

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИКЕ**

Настоящая книга является одной из первых в мировой литературе монографий по новому разделу физики, возникшему в последние годы в связи с автоматизацией научных исследований и машинной обработкой информации.

Основное содержание книги составляют алгоритмы методов вычислительной математики в применении к ряду конкретных физических задач. Главным достоинством ее является подробное обсуждение математических моделей, выбор правильной системы уравнений и дополнительных условий для описания сложных физических процессов. Много внимания уделено различным аспектам проблемы многих тел.

Книга предназначена для физиков, теоретиков и экспериментаторов, которым приходится самим программировать решения интересующих их физических задач. Она будет полезна и интересна, кроме того, аспирантам и студентам старших курсов, желающим подготовить себя к научной работе в современной лаборатории, оснащенной электронно-вычислительными машинами.

**Содержание**

Предисловие редактора перевода	5
Предисловие к английскому изданию	7
<b>Глава 1. Введение</b>	<b>9</b>
§ 1. Природа вычислительной физики	9
§ 2. Вычислительные машины в физической теории	11
§ 3. Ограниченность математического аппарата	13
§ 4. Дискретная природа вычислительной машины	15
§ 5. Краткое изложение содержания	18
<b>Глава 2. Элементы метода конечных разностей</b>	<b>22</b>
§ 1. Введение. Конечные элементы в физике	22
§ 2. Дискретное представление непрерывной переменной	23
§ 3. Разностные производные по пространству	28
§ 4. Общая постановка задачи с начальными условиями	32
§ 5. Требования к разностному решению задачи с начальными условиями	37
§ 6. Интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений	44
§ 7. Обыкновенные дифференциальные уравнения высших порядков	60
<b>Глава 3. Уравнения в частных производных для сплошных сред</b>	<b>63</b>
§ 1. Происхождение и некоторые свойства уравнений математической физики	63
§ 2. Устойчивость разностных схем для уравнений в частных производных	75
§ 3. Уравнение диффузии: явная схема интегрирования первого порядка точности	79
§ 4. Уравнение переноса: явная схема интегрирования первого порядка точности	82
§ 5. Дисперсия и диффузия на разностной сетке	84
§ 6. Консервативность на разностной сетке	88

§ 7. Консервативные методы для гиперболических уравнений	91
§ 8. Многомерные явные методы	103
§ 9. Обзор методов для параболических уравнений	107
<b>Глава 4. Численные методы матричной алгебры</b>	<b>113</b>
§ 1. Введение	113
§ 2. Матричные уравнения в конечно-разностном исчислении	116
§ 3. Матрицы специального вида: метод прогонки для уравнения с трехдиагональной матрицей	123
§ 4. Матрицы специального вида: «точное». решение уравнения Пуассона	128
§ 5. Точное решение общего матричного уравнения	138
§ 6. «Неточные», или итерационные, методы решения матричных уравнений	141
§ 7. Два приближенных метода определения собственных векторов и собственных значений	159
<b>Глава 5. Частицы: дальное действие в проблеме <math>N</math> тел</b>	<b>162</b>
§ 1. Частицы и системы частиц	162
§ 2. Движение отдельной частицы в потенциальном поле	163
§ 3. Движение отдельной частицы в плоскости, перпендикулярной магнитному полю	166
§ 4. Прямое моделирование дальнего действия в системе $N$ тел	170
§ 5. Равновесные статистические свойства в моделях с двухчастичным взаимодействием	172
<b>Глава 6. Расчет поля частиц</b>	<b>183</b>
§ 1. Среднее поле системы частиц	183
§ 2. Бесстолкновительная модель частиц в ячейке	193
§ 3. Применение бесстолкновительной модели частиц в ячейке к моделированию плазмы	201
§ 4. Применение бесстолкновительной модели частиц в ячейке к моделированию галактик	204
§ 5. Столкновательная PIC-модель в гидродинамике	211
<b>Глава 7. Частицы в самосогласованном поле: атомы и твердые тела</b>	<b>220</b>
§ 1. Самосогласованные поля в квантовой теории систем частиц	220
§ 2. Тождественность частиц и обменный потенциал	227
§ 3. Атом как система нескольких частиц	232
§ 4. Твердое тело как пример системы многих электронов	243
§ 5. Разложение уравнений Хартри — Фока для волн Блоха	247
<b>Глава 8. Фазовые среды</b>	<b>253</b>
§ 1. Плотность частиц в фазовом пространстве и уравнение Власова	253
§ 2. Некоторые замечания и примеры применения уравнения Власова	256
§ 3. Разностное решение уравнения Власова	259
§ 4. Несжимаемость фазовой среды	262
§ 5. Метод «водяного мешка»	264
<b>Глава 9. Классическая гидродинамика</b>	<b>271</b>

§ 1. Вводные замечания об уравнениях гидродинамики	271
§ 2. Разностное решение уравнений несжимаемой среды	278
§ 3. Несжимаемое течение как система вихревых частиц	290
§ 4. Метод маркеров на сетке для описания поверхностей и тяжелых сред: всплески, водопады, опрокидывание волн	298
§ 5. Разностное решение уравнений гидродинамики сжимаемых сред	309
§ 6. Расчет ударных волн и разрывов	323
§ 7. Гидростатическое равновесие в моделях атмосферы и мирового океана	328
<b>Глава 10. Гидродинамика с дальнедействующими силами: звезды,</b>	<b>340</b>
§ 1. Самосогласованные поля в сплошной среде	340
§ 2. Уравнения магнитной гидродинамики и их основные свойства	345
§ 3. Методы одномерной магнитной гидродинамики	352
§ 4. Многомерная магнитная гидродинамика	363
§ 5. Гравитационная гидродинамика	374
Литература	382
Предметный указатель	387

### Предметный указатель

Адамса — Башфорта метод 59, 99, 283, 319	— — кристалла 244, 250
альфвеновские волны 355, 363, 371	— — радиальная 240
Ампера закон 342	вязкости коэффициент 276, 346, 351
анизотропия среды 364, 373	— тензор 275, 328, 346,
ансамбль канонический 179	вязкость искусственная 324, 335, 365
аппроксимация непрерывной функции 24	— кинематическая 278
— оператора Лапласа 120	Гамильтониан 222, 234, 248, 293
— производной по времени 35	Гаусса метод 137, 139
— — по пространству 29	Гаусса — Зайделя метод 149, 156
Безразмерная форма уравнений 197	гидродинамики уравнения 212, 271, 299
Блоха теорема 246	— — в консервативной форме 274, 311, 318
— функция 247	— — в лагранжевой форме 273, 310, 312
Бриллюэна зоны 247	— — в эйлеровой форме 272, 311, 315
Буссинеска приближение 337	гравитационная система многих тел 61, 184, 210
«Вакуумная» область в МГД 355, 362, 366, 371	гравитационной гидродинамики уравнения 341, 375
вариационный принцип 223	граничные условия 118, 131, 240, 303, 320, 335
вектор ошибки 41, 143	— — периодические 132, 197
— решетки 244	Давление 272, 284, 341, 361, 376
Власова уравнение 256	
«водяного мешка» метод 262	
волновая функция 221	
— — антисимметричная 228	

— излучения 376  
— магнитное 343  
движения уравнения 163, 166, 170,  
183, 195, 265  
двухслойная схема 51  
дебаевская длина 189  
— сфера 189, 200  
динамика атмосферы 329  
дисперсионное соотношение 70, 76,  
86  
дисперсия разностная 84, 103, 320,  
356  
диффузия искусственная 106, 321,  
326  
— нелинейная 357, 380  
— радиационная 380  
— разностная 84, 103, 262, 356, 365  
Доплера эффект 317, 355  
дрейф в скрещенных полях 169  
Дюфора — Френкеля метод 110  
Завихренность 278, 293, 337  
задача с начальными условиями 33,  
122  
Интерполирование 24, 302  
источника функция 74, 125, 375  
итерационный метод 141, 156, 241  
358, 361, 381  
Калибровка 279, 369  
Кармана вихревая дорожка 296  
квантовое число 237  
коллапс гравитационный 374  
коллективные свойства системы  
частиц 190  
консервативная схема 90  
консервативное уравнение 65, 69,  
214, 274, 291, 300, 311, 318, 364  
консервативные силы 256  
кориолисова сила 284, 331  
краевая задача 118  
Кранка — Никольсона метод 108,  
122, 358, 381  
Куранта — Фридрихса — Леви  
условие 84, 96, 103, 106, 215,  
283, 290, 317, 326, 355

Лагранжа множитель 225, 243  
лагранжева производная по времени  
72, 212, 273, 312, 333  
— сетка 313, 356, 380  
— форма уравнений 212, 264, 273,  
310, 312, 334  
Лакса метод 83, 101, 104, 260, 316,  
353  
—— — консервативный 92, 288  
Лакса — Вендроффа метод 262, 319  
—— — — двушаговый 97, 101, 281  
—— — — одношаговый 102  
Лежандра уравнение 235  
— функции 236  
Лелевье метод 101  
Ленарда — Джонса потенциал 174  
Лоренца сила 166  
Магнитной гидродинамики  
уравнения 341  
— — — в лагранжевой форме 349,  
356, 360  
— — — в консервативной форме  
348, 364  
— — — в эйлеровой форме 345  
— — — одномерные 353  
магнитный звук 355, 359  
Максвелла уравнения 342  
«маркеров на сетке» метод 302  
Маркова процесс 179  
матричное уравнение 114  
матрица итерационная 142  
— обратная 114  
— разреженная 118  
— трехдиагональная 116, 118, 127,  
135, 154, 240, 334, 360  
Маха числа 363  
мелкой воды уравнения 300  
моделирование галактик 204  
Монте-Карло метод 178  
Навье — Стокса тензор 275  
— — уравнение 285, 300, 338  
нагрев вязкостный 323, 347  
— джоулев 347, 358  
натяжение силовых линий 343, 349

Неймана условие 78, 81, 84, 94, 99,  
106, 317, 355  
неразличимость частиц 227  
несжимаемость 277, 287  
— фазовой среды 262  
неустойчивость безусловная 82, 110  
— двухпучковая 202, 269  
— Кельвина — Гельмгольца 296  
— разностного решения 48, 53, 167  
неявный метод 37, 352  
— — второго порядка точности 55,  
108  
— — Хейна 359  
нормировки условие 240  
«Облако в ячейке» 201  
обратимость времени 164  
океана модель 329, 336  
Ома закон 343  
Паули принцип 228  
переменных направлений метод 153,  
157, 373  
переноса коэффициенты 351  
перехода матрица 42, 77, 93, 316, 354,  
360  
— множитель 41, 46, 50, 53, 57, 80,  
82, 96, 100  
— оператор 37, 76  
пинч 367  
плазма бесстолкновительная 202, 259  
плазменный фокус 368  
подоболочка электронная 237  
последовательной верхней  
релаксации метод 150, 157, 371  
— — — — циклический 152  
потенциал векторный 366, 369  
— обменный 230  
— — усредненный 232  
— поля частиц 184, 194  
— — — самосогласованный 195, 226,  
231  
— ядер в кристалле 244  
— ядра атома 233  
«почти второго порядка» метод 99,  
102, 319

прогноз погоды 335  
прогонки метод 123  
псевдопотенциал 252  
Пуассона уравнение 74, 117, 185,  
230, 261  
— — — в интегральной форме 226  
— — — двумерное 120, 199, 282  
— — — для давления 285, 290  
пульсация звезд 342, 374  
Распределение заряда частицы на  
сетке 186, 195, 201  
Рейнольдса число 326, 347, 365  
«С перешагиванием» метод 51, 102,  
104, 164, 167, 171, 195, 262, 266,  
295, 319  
— — — консервативный 94  
сетка разностная по времени 35  
— — — по пространству 23  
система частиц 170  
— — — бесстолкновительная 192, 257  
— — — в квантовой механике 220  
— — — термодинамическая 173, 181  
скорость звука 277, 317, 355  
— сходимости итерационного  
процесса 148, 154, 156  
Слэтера определитель 228  
согласованность разностной  
аппроксимации 38  
соленоидальность магнитного поля  
343, 366, 369  
— поля скоростей 277, 331  
состояния уравнение 213, 273, 315,  
333, 346, 375  
сохранения законы 63, 66, 89, 164,  
169, 200, 212, 255, 291, 343  
спектральная норма матрицы 144  
спектральный радиус матрицы 145,  
158  
Стефана — Больцмана закон 376  
столкновения 191, 193, 271, 351  
Теплопроводность 275, 311, 346, 351  
точность разностной аппроксимации  
30, 39, 61  
трехслойная схема 95, 100

турбулентность 309, 335  
Ударная волна 310, 323, 357, 372  
усреднение по ансамблю 178  
— по времени 176  
устойчивости условие 78, 81, 85, 199,  
261, 277, 283, 290, 300, 317  
устойчивость разностного решения  
49  
— разностной схемы 40  
— — — безусловная 59, 109, 110  
Фазовое пространство 166, 172, 178,  
203, 253  
фазовые переходы 177  
Фарадея закон 343, 369  
флуктуации поля частиц 187, 192,  
199, 214  
функция распределения 253  
— — «горб на хвосте»  
— — двухпучковая 202  
— тока 279, 293, 337  
фурье-анализ 25, 73, 86, 98, 248  
— — двумерный 104  
фурье-преобразование 129  
— — быстрое 132  
Хартри уравнения 225

Хартри — Фока уравнения 230, 244  
Хейна метод 359  
Центробежная сила 284, 331  
циклическая редукция 135  
— — двойная 136  
«Частицы в ячейке» 187, 193, 210,  
214, 219, 293  
частота альфвеновская 344  
— гравитационная 192, 342  
— звука 342  
— плазменная 191  
— столкновений 351  
— циклотронная 167  
Чебышева метод 152, 157, 371  
Шредингера уравнение 221  
Эйлера метод 45, 55, 305  
эйлерова сетка 214, 259, 281, 299,  
311, 316, 333  
энтропия системы 165, 213, 257, 262  
эффективность алгоритма 113  
— разностной схемы 43, 61  
Явный метод 37, 45, 79, 82, 101, 107  
— — двухшаговый 55  
Якоби матрица блочная 146  
— метод"148, 156

## Предисловие редактора перевода

---

За последние годы вышло в свет много монографий, посвященных численному решению дифференциальных уравнений. Как правило, эти книги ориентированы на математиков-вычислителей, в них детально обсуждаются вопросы сходимости и устойчивости разностных схем, доказываются соответствующие теоремы. Предлагаемая читателям книга Д. Поттера радикальным образом отличается от упомянутой литературы. Здесь нет теорем, и изложение ведется на «физическом» уровне строгости. Профессионал-математик не обнаружит здесь достаточной последовательности в доказательствах и может остаться неудовлетворенным. Однако оценка книги с таких позиций была бы несправедливой, поскольку и отбор материала, и характер изложения используются автором для другой цели.

Главным достоинством предлагаемой книги является подробное обсуждение математических моделей, выбор правильной системы уравнений и дополнительных условий для описания сложных физических процессов. Очень часто этот этап исследования оказывается одним из самых трудных. Он включает в себя, в частности, разумный выбор числа и формы уравнений (консервативная или неконсервативная форма), целесообразность использования различного типа потенциалов, правильную формулировку граничных условий, обоснованную разностную аппроксимацию. Эти вопросы изучаются на протяжении многих глав. Каждая математическая идея предварительно обсуждается «на пальцах» и выясняются физические принципы, позволяющие построить математическую модель.

Много внимания в книге уделено различным аспектам проблемы взаимодействия многих тел — и это является другим достоинством книги. Здесь обсуждаются системы, описываемые уравнением Власова («фазовые среды»), изучается использование метода укрупненных частиц для этих систем, излагается решение уравнений Хартри—Фока для многоэлектронных задач. Все эти проблемы только еще начинают переходить со страниц оригинальных работ в обзоры и монографии.

Таким образом, эта книга по вычислительной физике обращена скорее к физику, чем к вычислителю. Она будет полезна каждому, кто поставил перед собой физическую задачу и только еще выбирает путь ее исследования.

К сожалению, книга не лишена и недостатков. Решение действительно трудных двух- и трехмерных задач (в частности, задач гидродинамики с дальнедействующими силами) изложено слишком схематично. Внутренняя «кухня» вычислителя, отнимающая обычно массу сил и времени (выбор разностной сетки, накопление погрешностей), остается скрытой от читателя. Неполно освещена также важная проблема связи между «математическим» и «физическим» экспериментом для проблемы многих тел с учетом парных столкновений. Более подробные сведения по этим вопросам читатель может получить в недавно вышедшей книге «Вычислительные методы в физике плазмы» (изд-во «Мир», М., 1974) и в ряде известных монографий советских авторов.

Перевод настоящей книги выполнен Г. В. Переверзевым. Большую помощь в переводе и редактировании оказали Ю. С. Сигов, А. Н. Полюдов и Ю. В. Ходырев.

*Ю. Н. Днестровский*

## Предисловие к английскому изданию

---

В основу этой книги положен курс лекций, прочитанных выпускникам Лондонского Империял колледжа и Калэмской лаборатории Комиссии по атомной энергии Великобритании в Бёркшире. При написании ее я преследовал три цели. Во-первых, книга должна дать представление о предмете вычислительной физики, чтобы ознакомить студента с новой для него областью. Не предполагая у читателя предварительного знания предмета, книга вводит его в круг задач численного анализа, вычислительных методов линейной алгебры и построения теоретических моделей для ЭВМ.

Во-вторых, я стремился к тому, чтобы работа содержала краткие и основные сведения, необходимые широкому кругу физиков, работающих в этом направлении, которое охватывает столь различные области, как например, гидродинамика и физика твердого тела. Имеющаяся на эту тему литература содержит заметный пробел. Действительно, несмотря на наличие большого числа книг по численным методам (в частности, следует упомянуть превосходную работу Рихтмайера и Мортонa [1]), нет ни одной книги, которая содержала бы последовательное описание большого числа финитных моделей, используемых при численном исследовании физических явлений. Быстрый рост числа публикаций по этому вопросу вынуждает физика извлекать информацию из обилия журналов. Кроме того, многие из методов, используемых в одной области, могут быть с успехом применены в другой. Недостаточный обмен информацией между различными разделами физики вызывает потребность в «когерентном» взгляде на предмет. Я также надеюсь, что книга окажется полезной ученым и инженерам, работающим в других областях, и, в частности, тем, кто разрабатывает численные модели в метеорологии, океанографии и аэродинамике.

Третьей и наиболее важной задачей было добиться более глубокого понимания будущей огромной роли вычислительной техники в теоретической физике. Всего лишь двадцать пять лет назад Нейман предвосхитил появление современных ЭВМ. С тех пор мощность вычислительных машин увеличилась во много раз. Непрерывно продолжало расти число работ по моделированию физических явлений, но было недостаточно времени, чтобы оценить значение того, что сделано, или разработать хорошо проверенную методологию. В то время как в теоретической и экспериментальной физике столетиями развивались и стандартизировались методы постановки задач, в вычислительной физике все еще не ясно ни то, чего мы можем от нее ждать, ни то, как следует ставить конкретные физические задачи. Сам предмет настолько молод и мало опробован, что, очевидно, существует много методов и путей использования ЭВМ, о которых до сих пор нельзя было и мечтать и которые могут в значительной степени расширить наше понимание окружающего мира. Я надеюсь, что эта книга явится хотя бы небольшим шагом на этом захватывающем пути в направлении понимания роли вычислительных машин в физике.

Мне хотелось бы поблагодарить всех тех, кто сделал возможным появление этой книги. Я особенно благодарен д-ру Харлоу и его коллегам в Лос-Аламосе (Нью-Мехико) за предоставление рисунков из их великолепной работы по моделированию гидродинамических явлений. Я также весьма обязан проф. Роджеру Хокни (Ридинг университет, Бёркшир), д-ру Франку Холу (НАСА, Лангли, Вирджиния), д-ру К. Брайану (Национальный институт океанографии, Вашингтон) и м-ру Джесу Христиансену (Калэмская лаборатория, Бёркшир) за предоставление оригинальных результатов, использованных в этой книге.

Я благодарю также д-ра Кейга Робертса (Калэмская лаборатория, Бёркшир) за плодотворные дискуссии в течение длительного периода и за активную поддержку этой работы.

Лондон, май 1972 г.

*Дэвид Поттер*

## Введение

---

### § 1. Природа вычислительной физики

Вычисления в физической теории связаны с постановкой и численным решением задач для больших механических систем. Термин «механика» используется для обозначения науки, которая количественно описывает движение или тенденцию движения материальных объектов или систем объектов в природе. Классическая механика Ньютона, доведенная до совершенства в трудах математиков и физиков XVIII—XIX вв. — Даламбера, Лагранжа, Гамильтона, Якоби, — дает нам законы движения частиц или систем частиц, составляющих основу материального мира. Квантовая механика выводит законы движения атомных, ядерных или субъядерных частиц. Силы, действующие между частицами, по крайней мере выше ядерного уровня, хорошо установлены. В частности, точно известны фундаментальные электромагнитные и гравитационные силы. Поэтому физики могут все лучше количественно исследовать динамику систем материального мира или по крайней мере они могут сделать это в принципе. Однако наиболее интересные системы материального мира представляют собой ансамбли, состоящие не из нескольких, а чаще всего из огромного количества элементарных частиц, будь это звезды в галактике, атомы в классической жидкости или ионы и электроны в плазме. Но именно в этом случае, несмотря на то, что общие принципы и даже основные уравнения, описывающие поведение таких систем, хорошо известны, эти уравнения в сущности не разрешены и мало изучены. Мы можем аналитически решить проблемы одного или двух тел, но проблема трех тел в общем случае выходит за пределы возможностей анализа. Во всех примерах, за исключением

простейших, невозможно дать точные аналитические решения проблемы нескольких или многих тел.

Понятно, что математическая формулировка ряда физических принципов полезна только тогда, когда такая формулировка допускает решение задач. Многие вопросы, связанные с макроскопическими свойствами как классических, так и квантовых ансамблей очень большого числа частиц, удалось успешно решить с помощью методов статистической механики. Однако применение статистической механики часто приводит к сложным и «нелинейным» уравнениям, например уравнениям гидродинамики или уравнению Власова, описывающему бесстолкновительные фазовые жидкости.

Вычислительная механика дает численные методы решения нелинейных задач со многими переменными, которые возникают при описании механических систем. Однако на ЭВМ невозможно решать такие задачи путем прямого применения соответствующих законов движения, скажем уравнений Гамильтона, с учетом сил, приложенных к системе. В настоящее время и в обозримом будущем ЭВМ в состоянии оперировать ограниченным числом элементов, малым по сравнению с количеством звезд в галактике или количеством атомов в капле воды, и поэтому не способна непосредственно описывать континуум, который существует, например, в пространстве молекулярной структуры. Для использования на ЭВМ должны развиваться такие модели физических систем, которые, учитывая ограниченные возможности машин, могут работать, имея лишь часть полной информации о системе.

Эта книга посвящена строгой разработке единой методологии и ее применению к вычислительной механике. Вопросы анализа результатов эксперимента и точного численного выражения явных решений относятся к другой области и здесь не рассматриваются. Суть книги — формулировка конечных численных моделей для задач нескольких, многих и бесконечно большого количества тел. Мы затрагиваем широкий диапазон задач, которые «неразрешимы» в теории многих тел, так как они сформулированы неявно, а их явное решение с помощью обычного анализа невозможно. В книге дано описание

количественных моделей для систем нескольких частиц с прямым взаимодействием, для классических и квантовых частиц в самосогласованных полях, для проблемы бесконечного количества тел, которая встречается в фазовых жидкостях в случае уравнения Власова, для обычной гидродинамики и для различных гидродинамик с дальнедействующими силами (магнитная гидродинамика, гравитационная гидродинамика).

## § 2. Вычислительные машины в физической теории

Быстродействующие электронные машины стали широко использоваться только с начала 50-х годов, и методология их применения к физической теории только устанавливается. Интуиция говорит, что они нам необходимы, но совсем не говорит, каким образом их нужно применять. Отдельные операции, выполненные на машине, по сути не отличаются от арифметических вычислений, выполненных вручную, — на логарифмической линейке, с помощью логарифмических таблиц или настольного арифмометра. С другой стороны, количество операций и допустимое количество переменных здесь так велико и настолько превышает возможности прежних вычислительных устройств, что ЭВМ фактически представляет собой качественно новое вычислительное средство. Возникает вопрос о роли, которую оно может сыграть в развитии физической теории.

Для начала, чтобы представить себе природу физической теории, процитируем определение, принадлежащее Дюгему [2]:

Физическая теория — это система математических утверждений, выведенных из малого числа принципов с целью представить как можно проще, точнее и полнее ряд экспериментальных знаков.

По существу здесь подразумевается, что принципы, лежащие в основе теории, — это некие абстрактные предположения и что ценность теории определяется тем, насколько просто, точно и полно она описывает экспериментальные законы.

Теперь мы можем вернуться к нашему центральному вопросу: какую роль играет или может играть ЭВМ в развитии физической теории? Как мы уже видели, в развитии физической теории участвуют три процесса. Во-первых, предлагается ряд абстрактных принципов; во-вторых, выводятся математические утверждения; в-третьих, эти математические утверждения разрешаются, чтобы вывести экспериментальные законы, которые теория пытается описать. Ясно, что выдвижение ряда абстрактных принципов — это творческий акт, опирающийся на образование и жизненный опыт физика. ЭВМ здесь вообще не участвует. Однако мы видим, что она имеет очевидное отношение к той части развития физической теории, которая занимается разрешением наших математических утверждений, чтобы описать экспериментальные законы. Вычислительная машина может дать средства, с помощью которых устанавливается соответствие математических утверждений экспериментальным законам, и современные ЭВМ представляют собой качественно новый и единственный путь к этому. Из-за того, что возможное число выполняемых операций очень велико — на много порядков больше, чем мы могли выполнять раньше, — мы можем разрешить прежде неразрешимые математические утверждения и развить более полные физические теории. Рамки, ограничивавшие воображение физика, значительно раздвигаются, что позволяет делать новые и, возможно, более ценные физические заключения.

В вычислительной физике прежде всего необходимо развить методы решения математических уравнений на ЭВМ. Системы математических уравнений, а часто это очень большие системы, должны решаться как можно более эффективно. Это, однако, только техническая сторона проблемы. Равное, если не большее значение, имеют формулировка этих математических уравнений и развитие того, что можно назвать интуицией, опирающейся на мощные вычислительные средства, в результате чего применение физики и физических методов может привести к все более полному описанию природы.

### § 3. Ограниченность математического аппарата

Теперь полезно сравнить содержание и недостатки математического аппарата и вычислительной физики и, более того, рассмотреть внутреннюю связь между математической теорией, вычислительной физикой и экспериментом. Под «математическим аппаратом» понимается решение физических задач подходящими алгебраическими методами с целью описания экспериментально наблюдаемых явлений.

Математическая физика весьма успешно работает в тех случаях, когда теория линейна, когда можно привлечь соображения симметрии и когда необходимо использовать небольшое число переменных. Например, линейность законов электродинамики привела к созданию теории, отличающейся простотой, изяществом и, сверх того, гибкостью. Подобным образом для решения задачи о нахождении энергии электронных уровней атома водорода успешно используется центральная симметрия водородного атома, но уже в случае молекулы водорода или атома гелия центральная симметрия нарушается и решение находится не столь легко. Кроме того, задачи одного или двух тел, описываемые шестью или двенадцатью переменными соответственно, легко решаются аналитически, но для задач трех и более тел часто уже не удается найти аналитических решений.

Часто эти ограничения в математическом аппарате являются весьма жесткими и существенно ограничивают развитие физики. С другой стороны, в вычислительной физике для нахождения решений не требуется выполнения математических свойств линейности, симметрии и малого числа переменных. Существенными свойствами систем, которые можно описать с помощью вычислительных машин, являются лишь их *конечность* и *дискретность*. Хотя численные постановки задач не могут содержать бесконечного числа элементов, однако можно описать систему очень многих переменных (практически до  $10^6$  и более на современных машинах). Многие задачи физики, которые хорошо решаются с помощью математического аппарата, имеют дело со сплошными средами, и мощь дифференциального исчисления как

математического инструмента приводит к широкому применению в физике понятия сплошной среды. С другой стороны, в вычислительной физике можно описывать лишь величины, имеющие дискретную структуру, и поэтому полезны такие понятия, как частицы, ячейки или набор волн. Если же мы хотим описать понятия сплошной среды или непрерывного поля, которые суть математические абстракции, то необходимо представить непрерывность в виде набора многих элементов.

Резюмируя это сравнение классического математического аппарата и вычислительной физики, перечислим еще раз свойства, присущие каждому подходу. Математический аппарат основан на линейности, симметрии, на малом числе переменных и эффективен в описании сплошных сред. Физические системы, описываемые вычислительной физикой, должны быть дискретными и конечными, и численные методы особенно эффективны при описании систем многих переменных.

Эти подходы к решению физических проблем никоим образом не исключают один другого, скорее, роли, которые играют математическая теория, вычислительная физика и эксперимент, следует считать дополняющими друг друга. Каждый подход может дать свой вклад в наше понимание физических явлений. Верно, что в некоторых случаях лишь один из путей оказывается возможным. До недавнего времени именно такое положение было в общей теории относительности, которую могли подтвердить либо немногие опыты, либо умозрительные, хорошо развитые теории. Аналогично использование вычислительной физики может обеспечить нас информацией о явлении, когда эксперимент затруднен либо невозможен. Таким примером является изучение звезд, где наблюдения ограничиваются их поверхностями, так как любой экспериментальный зонд в центре звезды быстро разрушился бы под действием чрезмерных температур или гравитационного давления. Подобным же образом в физике управляемого термоядерного синтеза зонды, помещенные в горячую плазму, быстро выходят из строя, тогда как численный эксперимент может дать самую полную информацию. Однако если эксперимент невозможен, то прогресс физики ограничен,

так как модели, применяемые в теории, как аналитической, так и вычислительной, всего лишь модели и должны непрерывно сравниваться с природными явлениями путем экспериментальной проверки. Именно в этом глубоком смысле математическая теория, вычислительная физика и эксперимент дополняют друг друга.

#### § 4. Дискретная природа вычислительной машины

Чтобы оценить значение физических моделей и способ их задания для обсчета на ЭВМ, рассмотрим принципиальную структуру цифровой вычислительной машины. Нам нет необходимости касаться особенностей различных ЭВМ или различий между ними. Достаточно отметить, что все ЭВМ имеют два основных устройства: логическое устройство, часто называемое центральным процессором, в котором выполняются отдельные простые вычислительные операции, и оперативную память, где может храниться информация.

В оперативной памяти (или памяти на сердечниках) информация хранится в единицах, называемых битами; каждый бит имеет два состояния: да — нет или нуль — один. Обычно, однако, ряд битов (как правило, 18, 32, 36, 48 или 60 бит) группируется в «машинное слово». Практически именно в словах и представляется информация. Слово может представлять собой целое число, действительное число, имя (состоящее из набора алфавитно-цифровых символов), вектор, переменную, описывающую одну частицу, и т. д. Оперативная память больших современных вычислительных машин содержит порядка 100 000 слов, или переменных ячеек, и, хотя ясно, что в ней можно хранить очень большое число переменных, тем не менее число это конечно. Правда, объем памяти вычислительной машины можно очень сильно расширить, используя внешнюю память, т. е. магнитные барабаны, диски или ленты, но время выборки из этих типов запоминающих устройств значительно больше, чем из оперативной памяти, и во многих задачах мы часто ограничиваемся основной оперативной памятью.

Во время работы машинные слова выбираются из оперативной памяти и воспроизводятся в центральном процессоре. Эта операция и называется *выборкой*. В центральном процессоре выполняются простые арифметические или логические операции, и таким образом сформированные новые машинные слова вновь закладываются в оперативную память. Ясно, что эти операции выборки и запоминания, а также операции самого центрального процессора требуют конечного времени, которое на современных ЭВМ (например, IBM 360/91 или CDC 6600) составляет приблизительно от  $10^{-6}$  до  $10^{-7}$  с. Поскольку и память машины имеет конечную емкость, и число операций, выполняемых в единицу времени, тоже конечно, то физические системы, описываемые вычислительной физикой, должны представляться дискретными конечными математическими моделями<sup>1)</sup>.

В качестве подходящего примера использования дискретных математических представлений мы рассмотрим описание структуры галактик. Астрономические наблюдения обнаруживают во многих галактиках существование спиральных рукавов, анализ которых может дать значительную информацию о вращательных свойствах галактики или истории эволюции определенных галактик (см. гл. 6). Эту проблему можно численно изучить двумя очевидными способами: либо методом *частиц*, либо методом *жидкости*. В первом случае галактику можно считать конечной системой взаимодействующих звезд или частиц, в которой каждая звезда движется под действием самосогласованного гравитационного поля, образуемого всеми другими звездами ансамбля. Однако число звезд в галактике (обычно  $10^{10}$ ) во много раз больше, чем можно описать в ЭВМ.

Другой подход состоит в привлечении методов статистической механики, когда предполагается, что галактики состоят из такого большого числа звезд, что фактически их можно описывать как непрерывную жидкость. Следовательно, для того чтобы описать систему, можно вывести уравнения, которые определяют во вре-

---

<sup>1)</sup> Обсуждение структуры современных ЭВМ читатель может найти в работе [3].

мени эволюцию распределения или плотности галактической жидкости. Однако, для того чтобы удовлетворить требованиям ограниченных возможностей ЭВМ, жидкость делится на систему элементарных ячеек, что позволяет получить разностные уравнения, которые в свою очередь описывают движение и структуру галактики.

Другой простой пример, иллюстрирующий свойство дискретности вычислительной механики, возникает при изучении колебаний ионных решеток. Используя теорию Дебая, твердое тело можно описать как континуум, однако получающиеся при этом дифференциальные уравнения следует аппроксимировать разностными уравнениями, которые и будут описывать свойства элементов, или ячеек, твердого тела. С другой стороны, можно было бы снова использовать метод частиц, проследив за движением ограниченного числа взаимодействующих ионов решетки.

В этой книге многократно используются оба подхода к описанию непрерывной среды: первый, основанный на представлении о частицах и приводящий к системе большого числа обыкновенных дифференциальных уравнений, обычно связанных между собой через самосогласованное поле; и второй, оперирующий с представлением о жидкости и приводящий к уравнениям в частных производных, определенным на континууме, или к их разностному аналогу в дискретном представлении. При этом часто встречающееся слово «частица» не следует понимать буквально, как относящееся к одной из звезд галактики или к отдельному электрону плазмы. Чаще всего это слово относится к математической модели, описывающей лагранжеву систему.

В заключение следует предупредить читателя, что в настоящее время используемые в вычислительной механике дискретные и конечные методы не являются строго обоснованными, хотя они и согласованы с рассматриваемыми задачами. В большинстве случаев модельное описание дает только часть информации о системе, так что вообще не ясно, при каких условиях такая ситуация оправданна. К примеру, использование согласованных уравнений на дискретной сетке для описания, скажем, уравнений гидродинамики заведомо

оправданно для длинноволновых процессов и для решения линейных задач. Однако в случае нелинейных задач, представляющих для нас наибольший интерес, а также при отсутствии диффузии обоснованность отказа от описания мелкомасштабных процессов не очевидна. Возможно, для этого есть некоторые практические оправдания, поскольку результаты, полученные в вычислительной механике, часто хорошо согласуются с экспериментом. Будущее развитие вычислительной физики должно привести к разработке общих принципов, которые нужно будет положить в основу использования вычислительных моделей с конечным числом элементов для описания бесконечных систем или систем с большим количеством переменных.

## § 5. Краткое изложение содержания

Из-за простоты дифференциального исчисления и возможности получать с его помощью решения в аналитическом виде большинство разделов физики сформулировано в континуальных терминах и количественно описывается с помощью систем дифференциальных уравнений. Мы уже показали, что использовать ЭВМ можно лишь для обчета дискретных и конечных моделей, поэтому задачи вычислительной физики должны быть описаны в терминах не дифференциального, а разностного исчисления. Основные методы вычислительной алгебры и разностного исчисления будут приведены и обсуждены в гл. 2, 3 и 4.

В гл. 2 вводится понятие пространственной сетки, которое в конечно-разностных методах заменяет понятие континуума. Там же рассматриваются требования, предъявляемые к разностному решению задачи с начальными условиями и основные способы численного интегрирования по времени. В гл. 3 сообщаются необходимые сведения, относящиеся к использованию преобразования Фурье, и демонстрируется широкая применимость фурье-анализа к исследованию свойств разностных решений уравнений в частных производных. Как правило, разностные методы обсуждаются с физических, а не с математических позиций. Хотя в их изложении

и нет строгих математических обоснований и экзотических примеров, значительное внимание уделяется обсуждению таких важных понятий, как устойчивость, точность и дисперсия. При этом основной интерес для нас представляют грамотная формулировка конечно-разностных методов и их широкое использование для решения физических задач.

Разностное исчисление преобразует уравнения, описывающие физические процессы, в матричные уравнения, которые необходимо решать на ЭВМ с максимальной возможной эффективностью. В гл. 4 обсуждаются эффективные и широко применимые методы матричной алгебры, в частности, методы решения важных классов матричных уравнений и нахождения собственных значений и собственных векторов. И здесь основной целью является установление связи этих методов с физическими задачами.

Вместе с изложением математического аппарата конечно-разностных методов гл. 5—10 содержат постановку задач многих тел в вычислительной механике. В гл. 5 обсуждается «точная» постановка задачи  $N$  тел, взаимодействующих на расстоянии. При этом силы, действующие на каждую частицу, вычисляются явным образом как суммарное воздействие со стороны остальных  $N - 1$  частиц. Термин «точная», который здесь используется, не означает, что в этом случае применение разностных методов не ведет к появлению вычислительных погрешностей. Имеется в виду, что данная постановка задачи непосредственно опирается на использование законов движения Ньютона без обращения к статистической механике или к физическим приближениям. Поскольку в этом случае полное число взаимодействий порядка  $N^2$ , такой подход возможен лишь для относительно небольшого числа частиц. Тем не менее подобные модели имеют заметное применение как в задачах статистической механики — в своего рода «численных экспериментах», — так и в задачах теории классических молекулярных жидкостей с короткодействующими силами между частицами.

Введение понятия усредненного самосогласованного поля и включение его в гамильтониан рассматриваемой

системы позволяют развивать модели со значительно большим числом частиц как для классических, так и для квантовых систем. Оба этих случая обсуждаются соответственно в гл. 6 и 7. Подобные модели дают начало методам типа «частиц в ячейке» и широко применяются на практике. Так называемый бесстолкновительный метод «частиц в ячейке» можно использовать для описания галактик и плазмы, а в противоположном предельном случае, когда столкновения играют главную роль, аналогичный метод описывает гидродинамические системы. Методы и характерные трудности, возникающие при решении классических задач и при использовании метода Хартри—Фока для самосогласованного поля в квантовой механике, тесно связаны. В обоих случаях главной трудностью является нелинейная связь гамильтониана с распределением частиц.

В пределе бесконечно большого числа частиц в гравитационном или плазменном ансамбле мы получаем уравнение Власова, определенное в континуальном фазовом пространстве. В гл. 8 обсуждаются вывод уравнения Власова и описание непрерывного распределения в фазовом пространстве в рамках вычислительной механики. При этом для описания эволюции функции распределения в фазовом пространстве можно использовать как метод Эйлера, так и метод Лагранжа.

Задачи с бесконечно большим числом взаимодействующих тел, где столкновения играют доминирующую роль, описываются уравнениями гидродинамики. В гл. 9 в рамках вычислительной физики дается постановка классических задач гидродинамики несжимаемой и сжимаемой жидкостей. Здесь имеется два основных подхода. Первый заключается в использовании эйлеровых разностных методов, а во втором применение лагранжева формализма приводит к дискретным моделям «частиц», как в столкновительном методе частиц в ячейке или в моделях с использованием «вихревых частиц». Здесь же рассматриваются волны на воде и задачи о поверхности жидкости.

Включение в гидродинамику далекодействующих сил между телами позволяет расширить сферу применимости гидродинамических уравнений и приводит к магнит-

ной гидродинамике и гравитационной гидродинамике. Численные решения астрофизических задач и задач управляемого термоядерного синтеза рассматриваются в гл. 10.

Таким образом, область затронутых в книге физических явлений исключительно велика. Однако основная задача изложения состояла не в рассмотрении частных решений или деталей конкретных задач, а прежде всего в установлении методов вычислительной физики. Для иллюстрации такого подхода отобраны примеры, которые носят общий характер и могут оказаться полезными и поучительными.

## Элементы метода конечных разностей

---

### § 1. Введение: конечные элементы в физике

В счетных машинах мы имеем дело с операциями над дискретными и конечными объектами, а не над непрерывными и бесконечными, поэтому важно, чтобы основные количественные законы вычислительной физики были сформулированы для дискретных величин. Наиболее фундаментальный и широко распространенный метод — это метод конечных разностей, с помощью которого исследуются свойства малых элементов непрерывной физической системы. Обычно необходима дискретизация как временной переменной ( $t$ ), так и пространственной переменной ( $x$ ); в этой главе мы рассмотрим наиболее существенные идеи метода построения временных и пространственных сеток. Построение временной сетки в отличие от пространственной часто осуществляется путем интегрирования, так что производные по пространству и по времени вычисляются по-разному.

