный метод подхода к вопросу подчеркивает значение численного моделирования процесса, чтобы показать, каким способом можно использовать взгляд на физический смысл явления и на знание математических свойств решений при проектировании численных методов.

S u m m a r y

NUMERICAL SIMULATION OF PHYSICAL PROCESSES

Many physical processes are most conveniently described by partial differential equations relating the rates of change of the dependent variables to their space distributions. Occasionally, these relationships may also involve integrals over the past histories of these variables. The solutions of problems, governed by such equations, become particular by the enforcement of given initial and boundary conditions the number of which depends on the equations themselves.

Prior to the advent of high speed computers, and, as a consequence, of almost infinite numbers of arithmetic operations, a specific problem was considered to have been solved exactly, if its solution had been expressed in terms of special functions which preferably had to be tabulated. As the domain of applied mathematics expanded and practical problems became more involved, their numerical aspect received more attention, but all the time the status of numerical work was subsidiary to that of analysis. The numerical analyst had very little influence on the formulation of the problems requiring solution, he simply thought in terms of difference equations and systems of linear algebraic equations the number of which he had to limit in order to stay within the humanly realistic range of arithmetic operations.

So far, the modern computer seems to have caused less change in this situation than these considerations would lead one to expect. In particular, the numerical methods for solving problems have changed little from the special function days. Thus, there arise the following basic questions:

- a) Are the methods designed for small numbers of arithmetic operations and maximum utilization of tabulated results suitable for the computers?
- b) What criteria can be used for the development of numerical methods under the new conditions?

These ideas are discussed in detail and certain aspects of the use of exponential functions as the base for asymptotic integration methods are discussed in the light of applications to problems of diffusion and beam theory. The selected approach stresses the numerical simulation aspect in order to demonstrate how physical insight and knowledge of the mathematical features of the sought solutions can be combined for the purpose of the design of numerical methods.

POLYTECHNIC INSTITUTE OF BROOKLIN
COMPUTING LABORATORY

Praca została złożona w Redakcji dnia 12 grudnia 1959 r.