Электронный научный журнал "Математическое моделирование, компьютерный и натурный эксперимент в естественных науках" http://mathmod.esrae.ru/
URL статьи: mathmod.esrae.ru/48-195
Ссылка для цитирования этой статьи:
Григорьев С.А. Обзор численных методов решения дифференциальных уравнений в частных производных // Математическое моделирование, компьютерный и натурный эксперимент в естественных науках. 2024. №4

УДК 532.517.2:539.3 DOI:10.24412/2541-9269-2024-4-2-9

ОБЗОР ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Григорьев С.А.[1]
[1]Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Россия, Саратов, agstbf@gmail.com

OVERVIEW OF NUMERICAL METHODS FOR SOLVING PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS

Grigorev S.A.[1]
[1]Yuri Gagarin State Technical University of Saratov, Russia, Saratov, agstbf@gmail.com

Аннотация. Данная статья представляет обзор численных методов решения дифференциальных уравнений в частных производных: метод конечных разностей, метод конечных объемов, метод Галеркина. Рассмотрены основные идеи, способы применения, ключевые сложности и области применения методов. Приведены примеры программных продуктов, использующих методы, и их сравнение.

Ключевые слова: метод конечных разностей, метод конечных объемов, метод Галеркина, численные методы, дифференциальные уравнения в частных производных.

Abstract. This article provides an overview of numerical methods for solving partial differential equations: the finite difference method, the finite volume method, and the Galerkin method. The main ideas, methods of application, key difficulties, and areas of application of the methods are considered. Examples of software products using the methods and their comparison are given.

Keywords: finite difference method, finite volume method, Galerkin method, numerical methods, partial differential equations.

Дифференциальные уравнения в частных производных второго порядка часто применяются для описания законов природы из-за чего их называют уравнениями математической физики. Обычно эти уравнения содержат четыре неизвестных переменных – время и три пространственные координаты. При решении конкретной задачи устанавливаются граничные условия, которые позволяют выбрать одно из множества решений. Однако даже при наличии граничных условий получение точного аналитического решения зачастую невозможно или нецелесообразно. В связи с этим применяются численные методы, которые позволяют получить приближенные решения с относительно небольшой сложностью [1].

Метод конечных разностей

Один из самых широко применяемых методов. Идея метода заключается в дискретизации нахождения производной. Производные функции в уравнении заменяются на конечные разности между значениями функции в соседних узлах сетки, которая накладывается на рассматриваемую область[2].

На первом шаге на исследуемой области строится сетка, в узлах которой будут искаться численные значения. Производная – это предел отношения приращения функции к приращению её аргумента при стремлении приращения аргумента к нулю.

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (1)$$

Метод конечных разностей вместо приращения аргумента стремящегося к нулю использует конкретное значение шага сетки, что позволяет узнать примерное численное значение производной в каждом узле сетки [3].

Для получения более точных решений может потребоваться использование более сложных схем, например, схем второго порядка или высокоразрешающих схем. Граничные условия позволяют определить область на которой требуется найти значения производных, таким образом задача сводится к расчетам в конечном числе точек, то есть к системе алгебраических уравнений.

Ключевой сложностью в методе конечных разностей является выбор оптимального шага сетки. При уменьшении шага сетки будет увеличиваться точность решения и количество точек, в которых потребуется провести расчет. Слишком большой шаг приведет к неточному и неустойчивому решению.

Метод может оказаться непригодным для некоторых уравнений, особенно если необходимо использовать очень маленький шаг, что приводит к усложнению задачи вычисления значений производной в точках. Однако существует множество задач, для которых применение этого метода оправдано. Он широко используется в метеорологии, астрофизике и компьютерной графике, особенно в тех случаях, когда требуется выполнить большое количество расчетов, и можно немного снизить точность результатов.

Метод конечных объёмов

Метод конечных объёмов (метод контрольных объёмов) основан на аппроксимации закона сохранения в интегральном виде. В общем виде закон сохранения записывается так: изменение величины u равно сумме мощности источника u и входящего потока u.