Метод конечных разностей имеет широкую область применения, а в процессе рассмотрения малых элементов континуума возникают многие физические идеи. Например, при анализе динамики натянутой струны сначала используются уравнения движения для описания смещения ее малого элемента, а затем осуществляется переход к пределу при бесконечном уменьшении размеров элемента струны, что приводит к дифференциальному волновому уравнению. Если не переходить к упомянутому пределу, а просто выписать конечную систему уравнений, отвечающих движению конечного числа элементов натянутой струны, то мы приходим к системе конечно-разностных уравнений. Точно также значительная часть результатов теории электромагнетизма

получена с помощью рассмотрения дискретных конечных элементов. Представление о конечном наборе заряженных частиц приводит к концепции распределения зарядов  $\rho(x, t)$ , определенных на пространственно-временном континууме. В магнитостатике Ампер ввел понятие магнитной силы — силы, действующей между двумя элементами тока. И только в пределе, при бесконечном уменьшении размеров элемента, мы получаем дифференциальные уравнения Максвелла для континуума в теории электромагнетизма.

Поскольку дифференциальное исчисление является мощным математическим инструментом, многие физические явления удобно было описывать с помощью абстрактной концепции непрерывной среды. В результате в нашем распоряжении оказался большой набор дифференциальных уравнений, многие из которых вообще не были решены, и даже понимание их находится еще в самом зачаточном состоянии. Интерпретация и решение этих уравнений потребуют в известном смысле обратить процесс их получения и таким образом перейти от дифференциальных уравнений к алгебраическим уравнениям метода конечных разностей.

## § 2. Дискретное представление непрерывной переменной

Рассмотрим независимую непрерывную переменную  $x$ , пробегающую область значений

$$\begin{aligned} X &= (X_1, X_2), \\ X_1 &\leq x \leq X_2. \end{aligned}$$

Заменим континуум одномерной *сеткой* или *решеткой* из точек путем разбиения области  $X$  на множество из  $J-1$  элементов  $\Delta x_j$  и построим  $J$ -мерный вектор  $\{x_j\}$ , определяя непрерывную переменную  $x$  только в точках с номером  $j$ : (фиг. 2.1)

$$1 \leq j \leq J. \quad (2.1)$$

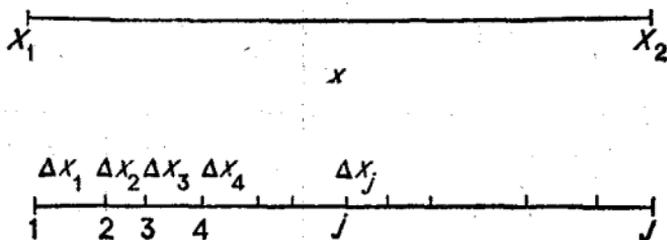
Мы имеем

$$x_j = X_1 + \sum_{v=1}^{j-1} \Delta x_v. \quad (2.2)$$

Таким образом, произвольную функцию  $f(x)$  непрерывной переменной можно в некотором смысле аппроксимировать вектором  $\{f_j\}$ , определенным в узлах решетки независимой переменной  $\{x_j\}$ :

$$f_j = f(x_j). \quad (2.3)$$

Так как первоначальная функция  $f$  определена всюду в области изменения  $x$ , представление  $\{f_j\}$  является не-



Фиг. 2.1. Пространственная сетка (или решетка), заменяющая непрерывную переменную  $x$ .

Точки  $j$ ,  $1 \leq j \leq J$ , разделены пространственными шагами  $\Delta x_j$ .

полным описанием  $f(x)$ . Однако функцию  $f$  можно аппроксимировать значениями  $\{f_j\}$  для любой точки  $x'$ ,

$$x_j \leq x' \leq x_{j+1}, \quad (2.4)$$

с помощью интерполяции векторных компонент  $f_j$  и  $f_{j+1}$  между соседними точками. Пусть

$$\varepsilon = \frac{x' - x_j}{x_{j+1} - x_j}, \quad (2.5)$$

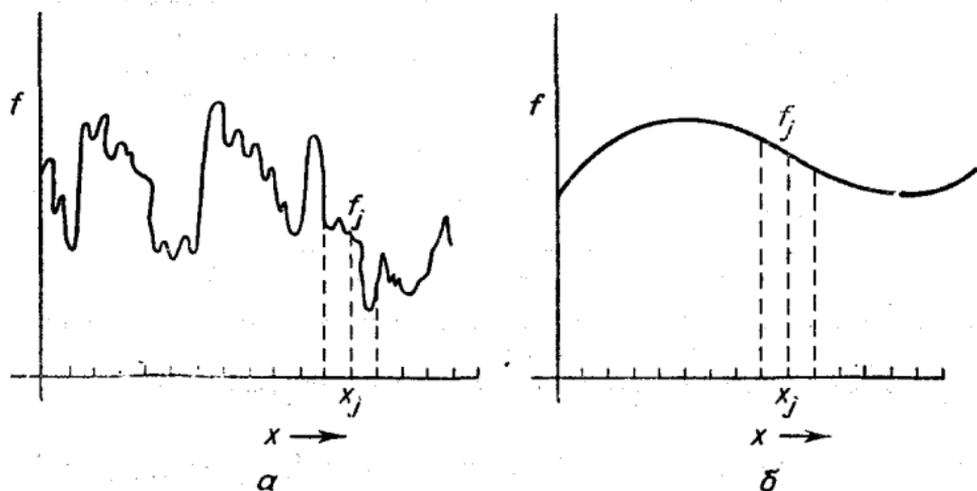
тогда для интерполяции первого порядка

$$f^* = \varepsilon f_{j+1} + (1 - \varepsilon) f_j. \quad (2.6)$$

Здесь  $f^*$  является аппроксимацией функции  $f$ . Построенная таким образом аппроксимация соответствует описанию «длинноволновых» свойств функции  $f$ , определенной на континууме. Действительно, если  $f$  значительно изменяется на элементе длины  $\Delta x_j$ , то  $f^*$  в некотором смысле «плохо» аппроксимирует  $f$  и, конечно, мы не можем включить в описание длины волн, меньшие  $\Delta x_j$  (фиг. 2.2). Таким образом, метод конечных разностей по существу применим лишь к длинноволновым процес-

сам, и чем больше точек разбиения содержит область  $X$  независимой переменной (т. е. чем больше  $J$ ), тем лучше вектор  $\{f_j\}$  представляет функцию  $f$ .

Чтобы выразить в количественной форме соображения о плохом или хорошем качестве аппроксимации, связанной с методом конечных разностей, полезно воспользоваться техникой разложения Фурье, позволяю-



Фиг. 2.2. Функция  $f$  аргумента  $x$  представлена вектором с компонентами  $f_j$  в узлах сетки  $j$ .

*a*—сеточное представление дает плохую аппроксимацию быстро меняющейся функции; *b*—хорошая аппроксимация медленно меняющейся (длинноволновой) функции.

щей записать функции в виде суммы мод, или волн Фурье<sup>1)</sup>). Предположим для простоты, что функция  $f$  периодична за пределами области  $X$ , т. е. что вне области  $X$  существует периодическое повторение функции  $f$ . Тогда при условии, что функция  $f$  удовлетворяет простым условиям (условиям Дирихле), ее можно разложить в бесконечный ряд Фурье:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{g}_k e^{i2\pi kx/X}, \quad (2.7)$$

где

$$\hat{g}_k = \frac{1}{X} \int_X f(x) e^{-i2\pi kx/X} dx, \quad (2.8)$$

<sup>1)</sup> См., например, работу [4].

а  $i$  — квадратный корень из  $-1$ . Формула (2.7) означает, что любую функцию  $f$  с «разумным» поведением, определенную везде в непрерывной области изменения  $x$ , можно разложить в бесконечный ряд по модам Фурье; коэффициенты  $\hat{g}_k$  определяют амплитуды мод с длиной волны  $X/k$ . Польза этой процедуры ясна, так как дискретную аппроксимацию  $\{f_j\}$  непрерывной функции  $f$  можно разложить вполне аналогичным образом, в результате чего мы можем сравнить представление для  $f$  с эквивалентным представлением для  $\{f_j\}$ . Так как компоненты  $f_j$  образуют вектор конечной размерности  $J$ , дискретное представление  $\{f_j\}$  можно выразить только в виде суммы конечного числа ( $J$ ) ортогональных функций.

Предположим, что элементы дискретной сетки  $\Delta x_j$  имеют одну и ту же длину  $\Delta$  для всех  $j$  и, кроме того, сама функция  $f$  вместе с ее дискретным представлением является периодической. В этом случае  $f_j$  можно записать в виде ряда Фурье, содержащего конечное число членов:

$$f_j = \sum_{k=1}^J \hat{g}_k e^{i2\pi k j / J}, \quad (2.9)$$

где амплитуда  $\hat{g}_k$  для каждой моды дается суммой

$$\hat{g}_k = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J f_j e^{-i2\pi k j / J}. \quad (2.10)$$

Ясно, что это разложение согласуется с выражением, содержащим бесконечный ряд Фурье [формулы (2.7) и (2.8)], в том случае, когда функция  $f(x)$  определена на континууме; при этом  $J\Delta$  соответствует  $X$ , а  $j\Delta$  —  $x$ . Так как длина волны любого процесса, определенного на сетке, ограничена снизу значением  $\Delta$ , бесконечный ряд превращается в конечную сумму. Сейчас мы более формально докажем, что амплитуды  $\hat{g}_k$  в конечной сумме ряда Фурье (2.9) определяются соотношением (2.10). Для этого, рассмотрев суммирование попарных произведений различных мод, покажем сначала, что

моды Фурье взаимно ортогональны:

$$S = \sum_{j=1}^J e^{i2\pi jk/J} e^{-i2\pi jk'/J} = \sum_{j=1}^J e^{i2\pi (k-k')j/J}. \quad (2.11)$$

Перепишем формулу (2.11) в виде

$$S = e^{i2\pi (k-k')/J} \sum_{j=0}^{J-1} \{e^{i2\pi (k-k')/J}\}^j. \quad (2.12)$$

Суммирование в правой части этой формулы соответствует вычислению суммы геометрической прогрессии:

$$\sum_{n=0}^N x^n = \frac{1 - x^{N+1}}{1 - x}. \quad (2.13)$$

Применяя это выражение к сумме (2.12), получаем

$$S = e^{i2\pi (k-k')/J} \left\{ \frac{1 - e^{i2\pi (k-k')}}{1 - e^{i2\pi (k-k')/J}} \right\}, \quad (2.14)$$

или, после простых преобразований,

$$S = e^{i\pi (J+1) (k-k')/J} \left\{ \frac{\sin [\pi (k-k')]}{\sin [\pi (k-k')/J]} \right\}, \quad (2.15)$$

$$S = \begin{cases} 0, & \text{если } k \neq k', \\ J, & \text{если } k = k', \end{cases} \quad (2.16)$$

так как  $k$  и  $k'$  по определению неотрицательные целые числа, не превосходящие  $J$ , а  $\sin \pi m = 0$  для целых значений  $m$ . Тот факт, что  $S = J$  для  $k = k'$ , с наибольшей очевидностью следует из разложения двух синусов в формуле (2.15) в ряд Тейлора для малых значений аргумента.

Таким образом показано, что фурье-моды образуют ортогональную систему

$$\sum_{j=1}^J e^{i2\pi jk/J} e^{-i2\pi jk'/J} = J \delta_{kk'}. \quad (2.17)$$

Этот результат можно теперь использовать для проверки соотношений (2.9) и (2.10), которые означают, что дискретное представление  $\{f_j\}$  можно разложить в конечный ряд Фурье. Покажем, что амплитуды

в разложении (2.9) удовлетворяют уравнению (2.10). Для этой цели образуем с помощью векторных компонент  $f_j$  следующую сумму:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^J f_j e^{-i2\pi k' j/J} &= \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^J \hat{g}_k e^{i2\pi k j/J} e^{-i2\pi k' j/J} = \\ &= \sum_{k=1}^J \hat{g}_k \sum_{j=1}^J e^{i2\pi k j/J} e^{-i2\pi k' j/J}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Из выражения (2.18) и из соотношений ортогональности (2.17) следует

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^J f_j e^{-i2\pi k' j/J} &= \sum_{k=1}^J \hat{g}_k J \delta_{kk'}, \\ \hat{g}_{k'} &= \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J f_j e^{i2\pi k' j/J}, \end{aligned}$$

т. е. результат совпадает с (2.10).

Таким образом мы видим, что представление  $\{f_j\}$  на дискретной сетке для функции  $f$ , определенной на континууме, ограничено в том смысле, что оно отвечает лишь конечному набору длин волн. В частности, этот набор ограничен снизу значением  $\Delta$  и процессы с шагом, меньшим  $\Delta$ , не описываются данным представлением. Таким образом, представление  $\{f_j\}$  является длинноволновым приближением функции  $f(x)$ , заданной на континууме.

При сравнении конечно-разностных и дифференциальных операторов очень полезно и поучительно определить интервал аппроксимации по отношению к отдельной моде Фурье с помощью описанных выше методов. Этот подход позволяет оценить степень искажения, вносимую аппроксимацией в различных областях длин волн, и мы будем широко пользоваться им в последующих главах.

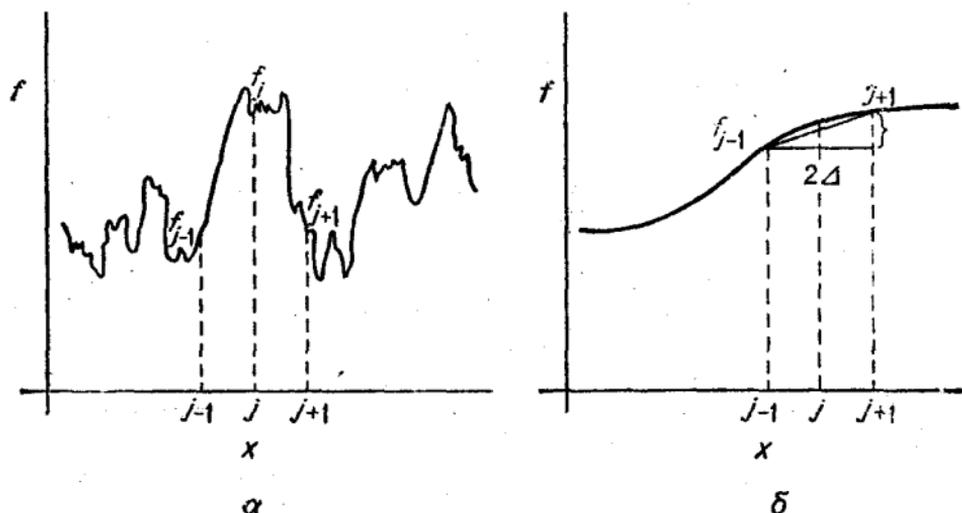
### § 3. Разностные производные по пространству

Рассмотрев представления непрерывных функций на дискретной сетке, остановимся теперь на разностной аппроксимации их производных. Производная функции

дает информацию о ее локальном изменении в пространстве и соответственно разностная производная связывает значения функции в соседних узлах сетки. Очевидная аппроксимация первой производной  $df/dx$  в точке  $j$  сетки,  $1 < j < J$ , имеет вид

$$\Delta'_x f_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta}, \quad (2.19)$$

где, как и раньше,  $\Delta$  — шаг сетки. Естественно, что это разностное отношение является хорошей аппроксима-



Фиг. 2.3. Разностная аппроксимация первой производной функции  $f$ .  
а — плохая аппроксимация; б — хорошая аппроксимация.

цией для  $df/dx$ , если сама функция  $f$  не слишком быстро меняется на длине  $\Delta$  (фиг. 2.3). Для оценки порядка аппроксимации дифференциального оператора  $d/dx$  разностным оператором  $\Delta'_x$  по формуле (2.19) полезно, опираясь на сказанное в гл. 2, § 2, провести сравнение между производной и разностной производной для одной из мод Фурье. Однократное дифференцирование фурье-моды

$$u = ge^{ikx} \quad (2.20)$$

дает

$$\frac{du}{dx} = ikge^{ikx} = iku. \quad (2.21)$$

В результате действия оператора разностного дифференцирования (2.19) на ту же фурье-моду  $u$  получаем выражение

$$\Delta'_x u = \frac{ge^{ikx_{j+1}} - ge^{ikx_{j-1}}}{2\Delta}. \quad (2.22)$$

Поскольку  $x_{j+1} = x_j + \Delta$  и  $x_{j-1} = x_j - \Delta$ , имеем

$$\begin{aligned} \Delta'_x u &= \frac{g}{2\Delta} (e^{ik(x_j+\Delta)} - e^{ik(x_j-\Delta)}) = \\ &= \frac{g}{\Delta} e^{ikx_j} \frac{1}{2} (e^{ik\Delta} - e^{-ik\Delta}), \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\Delta'_x u = \frac{iug}{\Delta} \sin k\Delta. \quad (2.24)$$

Для малых значений  $k\Delta$  величина  $\sin k\Delta$  приблизительно равна  $k\Delta$ . С той же точностью правая часть формулы (2.24) совпадает с полученным выражением (2.21) для производной. Таким образом, конечно-разностное отношение (2.19) является хорошей аппроксимацией первой производной, если мало волновое число  $k$  и соответственно велика длина волны  $2\pi/k$ . Чем длиннее волна, тем аппроксимация лучше. Более точную оценку аппроксимации  $\Delta'_x$  для  $d/dx$  можно получить, разлагая результат для разностной производной (2.24) в ряд по степеням малой величины  $k\Delta$ :

$$\begin{aligned} \Delta'_x u &= \frac{iug}{\Delta} \left( k\Delta - \frac{(k\Delta)^3}{6} + O(k^5\Delta^5) \right) = \\ &= iuk \left( 1 - \frac{k^2\Delta^2}{6} + O(k^4\Delta^4) \right), \end{aligned} \quad (2.25)$$

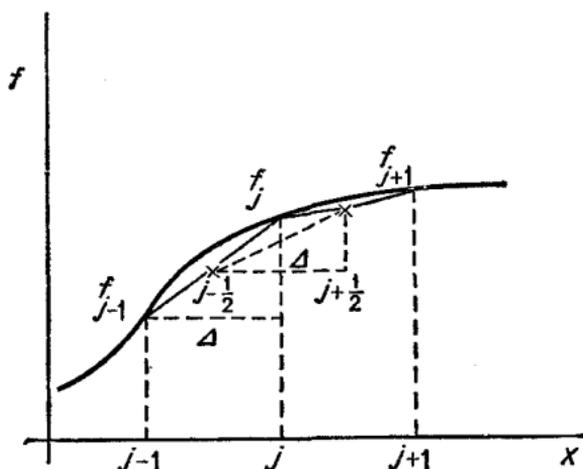
$$\Delta'_x \equiv \left( 1 - \frac{k^2\Delta^2}{6} + O(k^4\Delta^4) \right) \frac{d}{dx}. \quad (2.26)$$

В этом случае говорят, что  $\Delta'_x$  является разностным оператором 2-го порядка точности по  $k\Delta$ , или «центрированным по пространству».

Очевидно, что хорошая и простая аппроксимация второй производной  $d^2f/dx^2$  на разностной сетке  $1 < i < J$  (фиг. 2.4) имеет вид

$$\Delta''_x f_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta^2}. \quad (2.27)$$

Точность этой аппроксимации можно установить, как и выше, рассматривая результат действия разностного оператора  $\Delta_x''$  на фурье-моду с длиной волны  $2\pi/k$ . При-



Фиг. 2.4. Разностная аппроксимация второй производной функции  $f$ .

менение дифференциального оператора  $d^2/dx^2$  дает

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{d^2}{dx^2} (ge^{ikx}) = -gk^2e^{ikx} = -k^2u. \quad (2.28)$$

С другой стороны, применяя разностный оператор 2-го порядка, определенный выражением (2.27), получаем

$$\Delta_x'' u_j = \frac{g}{\Delta^2} (e^{ik(x_j+\Delta)} - 2e^{ikx_j} + e^{ik(x_j-\Delta)}) = \quad (2.29)$$

$$= \frac{2ge^{ikx_j}}{\Delta^2} \left( \frac{1}{2} e^{ik\Delta} + \frac{1}{2} e^{-ik\Delta} - 1 \right) = \quad (2.29)$$

$$= \frac{2u}{\Delta^2} (\cos k\Delta - 1). \quad (2.30)$$

Сравним этот результат с выражением для 2-й производной (2.28). Легко видеть, что дифференциальный оператор аппроксимируется разностным только при малых  $k\Delta$ , когда рассматриваемая длина волны много больше шага сетки. В этом случае разложение  $\cos k\Delta$

по малым  $k\Delta$  дает

$$\begin{aligned}\Delta_x'' u &= \frac{2u}{\Delta^2} \left( 1 - \frac{k^2 \Delta^2}{2} + \frac{k^4 \Delta^4}{24} - 1 + O(k^6 \Delta^6) \right) = \\ &= -k^2 u \left( 1 - \frac{k^2 \Delta^2}{12} + O(k^4 \Delta^4) \right).\end{aligned}\quad (2.31)$$

Таким образом, разностный оператор 2-го порядка представляет собой аппроксимацию второго порядка точности по величине отношения сеточного шага к длине волны:

$$\Delta_x'' \equiv \left( 1 - \frac{k^2 \Delta^2}{12} + O(k^4 \Delta^4) \right) \frac{d^2}{dx^2}.\quad (2.32)$$

Эти аппроксимации первой и второй производных широко используются для численного решения дифференциальных уравнений, представляющих физический интерес. В отдельных задачах могут быть использованы и более сложные формулы, если потребуется большая точность или возникнет необходимость аппроксимировать производные более высоких порядков. Однако и в этом случае описанный выше подход полностью сохраняет свое значение и тот же метод может быть применен для исследования этих более сложных операторов.

#### § 4. Общая постановка задачи с начальными условиями

Мы сформулировали основные идеи метода конечных разностей, согласно которым функции, заданные на континууме, представляются сеточным вектором, а дифференциальные операторы, по крайней мере для пространственных переменных, естественным образом аппроксимируются на сетке их разностными аналогами. Во временных задачах мы вынуждены получать решения в реальном времени ЭВМ, и определение производной по времени оказывается уже не столь легким, поскольку неизвестно решение, соответствующее новому моменту времени. Естественно поэтому, что в задачах, включающих зависимость от времени, операция интегрирования на временной сетке требует специального определения. Мы используем термин «временные задачи» для обозначения класса задач с граничными ус-

ловиями, заданными в одной точке. Вообще говоря, это более широкий класс, чем класс задач, возникающих при определении решения в реальном времени. Тем не менее задачи в реальном времени особенно интересны и важны, и именно из них вытекает наиболее употребительная система обозначений.

Задача с начальными условиями может быть сформулирована в любой области физики и имеет фундаментальное значение. Заклучая в себе по определению идею о возможности предсказания будущих событий, она представляет собой проблему номер один и для вычислительной физики. Она возникает, в частности, при необходимости сформулировать уравнения движения для частицы или системы частиц, что приводит к обыкновенному дифференциальному уравнению или системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Задача с начальными условиями возникает также при описании эволюции непрерывной системы, количественные характеристики которой задаются системой уравнений в частных производных. В обоих случаях при постановке задачи используется один и тот же подход, так что здесь мы будем подразумевать некоторую общую ситуацию, не делая различия между задачами с обыкновенными дифференциальными уравнениями и задачами с уравнениями в частных производных. В последних разделах этой главы мы познакомимся с конкретными схемами интегрирования, проводя все рассуждения, ради простоты изложения, для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Пусть состояние некоторой системы определяется вектором  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ , заданным в области пространства  $R = R(\mathbf{r})$ . Пусть, далее, задано  $\mathbf{u} = \mathbf{u}^0$  в момент времени  $t = 0$  и на поверхности  $S$  области  $R$  известно  $\mathbf{u}$  для всех  $t$ . Требуется найти  $\mathbf{u}$  в области  $R$  для любых  $t$ . Состояние системы для всех  $t$  можно получить, решая уравнение

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{L}\mathbf{u} \quad (2.33)$$

с заданными начальными значениями. В общем случае  $\mathbf{L}$  есть нелинейный оператор. Для обыкновенных

дифференциальных уравнений он является алгебраическим, а для уравнений в частных производных представляет собой пространственный дифференциальный оператор. Для иллюстрации формализма в качестве простого примера можно рассмотреть обычный одномерный гармонический осциллятор. Пусть  $m$  — масса,  $a$  — постоянная сила,  $x$  — переменная координата и  $v$  — скорость. Состояние системы задается вектором

$$\mathbf{u} = (x, v). \quad (2.34)$$

Оператор  $\mathbf{L}$  в рассматриваемом случае является линейным матричным оператором

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -a/m & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

вид которого сразу следует из уравнений движения осциллятора

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v, \\ \frac{dv}{dt} &= -\frac{a}{m} x. \end{aligned} \quad (2.36)$$

В качестве второго примера рассмотрим постановку задачи о распространении тепла в одномерном стержне. В этом случае вектор состояния системы есть просто скаляр,  $u(x, t) = T$ , где  $T$  — температура, а оператор  $\mathbf{L}$  есть пространственный дифференциальный оператор вида

$$\mathbf{L} = \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.37)$$

в соответствии с уравнением диффузии

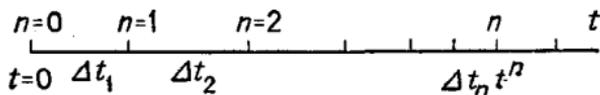
$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (2.38)$$

( $\kappa$  — коэффициент теплопроводности).

В такого рода примерах, когда состояние системы определяется на пространственном континууме, а  $\mathbf{L}$  есть дифференциальный оператор в пространстве, для задания вектора состояния  $\mathbf{u}$  на пространственной сетке необходимо предварительно перейти от непрерывных

к дискретным значениям пространственных переменных. При этом оператор  $L$  представляется разностным оператором, возможно, сложного вида, который можно найти, повторив процедуру из § 3.

Вернемся к общей постановке задачи с начальными условиями и будем интегрировать уравнение (2.33) по времени на малых временных шагах в соответствии с реальным временем вычислительной машины. Введем



Фиг. 2.5. Временная сетка.

В задачах с начальными условиями интегрирование производится по малым временным интервалам  $\Delta t_n$ .

на временной оси конечное число малых интервалов, разделяющих отдельные моменты времени (фиг. 2.5):

$$t^n = \sum_{v=1}^n \Delta t_v. \quad (2.39)$$

Тем самым мы определяем *временную сетку*, или *временную решетку*. Обычно, для того чтобы отличить временную сетку от пространственной, величины, относящиеся к отдельным моментам времени, обозначаются надстрочным индексом, а величины, заданные в узлах пространственной сетки, — подстрочным. Интегрируя уравнение (2.33) по малому временному шагу, мы получаем связь между значениями векторов состояния  $\mathbf{u}^{n+1}$  и  $\mathbf{u}^n$  в двух соседних точках  $t^{n+1}$  и  $t^n$ :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} L\mathbf{u} dt'. \quad (2.40)$$

Очевидно, что интеграл в правой части выражения (2.40) не может быть вычислен точно, поскольку вектор  $\mathbf{u}(t')$  не известен при значениях  $t'$ , лежащих в пределах  $t^n \leq t' \leq t^{n+1}$ . Поэтому переход к конечно-разностной аппроксимации по существу предполагает для достаточно малых временных шагов  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  возможность

замены подынтегрального выражения в (2.40) рядом Тейлора с конечным числом членов:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left\{ \sum_{r=0}^{p-1} \left[ \frac{d^r}{dt^r} (\mathbf{Lu}) \right]_{t^n} \frac{t'^r}{r!} + O(t'^p) \right\} dt'. \quad (2.41)$$

Производя интегрирование в правой части (2.41), получаем

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \sum_{r=1}^p \left[ \frac{d^{r-1}}{dt^{r-1}} (\mathbf{Lu}) \right]_{t^n} \frac{(\Delta t)^r}{r!} + O(\Delta t^{p+1}); \quad (2.42)$$

число  $p$  характеризует здесь порядок точности разностной схемы по временному шагу  $\Delta t$ . В обычной практике, особенно при операциях с уравнениями в частных производных, члены 3-го и более высоких порядков отбрасываются и тогда

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \mathbf{Lu}^n \Delta t + \left[ \frac{d}{dt} (\mathbf{Lu}) \right]_{t^n} \frac{(\Delta t)^2}{2}. \quad (2.43)$$

Возникает вопрос о том, каким образом следует теперь определить производную по времени, входящую в последний член выражения (2.43). На практике мы можем получить схему второго порядка точности, используя значения переменных на предыдущих временных слоях (скажем,  $t^{n-1}$ -м) или вводя на временной сетке промежуточные слои. Можно использовать и неизвестные значения переменных на следующем временном шаге  $t^{n+1}$ , и некоторые из таких алгоритмов будут сформулированы в следующих параграфах. В последней ситуации, когда мы имеем дело со значениями переменных в момент  $t^{n+1}$ , заслуживает внимания специальный случай, когда схема численного интегрирования имеет следующий вид:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \mathbf{Lu}^n (1 - \varepsilon) \Delta t + \mathbf{Lu}^{n+1} \varepsilon \Delta t. \quad (2.44)$$

Здесь  $\varepsilon$  — интерполяционный диаметр,  $0 \leq \varepsilon \leq 1$ . Схема второго порядка точности получается при единственном значении  $\varepsilon = 1/2$ . В частном случае  $\varepsilon = 0$  новое со-

стояние  $\mathbf{u}^{n+1}$  вычисляется явным образом по известному значению  $\mathbf{u}^n$  на предыдущем шаге

$$\mathbf{u}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{L}) \mathbf{u}^n. \quad (2.45)$$

В этом случае метод называется *явным*. И наоборот, при  $\varepsilon \neq 0$  мы получаем *неявный* метод

$$(\mathbf{I} - \varepsilon \Delta t \mathbf{L}) \mathbf{u}^{n+1} = (\mathbf{I} + (1 - \varepsilon) \Delta t \mathbf{L}) \mathbf{u}^n. \quad (2.46)$$

Предположим, что оператор в левой части (2.46) невырожденный, т. е. существует обратный оператор. Тогда задача сводится к решению уравнения (2.46) на каждом шаге по времени и к определению нового состояния  $\mathbf{u}^{n+1}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1} &= (\mathbf{I} - \varepsilon \Delta t \mathbf{L})^{-1} (\mathbf{I} + (1 - \varepsilon) \Delta t \mathbf{L}) \mathbf{u}^n; \\ \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{T}(\Delta t, \Delta) \mathbf{u}^n. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Оператор  $\mathbf{T}$  представляет собой разностный оператор, связывающий состояния системы в следующих друг за другом узлах временной сетки. В случае когда система описывается уравнениями в частных производных и  $\mathbf{L}$  есть пространственный дифференциальный оператор,  $\mathbf{T}$  является разностным оператором, связывающим значения функции на пространственной сетке с шагом  $\Delta$ . Само уравнение (2.47) является разностным аналогом задачи с начальными условиями в дифференциальной форме (2.33). Эта проблема имеет общий характер, и в дальнейшем мы определим условия, при которых такое интегрирование по времени имеет смысл, и рассмотрим связанные с этим интегрированием ошибки.

## § 5. Требования к разностному решению задачи с начальными условиями

Интегрируя по малым временным шагам, мы свели задачу с начальными условиями к задаче об отыскании последовательности решений для дискретного набора моментов времени, при этом оператор перехода  $\mathbf{T}(\Delta t, \Delta)$  осуществляет связь (2.47) состояния в данный момент времени с состоянием в предыдущий момент. Это в равной степени относится как к случаю, когда мы имеем

дело с системой обыкновенных дифференциальных уравнений, так и к более общей ситуации, когда рассматривается система уравнений в частных производных, определенная на континууме. В последнем случае мы заменяем пространственный континуум ячеистой или сеточной структурой, однако природа временной связи по существу не меняется.

Оператор перехода  $T$ , осуществляющий связь различных временных слоев, не является единственным. Его вид зависит и от выбора схемы интегрирования по времени, и от разностной схемы интегрирования по пространственным переменным. Возникает естественный вопрос: какими критериями следует руководствоваться при выборе конкретной разностной схемы, или оператора перехода  $T$ ? Здесь мы определим основные понятия, лежащие в основе такого рода критериев, а в следующей главе сформулируем их более строго для уравнений в частных производных. Основные свойства разностных схем, которые будут рассмотрены, можно озаглавить следующим образом: *согласованность, точность, устойчивость, эффективность.*

### 1. Согласованность разностной аппроксимации

Очевидно, что в первую очередь мы должны потребовать, чтобы разностная система, или схема, некоторым образом аппроксимировала дифференциальную систему, т. е. была с ней согласована. По существу это утверждение сводится к требованию, чтобы в пределе, при стремлении к нулю шагов по времени и по пространству, разностная система совпала с дифференциальной. Требование *согласованности* можно сформулировать следующим образом:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \lim_{\substack{\Delta \rightarrow 0 \\ \Delta t / \Delta \rightarrow \beta}} \frac{T(\Delta t, \Delta) - I}{\Delta t} = L. \quad (2.48)$$

Здесь  $L$  — тот же дифференциальный оператор, что и в уравнении (2.33);  $\beta$  — конечная величина. Ясно, что, если бы это условие не было выполнено, разностная схема вообще не могла бы служить моделью рассмат-

риваемой задачи с начальными условиями. Требование согласованности можно считать наиболее фундаментальным. Однако, убедившись в его выполнении, мы должны предпринять детальное исследование других свойств разностной схемы, связанных с возможным накоплением ошибок и отклонением разностного решения от точного из-за конечности шагов по времени и по пространству.

## 2. Точность разностной аппроксимации

Точность численного решения, как аппроксимации решения дифференциальной системы, ухудшается из-за наличия двух источников ошибок. Первый из них, дающий так называемые ошибки аппроксимации, непосредственно связан с заменой дифференциальных уравнений их разностными аналогами. Как мы уже видели в § 2—4, в основе этой замены лежит представление непрерывного аргумента дискретным набором точек. В силу этого ошибки аппроксимации зависят от величины шагов  $\Delta t$  и  $\Delta$  временной и пространственной сеток и их можно легко оценить. Естественно, что при выборе разностной схемы условие минимизации ошибки аппроксимации является одним из основных.

Второй источник ошибок, называемых ошибками округления, связан с точностью, с которой то или иное значение переменной записывается в памяти вычислительной машины. Обычно арифметические операции выполняются на ЭВМ, в которых числа представляются в экспоненциальной форме, и в итоге эти операции не являются точными. Понятно, что вычисления, выполненные с  $i$  десятичными знаками, менее точны, чем те же вычисления, выполненные с  $i + 1$  знаками. Ошибка зависит от того, насколько велико округление в младших разрядах машинного слова. Оценку суммарного эффекта от ошибок округления можно было бы получить, пользуясь методами статистического анализа. С другой стороны, в современных вычислительных машинах число разрядов, из которых формируется машинное слово, достаточно велико, что позволяет получать результаты с нужным числом десятичных знаков. Из этого следует,

что суммарная ошибка округления обычно незначительна.

Тем не менее важно отметить, что выполняемые на машине арифметические операции принципиально не точны. В результате в младших разрядах слов, представляющих искомые величины, непрерывно генерируются ошибки в величинах собственных векторов разностной системы, хотя эти ошибки и имеют в большинстве случаев малую амплитуду. В связи с этим возникает вопрос: ограничено ли разностное решение, т. е. может ли любой возможный собственный вектор разностного оператора неограниченно расти? С ответом на этот вопрос связано весьма важное свойство разностной схемы, а именно ее *устойчивость*.

### 3. Устойчивость разностной схемы

Очевидно, что, если в результате применения разностной схемы мы получаем неограниченное решение, последствия этого будут катастрофическими, и в этом случае мы говорим, что такая разностная схема численно неустойчива. Если любая ошибка возрастает во времени от шага к шагу, то она быстро «смажет» решение и его результат будет полностью обесценен. Условие устойчивости можно сформулировать следующим образом: *численный метод устойчив, если на любой стадии вычислительной процедуры малая ошибка приводит к меньшей конечной ошибке*. Любой используемый на практике численный метод для решения задачи с начальными условиями должен быть устойчивым по крайней мере при определенных условиях.

Прежде чем дать количественную формулировку принципа устойчивости, рассмотрим обыкновенное дифференциальное уравнение. В нашем простом примере искомая функция является скалярной величиной, и ошибку, появляющуюся на  $n$ -м шаге (обозначим ее через  $\epsilon^n$ ), можно легко определить. Нас интересует величина  $\epsilon^{n+1}$  этой ошибки при переходе к новому шагу  $n + 1$ ; запишем ее в виде

$$\epsilon^{n+1} = g\epsilon^n. \quad (2.49)$$

Величина  $g$ , которая называется множителем перехода, непосредственно связана с оператором перехода  $T$ , а значит, и с выбором конкретной схемы интегрирования. Таким образом, множитель перехода может быть связан с ошибками аппроксимации в схеме интегрирования, но в то же время он не учитывает ошибок округления, которые могут появиться на новом шаге по времени. В соответствии со сформулированным выше условием устойчивости потребуем

$$|\epsilon^{n+1}| \leq |\epsilon^n|. \quad (2.50)$$

Принимая во внимание определение множителя перехода (2.49), перепишем (2.50) в виде

$$|g\epsilon^n| \leq |\epsilon^n|. \quad (2.51)$$

Следовательно, численная устойчивость будет иметь место при условии

$$|g| \leq 1. \quad (2.52)$$

Это требование нуждается в некотором уточнении для класса задач, допускающих растущие решения. Действительно, в некоторых физических задачах могут возникать решения, экспоненциально растущие со временем. Тогда можно допустить неограниченное нарастание ошибки при условии, что последняя остается меньше растущего решения (см. § 3). Этот случай носит частный характер, и в дальнейшем мы исключим из рассмотрения класс задач с растущими решениями.

Не представляет труда распространить понятие устойчивости на системы обыкновенных дифференциальных уравнений и дифференциальных уравнений в частных производных (гл. 3)<sup>1)</sup>. Для системы  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го порядка необходимо определить вектор ошибки  $\epsilon^n$ , компонентами которого являются ошибки, относящиеся к соответствующим неизвестным функциям системы. Значение вектора ошибки  $\epsilon^{n+1}$  на новом временном шаге получается

<sup>1)</sup> Более строгая формулировка и обсуждение вопроса содержатся в книге Рихтмайера и Мортонa [1].

теперь умножением матрицы перехода  $\mathbf{G}$  на вектор ошибки, взятый с предыдущего слоя:

$$\varepsilon^{n+1} = \mathbf{G}\varepsilon^n. \quad (2.53)$$

Матрица перехода зависит от оператора перехода  $\mathbf{T}(\Delta t)$ , который связывает решения в соседние моменты времени. Действительно, пусть  $\varepsilon^n$  — ошибка в решении  $\mathbf{u}^n$  на  $n$ -м шаге по времени. Тогда уравнение (2.47) принимает вид

$$\mathbf{u}^{n+1} + \varepsilon^{n+1} = \mathbf{T}(\mathbf{u}^n + \varepsilon^n). \quad (2.54)$$

Очевидно, что в случае, когда  $\mathbf{T}$  — линейный оператор, матрица  $\mathbf{G}$  эквивалентна оператору перехода  $\mathbf{T}$ . В более общем нелинейном случае мы будем предполагать, что вектор ошибки имеет малую амплитуду, что позволит *линеаризовать* уравнение (2.54), используя разложение в ряд Тейлора по малой ошибке. Имеем

$$\mathbf{T}(\mathbf{u}^n + \varepsilon^n) = \mathbf{T}\mathbf{u}^n + \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} (\mathbf{T}\mathbf{u}) \right\}_n \varepsilon^n. \quad (2.55)$$

В этом соотношении присутствуют лишь два первых члена разложения. Подставляя (2.55) в правую часть выражения (2.54) и вычитая из него «точное» решение (2.47)

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{T}\mathbf{u}^n,$$

получаем линейное уравнение, связывающее значения векторов ошибки на двух слоях времени:

$$\varepsilon^{n+1} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} (\mathbf{T}\mathbf{u}) \right\}_n \varepsilon^n. \quad (2.56)$$

Оператор в правой части этого уравнения является линейным матричным оператором, а само уравнение имеет в точности тот же вид, что и уравнение (2.53), с помощью которого мы определили матрицу перехода. Сравнивая между собой эти уравнения, находим каждую из компонент  $G_{\mu\nu}$  матрицы перехода:

$$G_{\mu\nu} = \frac{\partial u_\mu^{n+1}}{\partial u_\nu^n}. \quad (2.57)$$

Этот результат позволяет находить матрицу перехода путем обычного дифференцирования разностных уравнений (2.47) в соответствии с формулой (2.57).

Известная матрица перехода, отвечающая схеме интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений, устанавливает связь (2.53) между векторами ошибки на новом и на предыдущем шагах по времени. Возникает вопрос о том, каким образом можно сформулировать понятие устойчивости теперь уже не для скалярной, а для векторной ошибки. Если уравнение перехода приведено к диагональному виду, то амплитуда каждого собственного вектора ошибки  $\varepsilon_\mu$  связана с соответствующим собственным значением  $g_\mu$  матрицы перехода соотношением

$$\varepsilon_\mu^{n+1} = g_\mu \varepsilon_\mu^n. \quad (2.58)$$

Теперь нужно потребовать, чтобы условие устойчивости было выполнено для амплитуды каждого собственного вектора ошибки

$$\begin{aligned} &|\varepsilon_\mu^{n+1}| \leq |\varepsilon_\mu^n| \quad \text{для всех } \mu \\ \text{или} &|g_\mu| \leq 1 \quad \text{для всех } \mu. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Таким образом, условие устойчивости сводится к требованию, чтобы модуль каждого собственного значения матрицы перехода был меньше или равен единице. В общем случае собственные значения матрицы перехода могут быть комплексными, и тогда под модулем собственного значения понимают его амплитуду на комплексной плоскости:

$$|g_\mu| = \sqrt{(g_\mu g_\mu^*)}, \quad (2.60)$$

где  $g_\mu^*$  — величина, комплексно-сопряженная  $g_\mu$ .

#### 4. Эффективность разностной схемы

Четвертым основным свойством каждого конкретного численного алгоритма для задачи с начальными условиями является его эффективность. Поскольку любая вычислительная машина затрачивает на выполнение каждой операции конечное время и имеет

ограниченную память, вообще говоря, не всякую сложную разностную схему целесообразно использовать на практике. Эффективность конкретной разностной схемы можно определить как полное число арифметических, логических и обменных операций, выполняемых центральным процессором машины, для получения решения на характерной единице времени задачи. С одной стороны, эффективность снижается, если используется усложненная разностная схема, с другой стороны, применение более сложного алгоритма может обеспечить лучшую точность. В практических расчетах для получения жизнеспособного метода, который обладал бы одновременно хорошей эффективностью и достаточной точностью, нужно идти на компромисс. Так, для решения простой задачи с малым числом переменных требуется относительно небольшое машинное время, что позволяет в этом случае использовать схемы высокого порядка точности, в то время как при решении задач с большим числом переменных бывает полезно пожертвовать точностью схемы в интересах ее эффективности.

## § 6. Интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений

В этом параграфе мы дадим описание нескольких важных схем интегрирования по времени, которые часто применяются для нахождения разностного решения задачи с начальными условиями, и сделаем это для одного или двух связанных между собой обыкновенных дифференциальных уравнений. Несмотря на то, что излагаемые методы будут иллюстрироваться на столь простых примерах, их можно распространить на более сложные случаи, в частности, на системы уравнений в частных производных и на системы из большого числа обыкновенных дифференциальных уравнений.

Набор развиваемых ниже методов не является полным. Имеется в виду, что, начав с наиболее простых схем и перейдя затем к знакомству с более совершенными и тонкими методами, мы, тем не менее, оставим в стороне очень сложные схемы из-за их ограниченной применимости.

Рассмотрим обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{du}{dt} + f(u, t) = 0 \quad (2.61)$$

для функции  $u = u(t)$  с заданными начальными условиями

$$u(t^0) = u^0. \quad (2.62)$$

Этот пример представляет собой частный случай постановки задачи с начальными условиями в § 4, поскольку теперь в выражении (2.61) вместо операторного формализма используется функциональный. В общем случае, когда неизвестная функция  $u$  и функция  $f$  определены на комплексной плоскости, вместо уравнения (2.61) надо рассматривать пару связанных уравнений.

Как и в § 4, уравнение (2.61) можно проинтегрировать по временному интервалу  $\Delta t$  между моментами  $t^n$  и  $t^{n+1}$ :

$$u^{n+1} = u^n - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u, t) dt, \quad (2.63)$$

$$\Delta t = t^{n+1} - t^n. \quad (2.64)$$

В зависимости от способа аппроксимации интеграла по времени в правой части уравнения (2.63) различают несколько методов.

### 1. Метод Эйлера первого порядка

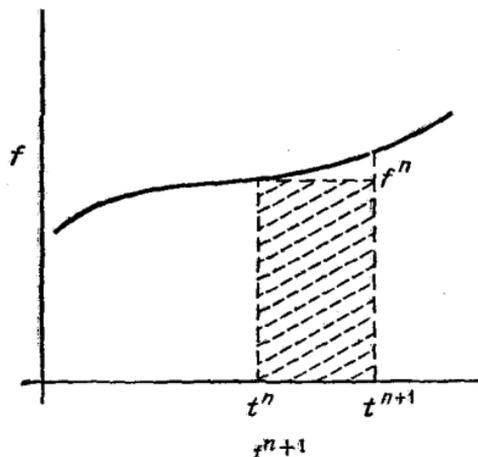
Простейший способ аппроксимации интегралов в уравнении (2.63) состоит в замене подынтегральной функции  $f$ , изменяющейся во времени на отрезке  $t$ ,  $t^n \leq t \leq t^{n+1}$ , значением этой функции в момент  $t^n$  (фиг. 2.6), в результате чего получаем алгоритм, называемый методом Эйлера:

$$u^{n+1} = u^n - f(u^n, t^n) \Delta t. \quad (2.65)$$

Метод Эйлера является явным и имеет лишь первый порядок точности по временному шагу  $\Delta t$ . Его чрезвычайная простота и эффективность очевидны, но остается

открытым вопрос об условиях, если таковые имеются, при которых он устойчив.

Предполагая, что  $\epsilon^n$  есть ошибка неизвестной функции  $u^n$  в момент  $t^n$ , воспользуемся методом, описанным



Фиг. 2.6. Аппроксимация интеграла  $\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(t), t) dt$  в методе Эйлера [уравнение (2.65)].

Заштрихованная область аппроксимирует площадь под соответствующим участком кривой.

в § 5, для нахождения решения  $u^{n+1}$  через один шаг по времени. Из уравнения (2.65) имеем

$$u^{n+1} + \epsilon^{n+1} = u^n + \epsilon^n - f((u^n + \epsilon^n), t^n) \Delta t. \quad (2.66)$$

Пусть  $\epsilon^n$  мало. Тогда, разлагая функцию  $f(u) = f(u^n + \epsilon^n)$  в ряд Тейлора в окрестности  $u^n$ , имеем

$$f(u^n + \epsilon^n, t^n) = f(u^n, t^n) + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \epsilon^n + o(\epsilon^n). \quad (2.67)$$

Используя уравнение (2.65), получаем для нового значения ошибки соотношение

$$\epsilon^{n+1} = \epsilon^n - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t \epsilon^n + o(\epsilon^n), \quad (2.68)$$

из которого непосредственно следует выражение для множителя перехода в методе Эйлера:

$$g = 1 - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t. \quad (2.69)$$

Мы будем различать три класса уравнений: уравнения «с затуханием», для которых  $\partial f/\partial u > 0$ ; «с нарастанием»:  $\partial f/\partial u < 0$  и уравнения «осцилляторного» типа. В последнем случае функция  $u$  комплексна и удовлетворяет системе двух связанных уравнений, при этом  $\partial f/\partial u$  является чисто мнимой величиной. Потребуем выполнения условия устойчивости для схемы (2.62). В первом случае для уравнений с затуханием ( $\partial f/\partial u > 0$ ) имеем

$$\left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t \leq 2, \quad (2.70)$$

$$\Delta t \leq \frac{2}{\left. \partial f/\partial u \right|_n}. \quad (2.71)$$

Таким образом, это условие определяет верхнюю границу допустимого шага по времени, позволяющего получать устойчивое решение. Если выбранный шаг по времени  $\Delta t$  больше этой величины, наблюдается неограниченный рост ошибок и метод оказывается «неустойчивым». Следует отметить, что метод Эйлера, для которого мы получили условия устойчивости, очень часто применяется в физике для решения нелинейных уравнений. В нашем подходе мы линеаризовали задачу, рассматривая малое отклонение  $\varepsilon^n$  от известного параметра  $u^n$ , в результате чего было получено линейное уравнение, связывающее  $\varepsilon^{n+1}$  и  $\varepsilon^n$ .

В качестве простого примера, иллюстрирующего метод, можно рассмотреть уравнение

$$\frac{du}{dt} + \frac{u}{\tau} = 0 \quad (2.72)$$

с начальным условием

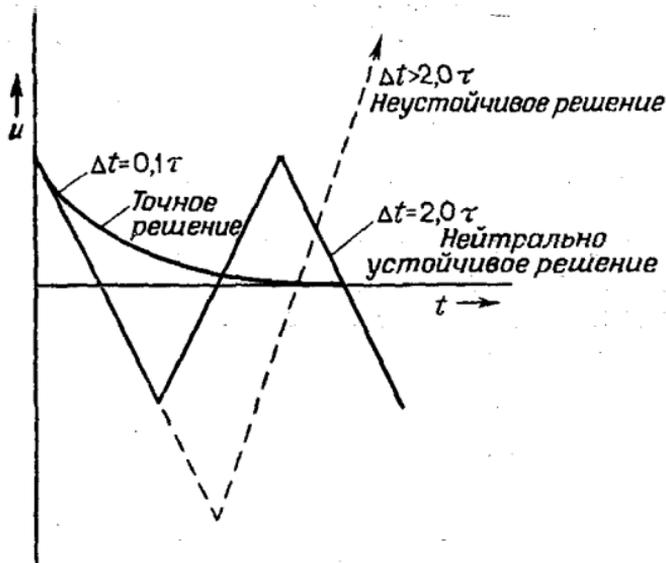
$$u(0) = 1, \quad (2.73)$$

где  $\tau$  — некоторая постоянная. Это уравнение возникает, например, в физической задаче о затухании электрического тока в контуре с индуктивностью  $L$  и сопротивлением  $R$ , и тогда  $\tau = L/R$ . Оно появляется и в задачах о радиоактивном распаде, в которых функция  $u$  есть поток нейтронов от радиоактивного источника, а  $\tau$  — период полураспада радиоактивного материала. Это же уравнение описывает затухание среднего импульса

электронов вследствие столкновений в зоне проводимости ионной решетки. Известно аналитическое решение:

$$u = e^{-t/\tau}. \quad (2.74)$$

Чтобы проиллюстрировать метод Эйлера, будем искать решение уравнения «с затуханием» по явной разностной



Фиг. 2.7. Решения уравнения с затуханием (2.72), полученные по методу Эйлера.

Проиллюстрированы три случая, соответствующие численному устойчивому ( $\Delta t = 0,1\tau$ ), нейтрально устойчивому ( $\Delta t = 2,0\tau$ ) и неустойчивому ( $\Delta t > 2,0\tau$ ) решениям (см. табл. 2.1).

схеме первого порядка (2.65). Из соображений устойчивости мы должны выбирать шаги по времени в соответствии с условием (2.71). Для данного примера

$$\left| \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n = \frac{1}{\tau}, \quad \Delta t \leq 2\tau. \quad (2.75)$$

Задача записывается в безразмерной форме, при этом в качестве единицы времени  $t$  используется период полураспада  $\tau$ . Результаты трех решений такой задачи приведены в табл. 2.1 и показаны на фиг. 2.7. В случае когда условие устойчивости заведомо выполнено ( $\Delta t = 0,1\tau$ ), решение носит регулярный характер на каж-

дом временном шаге и, как легко видеть, хорошо аппроксимирует точное решение (2.74). При использовании большего шага точность решения понижается, хотя оно все еще остается регулярным в смысле следования точному решению. Если же мы выбираем шаг по времени на границе устойчивости, т. е.  $\Delta t = 2,0 \tau$ , то решение не обнаруживает никакого сходства с точным, но в то же время  $u^n$  остается ограниченным при увеличении  $n$ , и в этом случае говорят, что решение является «нейтрально устойчивым». Однако в третьем примере, где критерий устойчивости существенно нарушен ( $\Delta t > 2,0 \tau$ ), уже через несколько шагов по времени наблюдается катастрофический рост решения и оно уже не имеет никакого отношения к точному. Очевидно, что устойчивость является фундаментальным свойством разностной схемы и выполнение всех условий устойчивости всегда должно быть гарантировано.

Таблица 2.1

Решение уравнения с затуханием при  $u^{n+1} = u^n - \Delta t u^n$ 

Точное решение	Устойчивое решение $\Delta t = 0,1 (\tau)$	Нейтрально устойчивое решение $\Delta t = 2,0 (\tau)$	Неустойчивое решение $\Delta t = 10,0 (\tau)$
$u(0,0) = 1,000$	$t=0,0 \quad u^0 = 1,000$	$t=0,0 \quad u^0 = 1,0$	$t=0,0 \quad u^0 = 1,0$
$u(0,1) = 0,9048$	$0,1 \quad u^1 = 0,9000$	$2,0 \quad u^1 = -1,0$	$10,0 \quad u^1 = -9,0$
$u(0,2) = 0,8187$	$0,2 \quad u^2 = 0,8100$	$4,0 \quad u^2 = 1,0$	$20,0 \quad u^2 = 81,0$
$u(0,3) = 0,7408$	$0,3 \quad u^3 = 0,7290$	$6,0 \quad u^3 = -1,0$	$30,0 \quad u^3 = -729,0$
$u(0,4) = 0,6703$	$0,4 \quad u^4 = 0,6561$		
$u(0,5) = 0,6065$	$0,5 \quad u^5 = 0,5895$		
$u(0,6) = 0,5488$	$0,6 \quad u^6 = 0,5306$		
$u(0,7) = 0,4966$	$0,7 \quad u^7 = 0,4775$		
$u(0,8) = 0,4493$	$0,8 \quad u^8 = 0,4298$		
$u(0,9) = 0,4066$	$0,9 \quad u^9 = 0,3865$		
$u(1,0) = 0,3679$	$1,0 \quad u^{10} = 0,3481$		

На этой стадии полезно рассмотреть другой пример, а именно уравнение осцилляторного типа, для которого в уравнении (2.69) для множителя перехода в методе

Эйлера параметр  $\partial f/\partial u$  является чисто мнимым. Простейшим примером такого рода является уравнение простого гармонического осциллятора с собственной частотой  $\omega$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = 0, \quad (2.76)$$

где, как обычно,  $x$  представляет собой отклонение от положения равновесия. Вводя определение нормированной скорости  $v$ , можно свести уравнение второго порядка (2.76) к двум уравнениям первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} - \omega v &= 0, \\ \frac{dv}{dt} + \omega x &= 0. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Рассматривая задачу на комплексной плоскости  $u = x + iv$ , для функции  $u$  получаем уравнение

$$\frac{du}{dt} + i\omega u = 0. \quad (2.78)$$

В этом примере множитель перехода является комплексным:

$$g = 1 - i\omega \Delta t. \quad (2.79)$$

В этом и более общих случаях, когда параметр  $\partial f/\partial u$  является мнимым и, следовательно, множитель перехода  $g$  представляет собой комплексную величину, для исследования метода на устойчивость мы должны рассматривать модуль множителя перехода (2.60) на комплексной плоскости

$$|g|^2 = gg^* = 1 + \left| \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n^2 \Delta t^2. \quad (2.80)$$

Модуль множителя перехода при любых значениях временного шага всегда больше единицы, и поэтому метод Эйлера не применим к решению уравнений чисто осцилляторного типа и является здесь безусловно неустойчивым.

В более сложных примерах нелинейных задач производная  $\partial f/\partial u$  есть функция от  $u$ . Следовательно, чтобы

удовлетворить, если это вообще возможно, критерию устойчивости, необходимо на каждом слое по времени определять величину шага  $\Delta t$ . Таким образом, в оптимальном решении шаг по времени является функцией времени.

Мы убедились, что, по крайней мере для уравнений с затуханием, для получения устойчивости решения методом Эйлера мы должны выбирать шаг по времени достаточно малым. На конкретном примере мы показали, что решение тем точнее, чем меньше использованный шаг по времени. Метод Эйлера имеет лишь первый порядок точности по  $\Delta t$ , и возникающая при его применении ошибка связана с аппроксимацией интеграла в уравнении (2.63) с помощью замены подынтегральной функции  $f$  на ее значение в момент времени  $t^n$ . По существу мы использовали лишь 1-й член разложения подынтегральной функции в ряд Тейлора (2.42). Решение можно улучшить, если удерживать в рассмотрении следующие члены разложения, и в этом случае подынтегральное выражение называется «центрированным по времени».

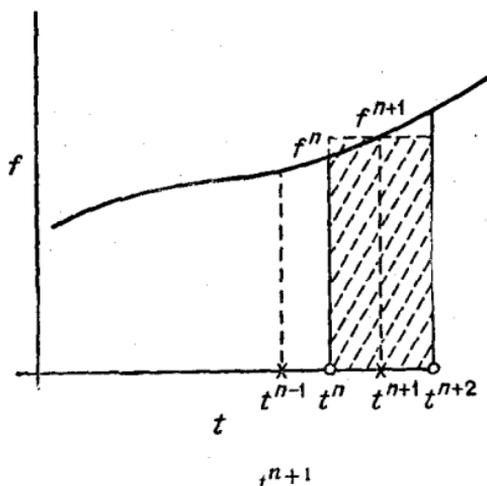
## 2. Метод «с перешагиванием»

Один из распространенных методов центрирования по времени подынтегральной функции в уравнении (2.63) и, следовательно, получения 2-го порядка точности основывается на применении «двухслойного» алгоритма (фиг. 2.8). Будем определять производную по времени сразу на удвоенном временном интервале и использовать промежуточный шаг по времени для нахождения интеграла от  $f$ :

$$\begin{aligned} \text{на } n+1 \text{ шаге } u^{n+1} &= u^{n-1} - f(u^n, t^n) 2 \Delta t, \\ \text{на } n+2 \text{ шаге } u^{n+2} &= u^n - f(u^{n+1}, t^{n+1}) 2 \Delta t. \end{aligned} \quad (2.81)$$

В свою очередь  $u^{n+1}$  и  $u^{n+2}$  можно использовать для вычисления  $u^{n+3}$ , поэтому для большей наглядности этот метод называют методом с перешагиванием. Его очевидными достоинствами являются простота и возможность получить второй порядок точности по  $\Delta t$ .

Однако при использовании этого метода возникает некоторая трудность. Поскольку соответствующие граничные условия определяют лишь величину  $u^{(0)} = u(0)$ , мы должны, чтобы продвинуться по времени, найти  $u^1 = u(\Delta t)$ . Очевидно, что можно определить  $u^1$ , скажем, по методу Эйлера и затем вести дальнейший счет по схеме с перешагиванием. Однако оказывается, что интегральная точность решения по этой схеме является



Фиг. 2.8. Аппроксимация интеграла  $\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(t), t) dt$  в методе с перешагиванием [уравнения (2.81)].

очень чувствительной функцией точности, с которой определено  $u^1$ . Для минимизации полной ошибки величину  $u^1$  приходится находить с большей точностью или путем дробления первого временного интервала  $\Delta t$ , или используя более высокие члены разложения.

Другая трудность в схеме с перешагиванием появляется при решении нелинейных задач, когда для уменьшения ошибок используется переменный шаг по времени. В этом случае схема уже не является центрированной по времени и могут возникнуть осложнения.

Прежде чем исследовать устойчивость схемы с перешагиванием, заметим, что обе формулы в алгоритме (2.81) взаимозаменяемы. По-прежнему применим ис-

пользовавшийся в предыдущих параграфах метод анализа устойчивости, однако теперь оказываются связанными между собой ошибки  $\epsilon^{n-1}$ ,  $\epsilon^n$ ,  $\epsilon^{n+1}$ , отвечающие сразу трем временным слоям:

$$\epsilon^{n+1} = \epsilon^{n-1} - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n 2 \Delta t \epsilon^n. \quad (2.82)$$

Таким образом,

$$g^2 = 1 - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n 2 \Delta t g, \quad (2.83)$$

$$g = -\alpha \pm \sqrt{(\alpha^2 + 1)}, \quad (2.84)$$

где  $\alpha = \left. \partial f / \partial u \right|_n \Delta t$ . В соответствии с тем, что используемый метод дает 2-й порядок точности, уравнение для множителя перехода имеет два корня и для неосцилляторных уравнений модуль одного из значений множителя перехода всегда больше единицы. Поэтому схема с перешагиванием обычно не используется при решении уравнений с затуханием или нарастанием. С другой стороны, для уравнений, описывающих колебания [например, для уравнения (2.78)] с чисто мнимой величиной  $\alpha$ , множитель перехода  $g$  является комплексным и, если  $\alpha$  мало, модуль множителя перехода тождественно равен единице. Пусть  $\alpha = i\beta$ , где  $\beta$  — действительная величина. Тогда

$$g = -i\beta \pm \sqrt{(-\beta^2 + 1)},$$

$$gg^* = 1 \quad (\text{для } \beta \leq 1). \quad (2.85)$$

Для частного случая двух связанных гармонических уравнений [уравнение (2.78)] требование устойчивости формулируется следующим образом:

$$\beta = \omega \Delta t \leq 1,$$

$$\Delta t \leq \frac{1,0}{\omega}. \quad (2.86)$$

И здесь для сохранения устойчивости шаг по времени должен быть меньше характерного времени процесса, который описывается нашими уравнениями. В рассматриваемом случае роль характерного времени играет величина, обратная собственной частоте осциллятора.

Продемонстрируем указанные выше свойства и специфические трудности схемы с перешагиванием на примере уравнения с затуханием (2.72). Заметим, что в соответствии с двухслойным алгоритмом (2.81) переменные величины, определенные на четных слоях с индексом  $2n$ , слабо связаны с переменными на нечетных слоях  $2n + 1$ , и наоборот. Обозначим переменную на четном слое через  $\xi$ , а на нечетном — через  $\zeta$ . Тогда, без потери общности, алгоритм схемы с перешагиванием (2.81) для уравнения с затуханием (2.72) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned}\xi^{2n} &= \xi^{2n-2} - \zeta^{2n-1} \frac{2 \Delta t}{\tau}, \\ \zeta^{2n+1} &= \zeta^{2n-1} - \xi^{2n} \frac{2 \Delta t}{\tau}.\end{aligned}\tag{2.87}$$

Эти уравнения эквивалентны двум связанным дифференциальным уравнениям 1-го порядка:

$$\begin{aligned}\frac{d\xi}{dt} + \frac{\zeta}{\tau} &= 0, \\ \frac{d\zeta}{dt} + \frac{\xi}{\tau} &= 0.\end{aligned}\tag{2.88}$$

Складывая и вычитая эти уравнения, получаем выражения для нормальных мод системы

$$\frac{d}{dt} (\xi + \zeta) + \frac{(\xi + \zeta)}{\tau} = 0,\tag{2.89}$$

$$\frac{d}{dt} (\xi - \zeta) - \frac{(\xi - \zeta)}{\tau} = 0.\tag{2.90}$$

Первая из этих мод представляет искомое решение, удовлетворяющее исходному дифференциальному уравнению 1-го порядка. Однако вторая мода не согласуется с исходным уравнением, и, следовательно, в схеме с перешагиванием может появиться дополнительная, посторонняя мода чисто вычислительного происхождения. Если не препятствовать ее развитию, это неизбежно приведет к большим ошибкам в решении и можно будет ожидать сильных осцилляций между переменными на четных и нечетных слоях сетки. Чтобы снизить эффект паразитной моды, следует как можно точнее находить зна-

чения функции  $u^1$  на первом шаге, поскольку величина каждой моды определяется «начальными условиями»  $u^0$  и  $u^1$ .

Суммируя сказанное, мы видим, что в схеме с перешагиванием 2-й порядок точности можно получить с помощью чрезвычайно простого разностного алгоритма. При этом, однако, необходимо учитывать, во-первых, требования, налагаемые критерием устойчивости, и, во-вторых, — особенно в нелинейном случае и для неосцилляторных уравнений — риск внесения побочной вычислительной моды, которая может серьезно испортить решение.

### 3. Явный двухшаговый метод

Идея этого чрезвычайно полезного метода, имеющего широкие приложения, заключается в центрировании по времени интеграла  $\int_n^{n+1} f dt$  в уравнении (2.63) с помощью некоторой двухшаговой процедуры (фиг. 2.9). Двухшаговый метод использует явный метод Эйлера в качестве первого шага для получения функции  $u$  на промежуточном шаге  $t^{n+1/2}$ :

$$u^{n+1/2} = u^n - f(u^n, t^n) \frac{\Delta t}{2} \quad (2.91)$$

— промежуточное решение;

$$u^{n+1} = u^n - f(u^{n+1/2}, t^{n+1/2}) \Delta t \quad (2.92)$$

— основное решение.

Значения  $u^{n+1/2}$  являются промежуточными и не используются после момента времени  $t^{n+1}$ . Применяя разработанный выше метод исследования устойчивости, получаем соотношение, связывающее ошибку на двух слоях по времени:

$$\epsilon^{n+1} = \epsilon^n - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t \left\{ 1 - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \frac{\Delta t}{2} \right\} \epsilon^n, \quad (2.93)$$

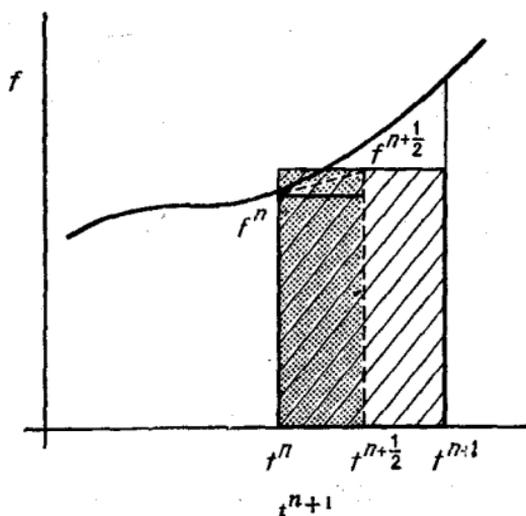
$$g = 1 - \alpha + \frac{1}{2} \alpha^2,$$

где  $\alpha = \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t$ .

Снова для случая  $df/\partial u > 0$  устойчивость имеет место лишь при достаточно малом шаге по времени:

$$\Delta t \leq \frac{2,0}{\partial f/\partial u|_n}. \quad (2.94)$$

Примечательно, что двухшаговую формулу можно получить непосредственно из разложения  $u^{n+1}$  в ряд



Фиг. 2.9. Аппроксимация интеграла  $\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(t), t) dt$  в двухшаговом методе [уравнения (2.91), (2.92)].

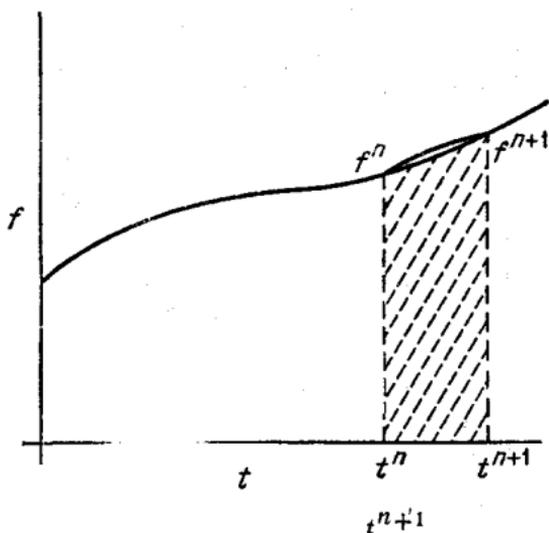
На первом шаге для «центрирования по времени» интеграла при  $t^{n+1}$  используется метод Эйлера (область, покрытая точками). На втором шаге достигается аппроксимация интеграла со вторым порядком точности (заштрихованная область).

Тейлора по временному шагу  $\Delta t$  в окрестности  $u^n$ , однако удобнее использовать ее в написанном выше виде. В действительности метод представляет собой частный двухслойный вариант методов Рунге — Кутта [5].

#### 4. Неявный метод второго порядка точности

В трех вышеописанных методах решение для функции получается на каждом шаге по времени в явной форме, и всегда должен выполняться критерий устойчивости. В простых обыкновенных дифференциальных

уравнениях часто бывает полезно использовать неявный метод, в котором интеграл из уравнения (2.63) определяется с точностью до второго порядка по временному шагу  $\Delta t$  с использованием усреднения подинтегральной



Фиг. 2.10. Аппроксимация интеграла  $\int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(t), t) dt$  в неявном методе второго порядка (2.95).

Для функции  $f$  используется усреднение по времени.

функции  $f$  по времени между временными слоями  $t^n$  и  $t^{n+1}$  (фиг. 2.10):

$$u^{n+1} = u^n - \{f(u^n, t^n) + f(u^{n+1}, t^{n+1})\} \frac{\Delta t}{2}. \quad (2.95)$$

Очевидно, что этот метод имеет второй порядок точности, и мы займемся исследованием его устойчивости:

$$g = 1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \frac{\Delta t}{2} - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{n+1} \frac{\Delta t}{2} g; \quad (2.96)$$

$$g = \frac{1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \frac{\Delta t}{2}}{1 + \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{n+1} \frac{\Delta t}{2}}. \quad (2.97)$$

Для уравнения с затуханием ( $\partial f / \partial u > 0$ ) модуль множителя перехода  $g$  всегда меньше или равен единице, а для осцилляторного уравнения, где  $\partial f / \partial u$  — мнимое,

Таблица 2.2

Методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений, зависящих от времени:

$$\frac{du}{dt} + f(u, t) = 0,$$

$$\text{где } f^n = f(u^n, t^n) \text{ и } \alpha = \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t$$

Метод	Алгоритм	Множитель перехода
1. Метод Эйлера	$u^{n+1} = u^n - f^n \Delta t$ <p>Устойчив для действительных <math>\alpha</math> при <math>\Delta t \leq 2 / \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right _n</math></p> <p>Неустойчив для мнимых <math>\alpha</math>  <math>\varepsilon = O(\Delta t)</math></p>	$g = 1 - \alpha$
2. Метод с перешагиванием	$u^{n+1} = u^{n-1} - f^{n2} \Delta t$ <p>Неустойчив для действительных <math>\alpha</math></p> <p>Устойчив для мнимых <math>\alpha</math> при <math>\Delta t \leq 1 / \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right _n</math></p> <p><math>\varepsilon = O(\Delta t^2)</math></p>	$g = -\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 1}$
3. Двухшаговый метод	$u^{n+1/2} = u^n - f^n \Delta t / 2$ $u^{n+1} = u^n - f^{n+1/2} \Delta t$ <p>Устойчив для действительных <math>\alpha</math> при <math>\Delta t \leq 2 / \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right _n</math></p> <p>На границе устойчивости при мнимых <math>\alpha</math>  <math>\varepsilon = O(\Delta t^2)</math></p>	$g = 1 - \alpha + 1/2 \alpha^2$

Продолжение табл. 2.2

Метод	Алгоритм	Множитель перехода
4. Неявный метод	$u^{n+1} = u^n - \frac{1}{2} (f^n + f^{n+1}) \Delta t$ <p>Устойчив для мнимых <math>\alpha</math> при всех <math>\Delta t</math>  Устойчив для действительных <math>\alpha</math> при всех <math>\Delta t</math>  <math>\epsilon = O(\Delta t^2)</math></p>	$g = (1 - \alpha)/(1 + \alpha)$
5. Метод Адамса — Башфорта	$u^{n+1} = u^n - \frac{1}{2} (3f^n - f^{n-1}) \Delta t$ <p>Устойчив для действительных <math>\alpha</math> при <math>\Delta t &lt; 1 / \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right _n</math>  На границе устойчивости при мнимых <math>\alpha</math>  <math>\epsilon = O(\Delta t^2)</math>.</p>	$g = \frac{1}{2} - \frac{3}{4} \alpha \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{9}{4} \alpha^2 - \alpha + 1\right)}$

модуль комплексного множителя перехода равен единице. Следовательно, в этих общих случаях метод является *безусловно устойчивым*.

Ясно, что метод, являющийся устойчивым вне зависимости от выбора шага по времени, обладает большими преимуществами, особенно в сложных и нелинейных задачах. Однако это полезное свойство достигается ценой некоторых алгебраических сложностей, так как на каждом шаге по времени новое значение  $u^{n+1}$  искомой функции входит в разностное уравнение неявным образом. Таким образом, на каждом шаге по времени нужно решать, возможно, совсем не простое алгебраическое уравнение. Если функция  $f$  не является сложной функцией зависимой переменной, то может существовать простой метод алгебраического отыскания  $u^{n+1}$ , но если это не так, то для получения согласованного решения мы должны найти итерационную формулу.

В этом параграфе мы развили ряд важных методов интегрирования по времени, и именно простота этих методов позволяет использовать их в более сложных задачах. Существует много сложных методов, но их применимость к решению уравнений в частных производных ограничена, а нашей целью было познакомиться в общих чертах с полезными схемами, а также с методикой их исследования. Краткая сводка методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений представлена в табл. 2.2.

### § 7. Обыкновенные дифференциальные уравнения высших порядков

В вычислительной физике редко приходится иметь дело с решением лишь отдельного обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка, и для такого решения можно было бы не заниматься подробным изучением смысла и свойств различных методов, так как решение обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка требует пренебрежимо мало машинного времени. Дело в том, что методы, описанные выше, переносятся без изменений на системы очень большого числа обыкновенных дифференциальных уравнений и на уравнения в частных производных (см. гл. 3).

Говоря о дифференциальных уравнениях, более сложных, чем описанные в предыдущем параграфе, следует заметить, что дифференциальные уравнения  $n$ -го порядка можно свести к  $n$  дифференциальным уравнениям первого порядка. Рассмотрим, например, частицу массы  $m$ , движущуюся в электрическом поле  $E_x(x, t)$ , где  $x$  — одномерная координата частицы. Тогда

$$m \frac{d^2x}{dt^2} - eE_x(x, t) = 0, \quad (2.98)$$

и если  $v$  — скорость частицы, то это дифференциальное уравнение второго порядка удобно записать в виде двух уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} m \frac{dv}{dt} - eE_x(x, t) &= 0, \\ \frac{dx}{dt} - v &= 0. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Теперь можно сформулировать основную задачу. Требуется найти  $K$  неизвестных функций  $\mathbf{u}$ ,

$$\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_K),$$

которые удовлетворяют системе  $K$  обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + \mathbf{F}(\mathbf{u}, t) = 0 \quad (2.100)$$

с начальными условиями

$$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}^0. \quad (2.101)$$

В физических задачах часто представляет интерес случай очень больших  $K$  ( $K \approx 100\,000$  в современных машинах), и очевидно, что при решении таких систем уравнений важно использовать методы, обладающие оптимальной эффективностью и точностью. Поэтому основные разностные методы следует проанализировать особенно тщательно.

В качестве примера, где  $K$  может быть большим, можно привести ньютоновскую гравитационную систему многих тел с частицами, движущимися в одном измерении. Точные классические уравнения для таких систем (для частиц с номерами  $\mu$  от 1 до  $K$ ) имеют вид

$$\frac{dx_\mu}{dt} - w_\mu = 0, \quad (2.102)$$

$$m_\mu \frac{dw_\mu}{dt} - \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^K \frac{G m_\nu m_\mu}{(x_\nu - x_\mu)^2} = 0, \quad (2.103)$$

где  $x_\mu$  и  $w_\mu$  — координаты и скорости  $\mu$ -й частицы,  $G$  — гравитационная постоянная,  $m_\mu$  — масса  $\mu$ -й частицы, а суммирование ведется по всем частицам, взаимодействующим с  $\mu$ -й частицей. Для того чтобы проследить поведение всей системы  $K$  частиц за все время  $t > 0$ , можно было бы воспользоваться одним из явных методов, описанных выше. В физике проблемы многих тел

подобного типа представляют большой интерес и будут рассмотрены в гл. 5.

При решении системы уравнений (2.102), (2.103) необходимо исследовать устойчивость любого примененного разностного метода. Теперь эту устойчивость нужно анализировать на основе матрицы перехода (2.53) при условии, чтобы модули всех собственных значений матрицы удовлетворяли условию устойчивости (2.59).

## Уравнения в частных производных для сплошных сред

---

### § 1. Происхождение и некоторые свойства уравнений математической физики

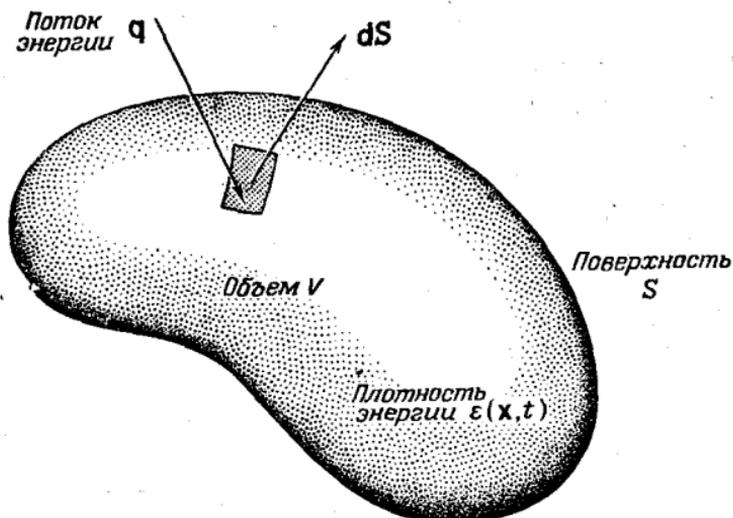
Основные принципы разностных методов были сформулированы в предыдущих главах, в которых было показано, что функции, непрерывные в пространстве и во времени, можно заменить конечномерными векторами, компоненты которых определяются лишь в дискретных точках пространства и времени. Были перечислены свойства разностных решений (гл. 2, § 5). В случае обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями свойства точности и устойчивости решения соотносились с характерными временами, связанными с уравнениями (например, со временем затухания или временем осцилляции). Аналогично точность и устойчивость численного решения уравнений в частных производных зависят от характерных времен процессов, описываемых этими уравнениями. Поэтому в общем случае и перед применением разностного метода к уравнениям в частных производных важно установить некоторые существенные физические свойства таких уравнений.

В этом параграфе мы рассмотрим, когда в физике прибегают к уравнениям в частных производных, и сопоставим хорошо понимаемые физические процессы с математической природой уравнений.

#### *1. Законы сохранения для сплошных сред*

Абстрактные понятия сплошных сред и непрерывных полей находят широкое применение в физике: в классической электродинамике уравнения Максвелла формулируются с помощью определения непрерывных функций источника; твердое тело часто для простоты

трактуются как сплошные; самые разнообразные среды (жидкости, газы, плазма, галактическое вещество) можно упрощенно трактовать как сплошные. Другие примеры — фазовая жидкость и «непрерывные силовые поля» в классической и квантовой механике. Исходя из этих представлений, в пространстве и времени определяют непрерывные функции, которые описывают свойства среды и, применяя количественные законы физики,



Фиг. 3.1. Уравнение теплопроводности выводится из закона сохранения энергии, записанного для произвольного объема  $V$  твердого тела. Полная энергия в объеме  $V$  может меняться только при наличии потока энергии  $q$  через поверхность  $S$  объема  $V$ .

получают уравнения в частных производных, связывающие свойства среды в пространстве и времени.

Хотя ясно, что уравнения в частных производных получаются огромным числом способов и возникают в самых разнообразных физических задачах, тем не менее такие уравнения и системы уравнений очень часто принимают одинаковую или близкую формы. Это весьма существенно, так как множество принципов в физике, особенно в классической, сформулировано в виде законов сохранения. Несколько чрезвычайно важных примеров иллюстрируют это утверждение: масса не создается и не уничтожается; импульс сохраняется; полный

электрический заряд инвариантен. Уравнения в частных производных, вытекающие из применения этих идей, называют консервативными. Для того чтобы выделить этот подход и пояснить сам метод, приведем несколько частных примеров.

Уравнение диффузии часто появляется при описании переноса частиц, импульса или энергии. В частности, оно описывает распределение температуры в твердом теле, где в классическом случае энергия переносится посредством теплопроводности.

Так как твердое тело — это жесткое неподвижное тело, то переменная плотность энергии в нем связана лишь с тепловой энергией или с температурой. Поэтому если использовать закон сохранения энергии, то он должен выполняться в каждом ограниченном объеме  $V$  твердого тела, охватываемом поверхностью  $S$  (фиг. 3.1). По закону сохранения энергии скорость изменения энергии в объеме  $V$  должна равняться потоку энергии  $\mathbf{q}$  через поверхность  $S$  объема  $V$ :

$$\begin{aligned} \text{энергия в объеме } V &= \iiint_V \epsilon(\mathbf{x}, t) d\tau; \\ \text{поток через } S &= - \oiint_S \mathbf{q} d\mathbf{S}; \\ \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \epsilon(\mathbf{x}, t) d\tau &= - \oiint_S \mathbf{q} d\mathbf{S}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Применяя теорему Гаусса — Остроградского к правой части уравнения (3.1) и считая объем  $V$  постоянным, получаем

$$\iiint_V \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla \mathbf{q} d\tau = 0. \quad (3.2)$$

Пусть плотность энергии  $\epsilon$  пропорциональна температуре  $T$ . Из эксперимента известно, что поток тепла  $\mathbf{q}$  зависит от градиента температуры. Поэтому, вводя коэффициент пропорциональности (коэффициент теплопроводности)  $k$ , получим уравнение диффузии

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \nabla k \nabla T = 0. \quad (3.3)$$

Таким образом, в данном случае уравнение диффузии описывает закон сохранения энергии.

В теории электромагнетизма Максвелла уравнения в частных производных описывают законы сохранения, например закон сохранения *электрического заряда*. В этом случае скорость изменения заряда в объеме  $V$  должна равняться потоку заряда (ток  $\mathbf{j}$ ) через поверхность  $S$ . Если  $\rho$  — плотность заряда  $\rho(\mathbf{x}, t)$ , то

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho \, d\tau = - \oiint_S \mathbf{j} \, d\mathbf{S}, \quad (3.4)$$

и, применяя теорему о дивергенции, получаем

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (3.5)$$

Это, конечно, согласуется с уравнениями Максвелла, так как, используя закон Гаусса ( $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$ ), где  $\mathbf{E}$  — электрическое поле, имеем

$$\nabla \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi\mathbf{j} \right) = 0; \quad (3.6)$$

интегрируя это выражение и учитывая, что  $\nabla \cdot [\nabla \times \mathbf{X}] = 0$ , получаем

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi\mathbf{j} = [\nabla \times \mathbf{X}]. \quad (3.7)$$

Неизвестный вектор  $\mathbf{X}$  пропорционален магнитному полю в соответствии с законом Ампера.