Скалярная форма:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + div(f) = g(u) \tag{2}$$

Интегральная форма:

$$\int_V \frac{\partial u}{\partial t} dV + \oint_S (f(u) \cdot n) dS = \int_V g(u) dV \tag{3}$$

u – величина, t – время, $f(u)$ – поток величины u, $g(u)$ – изменение величины u, V – объём, S – поверхность объёма, n – единичный вектор внешней нормали к поверхности S

При использовании метода контрольного объёма исследуемая область разбивается на ячейки, плоские для двумерных задач и на объёмные для трехмерных задач. Ячейки могут быть разных форм, отличаться по площади и объёму, это позволяет применять метод для задач со сложной геометрией, в которых приходится использовать неструктурированную сетку. Например, чтобы покрыть область вблизи граничных условий. Однако так как метод требует вычисления площадей и объемов ячеек, то для упрощения расчетов стоит использовать одинаковые ячейки с простой геометрией [4].

После построения сетки необходимо перевести исходное дифференциальное уравнение в интегральную форму. Считается, что значение в средней точке объёма равно значению всех точек внутри этого объёма. Таким образом для аппроксимации интеграла по объёму требуется умножить значение средней точки ячейки на объём ячейки, а для аппроксимации интеграла по площади граней ячеек требуется сложить произведения среднего значения каждой грани на площадь этой грани. В двумерных задачах для нахождения интеграла по периметру ячейки средние значения сторон умножаются на длины сторон [5].

Равенства, полученные в результате замены интегралов в уравнениях для всех ячеек, образуют систему линейных уравнений. Полученную систему требуется дополнить уравнениями граничных условий, чтобы она стала замкнутой.

При вычислениях не требуется выполнять полный расчет для каждой ячейки, переиспользуются значения объемов, площадей и длин сторон для ячеек одинаковой формы, а так же усредненные значения граней для соседних ячеек.

Способ вычисления значения средних точек находится за пределами метода и выбирается в зависимости от конкретной задачи.

Метод основан на уравнениях сохранения массы, импульса и энергии, применяется для расчетов гидродинамики, газодинамики и тепломассообмена [6].

Метод Галёркина

Идея метода Галёркина (Бубнова-Галёркина) заключается в том, чтобы исходную функцию заменить линейной комбинацией базисных функций, умноженных на коэффициенты. Коэффициенты определяются путём минимизации ошибки между приближённым решением и исходным уравнением. Точность приближенного решения растет с увеличением числа базисных функций. Для уравнений вида $L[y(x)] = f(x)$, где $L[\quad]$ – некоторый дифференциальный оператор (например, $L[y(x)] = y(x) + y'(x)$), замена для $y(x)$ ищется в виде суммы:

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^{n} a_k \varphi_k(x) \tag{4}$$

a_k – коэффициент k, φ_k – базисная функция k, n – количество базисных функций

Базисные функции выбираются исходя из условий задачи, они должны отвечать тем же граничным условиям, что и исходная функция, а так же быть ортогональны друг другу [7]. В качестве базисных функций часто выбираются ортогональные полиномы. Их удобно использовать, так как для увеличения числа слагаемых не требуется подбирать новую базисную функцию, достаточно взять полином следующей степени.

Выбранные базисные функции подставляются в $\psi(x)$, затем находятся необходимые производные $\psi(x)$. Полученные выражения подставляются в $L[y(x)]$ вместо функции $y(x)$ и её производных.

Невязка (ошибка) будет равна разности между $L[\psi(x)]$ и $f(x)$.

$$N(x) = L[\psi(x)] - f(x) \tag{5}$$

К невязке выдвигается требование ортогональности к базисным функциям, то есть предполагается, что базисные функции не входят в ошибку, следовательно, комбинация этих базисных функций не образует ошибку. Если это действительно так, то с увеличением числа базисных функций решение будет приближаться к точному [8]. Две функции ортогональны тогда, когда интеграл их скалярного произведения равен нулю, следовательно, чтобы базисные функции были ортогональны невязки должно выполняться следующее равенство:

$$\int_a^b N(x)\varphi_k(x)dx = 0 \tag{6}$$

В результате записи равенства (6) для каждой базисной функции, получается линейная система уравнений для коэффициентов a_k следующего вида:

$$\begin{cases} \int_a^b N(x)\varphi_1(x)dx = 0 \\ \int_a^b N(x)\varphi_2(x)dx = 0 \\ \qquad \dots \\ \int_a^b N(x)\varphi_n(x)dx = 0 \end{cases} \tag{7}$$

Коэффициенты, полученные в результате решения системы, подставляются в $L[\psi(x)]$ [9].