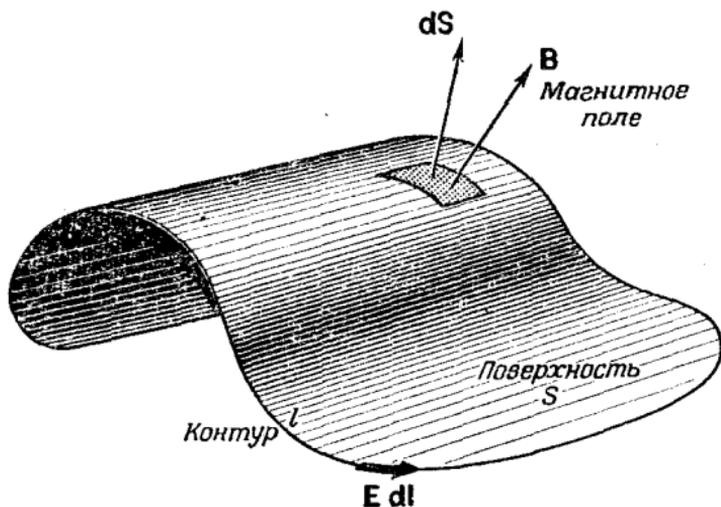
Аналогично закон Фарадея выражает сохранение *магнитного потока*: магнитный поток не может создаваться или уничтожаться, поскольку скорость изменения полного потока через поверхность  $S$  связана лишь с электрическим полем вдоль границы  $l$  поверхности  $S$  (фиг. 3.2):

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_S \mathbf{B} \, d\mathbf{S} = - \oint_l c\mathbf{E} \, dl. \quad (3.8)$$

Применяя теорему Стокса, получаем

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + [\nabla \times \mathbf{E}] = 0. \quad (3.9)$$

При выводе уравнений, описывающих динамику жидкости, используются основные классические законы сохранения массы, сохранения импульса (третий закон движения Ньютона) и сохранения энергии. Определяя переменную  $\rho(\mathbf{x}, t)$  как плотность жидкости и применяя первый из указанных законов, получаем, что скорость изменения массы в объеме  $V$  должна равняться потоку



Фиг. 3.2. Схема иллюстрирует сохранение магнитного потока в соответствии с законом Фарадея [уравнение (3.9)].

Магнитный поток через поверхность  $S$  может изменяться только при наличии тангенциальной компоненты электрического поля на контуре  $l$  поверхности  $S$ .

массы, пересекающему поверхность  $S$  объема  $V$  (фиг. 3.3). Поток массы через любой элемент поверхности  $dS$  равен  $-\rho v dS$ . Следовательно,

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho d\tau = - \iint_S \rho v dS, \quad (3.10)$$

и, используя теорему Гаусса — Остроградского, приходим к дифференциальному уравнению для сохранения массы:

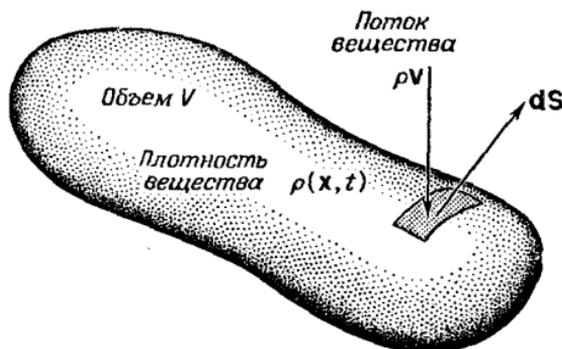
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho v = 0. \quad (3.11)$$

Аналогично из условия сохранения импульса получим уравнение движения для среды. Рассмотрим сохранение

проекции импульса на  $X$ -направление (фиг. 3.4).  $X$ -компонента полного импульса в объеме  $V$  равна

$$\iiint_V \rho v_X d\tau.$$

Благодаря конвекции импульса и влиянию давления ( $p$ ) в  $X$ -направлении  $X$ -компонента импульса среды



Фиг. 3.3. Сохранение массы среды.

Масса, заключенная в объеме  $V$ , может измениться только с появлением суммарного потока массы  $\rho v dS$  через поверхность  $S$  объема  $V$ . В результате получаем уравнение непрерывности (3.11).

в объеме  $V$  увеличивается со временем ( $\hat{e}_X$  — единичный вектор в  $X$ -направлении):

$$- \oint_S (\rho v_X \mathbf{v} + p \hat{e}_X) dS.$$

Следовательно, сохранение  $X$ -компоненты импульса приводит к уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho v_X d\tau = - \oint_S (\rho v_X \mathbf{v} + p \hat{e}_X) dS. \quad (3.12)$$

Используя теорему Гаусса — Остроградского, получаем

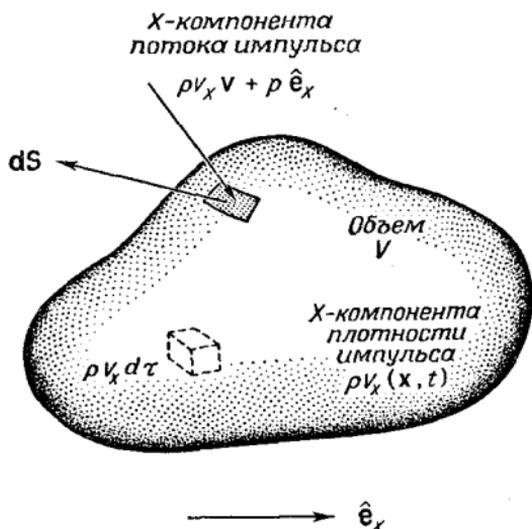
$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho v_X d\tau = - \iiint_V \nabla \cdot (\rho v_X \mathbf{v} + p \hat{e}_X) d\tau, \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \rho v_X}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v_X \mathbf{v} + p \hat{e}_X) = 0. \quad (3.14)$$

Аналогично получаются уравнения движения для  $Y$ - и  $Z$ -направлений. Объединим эти три уравнения в виде

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + p \mathbf{I}) = \boldsymbol{\theta}, \quad (3.15)$$

где  $\mathbf{I}$  — единичный тензор. Мы записали здесь гидродинамические уравнения (гл. 9), описывающие движение сжимаемой среды.



Фиг. 3.4. Сохранение импульса в среде.

Поток импульса через поверхность  $S$  включает в себя импульс переноса и поток давления.

Итак, мы показали, как из простых фундаментальных законов сохранения получаются нелинейные уравнения в частных производных, описывающие различные физические системы. Дифференциальные уравнения называют консервативными, если они записаны в следующем виде:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \mathbf{f} = 0, \quad (3.16)$$

где  $\mathbf{u}$  — неизвестная векторная функция, а  $\mathbf{f}$  — „поток“:  $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ .

## 2. Физические процессы и дисперсионное соотношение

Уравнения в частных производных связывают точки в пространстве и времени, и простые линейные свойства уравнений в частных производных или их систем можно установить, исследуя поведение волны в пространстве и времени. Выбирая функцию  $u(x, t)$  как функцию пространственной переменной  $x$  и временной переменной  $t$  и считая, что  $u$  удовлетворяет уравнению в частных производных, рассмотрим результат подстановки в это уравнение изолированной волны или фурье-моды в пространстве и во времени:

$$u(x, t) = \hat{u}e^{i(\omega t - kx)}, \quad (3.17)$$

где  $\omega$  — частота волны, а  $k$  — волновое число, связанное с длиной волны  $\lambda$ ,  $k = 2\pi/\lambda$ . После подстановки такой моды в интересующее нас уравнение в частных производных получаем *дисперсионное соотношение*

$$\omega = \omega(k). \quad (3.18)$$

Для физического явления, описываемого уравнением в частных производных, дисперсионное соотношение связывает частоту и соответственно характерный временной масштаб с определенной длиной волны. Частота  $\omega$  может быть действительной, когда описывается колебательный или волновой процесс, и может быть мнимой, когда описывается нарастание или затухание моды.

В разностном решении задачи с начальными условиями нас особенно интересуют временные масштабы задачи и их зависимость от длины волны для различных физических процессов. Эта информация содержится в дисперсионном соотношении. Мы рассмотрим четыре типа процессов, которые могут быть описаны довольно простыми уравнениями в частных производных и которые в более сложных формах повторяются в интересных физических задачах.

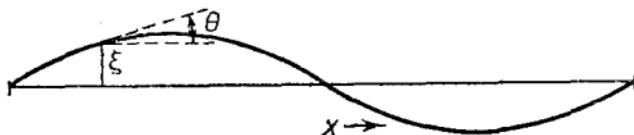
## 3. Волны и волновое уравнение

Волны и волновые движения встречаются в физике столь часто, что нет необходимости перечислять какие-

либо примеры. Мы рассмотрим частный случай волны на натянутой струне, где смещение  $\xi(x, t)$  точки струны удовлетворяет волновому уравнению (фиг. 3.5)

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} - V_s^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0. \quad (3.19)$$

В данном случае параметр  $V_s$  определяется натяжением  $T$  струны и величиной массы  $m$ , приходящейся на единицу длины,  $V_s = \sqrt{T/m}$ . Если  $L$  представляет собой



Фиг. 3.5. Волна на струне.

$\xi(x, t)$  — отклонение от положения равновесия;  $\theta(x, t)$  — угловое отклонение

характерную длину вдоль струны, то мы можем определить характерное время  $\tau$  как время прохождения волной длины  $L$

$$\tau \sim \frac{L}{V_s}. \quad (3.20)$$

Используя более сложный подход, мы рассмотрим поведение на струне фурье-моды:

$$\xi(x, t) = \hat{\xi} e^{i(\omega t - kx)}.$$

Подставляя моду в волновое уравнение, получаем, что для данного волнового числа  $k$  частота  $\omega$  должна удовлетворять уравнению

$$-\omega^2 + k^2 V_s^2 = 0. \quad (3.21)$$

Следовательно, характерный временной масштаб можно связать с волной:

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{V_s k} = \frac{\lambda}{V_s}. \quad (3.22)$$

Уравнение (3.21) является дисперсионным соотношением уравнения в частных производных.

Следует также заметить, что если использовать скорость  $v = \partial \xi / \partial t$  смещения и угловое отклонение  $\theta = \partial \xi / \partial x$ , то волновое уравнение второго порядка можно записать в виде системы двух уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} - V_s \frac{\partial \theta}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} - V_s \frac{\partial v}{\partial x} &= 0. \end{aligned} \quad (3.23)$$

#### 4. Уравнение переноса

Уравнение переноса связано с волновым уравнением и возникает за счет перемещения самой жидкости. Мы уже встречали переносной член в уравнениях гидродинамики (3.11), (3.15). Уравнение сохранения массы жидкости можно записать в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \rho + \rho \nabla \mathbf{v} = 0,$$

или

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \mathbf{v} = 0,$$

где  $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \nabla$  — полная производная по времени, или лагранжева производная. Из того факта, что плотность жидкости можно рассматривать как свойство, локализованное в элементе движущейся жидкости, следует, что плотность переносится вместе с жидкостью. В случае несжимаемой (хотя и с переменной плотностью) жидкости уравнение сохранения массы имеет вид

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \rho = 0. \quad (3.24)$$

Это уравнение называется уравнением переноса. Ясно, что в уравнениях, описывающих поведение любого объемного свойства любой жидкости, в задачах с начальными условиями будут возникать члены, описывающие перенос.

И здесь важно задать временной масштаб процесса переноса: очевидно, интересующим нас временным мас-

штабом будет время, за которое точка жидкости пройдет характерное расстояние  $L$ ,

$$\tau = \frac{L}{|v|}, \quad (3.25)$$

где  $v$  — скорость центра массы, а не фазовая скорость. Нетрудно получить дисперсионное соотношение для одномерного уравнения переноса фурье-моды:

$$\begin{aligned} \rho &= \hat{\rho} e^{i(\omega t - kx)}, \\ \omega &= kv \end{aligned} \quad (3.26)$$

и

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{kv} = \frac{\lambda}{|v|}. \quad (3.27)$$

### 5. Уравнение диффузии

Уравнение диффузии появляется в многочисленных физических задачах и хорошо известно. В простейшем одномерном случае оно принимает вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (3.28)$$

где  $u(x, t)$  — неизвестная функция, а  $\kappa$  — коэффициент диффузии. В более сложных случаях при наличии неоднородностей или источников уравнение содержит отличные от нуля члены в правой части и становится нелинейным; если коэффициент теплопроводности или диффузии зависит от искомой функции,  $\kappa = \kappa(u)$ . Интересующий нас временной масштаб является временем диффузии:

$$\tau = \frac{L^2}{\kappa}. \quad (3.29)$$

Следуя более строгому подходу, мы можем вновь рассмотреть эволюцию фурье-моды при подстановке ее в уравнение диффузии,

$$u = \hat{u} e^{i(\omega t - kx)},$$

и, следовательно, для постоянного коэффициента теплопроводности  $\kappa$  получим

$$\begin{aligned} i\omega + \kappa k^2 &= 0, \\ \omega &= i\kappa k^2. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Это уравнение является дисперсионным соотношением для простого уравнения диффузии. Угловая частота  $\omega$  теперь чисто мнимая, и поэтому мода затухает во времени. Временной масштаб этого затухания:

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{\kappa k^2} = \frac{\lambda^2}{2\pi\kappa}. \quad (3.31)$$

### 6. Эллиптическое уравнение

Наконец, в качестве четвертого примера можно привести эллиптическое уравнение, возникающее из краевой задачи. Этот тип уравнений также часто встречается и хорошо известен в физике, например уравнения Лапласа и Пуассона:

$$\nabla^2\Phi = 0; \quad (3.32)$$

$$\nabla^2\Phi = -\rho. \quad (3.33)$$

Неизвестная функция  $\Phi$  может описывать электростатический или гравитационный потенциал, в то время как неоднородный член, или известная «функция источника»  $\rho$ , может быть плотностью заряда или массы. Эти уравнения получаются при рассмотрении статических решений, а также систем, относительно которых предполагается, что информация переносится мгновенно. Если провести аналогию с предыдущими тремя процессами — распространением волн, переносом и диффузией, то частота фурье-моды обращается в бесконечность:

$$\omega \rightarrow \infty,$$

а

$$\tau \rightarrow 0,$$

т. е. временной масштаб распространения информации на расстояние  $L$  обращается в нуль.

## 7. Классификация уравнений в частных производных

Выше мы перечислили четыре важных процесса в сплошных средах и каждый процесс связали с уравнением в частных производных. В линейном случае три типа этих уравнений являются примерами общего двумерного уравнения второго порядка

$$a \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \phi}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial y} + f \phi + g = 0; \quad (3.34)$$

$a, b, c, d, e, f$  и  $g$  могут быть функциями независимых переменных  $x, y$ , а возможно, и искомой функции  $\phi$  — тогда уравнение будет нелинейным. Формально уравнения в частных производных классифицируются следующим образом:

гиперболические уравнения — при  $b^2 - 4ac > 0$ ;

параболические уравнения — при  $b^2 - 4ac = 0$ ;

эллиптические уравнения — при  $b^2 - 4ac < 0$ .

В гл. 2 была предложена разностная аппроксимация этих уравнений, за исключением краевых задач (эллиптических уравнений), поэтому и далее в этой главе мы будем рассматривать только задачи с начальными условиями для уравнений в частных производных.

## § 2. Устойчивость разностных схем для уравнений в частных производных

В гл. 2 мы обсуждали важные свойства разностного решения задачи с начальными условиями и сущность разностного метода как длинноволнового приближения. Свойство устойчивости явной схемы решения обыкновенного дифференциального уравнения зависит в основном от величины шага по времени в сравнении с временами изучаемых физических процессов. Поэтому, рассматривая дисперсионные соотношения определенных уравнений в частных производных, мы установили некоторые встречающиеся в физических задачах временные масштабы. Теперь мы можем перейти к главной цели настоящей главы и использовать рассмотренные идеи для

оценки свойств численного решения системы уравнений в частных производных.

Во второй главе задача с начальными условиями была сформулирована в общем виде [соотношение (2.33)], причем поведение интересующей нас системы во времени  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  удовлетворяло уравнениям

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{L}\mathbf{u}. \quad (3.35)$$

Здесь в случае уравнений в частных производных оператор  $\mathbf{L}$  является пространственным дифференциальным оператором. В разностной форме решение задачи с начальными условиями сводится к отысканию последовательности решений во временных точках  $t^n$  [уравнение (2.47)]

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{T}(\Delta t, \Delta) \mathbf{u}_j^n, \quad (3.36)$$

причем решения на соседних временных слоях связаны оператором перехода  $\mathbf{T}$ . Мы ввели индекс  $j$ , чтобы подчеркнуть тот факт, что в уравнениях в частных производных оператор  $\mathbf{T}(\Delta t, \Delta)$  связывает как зависимые переменные, описывающие векторное состояние системы, так и различные точки на пространственной сетке. Для того чтобы определить устойчивость, как это делалось ранее, или получить дисперсионное соотношение разностной схемы, мы используем тот же метод анализа, что и выше (см. гл. 2, § 5), но в данном случае можно сначала упростить задачу, разрывая связь между точками на пространственной сетке. Этого можно достичь, исследуя поведение фурье-мод на сетке независимо друг от друга и требуя устойчивости схемы для каждой фурье-моды в отдельности.

Если оператор перехода  $\mathbf{T}(\Delta t, \Delta)$  равен постоянной величине либо если используется линейное приближение (см. гл. 2, § 5, п. 3), фурье-моды на разностной сетке независимы. Поэтому для анализа устойчивости рассмотрим фурье-моду зависимой переменной

$$\mathbf{u}_j^n = \hat{\mathbf{u}}^n e^{ikx_j}, \quad (3.37)$$

и из разностного уравнения (3.36) получим связь амплитуд фурье-мод

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{u}}^{n+1} e^{ikx_j} &= \mathbf{T}(\Delta t, \Delta) \hat{\mathbf{u}}^n e^{ikx_j}, \\ \hat{\mathbf{u}}^{n+1} &= e^{-ikx_j} \mathbf{T}(\Delta t, \Delta) e^{ikx_j} \hat{\mathbf{u}}^n.\end{aligned}\quad (3.38)$$

Это уравнение можно представить в виде

$$\hat{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{G}(\Delta t, \Delta, k) \hat{\mathbf{u}}^n, \quad (3.39)$$

где  $\mathbf{G}$  является матрицей перехода разностной схемы для выбранной фурье-моды с волновым числом  $k$ . Формулировка по существу близка к приведенной в гл. 2, § 5, и теперь для устойчивости мы потребуем, чтобы амплитуда фурье-моды была ограничена. Устойчивость схемы предполагает, что если амплитуда фурье-моды конечна в момент времени  $t = 0$ , то она должна *оставаться конечной* на всех  $n$  шагах по времени.

Чтобы применить это требование, мы выразим амплитуду вектора рассматриваемой фурье-моды через собственные векторы  $\mathbf{s}^{(\mu)}$  матрицы перехода  $\mathbf{G}$ . Если компоненту вектора фурье-моды, направленную по собственному вектору  $\mathbf{s}^{(\mu)}$ , на нулевом шаге обозначить символом  $\hat{u}_\mu^0$ , то

$$\hat{\mathbf{u}}^0 = \sum_{\mu} \hat{u}_\mu^0 \mathbf{s}^{(\mu)}. \quad (3.40)$$

Далее, используя уравнение для матрицы перехода (3.39), для амплитуды вектора фурье-моды на временном шаге  $n$  имеем

$$\hat{\mathbf{u}}^n = \mathbf{G}^n \hat{\mathbf{u}}^0 = \mathbf{G}^n \sum_{\mu} \hat{u}_\mu^0 \mathbf{s}^{(\mu)}. \quad (3.41)$$

Поскольку  $\mathbf{s}^{(\mu)}$  является собственным вектором матрицы перехода  $\mathbf{G}$  с собственным значением  $g_\mu$ .

$$\mathbf{G} \mathbf{s}^{(\mu)} = g_\mu \mathbf{s}^{(\mu)}, \quad (3.42)$$

то

$$\hat{\mathbf{u}}^n = \sum_{\mu} \hat{u}_\mu^0 g_\mu^n \mathbf{s}^{(\mu)}. \quad (3.43)$$

Таким образом, для устойчивости решения (как и выше) необходимо выполнение условия

$$|\hat{u}_\mu^0 g_\mu^n| < K |\hat{u}_\mu^0|, \quad (3.44)$$

где  $K$  — положительное конечное число, причем это условие должно быть выполнено для каждой фурье-моды  $k$  и вдоль каждого собственного вектора (по всем  $\mu$ )  $G$ ,

$$|g_\mu^n| < K,$$

или

$$|g_\mu| < K^{1/n}. \quad (3.45)$$

Это неравенство накладывает ограничения на величину всех собственных значений  $g_\mu$  для всех шагов по времени, причем  $K^{1/n} \rightarrow 1$  при  $n \rightarrow \infty$ . Поэтому следует ожидать, что условие

$$|g_\mu| \leq 1 \quad (3.46)$$

является вероятным условием устойчивости.

Нейман учел возможное появление локально растущих членов в такой системе уравнений в частных производных и показал, что необходимым и достаточным условием устойчивости является условие [4]

$$|g_\mu| \leq 1 + O(\Delta t) \quad (\text{для всех мод } k \text{ и всех собственных значений } \mu). \quad (3.47)$$

В действительности собственные значения  $g_\mu$  могут быть комплексными, и  $|g_\mu|$  определяется как амплитуда собственного значения в комплексной плоскости:

$$|g_\mu| = \sqrt{g_\mu^* g_\mu}, \quad (3.48)$$

где  $g_\mu^*$  — величина, комплексно-сопряженная  $g_\mu$ .

Рассмотренная процедура анализа устойчивости разностной схемы решения уравнений в частных производных с начальными условиями в основном подобна схеме, изложенной в гл. 2, § 5, п. 3. Однако здесь мы явно показали, каким образом для анализа устойчивости решения уравнений в частных производных разрешаются сложные связи как между зависимыми переменными, так и между различными пространственными точками сетки. Разрыв связей происходит, во-первых, между пространственными точками сетки, поскольку фурье-моды рассматриваются в пространстве независимо друг от друга, и, во-вторых, при диагонализации получающейся матрицы перехода, которая теперь свя-

зывает фурье-моды на последовательных шагах по времени.

Поскольку в интересующих нас уравнениях в частных производных оператор перехода  $\mathbf{T}$  (3.36) может быть нелинейным, то после линеаризации матрица перехода для фурье-моды  $\mathbf{G}$  (3.39) может быть и непостоянной. Напротив,  $\mathbf{G}$  может меняться по пространственной и временной сеткам. Тогда условия устойчивости (3.47) сведутся к «локальным условиям», т. е. в этом случае условия устойчивости должны быть выполнены везде на пространственной сетке и для всех шагов по времени.

### § 3. Уравнение диффузии: явная схема интегрирования первого порядка точности

Простейший путь решения уравнения диффузии во времени — это использовать явный метод первого порядка, аналогичный методу Эйлера для обыкновенных дифференциальных уравнений. Как и ранее, в момент времени  $t = 0$  начальные условия определяют зависимую переменную на пространственной сетке  $x_j$  (§ 2 гл. 2). Нам необходимо проинтегрировать уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

в пределах шага по времени  $\Delta t$ . Пространственный оператор  $\partial^2/\partial x^2$  определен, как и ранее (гл. 2, § 3). Далее,  $u_j^{n+1} = u(t^{n+1}, x_j)$  находится из разностного уравнения

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n). \quad (3.49)$$

На фиг. 3.6 эта схема интегрирования представлена на двумерной сетке.

Как обсуждалось ранее, существуют понятные ошибки, связанные с шагами по времени  $\Delta t$  и пространству  $\Delta$ , и мы исследуем точность, устойчивость и эффективность этого метода. Следуя общему подходу (гл. 2, § 2) к изучению устойчивости схем, найдем множитель

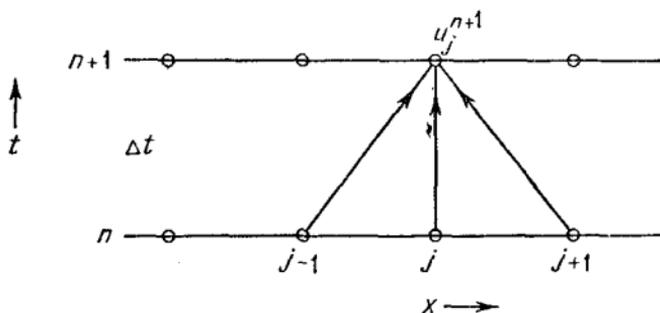
перехода (или, в более сложных ситуациях, матрицу перехода) для фурье-моды в пространстве:

$$u = \hat{u}(t) e^{ikx}.$$

Подставим эту функциональную форму в разностное уравнение (3.49):

$$\begin{aligned} \hat{u}^{n+1} e^{ikx_j} &= \hat{u}^n e^{ikx_j} + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \hat{u}^n (e^{ikx_{j+1}} - 2e^{ikx_j} + e^{ikx_{j-1}}), \\ \hat{u}^{n+1} &= \hat{u}^n \left\{ 1 + \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \left( \frac{1}{2} e^{ik\Delta} + \frac{1}{2} e^{-ik\Delta} - 1 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Учтем, что  $\frac{1}{2} e^{ik\Delta} + \frac{1}{2} e^{-ik\Delta} = \cos(k\Delta)$ . Уравнение (3.50) связывает амплитуду фурье-мод на последовательных



Фиг. 3.6. Схема изображает пространственно-временную сетку, на которой можно интегрировать уравнение диффузии явным методом первого порядка точности.

Неизвестная функция определена только в дискретных точках  $x-t$  плоскости. Вторая производная по пространству, входящая в уравнение диффузии, вычисляется с использованием трех точек:  $(n, j-1)$ ,  $(n, j)$ ,  $(n, j+1)$ . Производная по времени вычисляется по точкам:  $(n+1, j)$  и  $(n, j)$ .

временных слоях. Поскольку задача этого примера содержит лишь одну неизвестную функцию и только одно уравнение в частных производных, то фурье-моды соответствуют множителю перехода  $g$ , а не матрица перехода:

$$\begin{aligned} g(\Delta t, \Delta, k) &= 1 + 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \{\cos(k\Delta) - 1\} = \\ &= 1 - \frac{4\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Поэтому если выполнен критерий устойчивости Неймана (3.47), то

$$\left| 1 - \frac{4\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2 \left( \frac{k\Delta}{2} \right) \right| \leq 1. \quad (3.52)$$

Это условие должно быть справедливо для любого волнового числа  $k$ . Выбирая максимальное значение синуса, получаем условие устойчивости в виде

$$\begin{aligned} -4 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} &\geq -2, \\ \Delta t &\leq 0,5 \frac{\Delta^2}{\kappa}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Следовательно, чтобы получить устойчивое численное решение, мы должны выбирать шаг по времени меньше максимального допустимого шага (3.53). Этот результат можно пояснить физически, и он в действительности естествен. Максимальный допустимый шаг по времени  $\Delta t_m$  равен времени диффузии на характерной длине  $\Delta$ , которая совпадает с пространственным шагом сетки [ср. с уравнением (3.29)]. Величина  $\Delta t_m$  есть время распространения информации вдоль длины  $\Delta$ . Поскольку метод решения явный, то информация на  $n+1$  временном шаге в точке  $j$  получается лишь из окружающих точек. Поэтому в явном методе информация «распространяется» по сетке лишь со скоростью  $\Delta/\Delta t$ , и если эта скорость из-за большого шага по времени оказывается слишком малой, то можно ожидать катастрофических результатов.  $\Delta/\Delta t$  — это характерная для сетки скорость.

Для определения точности метода можно рассмотреть фурье-моду в пространстве и во времени и получить дисперсионное соотношение для разностной схемы. Затем его можно сравнить с дисперсионным соотношением для дифференциального уравнения. Разностная схема аппроксимирует дифференциальное уравнение в том случае, если в пределе нулевого шага  $\Delta t$  и больших длин волн получаемые дисперсионные соотношения совпадают. Здесь достаточно сказать, что в рассматриваемом случае точность по временному шагу имеет порядок  $\Delta t$ , а по пространственному — порядок  $\Delta^2$  ( $O(\Delta t) + O(\Delta^2)$ ).

#### § 4. Уравнение переноса: явная схема интегрирования первого порядка точности

Рассмотрим простой способ интегрирования уравнения переноса (3.24)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

с помощью явной схемы первого порядка точности. Находя пространственную производную так же, как в гл. 2, § 3, и интегрируя в пределах одного шага по времени  $\Delta t$  с точностью первого порядка (как в методе Эйлера), получаем

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{v \Delta t}{2\Delta} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n). \quad (3.54)$$

Эта схема представлена на фиг. 3.7 на двумерной сетке. Как и ранее, мы изучаем преобразование фурье-моды

$$\hat{u}^{n+1} e^{ikx_j} = \hat{u}^n e^{ikx_j} - \frac{v \Delta t}{2\Delta} \hat{u}^n (e^{ikx_{j+1}} - e^{ikx_{j-1}}),$$

или

$$\hat{u}^{n+1} = \left\{ 1 - i \frac{v \Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \right\} \hat{u}^n. \quad (3.55)$$

Таким образом, множитель перехода  $g(\Delta t, \Delta, k)$  для схемы является комплексным

$$g = 1 - i\alpha, \quad (3.56)$$

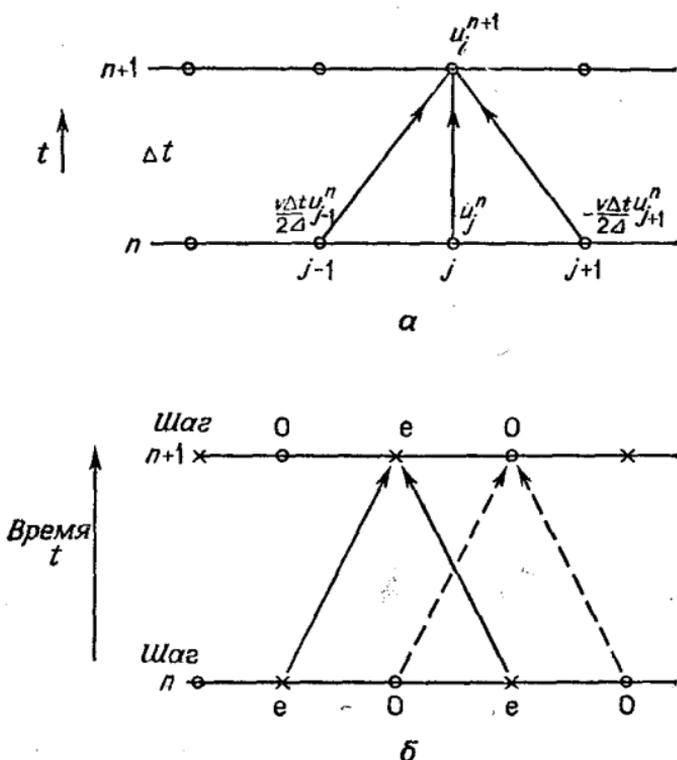
где

$$\alpha = \frac{v \Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta),$$

и, следовательно, нужно брать модуль комплексного множителя перехода:

$$|g|^2 = gg^* = 1 + \alpha^2. \quad (3.57)$$

Видно, что для этой схемы модуль множителя перехода всегда больше единицы и что условие Неймана (3.47) не может выполняться ни при каких ненулевых  $\alpha$  и ни при каких временных шагах. Разностной схеме (3.54) свойственна *неустойчивость* для всех временных шагов  $\Delta t$ , и она показывает, что не все согласованные и наглядные схемы полезны.



Фиг. 3.7. Неустойчивая схема первого порядка (3.54) для решения уравнения переноса.

**а**—производная по времени вычисляется по точкам  $(n+1, j)$  и  $(n, j)$ , а по пространству—по точкам  $(n, j+1)$  и  $(n, j-1)$ ; **б**—схема неустойчива, поскольку существуют две взаимопроницающие сетки, не связанные в том смысле, что перенос по сетке «е» происходит независимо от переноса по сетке «о».

Можно найти устойчивую, полезную схему первого порядка для уравнения переноса, заменяя  $u_j^n$  в явном алгоритме (3.54) на пространственное среднее:

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{v \Delta t}{2\Delta} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n). \quad (3.58)$$

Этот алгоритм в применении к гиперболическим уравнениям известен как схема Лакса [6] и широко применяется. Исследуем, как и ранее, устойчивость этой схемы. Подставляя в схему отдельную фурье-моду, получим соотношение

$$\hat{u}^{n+1} = \left\{ \cos(k\Delta) - i \frac{v \Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \right\} \hat{u}^n, \quad (3.59)$$

которое имеет вид уравнения перехода; поэтому множитель перехода равен

$$g = \cos(k\Delta) - i \frac{v \Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta). \quad (3.60)$$

Квадрат модуля этого комплексного множителя перехода

$$\begin{aligned} gg^* &= \cos^2(k\Delta) + \left(\frac{v \Delta t}{\Delta}\right)^2 \sin^2(k\Delta) = \\ &= 1 - \sin^2(k\Delta) \left\{ 1 - \left(\frac{v \Delta t}{\Delta}\right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Следовательно, условие устойчивости Неймана (3.47) будет выполнено для всех волновых чисел  $k$ , если

$$\begin{aligned} \frac{|v \Delta t|}{\Delta} &\leq 1, \\ \Delta t &\leq \frac{\Delta}{|v|}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Это условие для шага по времени является примером условия устойчивости Куранта — Фридрихса — Леви [7], применимого к гиперболическим уравнениям. Снова результат не вызывает удивления. В явном методе шаг по времени нужно выбирать меньше наименьшего характерного физического времени задачи, которое в случае уравнения переноса есть не что иное, как время, за которое скорость  $v$  приводит к перетoku на расстояние  $\Delta$  (гл. 1, § 3, п. 4). Условие Куранта — Фридрихса — Леви включает требование, чтобы физическая скорость  $v$  была меньше скорости сетки  $\Delta/\Delta t$ .

## § 5. Дисперсия и диффузия на разностной сетке

В дальнейшем интересно выяснить, почему явная схема первого порядка для решения уравнения переноса (3.54) неустойчива, а с помощью метода Лакса можно получить устойчивую схему. Неустойчивость, присущая схемам первого порядка точности при решении гиперболических уравнений, вызвана отсутствием

центрирования во времени. Например, можно переписать алгоритм метода Лакса из уравнения (3.58) в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}) + \frac{1}{2}(u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}) = \\ = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) - \\ - \frac{v \Delta t}{2\Delta}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Это уравнение, теперь уже с точностью второго порядка, эквивалентно дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\Delta^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (3.64)$$

Используя метод Лакса, мы пытаемся моделировать уравнение переноса уравнением (3.64). Второй член появляется так же, как и в неустойчивом методе, при интегрировании с точностью первого порядка по шагу  $\Delta t$  и обусловлен нецентрированностью во времени схемы интегрирования. Именно этот член приводит к неустойчивости или неограниченному росту в методах с первым порядком точности, и устойчивость метода Лакса возможна только благодаря добавлению третьего члена. Этот член возникает из усреднения зависимой переменной по пространству на предыдущем шаге по времени. Таким образом, в методе Лакса можно только тогда гарантировать устойчивость, когда третий, диффузионный член превышает второй. Для фурье-моды с волновым вектором  $k$  и частотой  $\omega \sim vk$  это условие обеспечивается выбором малого шага по времени

$$\frac{\Delta^2 k^2}{2\Delta t} \geq \frac{\Delta t}{2} \omega^2,$$

или

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|}.$$

Именно это условие и было получено ранее (3.62).

Вообще критерий устойчивости выражает локальное условие, поэтому уменьшение шага по времени с целью обеспечить априорное выполнение условия устойчивости приведет к чрезмерному возрастанию диффузионного члена в уравнении (3.64). Следовательно, в методе

Лакса, как и вообще во всех методах первого порядка точности, происходит затухание волн или диффузия (в противоположность дифференциальной системе). Это серьезная проблема в работе с гиперболическими уравнениями.

Присутствие *диффузии* и *дисперсии* (последнее означает, что волны различной длины распространяются с различными скоростями) — это общее явление для всех разностных уравнений. Условие устойчивости Неймана имеет очень широкую область применения и позволяет получать критерий устойчивости простейшим образом. Однако оно мало говорит нам о детальных свойствах конкретной разностной схемы и, в частности, о важных свойствах диффузии и дисперсии. В идеальном случае при условии, что задача не слишком сложна математически, можно получить дисперсионное соотношение для разностной схемы, связывающее частоту фурье-моды на сетке с определенным волновым числом:

$$\omega = \omega(k, \Delta, \Delta t). \quad (3.65)$$

Сравнивая дисперсионное соотношение разностной схемы с дисперсионным соотношением соответствующей дифференциальной системы, можно подробно проанализировать применимость и точность разностной схемы.

Чтобы проиллюстрировать этот подход, а также свойства диффузии и дисперсии волн в методе Лакса, найдем дисперсионное соотношение для дифференциального уравнения переноса и для разностной схемы (3.58). Рассмотрим фурье-моду во времени и в пространстве,

$$u(x, t) = \hat{u} e^{i(\omega t - kx)},$$

и, как прежде [см. соотношения (3.26)], для дифференциального уравнения переноса получим

$$\omega = vk. \quad (3.66)$$

Следовательно, в дифференциальном уравнении переноса величина  $\omega$  принимает чисто вещественное значение, так что нет затухания ни одной моды, и волны со всеми волновыми числами имеют одинаковые фазовые и групповые скорости, так что нет и дисперсии волн,

Обратимся теперь к разностной схеме (3.58) и подставим в нее фурье-моду:

$$\hat{u} e^{i[\omega(t^n + \Delta t) - kx_j]} = \frac{1}{2} \hat{u} e^{i(\omega t^n - kx_j)} \left\{ (e^{ik\Delta} + e^{-ik\Delta}) - \frac{v \Delta t}{\Delta} (e^{ik\Delta} - e^{-ik\Delta}) \right\}. \quad (3.67)$$

Приводя подобные члены, получаем

$$e^{i\omega \Delta t} = \cos(k\Delta) - \frac{v \Delta t}{\Delta} i \sin(k\Delta). \quad (3.68)$$

Это и есть искомое дисперсионное соотношение для разностной схемы, не разрешенное относительно  $\omega$ . В общем случае  $\omega$  комплексно, и, используя обозначение  $\omega = \Omega + i\gamma$ , можно приравнять отдельно действительные и мнимые части дисперсионного соотношения:

$$\operatorname{tg}(\Omega \Delta t) = \frac{v \Delta t}{\Delta} \operatorname{tg}(k\Delta); \quad (3.69)$$

$$e^{-2\gamma \Delta t} = \cos^2(k\Delta) + \left( \frac{v \Delta t}{\Delta} \right)^2 \sin^2(k\Delta). \quad (3.70)$$

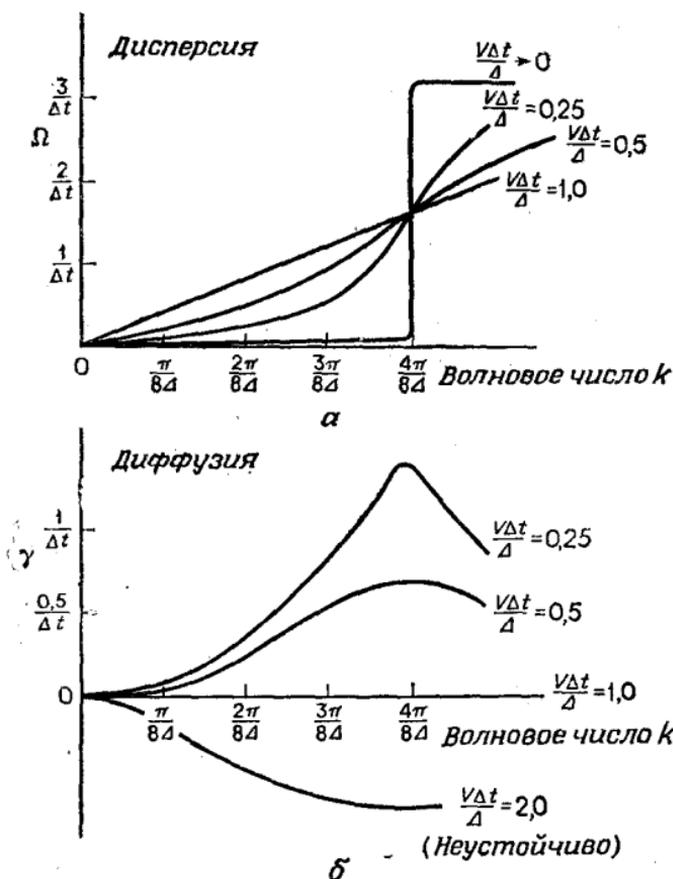
В частном случае, когда  $v \Delta t / \Delta = 1$ ,  $\gamma$  равно нулю и

$$\Omega = vk, \quad (3.71)$$

что находится в точном соответствии с дисперсионным соотношением дифференциальной системы (3.66). Однако в общем случае  $\gamma$  не равно нулю, так что на сетке происходит диффузия, и, кроме того, фазовая и групповая скорости являются функциями волнового числа, так что есть и дисперсия. Графики  $\Omega(k)$  и  $\gamma(k)$  представлены на фиг. 3.8 для различных значений величины  $v \Delta t / \Delta$ . Очевидно, что в методе Лакса для коротких волн сильно проявляются эффекты диффузии и дисперсии, поэтому наблюдается значительное отклонение от требуемого результата. Для малых волновых чисел, когда длины волн гораздо больше длины шага сетки, соответствие с дисперсионным соотношением дифференциальной системы становится разумным.

Аномальные диффузия и дисперсия, в особенности для коротких волн на разностной сетке, — это всеобщие эффекты, которые появляются в результате замены

дифференциальных уравнений разностными. В методах интегрирования первого порядка точности по временному шагу такие численные явления особенно сильны,



Фиг. 3.8. а — дисперсия; б — диффузия в методе Лакса для уравнения переноса.

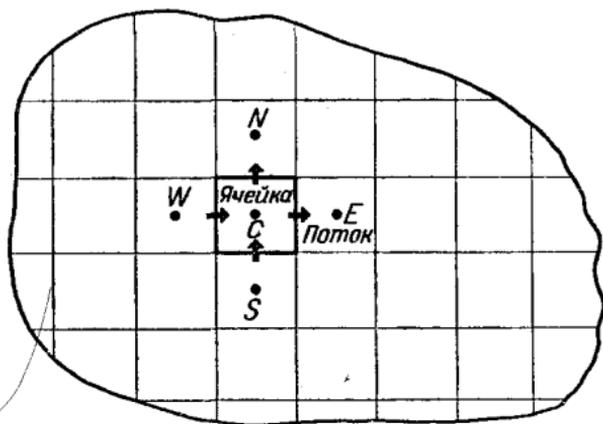
Численные эффекты на сетке становятся сильными для коротких длин волн ( $k\Delta \rightarrow 1/2\pi$ ).

и, чтобы ослабить их, обычно приходится использовать методы более высокого порядка точности.

## § 6. Консервативность на разностной сетке

Для линейной системы уравнений в частных производных можно, конечно, использовать конкретный разностный метод, однако очевидно, что имеется много спо-

совов разностного дифференцирования нелинейных членов. Мы видели, что многие физические уравнения в частных производных возникают из законов сохранения (см. гл. 3, § 1, п. 2) и называются консервативными. Было бы полезно, чтобы соответствующие разностные уравнения были в той же степени консервативны. Говоря более определенно, мы будем искать разностные



Фиг. 3.9. Сохранение потока на разностной сетке в пространстве двух измерений.

Поток от ячейки  $C$  к ячейке  $E$  точно равен по величине и противоположен по знаку потоку от ячейки  $E$  к ячейке  $C$ .

уравнения, которые тождественно сохраняют, скажем, энергию, массу, импульс или магнитный поток системы безотносительно к ошибкам, вносимым конечно-разностной сеткой.

Хотя понятие сохранения одинаково применимо к задачам любой размерности, для целей настоящего параграфа достаточно рассмотреть задачу в двумерной прямоугольной области  $R$ , ограниченной границей  $B$ . Разделим область  $R$  на ряд элементарных прямоугольных ячеек объемом  $\Delta\tau$  (фиг. 3.9), причем в двумерном случае будем иметь  $II$  прямоугольных ячеек. Систему уравнений сохранения в частных производных (3.16)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla f = 0$$

можно проинтегрировать по каждой элементарной ячейке пространства — времени объема  $\Delta\tau\Delta t$  от  $t^n$

до  $t^{n+1}$ . Например, интегрируя по объему ячейки  $C$  с поверхностью  $A$ , получим

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \iint_C \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} d\tau = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \iint_C \nabla \mathbf{f} d\tau,$$

$$\iint_C \mathbf{u}^{n+1} d\tau - \iint_C \mathbf{u}^n d\tau = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \oint_A \mathbf{f} d\mathbf{S}. \quad (3.72)$$

Левая часть проинтегрирована по времени, в правой использовалась теорема Гаусса — Остроградского, так что интеграл по объему был преобразован в интеграл по поверхности  $A$  ячейки  $C$ . Теперь вместо отыскания на сетке таких локальных величин, как, скажем, плотность или плотность импульса, можно определить соответствующие проинтегрированные величины полной массы или полного импульса соответственно в каждой ячейке:

$$\Delta \tau \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^n = \iint_C \mathbf{u}^n d\tau. \quad (3.73)$$

Кроме того, потоки  $\mathbf{f} d\mathbf{S}$  определены только на поверхности каждой ячейки. Для ячейки  $ij$  имеется четыре потока, относящихся к четырем окружающим ячейкам ( $\alpha = E, S, N, W$ ) (см. фиг. 3.9),

$$\sum_{\alpha} \mathbf{F}_{\alpha ij} = \oint_A \mathbf{f} d\mathbf{S}, \quad (3.74)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_{ij}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^n - \int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \frac{1}{\Delta \tau} \sum_{\alpha} \mathbf{F}_{\alpha ij}. \quad (3.75)$$

Разностная схема в форме (3.75) называется *консервативной*. Хотя конкретная разностная схема не определена, поскольку точно не определен способ вычисления потоков во времени, формулировка (3.75) имеет то значительное достоинство, что если дифференциальная система сохраняет величины  $\int_R \mathbf{u} d\tau$ , то разностная схема в равной мере тождественно сохраняет

эти величины. В соответствии с уравнением (3.75) любой поток  $F_{\alpha ij}$ , не относящийся к границе области, одинаков для двух соседних ячеек, так что, например,

$$F_{Eij} = -F_{W i+1j}. \quad (3.76)$$

Отсюда следует, что при суммировании уравнений (3.75) по всем ячейкам  $ij$  в  $R$  потоки попарно сократятся и останутся только вклады от границы:

$$\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \tilde{u}_{ij}^{n+1} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \tilde{u}_{ij}^n - \sum_B \int_{t^n}^{t^{n+1}} dt \frac{1}{\Delta\tau} F_{\alpha}. \quad (3.77)$$

И, следовательно, независимо от ошибок аппроксимации в разностной схеме величины  $\int_R u d\tau$  тождественно сохраняются с учетом вклада от потоков через границу  $B$  области  $R$ . Теперь, определяя потоки  $F_{\alpha ij}$  во времени, можно получать различные консервативные разностные схемы.

## § 7. Консервативные методы для гиперболических уравнений

Используя понятия консервативности, порядка точности, устойчивости и явного решения, мы теперь в состоянии рассмотреть ряд важных методов разностного решения гиперболических уравнений. Некоторые методы интегрирования по времени были введены в гл. 2, § 6, и они применимы в равной мере и к уравнениям в частных производных. Для простоты будем рассматривать алгоритмы для одномерного случая, хотя их можно применять и в пространстве любого числа измерений.

Здесь будут описаны только явные методы, хотя мы видели, что неявная аппроксимация имеет значительные достоинства, в особенности из-за того, что можно получить безусловную устойчивость схемы и использовать соответственно большие шаги по времени (см. гл. 2, § 6). Однако для гиперболических уравнений пригодность неявных методов не очевидна и успешность применения неявного метода зависит, несомненно, от свойств

конкретной задачи и точности формулировки описываемых уравнений (см. гл. 10). Имеется к тому же дополнительная трудность решения уравнений со сложными матрицами на каждом шаге по времени в случае пространства более чем одного измерения (см. гл. 4). Мы также ограничимся здесь применением методов на эйлеровых сетках, а именно на пространственных сетках, которые остаются неподвижными во времени. Надо отметить, что использование лагранжевых методов, в которых пространственная сетка движется с локальной скоростью, характерной для данной задачи, — мощный подход в случае одного измерения (см. гл. 9), однако многомерная лагранжева сетка быстро и сильно искажается и точность быстро падает.

Рассмотрим общие гиперболические уравнения в консервативной форме для случая одного измерения:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0. \quad (3.78)$$

Любой явный метод устойчив, если на шаг по времени  $\Delta t$  наложено условие Куранта — Фридрихса — Леви [7]:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|}, \quad (3.79)$$

где  $v$  — наибольшая скорость распространения волн на сетке.

### 1. Консервативный метод Лакса

Метод Лакса был описан ранее (см. гл. 3, § 4). В консервативной форме метод Лакса определяется алгоритмом

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \frac{1}{2} (\mathbf{u}_{j+1}^n + \mathbf{u}_{j-1}^n) - (\mathbf{F}_{j+1}^n - \mathbf{F}_{j-1}^n) \frac{\Delta t}{2\Delta}. \quad (3.80)$$

В качестве примера выше было подробно изучено уравнение переноса  $\mathbf{F} = v\mathbf{u}$ , где  $v$  — скорость на сетке (см. гл. 3, § 4, 5). Как и раньше [соотношения (3.62)], условие, налагаемое на шаг по времени, имеет вид

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|}.$$

Уравнение переноса — слишком простой пример интересующих нас уравнений, и, чтобы проиллюстрировать более широкую применимость метода, используем метод Лакса для системы двух уравнений, описывающих одномерные электромагнитные волны. Плоско-поляризованная волна в вакууме определяется дифференциальными уравнениями

$$\begin{aligned}\frac{\partial B}{\partial t} + c \frac{\partial E}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + c \frac{\partial B}{\partial x} &= 0,\end{aligned}\tag{3.81}$$

вытекающими из уравнений Максвелла. Здесь электрическое поле  $E$  направлено по оси  $y$ , магнитное поле  $B$  — по оси  $x$ . Применяя алгоритм Лакса для вектора  $\mathbf{u} = (E, B)$  и потока  $\mathbf{F} = (cB, cE)$ , находим новые компоненты поля на каждом шаге по времени:

$$\begin{aligned}E_j^{n+1} &= \frac{1}{2} (E_{j+1}^n + E_{j-1}^n) - \frac{c \Delta t^2}{2\Delta} (B_{j+1}^n - B_{j-1}^n), \\ B_j^{n+1} &= \frac{1}{2} (B_{j+1}^n + B_{j-1}^n) - \frac{c \Delta t}{2\Delta} (E_{j+1}^n - E_{j-1}^n).\end{aligned}\tag{3.82}$$

Для анализа устойчивости подставим в уравнения (3.82) векторную фурье-моду

$$\mathbf{u}^n = (\hat{E}^n e^{ikx}, \hat{B}^n e^{ikx})$$

и получим матрицу перехода (гл. 3, § 2)

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \cos(k\Delta) & \frac{-ic \Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \\ \frac{-ic \Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) & \cos(k\Delta) \end{bmatrix}.\tag{3.83}$$

В соответствии с условием устойчивости Неймана (3.47) требуется найти собственные значения  $g$  матрицы  $\mathbf{G}$ :

$$\{\cos(k\Delta) - g\}^2 + \frac{c^2 (\Delta t)^2}{\Delta^2} \sin^2(k\Delta) = 0,$$

откуда

$$g_{1,2} = \cos(k\Delta) \pm \frac{ic \Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta).\tag{3.84}$$

Матрица перехода имеет два собственных значения, соответствующие двум связанным уравнениям. Они относятся к волнам, распространяющимся в положительном и отрицательном направлениях по оси  $x$ . Впрочем, модули собственных чисел совпадают:

$$\begin{aligned} |g|^2 &= \cos^2(k\Delta) + \frac{c^2(\Delta t)^2}{\Delta} \sin^2(k\Delta) = \\ &= 1 - \sin^2(k\Delta) \left(1 - \frac{c^2(\Delta t)^2}{\Delta^2}\right). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Таким образом, условие устойчивости Неймана удовлетворяется для обеих волн, если

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{c}, \quad (3.86)$$

где  $c$  — скорость волн. Критерий устойчивости поэтому тот же, что и для уравнения переноса. Характерная скорость  $c$  — это теперь фазовая скорость, а не скорость переноса, тем не менее мы снова получили условие Куранта — Фридрихса — Леви, так как  $c$  — наибольшая скорость распространения на сетке.

Приведенные здесь примеры линейны, хотя формула (3.80) имеет общий характер и применяется в равной мере и к более интересным примерам нелинейных уравнений. Эта схема, однако, не центрирована по времени и имеет ошибки порядка шагов по времени и пространству (см. гл. 3, § 5).

## 2. Консервативный метод «с перешагиванием»

При интегрировании гиперболических уравнений по времени с шагом  $\Delta t$  только с первым порядком точности по  $\Delta t$  (временная разностная производная не центрирована по времени) в уравнения вносится сильно дестабилизирующий член, и единственный путь улучшения устойчивости — добавить более сильный пространственный диффузионный член (см. гл. 3, § 5). Эти методы, примером которых может служить метод Лакса, дают сильно сглаженное численное решение.

Мы можем преодолеть эти трудности посредством центрирования по времени уравнений, чтобы получить

методы со вторым порядком точности по шагу  $\Delta t$ . Очевидно, это требует более сложной разностной схемы и большей работы для вычислительной машины, так как должна использоваться *трехслойная* формула. Простейшая из этих схем — схема с перешагиванием — полностью аналогична методу с перешагиванием для обыкновенных дифференциальных уравнений (см. гл. 2, § 6), однако теперь этот метод будет использоваться на пространственной сетке для уравнений в консервативной форме.

В памяти вычислительной машины будем хранить зависимые переменные  $\mathbf{u}$  на двух временных слоях в каждой точке вычислений (требуемый объем памяти поэтому удваивается по сравнению с объемом памяти в методе с первым порядком точности по времени). В процессе счета потоки  $\mathbf{F}$  вычисляются на промежуточных слоях по времени  $t^n$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{j+1}^n &= \mathbf{F}(\mathbf{u}_{j+1}^n), \\ \mathbf{u}_j^{n+1} &= \mathbf{u}_j^{n-1} - \frac{\Delta t}{\Delta} (\mathbf{F}_{j+1}^n - \mathbf{F}_{j-1}^n). \end{aligned} \quad (3.87)$$

Полученные таким образом искомые величины используются для нахождения промежуточных потоков, чтобы «перешагнуть» на следующей временной слой:

$$\mathbf{u}_{j+1}^{n+2} = \mathbf{u}_{j+1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta} (\mathbf{F}_{j+2}^{n+1} - \mathbf{F}_j^{n+1}).$$

Для случая одного пространственного измерения эта схема представлена на фиг. 3.10. Следует отметить, что значения зависимых переменных в промежуточных пространственно-временных точках  $\mathbf{u}_j^n$  не нужны и вообще не вычисляются. Если на сетке определены все точки, то на самом деле имеются две взаимопроникающие сетки, которые в схеме не связаны, так что решения на этих сетках могут смещаться по фазам (фиг. 3.10).

Для исследования устойчивости схемы снова используем уравнение переноса (3.24), где

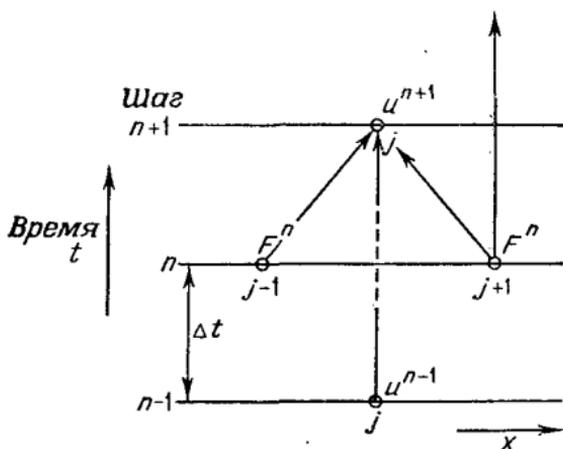
$$F = v u.$$

Для этого простого случая с одной функцией, подставляя в уравнение (3.87) фурье-моду с волновым

вектором  $k$  в пространстве, получим уравнение для множителя перехода  $g$  для этой схемы:

$$g^2 = 1 - i \frac{2\Delta t}{\Delta} v \sin(k\Delta) g. \quad (3.88)$$

Поскольку используется трехслойная по времени формула, из схемы с перешагиванием следует квадратное



Фиг. 3.10. Сетка в плоскости  $(x-t)$ , используемая для получения второго порядка точности в консервативном методе «с перешагиванием».

На промежуточных узлах  $(n, j)$  переменные не определяются.

уравнение для множителя перехода. Получаем два корня:

$$g = i\alpha \pm \sqrt{-\alpha^2 + 1}, \quad (3.89)$$

где  $\alpha = (\Delta t/\Delta) v \sin(k\Delta)$ . Таким образом, если выражение под корнем больше нуля, модуль  $g$  для обоих корней равен единице:

$$|g| = 1, \quad \text{если } |\alpha| \leq 1. \quad (3.90)$$

Чтобы гарантировать устойчивость этого явного метода для всех волновых чисел, необходимо наложить условие на шаг по времени:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|}. \quad (3.91)$$

Как и прежде, условие, налагаемое на шаг по времени, есть условие Куранта — Фридрихса — Леви.

Необходимо отметить, что два корня, полученные для множителя перехода, соответствуют двум несвязанным сеткам, используемым в схеме с перешагиванием. Хотя оба корня дают устойчивые решения при одинаковых условиях, две моды, относящиеся к этим двум сеткам, могут распространяться независимо. Можно избежать этого вычислением искомых величин только на одной сетке или, если это возможно, использованием малого диффузионного члена, чтобы связать эти две сетки (см. гл. 9, § 6).

### 3. Двухшаговая схема Лакса — Вендроффа

Можно получить точность второго порядка по шагу по времени, избежав большой численной диффузии путем обобщения явного двухшагового метода (гл. 2, § 6, п. 3), основанного на разложении в ряд Тейлора по времени. Как и для обыкновенных дифференциальных уравнений, двухшаговый метод Лакса — Вендроффа [4, 8, 9] обеспечивает центрирование по времени путем определения вспомогательных или промежуточных значений функций на полущелых шагах по времени  $t^{n+1/2}$ . Метод Лакса используется на первом шаге или для вспомогательных вычислений на каждом шаге по времени.

*Вспомогательный шаг:*

$$\mathbf{u}_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}(\mathbf{u}_j^n + \mathbf{u}_{j+1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta}(\mathbf{F}_{j+1}^n - \mathbf{F}_j^n). \quad (3.92)$$

Эти значения теперь используются для определения потоков в промежуточных временных и пространственных точках:

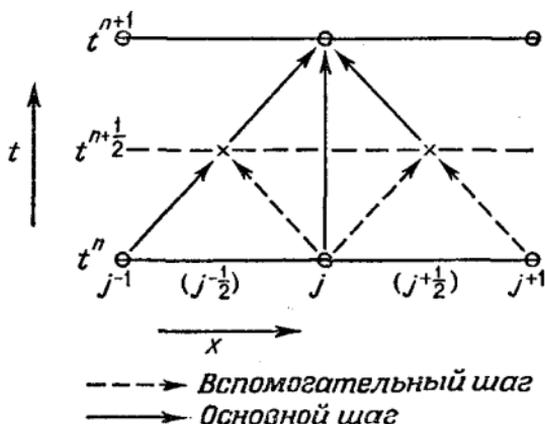
$$\mathbf{F}_{j+1/2}^{n+1/2} = \mathbf{F}(\mathbf{u}_{j+1/2}^{n+1/2}). \quad (3.93)$$

Наконец, на основном шаге вычислений используется центрированная по времени и пространству формула интегрирования (фиг. 3.11).

Основной шаг:

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta} (\mathbf{F}_{j+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{F}_{j-1/2}^{n+1/2}). \quad (3.94)$$

После каждого основного шага промежуточные значения величин  $\mathbf{u}_{j+1/2}^{n+1/2}$  оказываются ненужными и в дальнейшем формировании решения участия не принимают,



Фиг. 3.11. Консервативный двухшаговый метод Лакса — Вендроффа на сетке в плоскости  $(x - t)$ .

Метод Лакса используется для получения промежуточных величин на полуцелых шагах по времени  $(n + 1/2, j + 1/2)$ . Эти величины используются для центрирования по времени интеграла, чтобы получить точность второго порядка.

Устойчивость метода можно исследовать, снова обращаясь к уравнению переноса, где  $F = vu$ . Для фурье-моды  $\exp(ikx)$  множитель перехода  $g$  определяется из уравнений (3.92) и (3.94):

$$\begin{aligned} g &= 1 - \frac{\Delta t v}{\Delta} \left[ i \sin(k\Delta) - \frac{\Delta t v}{\Delta} \{ \cos(k\Delta) - 1 \} \right] = \\ &= 1 - i\alpha \sin(k\Delta) + \alpha^2 \{ \cos(k\Delta) - 1 \}, \end{aligned} \quad (3.95)$$

где  $\alpha = \Delta t v / \Delta$ . Множитель перехода  $g$  вновь комплексный и квадрат его модуля равен

$$\begin{aligned} gg^* &= [1 + \alpha^2 \{ \cos(k\Delta) - 1 \}]^2 + \alpha^2 \sin^2(k\Delta) = \\ &= 1 - \alpha^2 (1 - \alpha^2) \{ 1 - \cos(k\Delta) \}^2. \end{aligned} \quad (3.96)$$

Отсюда следует, что для двухшагового метода Лакса — Вендроффа множитель перехода по модулю будет мень-

ше либо равен единице, и, следовательно, условие устойчивости Неймана будет выполнено для всех волновых чисел  $k$ , если

$$\begin{aligned} \alpha^2 &\leq 1, \\ \Delta t &\leq \frac{\Delta}{|v|}, \end{aligned} \quad (3.97)$$

т. е. снова требуется выполнение условий Куранта — Фридрихса — Леви.

Заметим, что в схеме Лакса — Вендроффа, исключая случай, когда  $\alpha = 1$ , модуль множителя перехода меньше единицы, так что фурье-моды затухают на сетке. Этот эффект, однако, мал для малых  $k\Delta$ , так как, разложив косинус в выражении для модуля множителя перехода (3.96) по малым волновым числам, получим

$$gg^* = 1 - \alpha^2(1 - \alpha^2) \frac{k^4 \Delta^4}{4} + o(k^4 \Delta^4). \quad (3.98)$$

Таким образом, численная диффузия имеет четвертый порядок малости по волновому числу, так что длинные волны подвержены возмущению лишь в минимальной степени, в то же время эффект диффузии четвертого порядка малости оказывается даже полезным для сглаживания разрывов на сетке (см. гл. 9). Кроме того, необходимо отметить, что в методе Лакса — Вендроффа не вносятся никаких посторонних и дополнительных численных мод. Эти преимущества метода привели к его широкому применению.

#### 4. Метод квазивторого порядка точности

Можно сравнительно просто получить точность почти второго порядка путем расширения метода Адамса — Башфорта (табл. 2.2). Используя разложение в ряд Тейлора по шагу  $\Delta t$  до второго порядка, найдем искомую величину на новом шаге по времени:

$$u^{n+1} = u^n + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_n \Delta t + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_n \frac{\Delta t^2}{2}, \quad (3.99)$$

или, с той же точностью,

$$u^{n+1} = u^n + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_n \Delta t + \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_n - \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{n-1} \right\} \frac{\Delta t}{2}.$$

Применим этот прием для консервативного гиперболического уравнения (3.78):

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \left(\frac{3}{2} + \varepsilon\right) \frac{\Delta t}{2\Delta} (\mathbf{F}_{j+1}^n - \mathbf{F}_{j-1}^n) + \\ + \left(\frac{1}{2} + \varepsilon\right) \frac{\Delta t}{2\Delta} (\mathbf{F}_{j+1}^{n-1} - \mathbf{F}_{j-1}^{n-1}), \quad (3.100)$$

где  $\varepsilon$  — малое число. Таким образом, снова используется трехслойная формула со вторым порядком точности, но лишь потоки  $\mathbf{F}_{j+1}^{n-1}$  в отличие от зависимых переменных берутся с нижнего временного слоя. В процессе счета потоки нужно вычислять только один раз на каждом шаге по времени и вместо запоминания зависимых переменных на двух временных слоях, запоминаются потоки на одном временном слое. Особое преимущество этой схемы заключается в том, что не нужно вводить сложные переменные сетки или сетки такого типа, как для кристалла поваренной соли.

Исследуем множитель перехода схемы (3.100) для фурье-моды  $\exp(ikx)$ , когда для уравнения переноса

$$g^2 = g - \left(\frac{3}{2} + \varepsilon\right) iag + \left(\frac{1}{2} + \varepsilon\right) ia; \quad (3.101)$$

здесь

$$\alpha = \frac{\Delta t v}{\Delta} \sin(k\Delta). \quad (3.102)$$

Множитель перехода можно определить из уравнения (3.101) разложением по малому  $\alpha$ :

для

$$|\alpha| \leq \frac{1}{2} \quad |g| < 1, \quad \text{если} \quad \varepsilon > \frac{1}{4}\alpha^2 + \frac{1}{2}\alpha^4 + o(\alpha^4). \quad (3.103)$$

Таким образом, для малых  $\alpha$  метод будет устойчивым для всех мод, если число  $\varepsilon$  достаточно велико. Например, если выбирать шаг по времени в виде

$$\Delta t = \frac{1}{2} \frac{\Delta}{|v|}, \quad (3.104)$$

то для устойчивости нужно использовать достаточно большое  $\varepsilon$

$$\varepsilon \geq \frac{3}{32},$$

Таблица 3.1

**Явные консервативные методы для гиперболических уравнений:**

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0,$$

где  $F = F(u)$

Пример:  $F = vu$ ,  $\alpha = \frac{\Delta t}{\Delta} v$

Метод	Алгоритм
1. Явный метод первого порядка точности	$u_j^{n+1} = u_j^n - (F_{j+1}^n - F_{j-1}^n) \frac{\Delta t}{2\Delta}$ $g = 1 + i\alpha \sin(k\Delta)$ <p>Всегда неустойчив</p>
2. Метод Лакса	$u_j^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - (F_{j+1}^n - F_{j-1}^n) \frac{\Delta t}{2\Delta}$ $g = \cos(k\Delta) + i\alpha \sin(k\Delta)$ <p>Устойчив при <math>\Delta t \leq \frac{\Delta}{ v }</math></p>
3. Метод Лелевье	$u_j^{n+1} = u_j^n - \{(vu)_{j+1}^n - (vu)_j^n\} \frac{\Delta t}{\Delta}, \text{ если } v_j^n \leq 0$ $u_j^{n+1} = u_j^n - \{(vu)_j^n - (vu)_{j-1}^n\} \frac{\Delta t}{\Delta}, \text{ если } v_j^n \geq 0$ $g = 1 -  \alpha  +  \alpha  \cos(k\Delta) + i\alpha \sin(k\Delta)$ <p>Устойчив при <math>\Delta t \leq \frac{\Delta}{ v }</math></p> <p>Применим только к переносу</p>
4. Двухшаговый метод Лакса — Вендроффа	$u_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_j^n) - (F_{j+1}^n - F_j^n) \frac{\Delta t}{\Delta}$ $u_j^{n+1} = u_j^n - (F_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - F_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) \frac{\Delta t}{\Delta}$ $g = 1 - i\alpha \sin(k\Delta) + \alpha^2 \{\cos(k\Delta) - 1\}$ <p>Устойчив при <math>\Delta t \leq \frac{\Delta}{ v }</math></p>

Метод	Алгоритм
5. Одношаговый метод Лакса — Вендроффа	$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{2\Delta} (F_{j+1}^n - F_{j-1}^n) + \frac{\Delta t^2}{2\Delta^2} \times$ $\times \{C_{j+1/2}^n (F_{j+1}^n - F_j^n) - C_{j-1/2}^n (F_j^n - F_{j-1}^n)\},$ <p>где матрица <math>C</math> — якобиан, <math>C_{\mu\nu} = \frac{\partial F_\mu}{\partial u_\nu}</math></p> <p>и <math>C_{j+1/2}^n = C \left( \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_j^n) \right)</math>,</p> $g = 1 - i\alpha \sin(k\Delta) + \alpha^2 \{ \cos(k\Delta) - 1 \}$ <p>Устойчив при <math>\Delta t \leq \Delta /  v </math></p>
6. Метод «с перешагиванием»	$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \frac{\Delta t}{\Delta} (F_{j+1}^n - F_{j-1}^n),$ $g = i\alpha \sin k\Delta \pm \sqrt{(-\alpha^2 \sin^2 k\Delta + 1)}$ <p>Устойчив при <math>\Delta t \leq \Delta /  v </math></p>
7. Метод квази-второго порядка точности	$u_j^{n+1} = u_j^n - \left( \frac{3}{2} + \varepsilon \right) \frac{\Delta t}{2\Delta} (F_{j+1}^n - F_{j-1}^n) +$ $+ \left( \frac{1}{2} + \varepsilon \right) \frac{\Delta t}{2\Delta} (F_{j+1}^{n-1} - F_{j-1}^{n-1})$ <p>Устойчив при <math>\alpha \leq \frac{1}{2}</math>, если <math>\varepsilon &gt; \frac{1}{4} \alpha^2 + \frac{1}{2} \alpha^4</math>,</p> <p>а именно</p> $\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta}{ v }, \text{ если } \varepsilon > \frac{1}{4} \frac{\Delta t^2 v^2}{\Delta^2} + \frac{1}{2} \frac{\Delta t^4 v^4}{\Delta^4}$

тогда как для меньших шагов по времени  $\varepsilon$  быстро становится исчезающе малым. Этот метод в действительности только тогда имеет второй порядок точности, когда параметр  $\varepsilon$  тождественно равен нулю. Однако, поскольку  $\varepsilon$  можно сделать сколь угодно малым (за счет малости  $\Delta t$ ), метод имеет почти второй порядок точности по шагу по времени.

Приведенные в этом параграфе консервативные явные методы для гиперболических уравнений особенно удобны. Существует много других методов, и некоторые

из них приведены в табл. 3.1. Для уменьшения влияния численных дисперсии и диффузии, конечно, желательно использовать схемы, более сложные, чем схемы второго порядка точности по временному шагу. При этом, однако, увеличивается сложность их применения и быстро возрастает количество требуемых для решения арифметических операций. Робертсом и Вейссом [10] были развиты методы четвертого порядка точности по временному шагу.

### § 8. Многомерные явные методы

Явные консервативные методы, рассмотренные для одного измерения в гл. 3, § 7, естественно обобщаются на уравнения в двух или более измерениях, и именно в многомерных задачах эти методы находят наибольшее применение. Пространственные сетки, определенные теперь в двух или более измерениях, приводят к значительному усложнению, и необходимо позаботиться о том, чтобы взаимопроникающие сетки остались согласованными.

Условие устойчивости Куранта — Фридрихса — Леви (3.79), наложенное на шаг по времени, применимо к целому ряду методов, и в  $N$ -мерном пространстве переходит в следующее условие:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|\mathbf{v}| \sqrt{N}}, \quad (3.105)$$

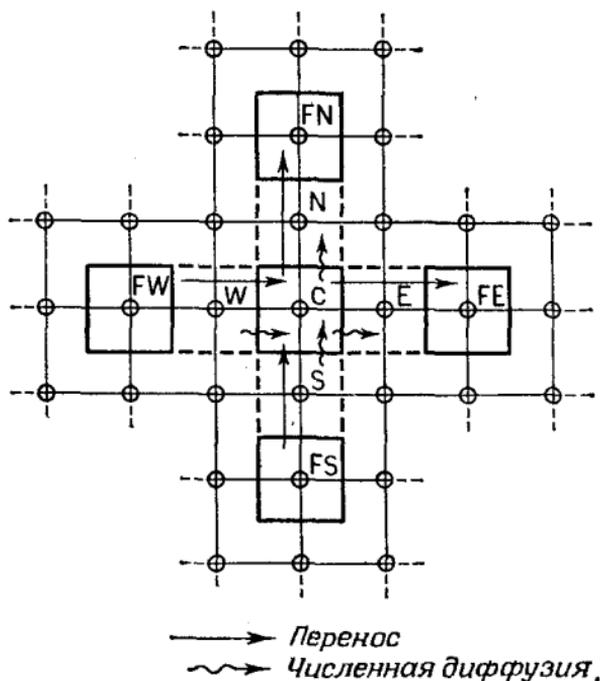
где вектор скорости  $\mathbf{v}$  — наибольшая скорость распространения на сетке. Предполагается, что шаги по пространству  $\Delta$  одинаковы вдоль каждого измерения.

Проиллюстрируем этот подход на примере метода Лакса. В  $N$ -мерном пространстве алгоритм принимает вид

$$\mathbf{u}^{n+1} = \frac{1}{2N} \sum_{\alpha=-N}^N \mathbf{u}_{\alpha}^n - \sum_{\alpha=1}^N (\mathbf{F}_{\alpha}^n - \mathbf{F}_{- \alpha}^n) \frac{\Delta t}{2\Delta}. \quad (3.106)$$

Индексы, определяющие конкретную точку сетки, опущены, и уравнение нужно рассматривать в каждом узле сетки; индекс  $\alpha$  относится к  $2N$  соседним точкам

в  $N$ -мерном пространстве. Сетка, используемая в методе Лакса в двумерном пространстве, показана на фиг. 3.12. Пространственное усреднение искоемых величин на предыдущем слое на каждом шаге по времени должно связывать пространственные сетки посредством численной диффузии.



Фиг. 3.12. Двумерная схема Лакса.

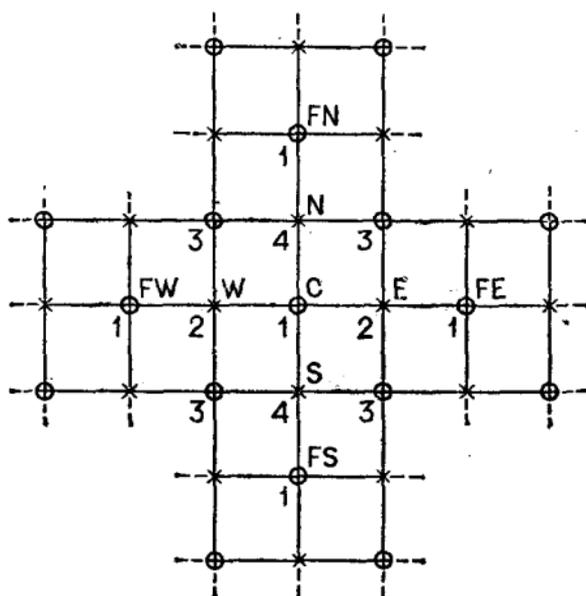
Потоки связывают ячейку  $C$  с ячейками  $FN$ ,  $FE$ ,  $FS$ ,  $FW$ , в то время как для связывания ячеек  $N$ ,  $E$ ,  $S$ ,  $W$  с ячейкой  $C$  используется численная диффузия.

Для исследования устойчивости многомерной схемы или фактически для исследования дисперсионного соотношения схемы нужно применять метод Фурье-анализа вдоль каждого измерения отдельно. В двумерной постановке берем Фурье-моды как в  $x$ , так и в  $y$  измерениях, а именно  $\hat{u} \exp(ik_x x + ik_y y)$ . В качестве примера используем метод Лакса (3.106) для уравнения переноса с  $F_x = v_x u$  и  $F_y = v_y u$ :

$$u_{ij}^{n+1} = \frac{1}{4} (u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i,j-1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_x (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_y (u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n). \quad (3.107)$$

Используя обозначения  $\theta_x = \Delta t v_x / \Delta$ ,  $\theta_y = \Delta t v_y / \Delta$ ,  $\alpha = k_x \Delta$  и  $\beta = k_y \Delta$ , множителю перехода  $g$  двойной фурье-моды можно придать вид

$$g = \frac{1}{2} \cos \alpha + \frac{1}{2} \cos \beta - i\theta_x \sin \alpha - i\theta_y \sin \beta. \quad (3.108)$$



О Четное время  
x Нечетное время

Фиг. 3.13. «Шахматная сетка», используемая как в методе Лакса, так и в методе «с перешагиванием».

Сетка аналогична ионной решетке кристалла поваренной соли. Точки, помеченные крестиками, определены на промежуточных временных слоях в отличие от точек, помеченных кружками.

Поскольку выражение комплексно, вычислим модуль множителя перехода

$$gg^* = \left( \frac{1}{2} \cos \alpha + \frac{1}{2} \cos \beta \right)^2 + (\theta_x \sin \alpha + \theta_y \sin \beta)^2.$$

Перегруппировав члены, можно написать

$$gg^* = 1 - (\sin^2 \alpha + \sin^2 \beta) \left\{ \frac{1}{2} - (\theta_x^2 + \theta_y^2) \right\} - \frac{1}{4} (\cos \alpha - \cos \beta)^2 - (\theta_y \sin \alpha - \theta_x \sin \beta)^2. \quad (3.109)$$

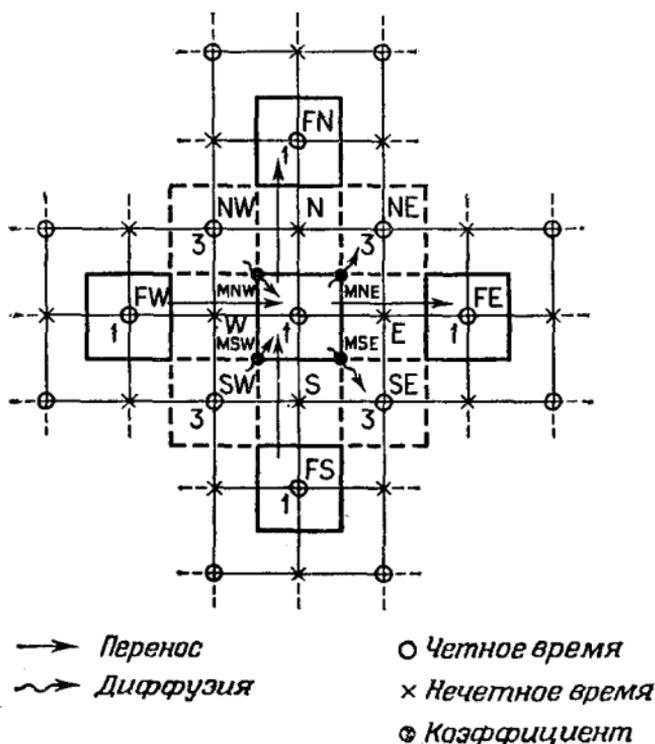
Два последних члена всегда отрицательны, и условие устойчивости Неймана (3.47) заведомо выполнено, если

$$\frac{1}{2} - (\theta_x^2 + \theta_y^2) \geq 0$$

или

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{(v_x^2 + v_y^2)^{1/2} \sqrt{2}}, \quad (3.110)$$

что выражает соответствующее условие Куранта — Фридрихса — Левин (3.105) для случая двух измерений.



Фиг. 3.14. Связывание сеток в методе Лакса — Вендроффа.

В двумерном пространстве имеются две различные сетки, и их рассогласование может привести к слабой численной неустойчивости между сетками 1 и 3. Если дифференциальные уравнения включают диффузионные члены, сетки 1 и 3 можно связать с помощью диагонального пятиточечного оператора диффузии; в противном случае нужно добавить искусственный диффузионный член.

Ясно, что такой подход применим и к пространству с большим числом измерений.

Для схем с перешагиванием Лакса — Вендроффа и схем квазивторого порядка точности справедливы те

же соображения. На фиг. 3.13 и 3.14 показаны пространственные сетки, используемые в первых двух схемах. В некоторых задачах может существовать слабая расогласованность в многомерной сетке (фиг. 3.14), которую, однако, можно преодолеть с помощью малой диффузии по диагонали сетки (см. гл. 9).

## § 9. Обзор методов для параболических уравнений

Мы подробно исследовали гиперболические уравнения и их разностные аппроксимации и теперь обратимся к параболическим уравнениям. Хотя для них по существу справедливы те же принципы разностных методов, конкретные алгоритмы, которые обеспечивают решение уравнений, отличаются. Проблема законов сохранения и их применимости к системам уравнений и к многомерным задачам в той же степени относится и к параболическим уравнениям. В качестве примера рассмотрим простое уравнение диффузии в одном измерении (3.28):

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (3.111)$$

где для наглядности коэффициент диффузии предполагается постоянным. Это не ограничивает применимости предложенных ниже методов к более сложным задачам. В действительности же в интересующих нас задачах параболические уравнения часто включают волноподобные свойства или «гиперболические члены». Кроме того, параболические уравнения могут образовывать системы уравнений, которые нужно решать совместно. В правой части уравнения (3.111) могут быть члены, описывающие источники, а если коэффициент теплопроводности зависит от  $u$ , то уравнение становится нелинейным,  $\kappa = \kappa(u)$ . Тем не менее приемы и методы, которые будут рассмотрены ниже, пригодны и для более сложных систем.

### 1. Явный метод первого порядка точности

Хотя явный метод первого порядка точности обсуждался ранее (гл. 3, § 3), для полноты включим сюда

алгоритм этого простейшего метода:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n). \quad (3.112)$$

Множитель перехода (3.51) выведен в гл. 3, § 3, и порог устойчивости для шага по времени определен неравенством

$$\Delta t \leq \frac{0,5\Delta^2}{\kappa}.$$

Необходимо отметить, что явные методы для параболических уравнений удовлетворяют критерию устойчивости, если шаг по времени ограничен квадратом шага по пространству в отличие от первой степени для гиперболических уравнений. Поэтому, удваивая точность по пространству, необходимо уменьшить в четыре раза шаг по времени, и, следовательно, в параболических уравнениях зависимость шага по времени от условия устойчивости может оказаться особенно жесткой. Кроме того, описанный здесь явный метод имеет только первый порядок точности по шагу  $\Delta t$ . Эти ограничения можно обойти с помощью использования неявного под-хода.

## 2. Неявный метод Кранка — Никольсона

Метод Кранка — Никольсона [4, 11] для параболических уравнений аналогичен неявному методу второго порядка для обыкновенных дифференциальных уравнений [см. уравнение (2.95)]. Усредним пространственный диффузионный член по времени:

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + \\ + \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \end{aligned} \quad (3.113)$$

и проведем исследование метода с помощью фурье-моды

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n - \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \{1 - \cos(k\Delta)\} \hat{u}^{n+1} - \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \{1 - \cos(k\Delta)\} \hat{u}^n.$$

Отсюда следует, что множитель перехода удовлетворяет уравнению

$$g = 1 - \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \{1 - \cos(k\Delta)\} g - \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \{1 - \cos(k\Delta)\}; \quad (3.114)$$

$$g = \frac{1 - \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right)}{1 + \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right)}.$$

Множитель перехода  $g$  — действительное число, и для всех волновых чисел и шагов по времени значение  $g$  всегда меньше единицы. Отсюда следует, что условие Неймана всегда выполнено, так что метод Кранка — Никольсона безусловно устойчив. Кроме того, он имеет точность второго порядка как по временному, так и по пространственному шагам и благодаря этим достоинствам широко применяется.

Однако точность и устойчивость схемы были получены ценою усложнения системы уравнений для определения величин  $u_j^{n+1}$  при всех  $j$ . В алгоритме (3.113) новые значения  $u_j^{n+1}$  определены неявно, и еще предстоит решать матричное уравнение на каждом шаге по времени (см. гл. 4).