Метод применяется в задачах теории упругости и гидродинамики. Метод позволяет получать численные решения с высокой точностью, но требует тщательного выбора базисных функций.

Примеры программных продуктов

В статье были рассмотрены три метода: метод конечных разностей, метод конечных объёмов и метод Галёркина. Для применения этих методов используются различные программные продукты.

COMSOL Multiphysics — это программное обеспечение для моделирования физических процессов, которое поддерживает все три метода. Оно предоставляет возможность решать мультифизические задачи, объединяя различные физические области в одной модели. Применяется для решения многомерных задач в различных областях, включая теплопередачу, механические деформации и гидродинамику. COMSOL является платным продуктом, предоставляющим набор инструментов для численного моделирования и анализа.

ANSYS Fluent — программа для моделирования потоков жидкости и газа. Она использует метод конечных объёмов для решения уравнений Навье-Стокса и других уравнений, описывающих потоки. Этот продукт также является платным и применяется в таких отраслях, как аэрокосмическая промышленность, автомобильная промышленность и энергетика.

OpenFOAM — платформа с открытым исходным кодом для моделирования потоков жидкости и газа, использующая метод конечных объёмов. Применяется для образовательных и исследовательских целей. Платформа является бесплатной и открытой для использования сообществом.

FreeFem++ — это язык программирования с открытым исходным кодом для решения задач на основе метода конечных элементов. Применяется для задач, связанных с эластичностью, теплопередачей, гидродинамикой и другими областями. FreeFem++ является бесплатным и свободным для использования.

FEniCS — библиотека Python/C++ для решения задач методом конечных элементов. Она предоставляет инструменты для создания и решения математических моделей с использованием метода Галёркина. FEniCS является бесплатной библиотекой.

Ниже приведено сравнение рассмотренных программных продуктов.

Параметр	COMSOL Multiphysics	ANSYS Fluent	OpenFOAM	FreeFem++	FeniCS
Основная область применения	Механика, теплообмен, химические реакции, электромагнетизм, акустика и др.	CFD, теплообмен, аэродинамика, химические реакции	Механика, теплообмен, волновые задачи, гидродинамика	Механика, теплообмен, волновые задачи	CFD, термодинамика, химические реакции
Метод решения	Поддерживает различные методы решения, включая метод конечных	Метод конечных объемов	Метод конечных объемов	Метод конечных элементов (метод Галёркина)	Метод конечных элементов (метод Галёркина)

ISSN 2541-9269

	разностей, метод конечных объемов и метод Галёркина				
Мультифизика	Да, поддержка различных физических процессов	Ограничена CFD, но можно интегрировать с другими инструментами	Могут быть добавлены дополнительные модули через расширения	Да, поддержка различных физических процессов	Да, поддержка различных физических процессов
Параллельные вычисления	Да	Да	Да	Да	Да
Графический интерфейс	Да	Да	Можно использовать визуализацию через ParaView	Можно использовать визуализацию через ParaView	Можно использовать визуализацию через ParaView
Ограничение производительности	Зависит от оборудования, может быть установленно лицензией	Зависит от оборудования, может быть установленно лицензией	Зависит от оборудования	Зависит от оборудования	Зависит от оборудования
Платформа	Windows, Linux, macOS	Windows, Linux	Windows, Linux, macOS	Windows, Linux, macOS	Linux, Windows (через WSL)
Стоимость	Платное, цена зависит от типа лицензии и количества пользователей Образовательная от 100000 руб. Стандартная коммерческая от 600000 руб.	Платное, цена зависит от типа лицензии и количества пользователей Образовательная - бесплатно Стандартная коммерческая от 1000000 руб.	Бесплатное	Бесплатное	Бесплатное
Необходимые знания и навыки	Знания физики и вычислительной математики, навык 3D моделирования	Знания физики и вычислительной математики, навык 3D моделирования	Знания физики, вычислительной математики и скриптовых языков программирования, навык 3D моделирования	Знания физики, вычислительной математики и Python	Знания физики, вычислительной математики и C++, навык работы с командной строкой

Сравнение программных продуктов Таблица 1

Требования к оборудованию зависят от решаемой задачи, усредненные минимальные и рекомендуемые требования представлены в следующей таблице.