### 3. Неустойчивый метод «с перешагиванием»

В случае обыкновенных дифференциальных уравнений и гиперболических уравнений трехслойный метод с перешагиванием имел ряд положительных свойств (см. гл. 2, § 6, п. 2 и гл. 3, § 7, п. 2). На первый взгляд этот метод можно применять и для решения уравнения диффузии:

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n). \quad (3.115)$$

Однако анализ устойчивости метода дает уравнение для множителя перехода:

$$g = -\alpha \pm \sqrt{(\alpha^2 + 1)}, \quad (3.116)$$

где

$$\alpha = \frac{4\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{\kappa\Delta}{2}\right).$$

Так как  $\alpha$  действительное, один из корней для множителя перехода всегда меньше минус единицы, и поэтому этот метод, хотя он и согласованный, является безусловно неустойчивым.

#### 4. Метод Дюфора — Франкеля

Используя трехслойную формулу и слегка измененный метод с перешагиванием, получаем метод решения параболических уравнений, который обладает необычным для явных схем свойством безусловной устойчивости [12]:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \{u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n\}. \quad (3.117)$$

Зависимая переменная под оператором диффузии в центральном временном и пространственном узле получена усреднением по времени, так что промежуточные узлы на сетки вводить не нужно. Можно найти явное выражение для функции  $u_j^{n+1}$  в каждом узле сетки

$$u_j^{n+1} = \left( \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \right) u_j^{n-1} + \frac{\alpha}{1+\alpha} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n), \quad (3.118)$$

где

$$\alpha = 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2}.$$

Для трехслойной схемы получается квадратное уравнение для множителя перехода

$$g^2 = \frac{1-\alpha}{1+\alpha} + \frac{2\alpha}{1+\alpha} \cos(k\Delta) g,$$

$$g = \frac{1}{1+\alpha} [\alpha \cos(k\Delta) \pm \sqrt{\{1 - \alpha^2 \sin^2(k\Delta)\}}]. \quad (3.119)$$

Для интерпретации этого уравнения отметим, что возможны два случая. Если  $\alpha^2 \sin^2(k\Delta) \leq 1$  (малый шаг по времени), то множитель перехода действителен и всегда меньше единицы для обоих корней. В случае  $\alpha^2 \sin^2(k\Delta) > 1$  (большой шаг по времени) множитель перехода становится комплексным и его модуль равен

$$|g| = \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \quad \text{для} \quad \alpha^2 \sin^2(k\Delta) > 1.$$

Таблица 3.2

## Методы для параболических уравнений

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

Множитель перехода  $g$ ,  $\beta = \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2}$

Метод	Алгоритм
1. Явный первого порядка	$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$ $g = 1 - 4\beta \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right)$ <p>Устойчив при <math>\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\kappa}</math></p>
2. Метод Кранка — Никольсона	$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) +$ $+ \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$ $g = \frac{1 - 2\beta \sin^2\left(\frac{1}{2} k\Delta\right)}{1 + 2\beta \sin^2\left(\frac{1}{2} k\Delta\right)}$ <p>Всегда устойчив</p>
3. Метод «с перешагиванием»	$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$ $g = -4\beta \sin^2\left(\frac{1}{2} k\Delta\right) \pm \sqrt{\left\{16\beta^2 \sin^4\left(\frac{1}{2} k\Delta\right) + 1\right\}}$ <p>Всегда неустойчив</p>
4. Явный метод Дюфора — Франкеля	$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \{u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n\}$ $u_j^{n+1} = \left(\frac{1 - 2\beta}{1 + 2\beta}\right) u_j^{n-1} + \frac{2\beta}{1 + 2\beta} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)$ $g = \frac{1}{1 + 2\beta} [2\beta \cos(k\Delta) \pm \sqrt{1 - 4\beta^2 \sin^2(k\Delta)}]$ <p>Всегда устойчив</p>

Таким образом, для любого шага по времени и для всех волновых чисел на сетке модуль  $g$  всегда меньше единицы, так что эта явная схема устойчива. Ясно, что метод Дюфора — Франкеля обладает большими возможностями, но необходимо отметить, что для больших шагов по времени множитель перехода становится комплексным, и, в отличие от дифференциальных уравнений, в пределе больших шагов по времени разностная схема приводит к колебаниям, хотя и не возрастающим. Это происходит из-за того, что схема включает ошибки вида  $\Delta t/\Delta$ , и хотя метод устойчив, но для больших шагов по времени он неточен.

Описанные здесь методы применимы для многомерных задач и сведены в табл. 3.2.

## Численные методы матричной алгебры

---

### § 1. Введение

Использование конечно-разностных методов позволяет перейти от дифференциальных уравнений физики к конечной системе алгебраических уравнений и открывает возможности различной обработки числовой информации. Благодаря применению разностного исчисления функции преобразуются в векторы конечной размерности, дифференциальные операторы преобразуются в матричные операторы, а дифференциальные уравнения — в конечномерные матричные уравнения. Ясно, что мы должны уметь решать такие матричные уравнения, причем решать их наиболее простым и эффективным способом. Конечно, в некоторых случаях, например для явной аппроксимации задачи с начальными условиями, решения можно найти непосредственно, и необходимые для этого алгебраические преобразования тривиальны. В общем случае и для краевой задачи, в частности, искомый результат можно получить только как решение неявных матричных уравнений, при этом естественно возникает необходимость решать эти матричные уравнения как можно быстрее. Это требование сохраняет свою силу и для многих задач с начальными условиями, в которых матричные уравнения приходится решать на каждом шаге по времени, и для неявной разностной аппроксимации нестационарной задачи (см. гл. 2, § 4), а также для итерационных методов решения эллиптических уравнений. Разработка наиболее эффективных алгоритмов решения матричных уравнений, а также количественное определение характеристик матриц и служат предметом численных методов матричной алгебры. Эффективными алгоритмами мы называем такие алгоритмы, которые минимизируют как количество отдельных

арифметических и логических операций, так и необходимый для отыскания решения объем машинной памяти.

Для физики и вычислительной физики особый интерес представляют две задачи матричной алгебры: решение матричного уравнения и определение собственных чисел и собственных векторов, принадлежащих отдельной матрице. В первой из них необходимо найти решения для системы уравнений, которая связывает неизвестные переменные  $u$  с известными переменными  $w$ :

$$\begin{aligned} a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + a_{13}u_3 + \dots + a_{1n}u_n &= w_1, \\ a_{21}u_1 + a_{22}u_2 + \dots + a_{2n}u_n &= w_2, \\ \vdots & \\ a_{m1}u_1 + a_{m2}u_2 + \dots + a_{mn}u_n &= w_m. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Это система  $m$  уравнений с  $n$  неизвестными  $u_1, u_2, \dots, \dots, u_n$ . Ее удобно записать<sup>1)</sup> в виде произведения матрицы  $\mathbf{A}$  с элементами  $a_{ij}$  на вектор-столбец  $\mathbf{u}$  с неизвестными элементами  $u_j$ :

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{w}, \quad (4.2)$$

или

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

В общем виде матрица  $\mathbf{A}$  имеет  $m$  строк и  $n$  столбцов, но если число строк равно числу столбцов ( $m = n$ ), то мы можем получить решение

$$\mathbf{u} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{w}, \quad (4.4)$$

где  $\mathbf{A}^{-1}$  — матрица, обратная матрице  $\mathbf{A}$ . В матричной алгебре обратная матрица определяется обычными методами, например с помощью правила Крамера:

$$(\mathbf{A}^{-1})_{ij} = (-1)^{i+j} \frac{A^{ji}}{\det \mathbf{A}}, \quad (4.5)$$

<sup>1)</sup> Предполагается, что читатель знаком с основами матричной алгебры (см., например, работу [13]).

где  $\det \mathbf{A}$  — определитель матрицы  $\mathbf{A}$ , а  $A^{ji}$  — определитель матрицы  $n-1$  порядка, полученный вычеркиванием  $i$  строки и  $j$  столбца из матрицы  $\mathbf{A}$ . Определитель матрицы можно вычислить с помощью соотношения

$$\det \mathbf{A} = \sum_{j=1}^n (-1)^{i+j} A^{ij} a_{ij}. \quad (4.6)$$

Простое рассмотрение этого общепринятого алгоритма показывает, что его осуществление требует очень большого числа арифметических операций. Например, для вычисления определителя только одной матрицы порядка  $n$  необходимо выполнить  $n!$  умножений [соотношение (4.6)]. Между тем мы имеем дело с довольно большими матрицами, для которых порядок  $n$  не менее 100, а может достигать и величины порядка 100 000. Очевидно, что для решения таких задач не может быть и речи о непосредственном применении правила Крамера. В таких случаях требуются алгоритмы более быстрые и, конечно, более эффективные, чем, например, правило Крамера.

Очевидно, что матричные уравнения возникают в вычислительной физике независимо от конечно-разностного исчисления: примером может служить описание движения ионов в классической решетке. Обычно мы имеем дело с общим матричным уравнением, в котором элементы матрицы произвольны и для решения которого имеется множество прямых алгоритмов (см. гл. 4, § 5). Однако матрицы, которые возникают в конечно-разностном исчислении, имеют специальные свойства, и важно эти свойства тщательно учесть. Основное свойство таких матриц заключается в том, что, хотя они и имеют очень большой порядок, они сильно «разрежены» в том смысле, что лишь немногие элементы матриц отличны от нуля. Это свойство является следствием физической природы задач, так как близкие точки, как правило, тесно связаны, в то время как пространственно разделенные точки связаны слабо. Указанное свойство разреженности является общим для матриц, возникающих в задачах любой пространственной размерности. Одномерный случай, кроме того, порождает матрицы, обладающие

дополнительным свойством *трехдиагональности*, т. е. матрицы, в которых отличные от нуля элементы расположены на трех главных диагоналях. Эти специальные свойства матриц — большое количество нулевых элементов, трехдиагональность или постоянное значение всех элементов на диагоналях — допускают применение специальных алгоритмов, с помощью которых решения можно найти ценой минимальных затрат (см. гл. 4, § 3, 4).

В частности, именно разреженность многих матриц приводит к возможности эффективного использования итерационных методов, часто описываемых как методы, в которых полученное приближенное решение используется для последовательного улучшения решений (см. гл. 4, § 6). Аналогичный подход можно использовать для отыскания собственных векторов и собственных значений разреженных матриц (гл. 4, § 7).

Численная матричная алгебра и вообще численная линейная алгебра имеют многочисленные приложения, которые в настоящее время быстро расширяются. В одной главе невозможно осветить все эти вопросы, но интересующийся ими читатель может найти подробное обсуждение в работах [5, 14—17]. В данной главе мы ограничимся лишь теми методами, которые необходимы для решения задач вычислительной механики.

## § 2. Матричные уравнения в конечно-разностном исчислении

Многие из используемых в матричной алгебре экономичных численных методов эффективны потому, что они учитывают специальные свойства частных и обычно встречающихся матриц. Для иллюстрации этих свойств рассмотрим вид матриц, возникающих в конечно-разностном исчислении, и, в частности, покажем, что вид таких матриц зависит от пространственной размерности формулируемой задачи.

### 1. Краевые задачи

В качестве простого, но важного примера матричного уравнения, характерного для разностного исчисления, рассмотрим решение одномерного уравнения

Пуассона

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\rho, \quad (4.7)$$

где  $\rho(x)$  — известная функция источников, а  $\Phi(x)$  — неизвестный потенциал. На равномерной разностной сетке (с шагом  $\Delta$ )  $1 \leq j \leq J$  функция  $\rho(x)$  заменяется вектором с координатами  $\rho_j$ , заданным в точках  $x_j$ , а дифференциальный оператор  $d^2/dx^2$  мы, как и выше (гл. 2, § 3), аппроксимируем разностным оператором  $\Delta_x''$  (2.27). Дифференциальное уравнение (4.7) теперь аппроксимируется в каждом внутреннем узле  $j$  разностной сетки уравнением

$$\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1} = -\Delta^2\rho_j. \quad (4.8)$$

Допустим, что в крайних точках значения потенциала заданы  $\Phi_1 = w_1$  и  $\Phi_J = w_J$ , тогда уравнение (4.8) можно записать в виде системы линейных уравнений:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= w_1, \\ \Phi_1 - 2\Phi_2 + \Phi_3 &= -\Delta^2\rho_2, \\ \Phi_2 - 2\Phi_3 + \Phi_4 &= -\Delta^2\rho_3, \\ &\dots \\ \Phi_{J-2} - 2\Phi_{J-1} + \Phi_J &= -\Delta^2\rho_{J-1}, \\ \Phi_J &= w_J. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Неизвестные значения  $\Phi_j$  для всех  $j$  можно представить в виде вектора  $\Phi$ , а правая часть системы (4.9) определяется известным вектором  $w$ . Теперь требуется решить уравнение

$$A\Phi = w, \quad (4.10)$$

где матрица  $A$  имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Матрица  $\mathbf{A}$  содержит ненулевые элементы только на трех центральных диагоналях и называется *трехдиагональной*. Если мы, взяв  $J$  очень большим, выберем разностную сетку с высоким разрешением (характерная величина  $J = 10\,000$ ), матрица  $\mathbf{A}$  будет состоять из большого числа элементов, но ее можно назвать *разреженной*, так как лишь небольшая часть ее элементов отлична от нуля. Кроме того, следует отметить, что в частном случае уравнения Пуассона элементы вдоль каждой диагонали имеют постоянное значение.

В общем случае трехдиагональные матрицы возникают при рассмотрении пространственно-одномерных задач. Сформулируем общую одномерную краевую задачу:

$$f \frac{d^2 u}{dx^2} + g \frac{du}{dx} + hu = w, \quad (4.12)$$

где  $f(x)$ ,  $g(x)$ ,  $h(x)$  и  $w(x)$  — известные функции переменной  $x$  и требуется найти неизвестную функцию  $u(x)$ . Опять аппроксимируем уравнение (гл. 2, § 3) на равномерной сетке  $1 \leq j \leq J$ :

$$\frac{f_j}{\Delta^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + \frac{g_j}{2\Delta} (u_{j+1} - u_{j-1}) + h_j u_j = w_j,$$

что можно переписать в виде

$$\alpha_j u_{j+1} + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = w_j, \quad (4.13)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_j &= \frac{f_j}{\Delta^2} + \frac{g_j}{2\Delta}, \\ \beta_j &= h_j - \frac{2f_j}{\Delta^2}, \\ \gamma_j &= \frac{f_j}{\Delta^2} - \frac{g_j}{2\Delta}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Уравнения (4.13) относятся ко всем внутренним точкам области  $1 < j < J$ , а граничные условия накладываются в краевых точках  $x_1$  и  $x_J$ . Общие граничные условия можно записать в дифференциальной форме:

$$\begin{aligned} \left( a \frac{du}{dx} + bu \right) \Big|_{x=x_1} &= c, \\ \left( a' \frac{du}{dx} + b'u \right) \Big|_{x=x_J} &= c', \end{aligned} \quad (4.15)$$

где  $a, b, c, a', b', c'$  — заданные числа. Если  $a = 0$ , то в краевой точке задано значение неизвестной функции  $u$ , а если  $b = 0$ , то задано значение ее производной. Общие граничные условия (4.15) можно записать в разностной форме следующим образом:

$$\begin{aligned} au_2 + (b\Delta - a)u_1 &= c\Delta, \\ -a'u_{j-1} + (b'\Delta + a')u_j &= c'\Delta, \end{aligned} \quad (4.16)$$

или

$$\begin{aligned} \alpha_1 u_2 + \beta_1 u_1 &= \omega_1, \\ \gamma_j u_{j-1} + \beta_j u_j &= \omega_j, \end{aligned} \quad (4.17)$$

где  $\alpha_1, \beta_1, \omega_1, \gamma_j, \beta_j$  и  $\omega_j$  определяются, как и в (4.16), видом граничных условий.

Таким образом, мы опять перешли от общего дифференциального уравнения (4.12) к системе линейных уравнений (4.13), (4.17). Матрица  $A$  теперь имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} \beta_1 & \alpha_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \gamma_2 & \beta_2 & \alpha_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \gamma_3 & \beta_3 & \alpha_3 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & & \dots & & 0 \\ & & & & \dots & \\ & & & & & \dots \\ & & & & \dots & \gamma_j & \beta_j \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

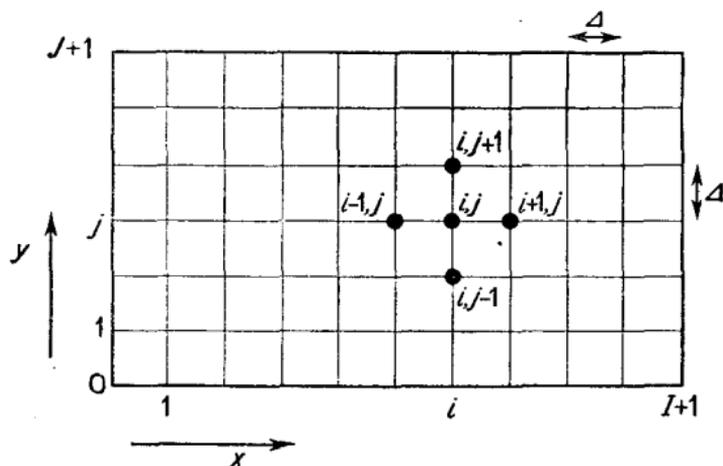
и опять трехдиагональна, но уже с переменными ненулевыми элементами.

Если рассматривать двумерную краевую задачу, то матрица и в этом случае окажется *разреженной*, но уже не будет просто трехдиагональной. В качестве примера запишем двумерное уравнение Пуассона в декартовых координатах:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\rho. \quad (4.19)$$

Если требуется найти решение этого уравнения, например, в прямоугольной области  $R$ ,  $0 \leq x \leq X$ ,  $0 \leq y \leq Y$ , то в этой области можно ввести двумерную сетку

(фиг. 4.1). Оператор  $\partial^2/\partial x^2$  мы аппроксимируем оператором  $\Delta_x''$ , а оператор  $\partial^2/\partial y^2$  — оператором  $\Delta_y''$  (см. гл. 2, § 3). Пусть в каждом узле сетки  $(i, j)$  определена функция  $\rho_{i,j}$  и мы ищем во всех узлах  $(i, j)$  потенциал  $\Phi_{i,j}$ .



Фиг. 4.1. Пятиточечная разностная аппроксимация двумерного уравнения Пуассона.

который, как следует из уравнения (4.19), удовлетворяет уравнению

$$(\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}) = -\Delta^2 \rho_{i,j}$$

или

$$(\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1}) - 4\Phi_{i,j} = -\Delta^2 \rho_{i,j} \quad (4.20)$$

в каждом узле сетки. Теперь полезно все неизвестные величины  $\Phi_{i,j}$  заменить одноиндексными элементами вектора  $\mathbf{u}$  размерности  $IJ$ :

$$u_k = u_{iJ+j} = \Phi_{i,j} \quad (4.21)$$

и аналогично  $\rho_{i,j}$  заменим вектором  $\mathbf{w}$ :

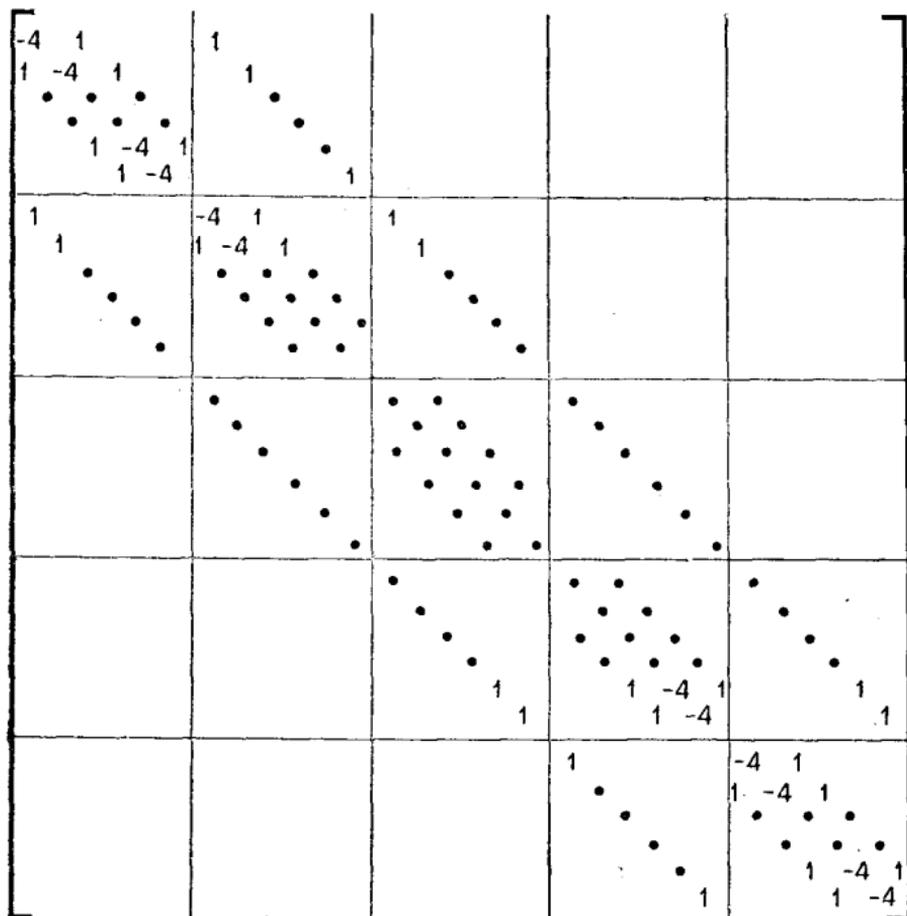
$$w_k = w_{iJ+j} = -\Delta^2 \rho_{i,j}. \quad (4.22)$$

Элементы вектора  $\mathbf{u}$  можно получить как решения системы уравнений (4.20), и, следовательно, вектор  $\mathbf{u}$

удовлетворяет матричному уравнению

$$Au = w,$$

где матрица  $A$  имеет вид, показанный на фиг. 4.2.



Фиг. 4.2. Матрица пятиточечной разностной аппроксимации двумерного уравнения Пуассона.

Каждый трехдиагональный блок описывает связи вдоль некоторого столбца разностной сетки, а соответствующие единичные блоки—вдоль строки сетки, или наоборот. Матрица является разреженной.

Из рассмотрения этой двумерной задачи ясно, что свойство трехдиагональности матрицы утрачено, но в то же время матрица остается разреженной с очень небольшим числом ненулевых элементов. Матрица двумерной задачи имеет пятидиагональный вид, как

показано на фиг. 4.2, хотя эти пять диагоналей с конечными элементами не являются основными. Следует отметить, что так как взаимосвязь двух измерений значительно усложняет явление, то и отыскание решения оказывается более трудным. Рассматриваемую матрицу полезно разбить на блоки, соответствующие различным столбцам двумерной разностной сетки. В частном случае уравнения Пуассона существенно, что элементы каждой диагонали постоянны, и это свойство эффективно используется при решении (см. гл. 4, § 5). В противоположность этому общее двумерное эллиптическое уравнение, как и в случае одного измерения, приводит к матрице, ненулевые элементы которой изменяются от одного узла сетки к другому.

Обобщение граничной задачи на случай трех и более «пространственных» измерений не представляет труда, и вид возникающих при этом матриц достаточно очевиден.

## 2. Неявная аппроксимация задач с начальными условиями

Большие системы алгебраических уравнений появляются, когда задача с начальными условиями в непрерывной среде интегрируется по неявной временной схеме [уравнение (2.46)]. И здесь мы опять приходим к разреженным матрицам, свойства которых вполне аналогичны свойствам матриц краевых задач.

Для того чтобы проиллюстрировать это утверждение, снова рассмотрим уравнения, которые возникают при неявной аппроксимации уравнения диффузии по методу Кранка — Никольсона (гл. 3, § 9). Значения функции  $u_j^{n+1}$  в узлах  $j$  пространственной сетки на новом шаге по времени  $n+1$  оказываются связанными уравнением (3.113):

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + \\ + \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n),$$

или, обозначая  $\alpha = \kappa \Delta t / 2\Delta^2$ ,

$$\begin{aligned} -\alpha u_{j+1}^{n+1} + (1 + 2\alpha) u_j^{n+1} - \alpha u_{j-1}^{n+1} &= \\ &= u_j^n + \alpha (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) = \omega_j^n. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Правые части этой системы уравнений образуют известный вектор  $\mathbf{w}^n$ , и на каждом шаге по времени требуется решить матричное уравнение для искомым величин  $u_j^{n+1}$ , образующих вектор  $\mathbf{u}^{n+1}$ . Так как здесь рассматривается задача с одним пространственным измерением, матрица системы опять имеет трехдиагональную форму.

Аналогично неявные схемы для многомерных задач приводят к разреженным матрицам, и та же ситуация возникает обычно при использовании неявного метода решения гиперболических уравнений. Так как эти матричные уравнения приходится решать на каждом шаге по времени и поскольку обычно размерность вектора на пространственной сетке велика, нужно использовать экономичные методы решения уравнений, что позволяет избежать неприемлемо долгих вычислений.

### § 3. Матрицы специального вида: метод прогонки для уравнения с трехдиагональной матрицей

Принимая во внимание важность одномерной задачи и, следовательно, распространенность трехдиагональных матричных уравнений, рассмотрим метод решения таких уравнений более подробно. Оказывается, существуют простые и чрезвычайно быстродействующие алгоритмы для решения трехдиагональных матричных уравнений, и мы обсудим этот метод решения как с алгебраической, так и с матричной точек зрения.

#### 1. Алгебраический подход

Общая одномерная задача была поставлена в § 2 и записана в следующем виде:

$$\alpha_j u_{j+1} + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = \omega_j \quad (4.24)$$

в области  $1 < j < J$  с дополнительными граничными условиями (4.17). Требуется найти неизвестные значения  $u_j$ . Будем искать решение в рекуррентной форме так, чтобы, зная значение  $u_j$  в точке  $j$ , мы могли получить значение  $u_{j+1}$  в точке  $j+1$ . А именно найдем вспомогательные неизвестные  $x_j$  и  $y_j$ , такие, что

$$u_{j+1} = x_j u_j + y_j. \quad (4.25)$$

Если такой алгоритм непротиворечив, то как определить переменные  $x_j$  и  $y_j$ ? Очевидно, что если формула (4.25) справедлива в точке  $j$ , то в силу непротиворечивости она должна быть справедлива и в любой другой точке  $j'$ . В частности, подставив выражение для  $u_{j+1}$  (4.25) в исходное уравнение (4.24), можно показать, что эта формула справедлива и в точке  $j-1$ :

$$\alpha_j (x_j u_j + y_j) + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = \omega_j,$$

или

$$u_j = \frac{-\gamma_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} u_{j-1} + \frac{\omega_j - \alpha_j y_j}{\alpha_j x_j + \beta_j}. \quad (4.26)$$

Ясно, что это уравнение имеет точно ту же самую форму, что и рекуррентное соотношение (4.25), связывающее точки  $j$  и  $j+1$ , т. е.

$$u_j = x_{j-1} u_{j-1} + y_{j-1}. \quad (4.27)$$

Поскольку граничные условия в крайних точках (4.17) введены тем же соотношением, то по индукции можно утверждать, что рекурсивная связь справедлива в любой точке  $j$ . Такая связь должна иметь место для произвольного вектора  $\mathbf{u}$ , поэтому нужно приравнять слагаемые в (4.26) и (4.27) почленно:

$$x_{j-1} = \frac{-\gamma_j}{\alpha_j x_j + \beta_j}, \quad y_{j-1} = \frac{\omega_j - \alpha_j y_j}{\alpha_j x_j + \beta_j}. \quad (4.28)$$

Эти соотношения и дают все искомые значения  $x_j$  и  $y_j$ , и, таким образом, уравнения (4.25) и (4.28) задают двойную рекурсивную процедуру решения трехдиагональной системы уравнений. С помощью уравнения (4.28) сетка проходится *вниз* по  $j$  начиная от точки  $J$  до точки  $j=1$ , при этом последовательно опреде-

ляются все значения  $x_j$  и  $y_j$  на сетке (прямая прогонка). Определив все  $x_j$  и  $y_j$ , проходим сетку *вверх* от  $j = 1$  до  $j = J$  и последовательно находим значения  $u_j$  из уравнения (4.25) (обратная прогонка). Граничное значение в точке  $j = J$  определяет начальные значения  $x_{J-1}$  и  $y_{J-1}$ , а граничное условие в  $j = 1$  определяет первое значение  $u_1$ . В частности, сравним граничные условия (4.16), (4.17) в точке  $J$  с общим рекуррентным соотношением (4.25):

$$\begin{aligned} x_{J-1} &= \frac{-\gamma_J}{\beta_J} = \frac{a'}{b'\Delta + a'}, \\ y_{J-1} &= \frac{\omega_J}{\beta_J} = \frac{c'\Delta}{b'\Delta + a'}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Особенно распространены два частных случая граничных условий. Первый из них — это случай явного задания функции  $u$  на границе ( $a' = 0$ ), так что  $x_{J-1} = 0$  и  $y_{J-1} = u_J$ , и второй — производная на границе равна нулю ( $b' = 0$ ), так что  $x_{J-1} = 1$ ,  $y_{J-1} = 0$ .

Определив все значения  $x_j$  и  $y_j$  для всех  $j$  вплоть до  $x_1$  и  $y_1$ , решаем рекуррентное уравнение (4.25) совместно с граничным условием и находим первое значение искомой функции  $u_1$

$$u_1 = \frac{\omega_1 - \alpha_1 y_1}{\beta_1 + \alpha_1 x_1} = \frac{-c\Delta + ay_1}{a - b\Delta - ax_1}. \quad (4.30)$$

Теперь можно определить оставшиеся значения функции  $u_j$ .

Для иллюстрации метода решим простейший вариант уравнения Пуассона на небольшой восьмиточечной сетке. Разностная аппроксимация уравнения Пуассона имеет вид

$$\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1} = m_j \quad \text{при } 1 < j < J; \quad (4.31)$$

распределение источников мы выберем в виде

$$\mathbf{m} = (0, 0, 2, 0, 1, 0, 0, 0),$$

а граничные условия

$$\Phi = 0, \quad \text{если } j = 1, \quad \text{и } \Phi = 0, \quad \text{если } j = J.$$

Тогда исходные значения  $x_{J-1}$  и  $y_{J-1}$  равны

$$x_7 = 0, \quad y_7 = 0.$$

Численный расчет и результаты содержатся в табл. 4.1.

Таблица 4.1

**Пример решения трехдиагонального матричного уравнения методом прогонки**

(Ищем решение уравнения  $\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1} = m_j$  с граничными условиями  $\Phi_1 = 0$  и  $\Phi_J = 0$  при  $J = 8$ )

Распределение источников $m_j$	Первая прогонка		Решение $\Phi_j$
	$x_j$	$y_j$	
$m_8 = 0$			$\Phi_1 = 0,000$
$m_7 = 0$	$x_7 = 0$	$y_7 = 0,000$	$\Phi_2 = 1,860$
$m_6 = 0$	$x_6 = 0,5$	$y_6 = 0,000$	$\Phi_3 = 3,716$
$m_5 = 1$	$x_5 = 0,667$	$y_5 = 0,000$	$\Phi_4 = 3,569$
$m_4 = 0$	$x_4 = 0,750$	$y_4 = 0,750$	$\Phi_5 = 3,429$
$m_3 = 2$	$x_3 = 0,800$	$y_3 = 0,600$	$\Phi_6 = 2,283$
$m_2 = 0$	$x_2 = 0,833$	$y_2 = 2,167$	$\Phi_7 = 1,142$
$m_1 = 0$	$x_1 = 0,857$	$y_1 = 1,860$	$\Phi_8 = 0,0$

В первом столбце перечислены значения заданного распределения источников. Во втором и третьем столбцах приведены результаты первой прогонки по формулам  $x_{j-1} = y_j / (a_j x_j + \beta_j)$  и  $y_{j-1} = (\omega_j - a_j y_j) / (a_j x_j + \beta_j)$  соответственно; значения  $x_j$  и  $y_j$  определяются по «правому» граничному условию. В четвертом столбце приведены значения  $\Phi_{j+1} = x_j \Phi_j + y_j$ ;  $\Phi_1$  определяется по «левому» граничному условию.

## 2. Матричный подход

Для того чтобы полнее описать и проиллюстрировать метод решения системы уравнений с трехдиагональной матрицей, рассмотрим этот метод с матричной точки зрения. Пусть задан вектор  $\mathbf{w}$  и требуется определить вектор  $\mathbf{u}$ , удовлетворяющий матричному уравнению

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{w}$$

с трехдиагональной матрицей  $\mathbf{A}$ . Полезно ввести матричные операторы сдвига  $\mathbf{L}_+$  и  $\mathbf{L}_-$ , такие, что для каждой компоненты вектора  $\mathbf{u}$

$$\mathbf{L}_+ \{u_j\} = \{u_{j+1}\}, \quad (4.32)$$

$$\mathbf{L}_- \{u_j\} = \{u_{j-1}\}. \quad (4.33)$$

Так как матрица  $\mathbf{A}$  трехдиагональна, матричное уравнение можно переписать в виде

$$(\mathbf{P}\mathbf{L}_+ + \mathbf{Q} + \mathbf{R}\mathbf{L}_-) \mathbf{u} = \mathbf{w}, \quad (4.34)$$

где  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$  и  $\mathbf{R}$  — диагональные матрицы.

Уравнение (4.34) задает двойную рекурсию, которую удобно разбить на две стадии, определив диагональную матрицу  $\mathbf{X}$  и вектор  $\mathbf{y}$  с помощью соотношения

$$\mathbf{L}_+ \mathbf{u} = \mathbf{X}\mathbf{u} + \mathbf{y}. \quad (4.35)$$

Умножив соотношение (4.35) на диагональную матрицу  $\mathbf{P}$ , перепишем его в виде

$$(\mathbf{P}\mathbf{L}_+ - \mathbf{P}\mathbf{X} + \mathbf{0}) \mathbf{u} = \mathbf{P}\mathbf{y}, \quad (4.36)$$

где  $\mathbf{0}$  — нулевая матрица. Вычтем уравнение (4.36) из уравнения (4.34)

$$(\mathbf{Q} + \mathbf{P}\mathbf{X}) \mathbf{u} = -\mathbf{R}\mathbf{L}_- \mathbf{u} + \mathbf{w} - \mathbf{P}\mathbf{y}, \quad (4.37)$$

$$\mathbf{u} = -(\mathbf{Q} + \mathbf{P}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{R}\mathbf{L}_- \mathbf{u} + (\mathbf{Q} + \mathbf{P}\mathbf{X})^{-1} (\mathbf{w} - \mathbf{P}\mathbf{y}). \quad (4.38)$$

Последнее уравнение совпадает по форме с (4.35). Для того чтобы оно было совместно с рассматриваемой задачей (4.34), необходимо, чтобы уравнения (4.38) и (4.35) были идентичны, следовательно, можно записать почленное равенство

$$\mathbf{L}_- \mathbf{X} = -(\mathbf{Q} + \mathbf{P}\mathbf{X})^{-1} \mathbf{R},$$

$$\mathbf{L}_- \mathbf{y} = (\mathbf{Q} + \mathbf{P}\mathbf{X})^{-1} (\mathbf{w} - \mathbf{P}\mathbf{y}). \quad (4.39)$$

Уравнения (4.35) и (4.39) образуют двухшаговую рекурсивную процедуру. Эти результаты можно сопоставить с результатами, полученными с помощью скалярного подхода, так как  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{R}$  и  $\mathbf{X}$  по определению являются диагональными матрицами, на диагоналях которых в каждом столбце  $j$  стоят элементы  $\alpha_j$ ,  $\beta_j$ ,  $\gamma_j$

и  $x_j$  соответственно. Очевидно, что матричный результат совпадает с алгебраическими уравнениями (4.25) и (4.28).

Следует отметить, что процедура обращения трехдиагональной матрицы чрезвычайно проста и экономична, поскольку для решения системы с трехдиагональной матрицей порядка  $n \times n$ , действующей на вектор размерности  $n$ , необходимо всего  $9n$  арифметических операций.

#### § 4. Матрицы специального вида: «точное» решение уравнения Пуассона

Уравнение Пуассона настолько широко распространено в физике, что его решению всегда уделялось особое внимание. Вообще решение эллиптических уравнений в двух или более пространственных измерениях и соответствующих им матричных уравнений представляет определенные трудности и требует значительного времени, однако свойство симметрии уравнения Пуассона допускает применение ряда быстродействующих методов, непригодных для решения общей задачи. Симметрия уравнения Пуассона является результатом симметрии оператора Лапласа, который можно записать как сумму коммутирующих операторов. Например, в случае двух пространственных измерений оператор Лапласа имеет вид

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

где

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] = 0. \quad (4.40)$$

Отсюда следует, что собственные функции многомерного оператора Лапласа можно записать в виде произведения отдельных собственных функций одномерного оператора Лапласа по каждому пространственному измерению. Следовательно, решение многомерного уравнения Пуассона всегда можно свести к отдельному решению ряда одномерных задач. Это же в равной степени справедливо и для матричного уравнения, получен-

ного конечно-разностной аппроксимацией уравнения Пуассона. Собственные функции относительно каждого измерения являются просто гармоническими функциями, или фурье-модами, а выбор каждой из них определяется граничными условиями рассматриваемой задачи.

Здесь достаточно рассмотреть двумерное уравнение Пуассона, конечно-разностная форма которого была записана выше [см. § 2, уравнение (4.20), фиг. 4.2]. Разработаны три подхода, дающих быстрое решение матричного уравнения. В простейшем из них полное матричное уравнение диагонализуется с помощью методов фурье-анализа относительно каждого пространственного измерения [18]. Метод Хокни [19] в своей простейшей форме применяет преобразование Фурье только по одной пространственной координате, в результате относительно другой координаты остаются несвязанные трехдиагональные матричные уравнения, которые легко решить. И, наконец, относительно каждого пространственного измерения можно использовать метод циклической редукции [20] или прогонки.

Эти методы решения уравнения Пуассона являются точными не в том смысле, что конечно-разностная аппроксимация дифференциального уравнения не вносит ошибок, а в том смысле, что они обеспечивают прямое определение точного решения конечного матричного уравнения.

### 1. Кратное преобразование Фурье

Рассмотрим пятиточечную разностную аппроксимацию уравнения Пуассона в двумерной декартовой системе координат (4.20):

$$(\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}) = -\Delta^2 \rho_{i,j}$$

при

$$0 < i < I \quad \text{и} \quad 0 < j < J, \quad (4.41)$$

где  $\rho_{ij}$  и  $\Phi_{ij}$  — заданное распределение источников и неизвестный потенциал соответственно. Обозначим

пятиточечный оператор в левой части символом  $P_1$

$$P\Phi_{i,j} = (\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + \\ + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}). \quad (4.42)$$

Сначала без рассмотрения граничных условий мы в качестве примера покажем, что двойная фурье-гармоника

$$s_{ij}(k, l) = \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \sin \frac{\pi l l}{I} \quad (4.43)$$

при целых  $k$  и  $l$  является собственным вектором оператора  $P$ :

$$Ps_{ij}(k, l) = \\ = \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \left\{ \sin \frac{\pi l (i+1)}{I} - 2 \sin \frac{\pi l i}{I} + \sin \frac{\pi l (i-1)}{I} \right\} + \\ + \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I} \left\{ \sin \frac{\pi k (j+1)}{J} - 2 \sin \frac{\pi k j}{J} + \sin \frac{\pi k (j-1)}{J} \right\} = \\ = \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \left\{ 2 \cos \frac{\pi l}{I} \sin \frac{\pi l i}{I} - 2 \sin \frac{\pi l i}{I} \right\} + \\ + \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I} \left\{ 2 \cos \frac{\pi k}{J} \sin \frac{\pi k j}{J} - 2 \sin \frac{\pi k j}{J} \right\}. \quad (4.44)$$

Последнее равенство в (4.44) получено с использованием формулы для суммы двух синусов. Преобразуя правую часть, получаем

$$Ps_{ij}(k, l) = \\ = \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \sin \frac{\pi l i}{I} \left\{ 2 \cos \frac{\pi l}{I} + 2 \cos \frac{\pi k}{J} - 4 \right\} = \\ = \alpha_{kl} s_{ij}(k, l). \quad (4.45)$$

Это и есть уравнение для собственных векторов, причем собственному вектору  $s_{ij}(k, l)$  (4.43) отвечает собственное значение

$$\alpha_{kl} = 2 \cos \frac{\pi l}{I} + 2 \cos \frac{\pi k}{J} - 4, \quad (4.46)$$

Таким образом, мы можем решать уравнение Пуассона (4.41) отдельно для каждого собственного вектора оператора  $P_1$ .

Поэтому метод двойного преобразования Фурье для решения уравнения Пуассона содержит пять шагов. Сначала заданное распределение источников  $\rho_{ij}$  раскладывается в ряд Фурье по одной из координат — вдоль каждого столбца разностной сетки  $i$ .

Для всех  $k$ , таких, что  $0 < k < J$ ,

$$\hat{\rho}_i(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^J \rho_{i,j} \sin \frac{\pi k j}{J}, \quad (4.47)$$

и каждая гармоника Фурье имеет длину волны  $2J\Delta/k$ . Затем можно провести аналогичное разложение в ряд по другой координате.

Для всех  $l$ , таких, что  $0 < l < I$ ,

$$\hat{\rho}(k, l) = \frac{2}{I} \sum_{i=1}^I \hat{\rho}_i \sin \frac{\pi l i}{I}. \quad (4.48)$$

Теперь, зная собственные значения (4.46), можно отдельно определить амплитуду каждой фурье-гармоники потенциала

$$\hat{\Phi}(k, l) = \frac{\hat{\rho}(k, l) \Delta^2}{4 - 2 \cos(\pi k/J) - 2 \cos(\pi l/I)}. \quad (4.49)$$

И, наконец, по каждой из координат выполняется суммирование ряда Фурье.