Компонент	Минимальные требования	Рекомендуемые требования
Процессор	4 ядра, 3.0 GHz	8-12 ядер, 3.5 GHz и выше, Intel

		i7/i9 или AMD Ryzen 7/9
Оперативная память	8 ГБ	16 - 32 ГБ (64 ГБ для сложных расчетов)
Графическая карта	Встроенная или базовая дискретная карта	NVIDIA GTX 1660 и выше
Жесткий диск	256 ГБ SSD	512 ГБ - 1 ТБ SSD, предпочтительно NVMe
Питание	500-600 Вт	650-850 Вт

Требования к оборудованию Таблица 2

Выбор программного продукта зависит от конкретной задачи и доступных ресурсов. Для небольших проектов можно использовать бесплатные инструменты, такие как FreeFem++, FeniCS и OpenFOAM. Для более сложных задач лучше применять мощные коммерческие продукты, например, COMSOL Multiphysics или ANSYS Fluent.

Заключение

В заключение следует отметить, что каждый из рассмотренных методов имеет свои преимущества и недостатки, а так же сферы применения. Например, метод конечных разностей хорошо подходит для задач с постоянными коэффициентами и регулярной сеткой. Метод конечных объёмов лучше подходит для задач с переменными коэффициентами и нерегулярной сеткой, однако требует более сложной реализации. Ещё одним преимуществом метода конечных объёмов является то, что он позволяет сохранить свойства исследуемой системы. Метод Галёркина основан на использовании базисных функций, которые подбираются в зависимости от задачи. Он позволяет получить достаточно точное решение для широкого класса задач, но также требует сложных вычислений. Выбор метода зависит от конкретной задачи, типа дифференциального уравнения, требуемой точности решения и доступных вычислительных ресурсов.

Таким образом, понимание особенностей каждого метода и умение выбирать наиболее подходящий инструмент для конкретной задачи являются ключевыми факторами успешного решения дифференциальных уравнений в частных производных.

Литература

1. П. И. Бельмесов, Д. В. Кондратов Обзор применения численных методов для решения задач моделирования процессов взаимодействия цилиндрических оболочек и сплошной среды // Техническое регулирование в транспортном строительстве. — 2018. — № 6 (32). — С. 59-62.
2. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский Уравнения математической физики / — 7-е изд. — 2004. — 800 с.
3. Самарский, А. А. Введение в численные методы / — 5-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2009. — 288 с.

4. В. М. Ковеня, Д. В. Чирков Методы конечных разностей и конечных объемов для решения задач математической физики / — Новосибирск : 2013. — 87 с.
5. Теория метода контрольных объемов // конструкторский : [сайт]. — URL: https://конструкторский.рф/2018/04/18/теория-метода-контрольных-объемов-1d/.
6. Е.М. Смирнов, Д.К. Зайцев Метод конечных объемов в приложении к задачам гидрогазодинамики и теплообмена в областях сложной геометрии // Научно технические ведомости № 2 2004. Проблемы турбулентности и вычислительная гидродинамика (к 70-летию кафедры «Гидроаэродинамика»). С. 1-22.
7. Давронов, Ж. Р. Обзор применения численных методов для решения задач моделирования процессов взаимодействия цилиндрических оболочек и сплошной среды // Вестник науки и образования. — 2020. — № 19-2 (97) . — С. 6-9.
8. Ритца и Галёркина методы // Сайт Вологодской областной универсальной научной библиотеки: [сайт]. — URL: https://www.booksite.ru/fulltext/1/001/008/097/114.htm
9. В. А. Кудинов, А. Э. Кузнецова, А. В. Еремин, Е. В. Котова Аналитические решения квазистатических задач термоупругости с переменными физическими свойствами среды // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Физико-математические науки». — 2014. — № выпуск 2(35). — С. 130–135.
10. OpenFOAM Documentation // OpenFOAM: [сайт]. — URL: https://www.openfoam.com/documentation/overview
11. FreeFEM Documentation // freefem: [сайт]. — URL: https://doc.freefem.org/pdf/FreeFEM-documentation.pdf