Для всех  $i$ , таких, что  $0 < i < I$ ,

$$\hat{\Phi}_i(k) = \sum_{l=1}^I \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I}. \quad (4.50)$$

Для всех  $j$ , таких, что  $0 < j < J$ ,

$$\Phi_{ij} = \sum_{k=1}^J \hat{\Phi}_i(k) \sin \frac{\pi k j}{J}. \quad (4.51)$$

Так выглядит общая процедура, но нам в соответствии с граничными условиями нужно выбрать лишь частные гармоники. Так, например, разложение в ряд Фурье по синусам (4.47) и (4.51) используется, если потенциал задан на границе нулем или постоянной. Если

потенциал имеет на границе равную нулю производную, используется разложение в ряд по косинусам:

$$\Phi_j = \frac{1}{2} \hat{\Phi}(0) + \sum_{k=1}^{J-1} \hat{\Phi}(k) \cos \frac{\pi k j}{J}, \quad (4.52)$$

где

$$\hat{\Phi}(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \cos \frac{\pi k j}{J}. \quad (4.53)$$

При периодических граничных условиях нужно использовать полные ряды Фурье, содержащие как синусы, так и косинусы (табл. 4.2):

$$\Phi_j = \frac{1}{2} \hat{\Phi}^c(0) + \sum_{k=1}^{J/2-1} \hat{\Phi}^c(k) \cos \frac{2\pi k j}{J} + \hat{\Phi}^s(k) \sin \frac{2\pi k j}{J}, \quad (4.54)$$

где

$$\hat{\Phi}^c(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \cos \frac{2\pi k j}{J},$$

$$\hat{\Phi}^s(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \sin \frac{2\pi k j}{J}. \quad (4.55)$$

В последнем случае собственные значения двумерного уравнения Пуассона равны

$$\alpha_{kl} = 2 \cos \frac{2\pi k}{J} + 2 \cos \frac{2\pi l}{J} - 4. \quad (4.56)$$

В заключение следует подчеркнуть, что при использовании рассматриваемого метода удастся избежать численного вычисления синусов и косинусов с помощью методики быстрого преобразования Фурье, в которой значения гармонических функций образуются простыми рекуррентными соотношениями [19, 21]. Полное число арифметических операций, необходимых для решения уравнения Пуассона на двумерной сетке ( $I \times J$  точек), составляет примерно  $4IJ(I+J)$ .

Собственные функции (гармоники Фурье) трехдиагональной матрицы с элементами (1, —4, 1)

$j$  — пространственная точка  $0 \leq j \leq J$ ;

$k$  — целое волновое число  $0 \leq k \leq J$ .

Граничные условия  
 $\frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0$  при  $j=0, j=J$

Периодические граничные условия  
 $\Phi_0 = \Phi_J$

$$1. \text{ Ряд Фурье} \quad \Phi_j = \sum_{k=1}^{J-1} \hat{\Phi}_k \sin \frac{\pi k j}{J} \quad \Phi_j = \frac{1}{2} \hat{\Phi}_0 + \sum_{k=1}^{J-1} \hat{\Phi}_k \cos \frac{\pi k j}{J} \quad \Phi_j = \frac{1}{2} \hat{\Phi}_0 + \sum_{k=1}^{J/2-1} \hat{\Phi}_k^c \cos \frac{2\pi k j}{J} + \hat{\Phi}_k^s \sin \frac{2\pi k j}{J}$$

$$2. \text{ Гармоники Фурье} \quad \hat{\Phi}_k = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^J \Phi_j \sin \frac{\pi k j}{J} \quad \hat{\Phi}_k = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \cos \frac{\pi k j}{J}$$

$$\hat{\Phi}_k^c = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \cos \frac{2\pi k j}{J}$$

$$\hat{\Phi}_k^s = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \sin \frac{2\pi k j}{J}$$

$$3. \text{ Собственные значения для функции с волновым числом } k \quad -2 + 2 \cos \frac{\pi k}{J} \quad -2 + 2 \cos \frac{\pi k}{J} \quad -2 + 2 \cos \frac{2\pi k}{J}$$

## 2. Преобразование Фурье и циклическая редукция

Чрезвычайно быстрый и широко применяемый метод решения двумерного уравнения Пуассона состоит в выполнении разложения Фурье только по одной пространственной координате, например вдоль столбцов сетки  $0 < j < J$ . В результате задача сводится к набору  $J - 1$  трехдиагональных матричных уравнений, которые связывают значения переменных вдоль строк  $0 \leq i \leq I$  и каждое из которых можно решать независимо от остальных [19].

Мы рассмотрим уравнения в двумерной декартовой системе координат (4.41), хотя данный метод в равной степени применим и при использовании цилиндрических координат. В качестве примера выберем граничные условия, задающие постоянный потенциал на концах каждого столбца (допустим,  $\Phi_{i0} = \Phi_{iJ} = 0$  для всех  $i$ ). В этом случае потенциал и распределение источников можно разложить в ряды Фурье по синусам (табл. 4.2):

$$\Phi_{ij} = \sum_{k=1}^J \hat{\Phi}_i(k) \sin \frac{\pi k j}{J}, \quad \rho_{ij} = \sum_{k=1}^J \hat{\rho}_i(k) \sin \frac{\pi k j}{J}. \quad (4.57)$$

Подставив эти выражения в пятиточечное разностное уравнение Пуассона (4.41), получим уравнение

$$\sum_{k=1}^J \left\{ [\hat{\Phi}_{i+1}(k) - 2\hat{\Phi}_i(k) + \hat{\Phi}_{i-1}(k)] \sin \frac{\pi k j}{J} + \right. \\ \left. + [2 \cos \frac{\pi k}{J} - 2] \hat{\Phi}_i(k) \sin \frac{\pi k j}{J} + \Delta^2 \hat{\rho}_i(k) \sin \frac{\pi k j}{J} \right\} = 0, \quad (4.58)$$

которое должно быть справедливо в каждой точке  $j$ . Следовательно, в этих уравнениях можно отдельно приравнять нулю амплитуду каждой гармонике Фурье, что для каждого «волнового числа»  $k$  дает

$$\hat{\Phi}_{i+1}(k) - \left(4 - 2 \cos \frac{\pi k}{J}\right) \hat{\Phi}_i(k) + \hat{\Phi}_{i-1}(k) = -\Delta^2 \hat{\rho}_i(k). \quad (4.59)$$

Таким образом, для каждой гармоники Фурье  $k$  получено трехдиагональное матричное уравнение относительно неизвестного вектора  $\{\hat{\Phi}_i(k)\}$ , а каждое трехдиагональное матричное уравнение в свою очередь можно решить одним из имеющихся методов (например, методом прогонки, см. гл. 4, § 3).

Следовательно, описанная процедура состоит в разложении распределения источников  $\rho_{ij}$  в ряд Фурье только по одной координате, что дает коэффициенты Фурье для всех значений  $i$

$$\hat{\rho}_i(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^J \rho_{ij} \sin \frac{\pi k j}{J}. \quad (4.60)$$

Теперь для каждого волнового числа получены трехдиагональные уравнения (4.59) с известной правой частью. Хокни [19] использовал для решения трехдиагональных уравнений метод циклической редукции, отличный от изложенного в § 3 метода прогонки. В трех соседних точках трехдиагональные уравнения (4.59) имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_{i+2}(k) - \left(4 - 2 \cos \frac{\pi k}{J}\right) \hat{\Phi}_{i+1}(k) + \hat{\Phi}_i(k) &= -\Delta^2 \hat{\rho}_{i+1}(k), \\ \hat{\Phi}_{i+1}(k) - \left(4 - 2 \cos \frac{\pi k}{J}\right) \hat{\Phi}_i(k) + \hat{\Phi}_{i-1}(k) &= -\Delta^2 \hat{\rho}_i(k), \\ \hat{\Phi}_i(k) - \left(4 - 2 \cos \frac{\pi k}{J}\right) \hat{\Phi}_{i-1}(k) + \hat{\Phi}_{i-2}(k) &= -\Delta^2 \hat{\rho}_{i-1}(k). \end{aligned} \quad (4.61)$$

Умножив второе из этих уравнений на  $(4 - 2 \cos \pi k/J)$  и сложив все три уравнения, исключим промежуточные значения

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_{i+2}(k) - \left[\left(4 - 2 \cos \frac{\pi k}{J}\right)^2 - 2\right] \hat{\Phi}_i(k) + \hat{\Phi}_{i-2}(k) &= \\ = -\Delta^2 \hat{\rho}_{i+1}(k) - \left(4 - 2 \cos \frac{\pi k}{J}\right) \Delta^2 \hat{\rho}_i(k) - \Delta^2 \hat{\rho}_{i-1}(k). \end{aligned} \quad (4.62)$$

Таким образом, трехдиагональная система  $I$  уравнений сведена к трехдиагональной системе  $1/2 I$  уравнений, которая в основном сохраняет прежнюю форму (4.59),

Эту процедуру можно подобным образом повторять до тех пор, пока значение потенциала в центральной точке  $1/2I$  не окажется выраженным через значения только в граничных точках  $i=0$  и  $i=I$ , в результате чего граничные условия определяют неизвестное значение в центральной точке. Обратная же процедура определяет сначала неизвестные значения в точках  $1/4I$  и  $3/4I$  и так далее, пока процесс не завершится отысканием всех значений на сетке.

Итак, после решения всех трехдиагональных уравнений получены значения  $\hat{\Phi}_i(k)$  для всех  $i$  и всех волновых чисел  $k$ . Потенциал в каждой узловой точке сетки  $(i, j)$  определяется суммой ряда Фурье для каждого столбца  $i$

$$\Phi_{ij} = \sum_{k=1}^J \hat{\Phi}_i(k) \sin \frac{\pi k j}{J}. \quad (4.63)$$

Этот метод, заключающийся в разложении Фурье по одной из независимых переменных и последующей циклической редукции (или прогонке) по другой переменной, является быстродействующим и требует выполнения примерно  $J \log_2 J$  операций. Его преимущество состоит еще и в том, что он применим в цилиндрической или более сложной геометрии, так как разложение Фурье проводится лишь в одном измерении. Метод допускает еще некоторое повышение экономичности, которое достигается путем выполнения одного уровня циклической редукции по строкам и исключения четных строк, прежде чем будет проведено разложение источников в ряд Фурье по строкам.

### 3. Двойная циклическая редукция

Можно вообще обойтись без разложения в ряд Фурье, если использовать свойство коммутации двух частей оператора Лапласа, отвечающих разным измерениям. Дело в том, что метод циклической редукции можно применять к векторной величине  $\{\Phi_{ij}\}$  для каждого ряда  $j$  [20]. Перепишем пятиточечную разностную

аппроксимацию уравнения Пуассона в виде

$$\{\Phi_i\}_{j+1} + \mathbf{A}^0 \{\Phi_i\}_j + \{\Phi_i\}_{j-1} = \{\tilde{\rho}_i^{(0)}\}_j, \quad (4.64)$$

где  $\mathbf{A}^{(0)}$  — трехдиагональная матрица с диагональными элементами  $(1, -4, 1)$ , которая умножается на каждый вектор  $\{\Phi_i\}_j$  с элементами  $\Phi_{ij}$ . Правая часть пропорциональна заданной функции распределения источников. Аналогичные уравнения справедливы для каждого ряда  $j$ , и, исключая промежуточные ряды  $j+1$ ,  $j-1$  и т. д., методом циклической редукции получаем

$$\begin{aligned} \{\Phi_i\}_{j+2} + (\mathbf{A}^{(0)2} - 2\mathbf{I}) \{\Phi_i\}_j + \{\Phi_i\}_{j-2} = \\ = \mathbf{A}^{(0)} \{\tilde{\rho}_i^{(0)}\}_j - \{\tilde{\rho}_i^{(0)}\}_{j+1} - \{\tilde{\rho}_i^{(0)}\}_{j-1}. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Эти редуцированные  $(J/2)$  уравнения имеют ту же трехдиагональную форму, что и раньше:

$$\{\Phi_i\}_{j+2} + \mathbf{A}^{(1)} \{\Phi_i\}_j + \{\Phi_i\}_{j-2} = \{\tilde{\rho}_i^{(1)}\}_j, \quad (4.66)$$

и отсюда следует, что циклическую редукцию можно продолжать до тех пор, пока после  $p$  шагов центральный ряд не будет выражен через функцию распределения источников  $\{\tilde{\rho}_i^{(p)}\}_j$  и значения на границе

$$\mathbf{A}^{(p)} \{\Phi_i\}_{J/2} = \{\tilde{\rho}_i^{(p)}\}_{J/2}. \quad (4.67)$$

Таким образом, мы пришли к матричному уравнению более низкого порядка, в котором осталось всего  $I$ , а не  $IJ$  неизвестных. Матрица этого укороченного уравнения  $\mathbf{A}^{(p)}$  уже не является трехдиагональной — в ней значительное число элементов отлично от нуля, поэтому укороченное уравнение можно решать методом исключения Гаусса (см. гл. 4, § 5). В простых случаях матрицу  $\mathbf{A}^{(p)}$  можно представить в виде произведения трехдиагональных матриц, после чего можно поочередно обращать каждую из них [20]. В заключение процесс, обратный циклической редукции, позволяет определить все неизвестные значения на промежуточных рядах.



В методе исключения Гаусса неизвестные  $u_1, \dots, u_n$  исключаются последовательно до тех пор, пока не останется только одна из них. Одно из уравнений (например, первое) используется для выражения одной неизвестной, например  $u_1$ , через остальные  $n - 1$  неизвестных. С помощью этого, так называемого опорного, уравнения величина  $u_1$  поочередно исключается из остальных  $n - 1$  уравнений. Если каждое из последних  $n - 1$  уравнений системы умножить на  $a_{11}/a_{i1}$  и вычесть из опорного уравнения, то неизвестная  $u_1$  будет исключена из каждого уравнения. В результате первого шага система уравнений сведется к виду

$$\begin{aligned} a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + a_{13}u_3 + \dots + a_{1n}u_n &= w_1 \\ a'_{22}u_2 + a'_{23}u_3 + \dots + a'_{2n}u_n &= w'_2 \\ a'_{32}u_2 + a'_{33}u_3 + \dots + a'_{3n}u_n &= w'_3 \\ \vdots & \qquad \qquad \qquad \vdots \\ a'_{n2}u_2 + \dots + a'_{nn}u_n &= w'_n \end{aligned} \quad (4.69)$$

Исключением величины  $u_1$  из последних  $n - 1$  уравнений система оказалась сведенной к системе  $n - 1$  уравнений с  $n - 1$  неизвестными. Новые коэффициенты  $a'$  и новые правые части определяются формулами<sup>1)</sup>

$$\begin{aligned} a'_{ij} &= \frac{a_{11}}{a_{i1}} a_{ij} - a_{1j}, \\ w'_i &= \frac{a_{11}}{a_{i1}} w_i - w_1 \end{aligned} \quad (4.70)$$

при  $i, j \geq 2$ .

Та же самая процедура исключения может быть применена к новой системе из  $n - 1$  уравнений и т. д. до тех пор, пока не останется единственное уравнение с одной неизвестной  $u_n$ . В результате система уравнений

<sup>1)</sup> Обычно методом Гаусса называют алгоритм, определяемый формулами

$$a'_{ij} = a_{ij} - a_{i1} \frac{a_{1j}}{a_{11}}, \quad w'_i = w_i - a_{i1} \frac{w_1}{a_{11}}. \quad - \text{Прим. ред.}$$

окажется приведенной к «треугольному» виду:

$$\begin{aligned}
 a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + a_{13}u_3 + \dots + a_{1n}u_n &= w_1 \\
 a'_{22}u_2 + a'_{23}u_3 + \dots + a'_{2n}u_n &= w'_2 \\
 a''_{33}u_3 + \dots + a''_{3n}u_n &= w''_3 \\
 &\vdots \\
 a^{(n-1)}_{nn}u_n &= w_n^{(n-1)}
 \end{aligned} \tag{4.71}$$

Теперь можно найти числовое значение величины  $u_n$ , а затем из треугольной системы (4.71) последовательно вычислить все неизвестные от  $u_n$  до  $u_1$ .

Очевидно, что на языке матриц процесс решения заключается в преобразовании матрицы  $\mathbf{A}$  в произведение двух матриц  $\mathbf{L}$  (нижней треугольной) и  $\mathbf{U}$  (верхней треугольной):

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}, \tag{4.72}$$

где  $\mathbf{L}$  имеет вид

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} x & & & & \\ x & x & & & 0 \\ x & x & x & & \\ & & & \ddots & \\ x & x & \dots & x & x \end{pmatrix},$$

а  $\mathbf{U}$  —

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} x & x & x & \dots & x \\ & x & x & \dots & x \\ & & x & & \cdot \\ & & & \ddots & \cdot \\ 0 & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & & x \end{pmatrix},$$

Матрица, обратная треугольной, сохраняет треугольную форму, и, следовательно, решение состоит в поочередном обращении матриц  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{U}$ :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{LUu} &= \mathbf{w}, \\
 \mathbf{Uu} &= \mathbf{L}^{-1}\mathbf{w}.
 \end{aligned} \tag{4.73}$$

Матричное уравнение (4.73) эквивалентно системе уравнений (4.71). Затем вычисляются все неизвестные компоненты вектора  $u$ :

$$u = U^{-1}L^{-1}w. \quad (4.74)$$

Если неизвестный вектор  $u$  имеет порядок  $n$ , то простой подсчет показывает, что общее число арифметических операций, необходимых для решения, составляет  $2/3n^3$ .

Существует много видоизменений метода исключения Гаусса, которые предельно уменьшают число арифметических операций, необходимых для решения уравнения, однако во всех методах это число имеет порядок куба размерности искомого вектора<sup>1)</sup>). Для больших матриц и, в частности, для матриц, возникающих при разностной аппроксимации многомерных задач, отыскание решения требует чрезвычайно большого числа операций, и при больших пространственных сетках затраты машинного времени неприемлемо велики.

## § 6. «Неточные», или итерационные, методы решения матричных уравнений

Показано, что точное решение общего матричного уравнения

$$Au = w, \quad (4.75)$$

где  $w$  — заданный, а  $u$  — искомый вектор, требует примерно  $n^3$  арифметических операций, где  $n$  — размерность вектора  $u$ . Для больших разреженных матриц, которые часто возникают в физических задачах, затраты машинного времени, необходимого для выполнения столь большого числа операций, оказываются неприемлемо высокими. В частных случаях трехдиагональной матрицы  $A$  или матрицы разностного многомерного уравнения Пуассона существуют быстродействующие прямые алгоритмы (см. § 3 и 4). Однако в общем случае матриц, возникающих из общей многомерной граничной задачи или при неявной аппроксимации задачи с начальными условиями, прямые методы требуют слишком большого числа операций.

<sup>1)</sup> О методах Жордана, Эйткена см. работу [14].

Альтернативой прямому и точному решению матричного уравнения (4.75) может быть следующий подход. Возьмем начальное приближенное значение величины  $u$ , например  $u^{(0)}$ , и попытаемся, выполняя последовательные шаги  $p$ , улучшить наше *неточное* решение  $u^{(p)}$ . В простейшем случае эту процедуру можно описать матричным уравнением

$$u^{(p+1)} = Pu^{(p)} + c, \quad (4.76)$$

где  $P$  — итерационная матрица и улучшенное решение  $u^{(p+1)}$  явно выражено через предыдущее решение  $u^{(p)}$ . Матрица  $P$  выражается через данную матрицу  $A$ , а постоянный вектор  $c$  — через известный вектор  $w$ . Если в пределе бесконечно большого числа шагов ( $p$  очень велико) имеется сходимость, так что

$$\lim_{p \rightarrow \infty} u^{(p)} = Pu^{(p)} + c, \quad (4.77)$$

то вектор  $u^{(\infty)}$  удовлетворяет матричному уравнению

$$(I - P)u^{(\infty)} = c. \quad (4.78)$$

Таким образом,  $u^{(\infty)}$  будет искомым решением, если матричное уравнение (4.78) совместно с рассматриваемым уравнением (4.75). Отсюда следует, что если вектор  $c$  связан с известным вектором  $w$  невырожденной матрицей  $T$ ,

$$c = Tw,$$

то итерационная матрица удовлетворяет уравнению

$$T^{-1}(I - P) = A,$$

или

$$P = I - TA. \quad (4.79)$$

Преимущество этого метода состоит в том, что каждое улучшенное значение  $u^{(p+1)}$  выражено *явно*. Поучительно выяснить физический смысл такого постепенного улучшения «решения». Выше, например (гл. 3, § 1, п. 6), было показано, что если матричное уравнение (4.75) возникает из разностной записи краевой задачи, то такое уравнение выражает бесконечную скорость распространения информации на сетке. Вместе с итерационной

процедурой мы вводим в уравнение «псевдовремя» с тем, чтобы можно было явно аппроксимировать уравнения, обеспечивая этим конечную скорость распространения информации на сетке. Предположим, например, что матричное уравнение (4.75) является конечно-разностной аппроксимацией уравнения Пуассона (см. гл. 2), а матрица  $\mathbf{A}$  — разностным оператором Лапласа  $\Delta''$  (см. фиг. 4.1). Очевидно, что один из методов получения решения уравнения Пуассона состоит в отыскании предельного стационарного решения уравнения диффузии

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla^2 u = \rho,$$

где  $\rho$  — известная функция распределения источников. Стационарное решение такого уравнения  $u$  удовлетворяет уравнению Пуассона. Эквивалентная разностная запись имеет вид

$$\mathbf{u}^{(p+1)} = \mathbf{u}^{(p)} + \Delta t \Delta'' \mathbf{u}^{(p)} + \rho \Delta t. \quad (4.80)$$

Итерационную процедуру можно рассматривать как явное решение, сходящееся в течение некоторого воображаемого итерационного времени. Очевидно, что эту методику легко использовать. В частности, для разреженных матриц метод требует весьма небольшого числа арифметических операций на каждую итерацию. Но, с другой стороны, может оказаться, что необходимо провести большое число итераций прежде, чем будет получено разумное решение.

### 1. Конструкция итерационной матрицы и ее свойства

Применяя итерационный метод, мы должны выяснить, во-первых, для каждого ли начального приближения  $\mathbf{u}^{(0)}$  метод сходится, и, во-вторых, насколько быстро будут сходиться итерации  $\mathbf{u}^{(p)}$ . Вместо абсолютного значения вектора  $\mathbf{u}^{(p)}$  полезно рассматривать вектор ошибок  $\mathbf{e}^{(p)}$ , который присутствует на каждом шаге, другими словами, если  $\mathbf{u}$  — точное решение матричного уравнения, то

$$\mathbf{e}^{(p)} = \mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u}. \quad (4.81)$$

Так как итерационная схема (4.76) должна быть совместна с матричным уравнением (4.75), потребуем, чтобы точное решение  $\mathbf{u}$  удовлетворяло уравнению

$$\mathbf{u} = \mathbf{P}\mathbf{u} + \mathbf{c}. \quad (4.82)$$

Из уравнений (4.76) и (4.82) следует, что векторы ошибок  $\boldsymbol{\varepsilon}$  на соседних шагах связаны соотношением

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(p+1)} = \mathbf{P}\boldsymbol{\varepsilon}^{(p)}. \quad (4.83)$$

Для того чтобы имела место сходимость, величина вектора ошибок должна удовлетворять условию

$$|\boldsymbol{\varepsilon}^{(p+1)}| < |\boldsymbol{\varepsilon}^{(p)}|. \quad (4.84)$$

Поэтому мы введем величину  $\|\mathbf{P}\|$  — спектральную норму матрицы  $\mathbf{P}$ :

$$\|\mathbf{P}\| = \frac{|\mathbf{P}\boldsymbol{\varepsilon}^{(p)}|}{|\boldsymbol{\varepsilon}^{(p)}|} \quad (4.85)$$

и потребуем, чтобы норма  $\|\mathbf{P}\|$  была меньше единицы, с тем чтобы итерации  $\mathbf{u}^{(p)}$  сходились.

Рассмотрим это ограничение более детально, выражая вектор ошибок через собственные векторы итерационной матрицы  $\mathbf{P}$ . Пусть  $\mathbf{P}$  имеет набор  $n$  различных собственных чисел  $\rho_i$ , тогда ошибку  $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}$  начального приближения  $\mathbf{u}^{(0)}$  можно разложить по собственным векторам  $\mathbf{s}^{(i)}$  матрицы  $\mathbf{P}$ :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{s}^{(i)}; \quad (4.86)$$

$\alpha_i$  — компонента вектора начальной ошибки вдоль собственного вектора  $\mathbf{s}^{(i)}$ . Из соотношения (4.83), связывающего последовательные векторы ошибок, можно выразить ошибку шага  $p$  через начальную ошибку:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(p)} = \mathbf{P}\boldsymbol{\varepsilon}^{(p-1)} = \mathbf{P}^p \boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}. \quad (4.87)$$

Используем разложение (4.86):

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(p)} = \mathbf{P}^p \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{s}^{(i)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i^p \mathbf{s}^{(i)}. \quad (4.88)$$

Следовательно, после  $p$  итераций компонента вектора ошибок вдоль направления каждого собственного вектора пропорциональна  $p$ -й степени соответствующего соб-

ственного значения. Очевидно, что при большом  $p$  ошибка выражается через собственный вектор с наибольшим по модулю собственным значением, откуда следует, что для сходимости необходимо, чтобы абсолютная величина наибольшего собственного значения  $\rho = |\rho_m|$  матрицы  $\mathbf{P}$  была меньше единицы.  $\rho$  называется спектральным радиусом матрицы  $\mathbf{P}$ .

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \epsilon^{(p)} = \alpha_m \rho_m^p \mathbf{s}^{(m)}, \quad (4.89)$$

где

$$|\rho_m| = \max(|\rho_1|, |\rho_2|, \dots, |\rho_n|). \quad (4.90)$$

Кроме того, асимптотическая (при больших  $p$ ) скорость сходимости зависит от спектрального радиуса  $\rho$  итерационной матрицы: чем меньше  $\rho$ , тем быстрее будет сходимость. Поэтому, выбирая итерационный метод и соответственно итерационную матрицу, мы должны минимизировать спектральный радиус итерационной матрицы.

Для определения различных итерационных методов и для анализа их свойств полезно разбить матрицу  $\mathbf{A}$  на диагональную матрицу  $\mathbf{D}$ , верхнюю треугольную матрицу  $\mathbf{U}$  и нижнюю треугольную матрицу  $\mathbf{L}$ :

$$\begin{pmatrix} x & x & x & x & \dots & x \\ x & x & x & & & \\ x & x & x & & & \\ \vdots & & & \ddots & & \\ \vdots & & & & \ddots & \\ x & & & & & x & x \\ x & & & & & x & x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & & & & & 0 \\ & x & & & & \\ & & x & & & \\ & & & x & & \\ 0 & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & x \end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} 0 & x & x & x & \dots & x \\ & 0 & x & x & \dots & x \\ 0 & & 0 & x & \dots & \\ & & & \vdots & & \\ 0 & & & & 0 & x \\ & & & & & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ x & 0 & & & & 0 \\ x & x & 0 & & & \\ x & x & x & 0 & & \\ \vdots & & & \vdots & & \\ \vdots & & & \vdots & & \\ x & x & & x & 0 & \end{pmatrix}, \quad (4.91)$$

т. е.  $\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{U} + \mathbf{L}$ .

С этого момента будем считать, что все диагональные элементы конечны, так чтобы матричное уравнение (4.75) всегда можно было записать в виде <sup>1)</sup>

$$\mathbf{A}'\mathbf{u} = \mathbf{w}', \quad (4.92)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{A}' &= \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A}, \\ \mathbf{A}' &= \mathbf{I} + \mathbf{U}' + \mathbf{L}'. \end{aligned}$$

Матрица  $\mathbf{B} = -(\mathbf{U}' + \mathbf{L}')$  имеет особое значение и называется блочной матрицей Якоби. В частности, очевидно, что все собственные значения  $\mu_i$  блочной матрицы Якоби просто связаны с собственными значениями  $\lambda_i$  матрицы  $\mathbf{A}'$  соотношением <sup>2)</sup>

$$\mu_i = 1 - \lambda_i. \quad (4.93)$$

Для того чтобы разработать простые итерационные схемы, представим эволюцию решения в некотором воображаемом времени:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\mathbf{A}'\mathbf{u} + \mathbf{w}', \quad (4.94)$$

так что решение на новом шаге  $p + 1$  получается явно посредством итерационного шага по времени  $\Delta t = \omega$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(p+1)} &= \mathbf{u}^{(p)} - \omega \mathbf{A}'\mathbf{u}^{(p)} + \omega \mathbf{w}', \\ \mathbf{u}^{(p+1)} &= (\mathbf{I} - \omega \mathbf{A}')\mathbf{u}^{(p)} + \omega \mathbf{w}'. \end{aligned} \quad (4.95)$$

Очевидно, что такая итерационная процедура будет эффективна, если в матрице  $\mathbf{A}'$  диагональные элементы достаточно велики по сравнению с остальными и если мы выберем подходящее или наилучшее значение  $\omega$ .

Для иллюстрации данного подхода и в качестве модельной задачи возьмем уравнение Пуассона в декартовых координатах на равномерной пространственной сетке. Матрица этой задачи показана на фиг. 4.2. Для двумерного пятиточечного оператора Лапласа удобно

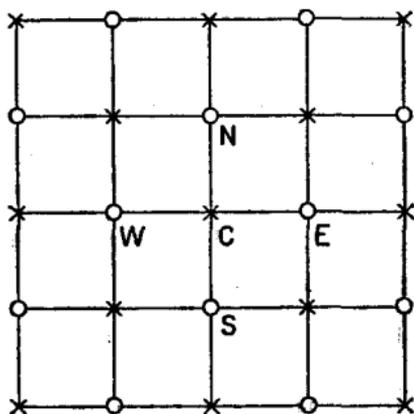
<sup>1)</sup> Мы будем в основном иметь дело с матрицами  $\mathbf{A}$ , в которых преобладают диагональные элементы, т. е. матрица  $\mathbf{D}$  велика [16].

<sup>2)</sup> Соотношение  $\mu_i = 1 - \lambda_i$  легко доказать, используя преобразование подобия.

принять обозначения узлов сетки по сторонам света (фиг. 4.3), что позволяет записать уравнение Пуассона в виде

$$u_C - \frac{1}{4}(u_N + u_S + u_E + u_W) = \frac{1}{4} \rho_C \Delta^2 = \omega_C, \quad (4.96)$$

где точка  $C$  — центральный узел, поочередно пробегающий все узлы сетки. Для прямоугольной сетки с  $J$  стро-



Фиг. 4.3. Использование аналогии со сторонами света для обозначения соседних узлов в двумерных задачах.

При решении уравнения Пуассона методом Чебышева значения решения в узлах, отмеченных кружками, и в узлах, отмеченных крестиками, определяются поочередно.

ками и  $I$  столбцами мы знаем все собственные значения нашей задачи (табл. 4.2):

$$1 - \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{J} - \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{I} \leq \lambda_i \leq 1. \quad (4.97)$$

Модельную задачу для уравнения Пуассона можно использовать, чтобы выявить особенности итерационного метода, хотя на практике эту задачу проще решать непосредственно.

Применяя общую итерационную схему (4.95) к уравнению Пуассона (4.96), получаем

$$u_C^{(p+1)} = (1 - \omega) u_C^{(p)} + \frac{1}{4} \omega (u_N^{(p)} + u_S^{(p)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p)}) + \omega \omega_C. \quad (4.98)$$

Фактически это уравнение является разностной формой уравнения диффузии с шагом по времени  $\frac{1}{4}\omega$ ,

единичным шагом по пространству и единичным коэффициентом диффузии (см. гл. 3, § 3), поэтому в двумерном случае условие устойчивости (а значит, и сходимости) имеет вид

$$\frac{1}{4} \omega \leq \frac{1}{4}.$$

Таким образом, для сходимости такой итерационной схемы параметр  $\omega$  обязательно должен удовлетворять условию

$$0 \leq \omega \leq 1. \quad (4.99)$$

## 2. Метод Якоби

В частном случае  $\omega = 1$  итерационный алгоритм называется методом Якоби:

$$\mathbf{u}^{(p+1)} = (\mathbf{I} - \mathbf{A}') \mathbf{u}^{(p)} + \mathbf{w}'. \quad (4.100)$$

Так как матрица  $\mathbf{A}'$  представима в виде суммы единичной матрицы, верхней треугольной матрицы и нижней треугольной матрицы [соотношение (4.92)], то итерацию Якоби можно записать следующим образом:

$$\mathbf{u}^{(p+1)} = -(\mathbf{L}' + \mathbf{U}') \mathbf{u}^{(p)} + \mathbf{w}'. \quad (4.101)$$

Поэтому метод Якоби можно рассматривать как приравнивание новых диагональных элементов старым недиагональным элементам, а итерационная матрица  $\mathbf{P}$  представляет собой просто блочную матрицу Якоби  $\mathbf{B} = -(\mathbf{L}' + \mathbf{U}')$ . В соответствии с асимптотикой убывания ошибки (4.89) скорость сходимости метода при больших значениях  $p$  равна

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \delta \varepsilon^{(p)} = \varepsilon^{(p+1)} - \varepsilon^{(p)} = (\rho_m - 1) \varepsilon^{(p)},$$

$$\frac{|\delta \varepsilon^{(p)}|}{|\varepsilon^{(p)}|} = |\rho_m - 1|, \quad (4.102)$$

где  $\rho_m$  — наибольшее по модулю собственное значение итерационной матрицы  $\mathbf{P}$ , или в данном случае — максимальное собственное значение блочной матрицы Якоби  $\mathbf{B}$ , а именно  $\mu_m$  (4.93).

Если метод Якоби применить к сформулированной выше модельной задаче для уравнения Пуассона, то максимальное собственное значение блочной матрицы Якоби (4.97) равно

$$\mu_m = \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{J} + \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{I}, \quad (4.103)$$

или при больших  $I$  и  $J$

$$\mu_m \sim 1 - \frac{\pi^2}{4J^2} - \frac{\pi^2}{4I^2}. \quad (4.104)$$

Последнее означает, что скорость сходимости (4.102) очень мала:

$$\frac{|\delta \varepsilon^{(p)}|}{|\varepsilon^{(p)}|} = \frac{\pi^2}{4J^2} + \frac{\pi^2}{4I^2}. \quad (4.105)$$

### 3. Метод Гаусса — Зайделя

На каждом итерационном шаге поочередно определяются все компоненты вектора  $\mathbf{u}^{(p+1)}$ . Например, при решении уравнения Пуассона (4.98), когда пересчитывается значение в точке  $C$ , в точках  $S$  («южный» узел, фиг. 4.3) и  $W$  («западный» узел) новые итерационные значения  $u_S^{(p+1)}$  и  $u_W^{(p+1)}$  уже определены. А так как эти новые значения улучшают старые значения  $u_S^{(p)}$  и  $u_W^{(p)}$ , то для ускорения сходимости представляется естественным использовать в итерационной процедуре новые значения. Если опять параметр  $\omega$  выбрать равным единице,

$$u_C^{(p+1)} = \frac{1}{4} (u_N^{(p)} + u_S^{(p+1)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p+1)}) + w'_C, \quad (4.106)$$

то мы приходим к методу, известному под названием метода Гаусса — Зайделя. В общих матричных обозначениях (4.92) метод Гаусса — Зайделя можно записать следующим образом:

$$(\mathbf{I} + \mathbf{L}') \mathbf{u}^{(p+1)} = -\mathbf{U}' \mathbf{u}^{(p)} + \mathbf{w}', \quad (4.107)$$

а так как на итерационном шаге  $p+1$  новые значения  $\mathbf{L}' \mathbf{u}^{(p+1)}$  известны во всех узлах, то уравнение (4.107)

можно переписать в виде

$$\mathbf{u}^{(p+1)} = -(\mathbf{I} + \mathbf{L}')^{-1} \mathbf{U}' \mathbf{u}^{(p)} + (\mathbf{I} + \mathbf{L}')^{-1} \mathbf{w}'. \quad (4.108)$$

Можно показать, что скорость сходимости в методе Гаусса — Зайделя выше, чем в методе Якоби, хотя это утверждение справедливо только в предельном смысле [16].

#### 4. Метод последовательной верхней релаксации

Было показано, что для сходимости итерационного процесса при решении уравнения Пуассона (4.98) параметр  $\omega$  должен лежать между нулем и единицей (равен единице для метода Якоби). В методе Гаусса — Зайделя параметр  $\omega$  был выбран равным единице, хотя на практике наибольшая скорость сходимости не обязательно достигается при значении  $\omega$ , равном единице. Часто скорость сходимости растет при увеличении  $\omega$  по сравнению с единицей; в этом случае метод называется методом верхней релаксации. Противоположный случай  $\omega < 1$  называется методом последовательной нижней релаксации.

Метод последовательной верхней релаксации использует ту же итерационную формулу, что и метод Гаусса — Зайделя, но с улучшенным постоянным значением параметра релаксации:

$$(\mathbf{I} + \omega \mathbf{L}') \mathbf{u}^{(p+1)} = (1 - \omega) \mathbf{I} \mathbf{u}^{(p)} - \omega \mathbf{U}' \mathbf{u}^{(p)} + \omega \mathbf{w}' \quad (4.109)$$

или

$$\mathbf{u}^{(p+1)} = (\mathbf{I} + \omega \mathbf{L}')^{-1} [(1 - \omega) \mathbf{I} - \omega \mathbf{U}'] \mathbf{u}^{(p)} + (\mathbf{I} + \omega \mathbf{L}')^{-1} \omega \mathbf{w}'. \quad (4.110)$$

Оптимальное значение параметра релаксации, обеспечивающее наивысшую скорость сходимости, равно [16, 22]

$$\omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu_m^2}}, \quad (4.111)$$

где  $\mu_m$ , как и раньше, — спектральный радиус, или наибольшее по модулю собственное значение блочной мат-

рицы Якоби  $\mathbf{B} = -(\mathbf{L}' + \mathbf{U}')$ . Кроме того, асимптотическая скорость сходимости метода последовательной верхней релаксации (4.110) равна

$$\rho = \frac{|\epsilon^{(p+1)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = \omega_b^{-1},$$

или

$$\frac{|\delta\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = \sqrt{1 - \mu_m^2}. \quad (4.112)$$

В качестве примера рассмотрим модельную задачу для уравнения Пуассона, итерационная формула которой в прежних обозначениях имеет простой вид:

$$u_C^{(p+1)} = (1 - \omega) u_C^{(p)} + \frac{1}{4} \omega (u_N^{(p)} + u_S^{(p+1)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p+1)}) + \omega \omega_C. \quad (4.113)$$

Собственные значения блочной матрицы Якоби равны (4.93), (4.97):

$$0 \leq \mu_i \leq \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{J} + \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{I},$$

где  $I$  и  $J$  — числа строк и столбцов сетки. Таким образом,

$$\omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{J} + \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{I}\right)^2}}, \quad (4.114)$$

и при больших  $I$  и  $J$

$$\omega_b \approx \frac{2}{1 + \pi \sqrt{\frac{1}{2J^2} + \frac{1}{2I^2}}}.$$

Отсюда видно, что чем больше сетка, тем ближе величина  $\omega_b$  к своему предельному значению 2. Аналогично асимптотическая скорость сходимости модельной задачи (4.112) равна

$$\frac{|\delta\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} \approx \pi \left( \frac{1}{2J^2} + \frac{1}{2I^2} \right)^{1/2}. \quad (4.115)$$

Здесь скорость сходимости значительно увеличена по сравнению с методами Гаусса — Зейделя и Якоби [см.

соотношение (4.105)], так как она изменяется обратно пропорционально числу узлов сетки, а не квадрату этого числа.

В схему метода последовательной верхней релаксации можно ввести некоторое изменение. Для этого заметим, что рассматриваемые здесь матричные уравнения, в частности, уравнения, получаемые путем разностной аппроксимации, симметричны относительно чередующихся узлов. Например, в уравнении Пуассона каждая точка  $C$  связана с четырьмя соседними точками  $[N, S, E, W$  (фиг. 4.3)], таким образом, переменные в каждом четном узле связаны только с переменными в нечетных узлах, и наоборот. Поэтому полезно ввести двойной или циклический итерационный процесс, в котором сначала вычисляются улучшенные значения всех переменных в четных узлах, а затем они используются для пересчета остальных значений в нечетных узлах. Переопределим искомый вектор-решение  $u$  как два вектора  $u_0$  и  $u_1$ , первый из которых задан в четных узлах, а второй — в нечетных. Аналогично известный вектор  $w$  расщепляется на  $w_0$  и  $w_1$ . Теперь циклический метод последовательной верхней релаксации можно определить следующим образом:

$$u_v^{(p+1)} = -\omega(L' + U')u_{1-v}^{(p)} + (1 - \omega)u_v^{(p-1)} + \omega w'_v, \quad (4.116)$$

где  $v = 0, 1$ ,  $p$  — номер последовательного шага. Оптимальное значение параметра релаксации  $\omega = \omega_b$  по-прежнему определяется формулой (4.111).

### 5. Циклический метод Чебышева

Хотя асимптотическая скорость сходимости метода последовательной верхней релаксации (4.115) чрезвычайно высока, на ранней стадии итерационного процесса сходимости может быть медленной и даже возможно временное возрастание ошибки. В циклическом методе Чебышева сходимость на ранней стадии итерационного процесса значительно улучшена за счет того, что параметр релаксации меняется от шага к шагу. Этот замысел возник в связи с идеей использования полиномов Чебышева для ускорения сходимости [16, 23]. Метод Че-

бышева использует те же формулы, что и метод последовательной верхней релаксации (4.116), но с переменным параметром релаксации  $\omega$ :

$$\mathbf{u}_v^{(p+1)} = -\omega_p (\mathbf{L}' + \mathbf{U}') \mathbf{u}_{1-v}^{(p)} + (1 - \omega_p) \mathbf{u}_v^{(p-1)} + \omega_p \mathbf{w}'_v, \quad (4.117)$$

где  $p$  — номер очередного шага;

$$v = \begin{cases} 0, & \text{если } p \text{ — четное,} \\ 1, & \text{если } p \text{ — нечетное.} \end{cases}$$

На последовательных шагах параметр  $\omega_p$  изменяется так, чтобы оптимизировать среднюю скорость сходимости:

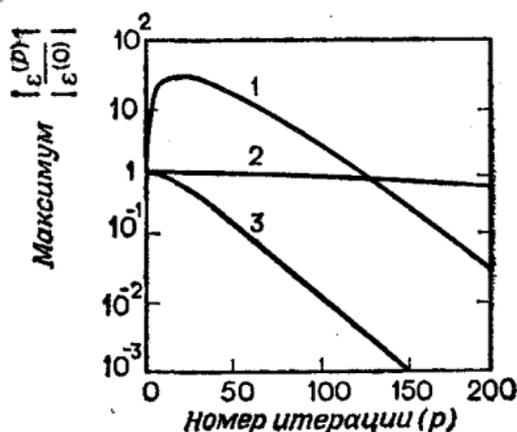
$$\begin{aligned} \omega_0 &= 1, \\ \omega_1 &= \frac{1}{1 - \mu_m^2/2}, \\ \text{при } p \geq 1 \quad \omega_{p+1} &= \frac{1}{1 - \mu_m^2 \omega_p/4}, \end{aligned} \quad (4.118)$$

где, как и раньше,  $\mu_m$  — наибольшее по модулю собственное значение блочной матрицы Якоби  $-(\mathbf{L}' + \mathbf{U}')$ , определенное для полного вектора. Следует отметить, что первый шаг соответствует методу Гаусса — Зайделя ( $\omega = 1$ ), после чего параметр релаксации  $\omega$  постепенно увеличивается. В асимптотическом пределе параметр релаксации стремится к оптимальному для метода последовательной верхней релаксации значению  $\omega_\infty = \omega_b$  (4.111), и поэтому асимптотические свойства метода Чебышева совпадают со свойствами метода последовательной верхней релаксации. Однако на ранних стадиях процесса сходимость заметно улучшена. Скорости сходимости методов Гаусса — Зайделя, Чебышева и последовательной верхней релаксации показаны на фиг. 4.4 для примера модельного уравнения Пуассона на сетке  $128 \times 128$  узлов [19].

## 6. Неявный метод переменных направлений

Мы убедились, что разностная аппроксимация одномерных граничных задач и неявная аппроксимация параболических уравнений приводят к трехдиагональному

матричному уравнению (см. § 2, п. 1). Как показано в § 3, трехдиагональные матричные уравнения решаются чрезвычайно просто, в то же время в аналогичных многомерных задачах матричная связь оказывается гораздо более сложной (см. § 2, п. 2) и, за исключением простейшей задачи для уравнения Пуассона, матричные уравнения трудноразрешимы. Тем не менее мы сможем



Фиг. 4.4. Скорости сходимости итерационных процессов методов решения двумерного уравнения Пуассона (из работы [19]).

1 — метод последовательной верхней релаксации; 2 — метод Гаусса—Зайделя; 3 — метод Чебышева.

весьма успешно использовать свойства трехдиагональных матриц и в многомерных задачах, если заметим, что матричный оператор  $A'$  (4.92) можно записать в виде суммы трехдиагональных матриц.

В качестве примера возьмем двумерную задачу на разностной сетке из  $J$  строк и  $I$  столбцов, хотя излагаемый метод применим к задаче любой пространственной размерности. Как было указано в § 2, п. 1, вектор  $u$  можно определить как вектор с компонентами в каждом узле пространственной сетки, причем компоненты можно упорядочить нумерацией вдоль строк или вдоль столбцов:

$$u = \{u_{i,j+1}\} = \{u_{ij}\},$$

$$v = \{u_{jI+i}\} = \{u_{i,j}\}.$$

(4.119)

Векторы  $u$  и  $v$  в основном эквивалентны и отличаются лишь порядком элементов, расположенных вдоль строк или вдоль столбцов, что можно выразить с помощью перестраивающей матрицы  $N$ :

$$v = Nu.$$

Теперь матрицу  $A'$  в уравнении

$$A'u = w'$$

можно переписать как сумму двух трехдиагональных матриц

$$(C + RN)u = w'$$

или

$$Cu + Rv = w', \quad (4.120)$$

где  $C$  и  $R$  — трехдиагональные матрицы, действующие вдоль столбцов и вдоль строк соответственно. Примером служит разностная запись двумерного уравнения Пуассона (фиг. 4.1). На практике уравнение (4.120) оказывается проще, так как обе матрицы  $C$  и  $R$  можно разбить на независимые трехдиагональные матрицы, действующие отдельно на каждый столбец и на каждую строку.

Поскольку трехдиагональные матричные уравнения допускают простые прямые методы решения, ясно, что можно получить эффективный итерационный метод путем решения трехдиагональных уравнений отдельно для столбцов и для строк, а именно:

$$\begin{aligned} (C + \omega I) u^{(p+1/2)} &= (\omega N^{-1} - R) v^{(p)} + w', \\ (R + \omega I) v^{(p+1)} &= (\omega N - C) u^{(p+1/2)} + w', \end{aligned} \quad (4.121)$$

где  $\omega$  выбирается таким, чтобы оптимизировать итерационный процесс. Таким образом, задача решается неявно сведением к трехдиагональным уравнениям методом переменных направлений на сетке [16, 24].

Исследуем скорость сходимости метода и выберем параметр релаксации  $\omega$ . Из уравнений (4.121) видно, что ошибки на двойном шаге связаны следующим

Итерационные методы решения матричного уравнения  $Au = w$ Матрица  $A$  имеет вид  $A = I + L + U$ Матрица  $B$  — блочная матрица Якоби  $B = -(L + U)$  $p$  — номер итераций $\mu$  — наибольшее по модулю собственное значение матрицы  $B$  $\omega$  — параметр релаксации

Метод	Итерационная формула	Оптимальное значение параметра релаксации	Асимптотическая скорость сходимости	Асимптотическое поведение ошибки для уравнения Пуассона на сетке размером $J \times J$
1. Метод Якоби	$u^{(p+1)} = -(L + U)u^{(p)} + w$	нет	$1 - \mu$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi^2}{2J^2} p\right)$
2. Метод Гаусса — Зайделя	$u^{(p+1)} = -(I + L)^{-1} U u^{(p)} + (I + L)^{-1} w$	нет	$1 - \mu^2$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi^2}{J^2} p\right)$
3. Метод последовательной верхней релаксации	$u^{(p+1)} = (I + \omega L)^{-1} [(1 - \omega)I - \omega U] u^{(p)} + (I + \omega L)^{-1} w$	$\omega_b = \frac{2}{1 + 1 - \mu^2}$	$\omega_b - 1 = \frac{1}{\sqrt{1 - \mu^2}}$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi}{J} p\right)$
4. Метод Чебышева	$u^{(p+1)} = (I + \omega_{2p} L)^{-1} \times [(1 - \omega_{2p})I - \omega_{2p} U] u^{(p)} + (I + \omega_{2p} L)^{-1} w$	$\omega_0 = 1$ $\omega_1 = 1 / \left(1 - \frac{1}{2} \mu^2\right)$ $\omega_p = 1 / \left(1 - \frac{1}{4} \mu^2 \omega_{p-1}\right)$ $\omega_\infty = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}}$	$\omega_\infty - 1 = \frac{1}{\sqrt{1 - \mu^2}}$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi}{J} p\right)$ Первые итерации сходятся быстрее, чем в методе последовательной верхней релаксации
5. Метод переменных направлений, неявная схема	$A = C + RN$ , где $v = Nu$ $(C + \omega I) u^{(p+1/2)} = (\omega N^{-1} - R) v^{(p)} + w$ $(R + \omega I) v^{(p+1)} = (\omega N - C) u^{(p+1/2)} + w$	$\omega = \sqrt{\lambda_1 \lambda_2}$ $\lambda_1, \lambda_2$ — минимальное и максимальное собственные значения матрицы $A$	$1 - \lambda_1^2 \lambda_2^2$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi}{J} p\right)$

Итерационные методы решения матричного уравнения  $Au = w$ Матрица  $A$  имеет вид  $A = I + L + U$ Матрица  $B$  — блочная матрица Якоби  $B = -(L + U)$  $p$  — номер итераций $\mu$  — наибольшее по модулю собственное значение матрицы  $B$  $\omega$  — параметр релаксации

Метод	Итерационная формула	Оптимальное значение параметра релаксации	Асимптотическая скорость сходимости	Асимптотическое поведение ошибки для уравнения Пуассона на сетке размером $J \times J$
1. Метод Якоби	$u^{(p+1)} = -(L + U)u^{(p)} + w$	нет	$1 - \mu$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi^2}{2J^2} p\right)$
2. Метод Гаусса — Зайделя	$u^{(p+1)} = -(I + L)^{-1} Uu^{(p)} + (I + L)^{-1} w$	нет	$1 - \mu^2$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi^2}{J^2} p\right)$
3. Метод последовательной верхней релаксации	$u^{(p+1)} = (I + \omega L)^{-1} [(1 - \omega)I - \omega U]u^{(p)} + (I + \omega L)^{-1} w$	$\omega_b = \frac{2}{1 + 1 - \mu^2}$	$\omega_b - 1 = \frac{1}{\sqrt{1 - \mu^2}}$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi}{J} p\right)$
4. Метод Чебышева	$u^{(p+1)} = (I + \omega_{2p}L)^{-1} \times [(1 - \omega_{2p})I - \omega_{2p}U]u^{(p)} + (I + \omega_{2p}L)^{-1} w$	$\omega_0 = 1$ $\omega_1 = 1 / \left(1 - \frac{1}{2}\mu^2\right)$ $\omega_p = 1 / \left(1 - \frac{1}{4}\mu^2\omega_{p-1}\right)$ $\omega_\infty = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}}$	$\omega_\infty - 1 = \frac{1}{\sqrt{1 - \mu^2}}$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi}{J} p\right)$ Первые итерации сходятся быстрее, чем в методе последовательной верхней релаксации
5. Метод переменных направлений, неявная схема	$A = C + RN$ , где $v = Nu$ $(C + \omega I)u^{(p+1/2)} = (\omega N^{-1} - R)v^{(p)} + w$ $(R + \omega I)v^{(p+1)} = (\omega N - C)u^{(p+1/2)} + w$	$\omega = \sqrt{\lambda_1 \lambda_2}$ $\lambda_1, \lambda_2$ — минимальное и максимальное собственные значения матрицы $A$	$1 - \lambda_1^2 \lambda_2^2$	$\frac{ e^{(p)} }{ e^{(0)} } \sim \exp\left(-\frac{\pi}{J} p\right)$

образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^{(p+1)} &= (\mathbf{R} + \omega \mathbf{I})^{-1} (\omega \mathbf{N} - \mathbf{C}) (\mathbf{C} + \omega \mathbf{I})^{-1} (\omega \mathbf{N}^{-1} - \mathbf{R}) \mathbf{e}^{(p)}, \\ \mathbf{e}^{(p+1)} &= \mathbf{P} \mathbf{e}^{(p)}. \end{aligned} \quad (4.122)$$

Как и прежде, для оптимизации сходимости постараемся минимизировать наибольшее собственное значение итерационной матрицы  $\mathbf{P}$ . Матрица  $\mathbf{N}$  описывает перестраивающий оператор (4.119) и имеет единичные собственные значения. Поэтому с помощью преобразования подобия легко убедиться, что собственные значения  $\rho$  матрицы  $\mathbf{P}$  связаны с собственными значениями  $r$  матрицы  $\mathbf{R}$  и  $c$  матрицы  $\mathbf{C}$  соотношением

$$\rho = \frac{\omega - c}{\omega + c} \cdot \frac{\omega - r}{\omega + r}. \quad (4.123)$$

Если  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  — наименьшее и наибольшее собственные значения матрицы  $\mathbf{A}$ , или, что то же самое, матрицы  $\mathbf{C} + \mathbf{R}$ , то оптимальное значение параметра релаксации  $\omega$ , минимизирующее спектральный радиус  $|\rho_m|$  итерационного оператора  $\mathbf{P}$ , равно [16]

$$\omega_b = \sqrt{\lambda_1 \lambda_2}. \quad (4.124)$$

Например, в модельном уравнении Пуассона при  $I = J$  и для больших  $J$

$$\omega_b \sim \frac{\pi}{J}. \quad (4.125)$$

Можно проверить, что при таком оптимальном выборе параметра релаксации асимптотическая скорость сходимости равна

$$\frac{|\delta \mathbf{e}^{(p)}|}{|\mathbf{e}^{(p)}|} \sim \frac{\pi}{J}. \quad (4.126)$$

И действительно, асимптотическая скорость сходимости (4.126) имеет то же самое значение, что и в методе последовательной верхней релаксации и в циклическом методе Чебышева.

Все изложенные в этом параграфе методы собраны в табл. 4.3.

## § 7. Два приближенных метода определения собственных векторов и собственных значений

Матрица  $\mathbf{A}$  размерности  $n \times n$  имеет  $n$  собственных значений  $\lambda_i$ , каждому из которых соответствует собственный вектор  $\mathbf{s}^{(i)}$ :

$$\mathbf{A}\mathbf{s}^{(i)} = \lambda_i \mathbf{s}^{(i)}. \quad (4.127)$$

Предполагается, что матрица  $\mathbf{A}$  простая: она имеет  $n$  различных собственных значений, и ее собственные векторы независимы. Собственные значения  $\lambda_i$  удовлетворяют характеристическому уравнению

$$|\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| = 0, \quad (4.128)$$

поэтому для отыскания собственных значений можно было бы представить этот определитель в виде полинома  $n$ -го порядка по  $\lambda$ . Однако такой подход потребует очень большого числа арифметических операций, и даже после того, как коэффициенты полинома будут вычислены, останется непростая задача решения алгебраического уравнения очень высокого порядка. Такие процедуры прямого преобразования могут быть использованы, однако они достаточно сложны, и здесь мы ограничимся двумя очень простыми итерационными процедурами.

### 1. Наибольшее собственное значение

Рассмотрим произвольный вектор  $\mathbf{v}^{(0)}$ , который не коллинеарен ни одному из собственных векторов  $\mathbf{s}^{(i)}$  матрицы  $\mathbf{A}$ . Вектор  $\mathbf{v}^{(0)}$  можно представить в виде

$$\mathbf{v}^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{s}^{(i)}. \quad (4.129)$$

Поддействуем на вектор  $\mathbf{v}$   $p$  раз оператором  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{v}^{(p)} = \mathbf{A}\mathbf{v}^{(p-1)} = \mathbf{A}^p \mathbf{v}^{(0)}. \quad (4.130)$$

Для того чтобы выяснить результат этого преобразования, используем разложение (4.129):

$$\mathbf{v}^{(p)} = \mathbf{A}^p \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{s}^{(i)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{A}^p \mathbf{s}^{(i)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^p \mathbf{s}^{(i)}. \quad (4.131)$$

Таким образом, после  $p$  умножений вектор  $\mathbf{v}^{(p)}$  имеет компоненту вдоль каждого собственного вектора, пропорциональную  $p$ -й степени соответствующего значения  $\lambda_i$ . Отсюда следует, что если  $\lambda_m$  — наибольшее по модулю собственное значение, то после многократного умножения на матрицу  $\mathbf{A}$  вектор  $\mathbf{v}^{(p)}$  будет почти коллинеарен собственному вектору  $\mathbf{s}^{(m)}$ . Следовательно, собственный вектор, отвечающий наибольшему по модулю собственному значению, получить очень легко. Конечно, при обычном применении этого метода вектор  $\mathbf{v}^{(p)}$  нормируют на каждом шаге  $p$ , чтобы избежать слишком большого возрастания или убывания вектора  $\mathbf{v}^{(p)}$ . При больших  $p$  рост каждой компоненты определяется умножением на собственное значение  $\lambda_m$ .

## 2. Определение всех собственных значений и собственных векторов

Изложенный выше метод предельно прост, но он не дает общего способа определения чего-либо, кроме наибольшего по модулю собственного значения и соответствующего собственного вектора.

Каждое или все вместе собственные значения и собственные векторы можно получить путем обратной итерации. Снова выберем какой-нибудь произвольный вектор  $\mathbf{v}^{(0)}$ . Значение  $\mathbf{v}^{(p)}$  на  $p$ -м шаге теперь определяем с помощью решения уравнения

$$(\mathbf{A} - k\mathbf{I}) \mathbf{v}^{(p)} = \mathbf{v}^{(p-1)}, \quad (4.132)$$

где число  $k$  выбирается так, чтобы задать именно то собственное значение и тот собственный вектор, которые нас интересуют. Из формулы (4.132) следует

$$\mathbf{v}^{(p)} = (\mathbf{A} - k\mathbf{I})^{-1} \mathbf{v}^{(p)} = (\mathbf{A} - k\mathbf{I})^{-p} \mathbf{v}^{(0)}. \quad (4.133)$$

Для того чтобы понять результат такого преобразования, снова разложим начальный вектор  $\mathbf{v}^{(0)}$  по системе собственных векторов матрицы  $\mathbf{A}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^{(p)} &= (\mathbf{A} - \mathbf{I}k)^{-p} \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{s}^{(i)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i (\mathbf{A} - \mathbf{I}k)^{-p} \mathbf{s}^{(i)} = \\ &= \sum_{i=1}^n \alpha_i (\lambda_i - k)^{-p} \mathbf{s}^{(i)}. \end{aligned} \quad (4.134)$$

Очевидно, что при большом  $p$   $\mathbf{v}^{(p)}$  в основном состоит из собственного вектора  $\mathbf{s}^{(m)}$ , имеющего собственное значение, наиболее близкое к  $k$ ,

$$|\lambda_m - k| < |\lambda_i - k| \quad \text{для всех } i \neq m. \quad (4.135)$$

Выбирая различные значения  $k$ , можно удовлетворить неравенству (4.135) для всех собственных значений по очереди. Метод оптимален, когда  $k$  является хорошим приближением к отдельному собственному значению  $\lambda_m$ .

Для решения последовательных матричных уравнений (4.132) можно использовать точные методы, например метод исключения Гаусса,

## Частицы: дальнодействие в проблеме $N$ тел

---

### § 1. Частицы и системы частиц

Материальный мир состоит из скопления частиц, и поведение любого макроскопического тела зависит от микроскопического взаимодействия между составляющими частицами. Поэтому основной подход к определению эволюции или структуры макроскопической системы состоит в конструировании и рассмотрении этой системы в виде системы частиц. Мы можем, конечно, сформулировать количественное описание такой системы, так как законы, управляющие движением отдельных частиц как классических, так и квантовых и релятивистских, полностью установлены, равно как и законы сил, действующих между многочисленными типами частиц. Но, хотя для систем частиц задача движения и может быть сформулирована, решение ее в явном виде оказывается невозможным.

Мы разделим задачи, связанные с системами частиц, на задачи многих тел и задачи нескольких тел; причем в каждом случае подход будет совершенно различным. Чтобы уточнить класс возможных проблем, приведем в качестве примеров задачи нескольких тел: атом, ядро, молекула, солнечная система, звездные скопления. Каждая из этих систем представляет собой систему небольшого числа частиц, и можно ожидать, что методами вычислительной механики удастся точно определить структуру и внутреннее движение каждой системы.

С другой стороны, в проблеме, которую мы называем задачей многих тел, интерес представляют системы столь большого числа частиц, что точное определение полного внутреннего движения немыслимо. Примеры систем такого типа многочисленны и разнообразны. К ним относятся жидкости, газы, звезды, галактики, плазма, классические среды, электроны в ионной решетке, сами ионные решетки и сверхтекучие и сверх-

## Частицы: дальнодействие в проблеме $N$ тел

### § 1. Частицы и системы частиц

Материальный мир состоит из скопления частиц, и поведение любого макроскопического тела зависит от микроскопического взаимодействия между составляющими частицами. Поэтому основной подход к определению эволюции или структуры макроскопической системы состоит в конструировании и рассмотрении этой системы в виде системы частиц. Мы можем, конечно, сформулировать количественное описание такой системы, так как законы, управляющие движением отдельных частиц как классических, так и квантовых и релятивистских, полностью установлены, равно как и законы сил, действующих между многочисленными типами частиц. Но, хотя для систем частиц задача движения и может быть сформулирована, решение ее в явном виде оказывается невозможным.

Мы разделим задачи, связанные с системами частиц, на задачи многих тел и задачи нескольких тел; причем в каждом случае подход будет совершенно различным. Чтобы уточнить класс возможных проблем, приведем в качестве примеров задачи нескольких тел: атом, ядро, молекула, солнечная система, звездные скопления. Каждая из этих систем представляет собой систему небольшого числа частиц, и можно ожидать, что методами вычислительной механики удастся точно определить структуру и внутреннее движение каждой системы.

С другой стороны, в проблеме, которую мы называем задачей многих тел, интерес представляют системы столь большого числа частиц, что точное определение полного внутреннего движения немислимо. Примеры систем такого типа многочисленны и разнообразны. К ним относятся жидкости, газы, звезды, галактики, плазма, классические среды, электроны в ионной решетке, сами ионные решетки и сверхтекучие и сверх-

проводящие среды. Типичное число частиц, например, для лабораторной жидкости составляет  $10^{23}$ . Тем не менее в системах многих частиц макроскопические свойства всей системы зависят от средних свойств частиц и могут быть довольно простыми. Поскольку в таких задачах важную роль играет статистическая физика, часто приходится встречаться с нелинейными и трудно разрешимыми задачами. И все же эти системы поддаются изучению с помощью вычислительной механики, и мы можем делать заключения о их макроскопических свойствах, изучая самосогласованное движение «типичных» частиц.

В настоящей главе мы сначала изучим движение отдельных частиц во внешних полях. Затем рассмотрим прямое точное решение задачи нескольких частиц, причем, говоря о точном решении, мы подразумеваем, что система описана путем прямого применения фундаментальных законов движения к отдельным частицам с учетом парного взаимодействия.

### § 2. Движение отдельной частицы в потенциальном поле

Два вида сил первостепенной важности — это электрические и гравитационные силы, причем и те и другие являются далекодействующими и потенциальными. Движение отдельной частицы определяется действием приложенного к ней заданного внешнего поля  $E$ . Если это поле потенциально, то его можно представить с помощью скалярного потенциала  $\Phi$ :

$$E = -\nabla\Phi. \quad (5.1)$$

«Состояние» точечной частицы массы  $m$  определяется шестью координатами: вектором пространственного положения  $x = \{x, y, z\}$  и вектором скорости  $v = \{v_x, v_y, v_z\}$ . Координаты частицы удовлетворяют уравнениям движения

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v, \\ \frac{dv}{dt} &= -\frac{e}{m} \nabla\Phi, \end{aligned} \quad (5.2)$$

где  $e$  — заряд частицы в случае электрического поля и  $e = m$  — масса частицы в случае гравитационного поля.

Отсюда следует, что состояние системы описывается шестью зависимыми переменными  $\mathbf{u} = \{\mathbf{x}, \mathbf{v}\}$ . Так как потенциал  $\Phi$  зависит лишь от пространственных координат  $\mathbf{x}$  и от времени  $t$ , то правая часть каждого из уравнений (5.2) не зависит от той величины, для которой записано уравнение, или, более подробно, каждое из уравнений для координат зависит только от скорости, а каждое из уравнений для компонент скорости зависит только от пространственных координат. Следовательно, для этой системы уравнений особенно подходит разностная схема «с перешагиванием» (гл. 2, § 6, п. 2), так как координаты и скорости частицы нужно определять только в чередующиеся моменты времени. Если скорости определены в момент времени  $n-1$ , новые пространственные координаты мы вычисляем только в момент времени  $n$ :

$$\mathbf{x}^n = \mathbf{x}^{n-2} + 2 \Delta t \mathbf{v}^{n-1}, \quad (5.3)$$

а скорость вновь вычисляется только в момент  $n+1$ :

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^{n-1} - 2 \Delta t \frac{e}{m} \nabla \Phi(\mathbf{x}^n, t^n). \quad (5.4)$$

Схема «с перешагиванием» очень проста и красива, однако в общем случае, если все функции приходится определять в каждый момент времени, то внесение случайных вычислительных мод приводит к рассогласованию чередующихся моментов времени (см. гл. 2, § 6, п. 2). Очевидно, что в рассматриваемом случае никаких трудностей не возникает, если не требуется вычислять каждую из переменных на каждом шаге по времени.

При движении частицы в потенциальном силовом поле обнаруживаются два чрезвычайно важных свойства: обратимость времени и сохранение энергии. Важно отметить, что любая схема интегрирования траектории частицы должна обеспечивать обратимость времени, а также сохранение энергии, если не строгое, то по крайней мере с высоким порядком точности. Ясно, что рассматриваемая разностная схема обратима во времени, так как если  $\Delta t' = -\Delta t$ , то

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^{n-1} &= \mathbf{v}^{n+1} - 2 \Delta t' \frac{e}{m} \nabla \Phi(\mathbf{x}^n, t^n), \\ \mathbf{x}^{n-2} &= \mathbf{x}^n + 2 \Delta t' \mathbf{v}^{n-1}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

Отсюда следует, что состояние системы описывается шестью зависимыми переменными  $\mathbf{u} = \{\mathbf{x}, \mathbf{v}\}$ . Так как потенциал  $\Phi$  зависит лишь от пространственных координат  $\mathbf{x}$  и от времени  $t$ , то правая часть каждого из уравнений (5.2) не зависит от той величины, для которой записано уравнение, или, более подробно, каждое из уравнений для координат зависит только от скорости, а каждое из уравнений для компонент скорости зависит только от пространственных координат. Следовательно, для этой системы уравнений особенно подходит разностная схема «с перешагиванием» (гл. 2, § 6, п. 2), так как координаты и скорости частицы нужно определять только в чередующиеся моменты времени. Если скорости определены в момент времени  $n-1$ , новые пространственные координаты мы вычисляем только в момент времени  $n$ :

$$\mathbf{x}^n = \mathbf{x}^{n-2} + 2 \Delta t \mathbf{v}^{n-1}, \quad (5.3)$$

а скорость вновь вычисляется только в момент  $n+1$ :

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^{n-1} - 2 \Delta t \frac{e}{m} \nabla \Phi(\mathbf{x}^n, t^n). \quad (5.4)$$

Схема «с перешагиванием» очень проста и красива, однако в общем случае, если все функции приходится определять в каждый момент времени, то внесение случайных вычислительных мод приводит к рассогласованию чередующихся моментов времени (см. гл. 2, § 6, п. 2). Очевидно, что в рассматриваемом случае никаких трудностей не возникает, если не требуется вычислять каждую из переменных на каждом шаге по времени.

При движении частицы в потенциальном силовом поле обнаруживаются два чрезвычайно важных свойства: обратимость времени и сохранение энергии. Важно отметить, что любая схема интегрирования траектории частицы должна обеспечивать обратимость времени, а также сохранение энергии, если не строгое, то по крайней мере с высоким порядком точности. Ясно, что рассматриваемая разностная схема обратима во времени, так как если  $\Delta t' = -\Delta t$ , то

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^{n-1} &= \mathbf{v}^{n+1} - 2 \Delta t' \frac{e}{m} \nabla \Phi(\mathbf{x}^n, t^n), \\ \mathbf{x}^{n-2} &= \mathbf{x}^n + 2 \Delta t' \mathbf{v}^{n-1}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

и полученные уравнения полностью аналогичны уравнениям с прямым ходом времени (5.3) и (5.4). Очевидно, что если бы схема интегрирования траектории частицы нарушала обратимость времени, то в системе таких частиц наблюдался бы рост энтропии, обусловленный численными эффектами.

Второе соображение, требующее сохранения энергии, можно проверить, переписав уравнение (5.4) для скоростей:

$$\mathbf{v}^{n+1} - \Delta t \frac{e}{m} \mathbf{E}^n = \mathbf{v}^{n-1} + \Delta t \frac{e}{m} \mathbf{E}^n. \quad (5.6)$$

Возведем это уравнение в квадрат:

$$\begin{aligned} (v^{n+1})^2 - 2 \Delta t \frac{e}{m} \mathbf{v}^{n+1} \mathbf{E}^n + \Delta t^2 \frac{e^2}{m^2} (\mathbf{E}^n)^2 = \\ = (v^{n-1})^2 + 2 \Delta t \frac{e}{m} \mathbf{v}^{n-1} \mathbf{E}^n + \Delta t^2 \frac{e^2}{m^2} (\mathbf{E}^n)^2. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Таким образом, изменение кинетической энергии на двух временных слоях составляет

$$\frac{1}{2} m (v^{n+1})^2 - \frac{1}{2} m (v^{n-1})^2 = e (\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^{n-1}) \mathbf{E}^n \Delta t. \quad (5.8)$$

Теперь используем разностное уравнение с перешагиванием для координат (5.3) на двух временных слоях и исключим скорости из правой части уравнения (5.8):

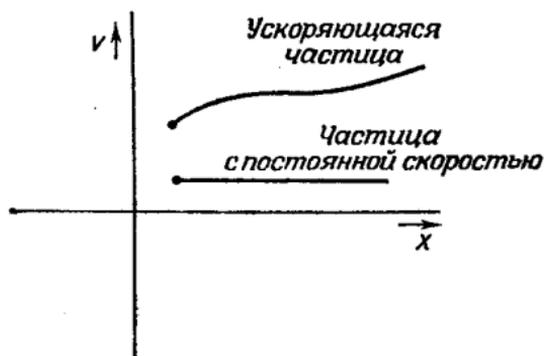
$$\frac{1}{2} m (v^{n+1})^2 - \frac{1}{2} m (v^{n-1})^2 = \frac{1}{2} e (\mathbf{x}^{n+2} - \mathbf{x}^{n-2}) \mathbf{E}^n. \quad (5.9)$$

Правая часть этого уравнения представляет собой изменение потенциальной энергии частицы между слоями  $t^{n+1}$  и  $t^{n-1}$ , взятое с противоположным знаком. Но, поскольку это изменение потенциальной энергии нельзя выразить в виде разности значений потенциала, энергия частицы полностью не сохраняется. Тем не менее правая часть уравнения (5.9) представляет собой

разностную аппроксимацию интеграла  $\int_{n-1}^{n+1} \mathbf{E} d\mathbf{x}$  со вторым порядком точности. Таким образом, хотя строгое сохранение энергии и не имеет места, ошибки в выполнении

закона сохранения энергии очень невелики и, пока схема обратима, искажения отсутствуют.

Для того чтобы описать состояние одночастичной системы, введем шестимерное пространство, координатами которого служат пространственные координаты и компоненты скорости частицы. В любой момент времени состояние этой системы описывается точкой шестимерного фазового пространства. Аналогично эволю-



Фиг. 5.1. Представление движения частицы с помощью траектории в фазовом пространстве.

ция системы во времени описывается линией в фазовом пространстве, которая связывает все промежуточные состояния (фиг. 5.1).

### § 3. Движение отдельной частицы в плоскости, перпендикулярной магнитному полю

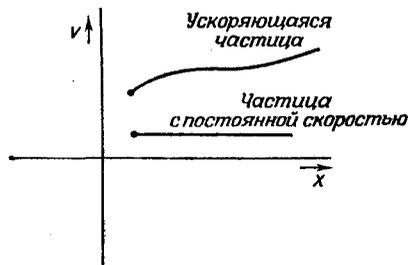
Частица массы  $m$  и заряда  $e$  в магнитном поле  $\mathbf{B}$  движется под действием силы Лоренца, а уравнения движения частицы имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \mathbf{v}, \\ \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \frac{e}{mc} [\mathbf{v}\mathbf{B}], \end{aligned} \quad (5.10)$$

где  $c$  — скорость света. Простота схемы с перешагиванием в применении к разностному описанию движения частицы в потенциальном поле наводит на мысль, что ту же самую методику можно применить к частице

закона сохранения энергии очень невелики и, пока схема обратима, искажения отсутствуют.

Для того чтобы описать состояние одночастичной системы, введем шестимерное пространство, координатами которого служат пространственные координаты и компоненты скорости частицы. В любой момент времени состояние этой системы описывается точкой шестимерного фазового пространства. Аналогично эволю-



Фиг. 5.1. Представление движения частицы с помощью траектории в фазовом пространстве.

ция системы во времени описывается линией в фазовом пространстве, которая связывает все промежуточные состояния (фиг. 5.1).

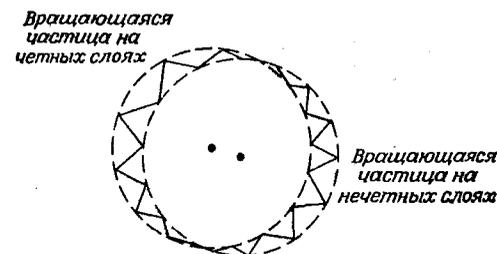
### § 3. Движение отдельной частицы в плоскости, перпендикулярной магнитному полю

Частица массы  $m$  и заряда  $e$  в магнитном поле  $\mathbf{B}$  движется под действием силы Лоренца, а уравнения движения частицы имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{v}, \\ \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \frac{e}{mc} [\mathbf{v}\mathbf{B}], \end{aligned} \quad (5.10)$$

где  $c$  — скорость света. Простота схемы с перешагиванием в применении к разностному описанию движения частицы в потенциальном поле наводит на мысль, что ту же самую методику можно применить к частице

в магнитном поле. Однако правые части уравнений для импульса зависят от скорости частицы, и теперь уже недостаточно задавать значения координат и скоростей поочередно во времени. Поэтому добавочные численные моды неизбежно приведут к созданию различия между центрами вращения частицы на четных и нечетных временных слоях, в результате чего частица будет совершать зигзагообразное движение между круговыми орбитами (фиг. 5.2).



Фиг. 5.2. Влияние численных мод, обусловленных схемой с перешагиванием, при расчете движения заряженной частицы перпендикулярно магнитному полю.

Координаты частицы на четных временных слоях и координаты на нечетных слоях лежат на орбитах с разными центрами.

Для того чтобы в этом случае написать удовлетворительную разностную схему, следует использовать неявный метод второго порядка точности (гл. 2, § 6, п. 4), а получившееся в результате алгебраическое уравнение можно решать непосредственно. Достаточно рассмотреть двумерную задачу в плоскости движения  $\mathbf{v} = \{v_x, v_y, 0\}$ , которая перпендикулярна магнитному полю  $\mathbf{B} = \{0, 0, B_z\}$ . Введем локальную циклотронную частоту

$$\Omega = \frac{eB_z}{mc}, \quad (5.11)$$

где, вообще говоря,  $\Omega = \Omega(\mathbf{x}, t)$ . Используя для скорости пространственных координат комплексные переменные

$$\hat{v} = v_x + iv_y, \quad \hat{x} = x + iy, \quad (5.12)$$

можно упростить запись уравнений движения (5.10):

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{v}, \quad \frac{d\hat{v}}{dt} = -i\hat{v}\Omega. \quad (5.13)$$

Мы интегрируем уравнение скорости между временными слоями  $t^n$  и  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  неявно в соответствии с изложенным выше алгоритмом (2.95):

$$\hat{v}^{n+1} - \hat{v}^n = -i\varphi(\hat{v}^{n+1} + \hat{v}^n), \quad (5.14)$$

где  $\varphi = 1/2\Delta t\Omega$  — половина циклотронного угла, на который частица повернется за время одного шага  $\Delta t$ . Уравнение (5.14) можно разрешить относительно пересчитанного значения скорости

$$\hat{v}^{n+1} = \frac{1 - \varphi^2 - 2i\varphi}{1 + \varphi^2} \hat{v}^n, \quad (5.15)$$

чтобы определять новые значения скорости фактически по явной схеме. Теперь для наглядности разделим вещественную и мнимую части этого уравнения:

$$\begin{aligned} v_x^{n+1} &= \frac{1 - \varphi^2}{1 + \varphi^2} v_x^n + \frac{2\varphi}{1 + \varphi^2} v_y^n, \\ v_y^{n+1} &= \frac{1 - \varphi^2}{1 + \varphi^2} v_y^n - \frac{2\varphi}{1 + \varphi^2} v_x^n. \end{aligned} \quad (5.16)$$

В общем случае циклотронный угол поворота частицы зависит от пространственных координат и времени, и для того чтобы уравнения были точно центрированы во времени, угол  $\varphi$  или соответственно поле  $B_z$  следует вычислять на промежуточных или полуцелых временных слоях:

$$\varphi = \varphi^{n+1/2} = \frac{\Delta t}{2} \frac{e}{mc} B_z \left( \mathbf{x}^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}^n, t^{n+1/2} \right). \quad (5.17)$$

После того как найдены новые значения скорости (5.16), легко определить и пространственные координаты

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + (\mathbf{v}^n + \mathbf{v}^{n+1}) \frac{\Delta t}{2}. \quad (5.18)$$

Такая разностная аппроксимация (5.16), (5.18) движения частицы в магнитном поле в равной степени применима и к трехмерной задаче с изменяющимся направлением магнитного поля. Так как это неявный ме-

можно упростить запись уравнений движения (5.10):

$$\frac{d\dot{x}}{dt} = \dot{\vartheta}, \quad \frac{d\dot{\vartheta}}{dt} = -i\dot{\vartheta}\Omega. \quad (5.13)$$

Мы интегрируем уравнение скорости между временными слоями  $t^n$  и  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  неявно в соответствии с изложенным выше алгоритмом (2.95):

$$\dot{\vartheta}^{n+1} - \dot{\vartheta}^n = -i\varphi(\dot{\vartheta}^{n+1} + \dot{\vartheta}^n), \quad (5.14)$$

где  $\varphi = 1/2\Delta t\Omega$  — половина циклотронного угла, на который частица повернется за время одного шага  $\Delta t$ . Уравнение (5.14) можно разрешить относительно пересчитанного значения скорости

$$\dot{\vartheta}^{n+1} = \frac{1 - \varphi^2 - 2i\varphi}{1 + \varphi^2} \dot{\vartheta}^n, \quad (5.15)$$

чтобы определять новые значения скорости фактически по явной схеме. Теперь для наглядности разделим вещественную и мнимую части этого уравнения:

$$\begin{aligned} v_x^{n+1} &= \frac{1 - \varphi^2}{1 + \varphi^2} v_x^n + \frac{2\varphi}{1 + \varphi^2} v_y^n, \\ v_y^{n+1} &= \frac{1 - \varphi^2}{1 + \varphi^2} v_y^n - \frac{2\varphi}{1 + \varphi^2} v_x^n. \end{aligned} \quad (5.16)$$

В общем случае циклотронный угол поворота частицы зависит от пространственных координат и времени, и для того чтобы уравнения были точно центрированы во времени, угол  $\varphi$  или соответственно поле  $B_z$  следует вычислять на промежуточных или полуполных временных слоях:

$$\varphi = \varphi^{n+1/2} = \frac{\Delta t}{2} \frac{e}{mc} B_z \left( \mathbf{x}^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}^n, t^{n+1/2} \right). \quad (5.17)$$

После того как найдены новые значения скорости (5.16), легко определить и пространственные координаты

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + (\mathbf{v}^n + \mathbf{v}^{n+1}) \frac{\Delta t}{2}. \quad (5.18)$$

Такая разностная аппроксимация (5.16), (5.18) движения частицы в магнитном поле в равной степени применима и к трехмерной задаче с изменяющимся направлением магнитного поля. Так как это неявный ме-

тод, он дает численно устойчивое решение даже в случае сколь угодно большого шага по времени, когда  $\varphi \gg 1$ . Кроме того, следует отметить, что в этом случае разностные уравнения удовлетворяют важному требованию точного сохранения кинетической энергии частицы. Действительно, если уравнение для комплексной скорости (5.15) умножить на комплексно-сопряженное с ним уравнение, то в результате получится

$$\begin{aligned} \dot{\vartheta}^{n+1} \dot{\vartheta}^{n+1*} &= \dot{\vartheta}^n \dot{\vartheta}^{n*} \left( \frac{1 - \varphi^2 - 2i\varphi}{1 + \varphi^2} \right) \left( \frac{1 - \varphi^2 + 2i\varphi}{1 + \varphi^2} \right), \\ (v_x^{n+1})^2 + (v_y^{n+1})^2 &= (v_x^n)^2 + (v_y^n)^2. \end{aligned}$$

Конечно, это свойство является необходимым для разностной аппроксимации, поскольку его нарушение приведет к спиральному движению частицы внутрь или наружу от центра орбиты, чего в дифференциальном уравнении быть не может.

Наконец, если имеется электрическое поле  $\mathbf{E} = E_x \mathbf{e}_x + iE_y \mathbf{e}_y$ , его легко включить в такую разностную схему, видоизменив уравнение следующим образом:

$$\dot{\vartheta}^{n+1} = \frac{e}{m} \Delta t \left( \frac{1 - i\varphi}{1 + \varphi^2} \right) \hat{E} + \left( \frac{1 - \varphi^2 - 2i\varphi}{1 + \varphi^2} \right) \dot{\vartheta}^n. \quad (5.20)$$

Следует отметить, что этот разностный алгоритм обладает тем интересным и полезным свойством, что при сильном магнитном поле и при большом шаге по времени  $\varphi \gg 1$  разностное уравнение (5.20) приближенно переходит в уравнение

$$\dot{\vartheta}^{n+1} \approx -\frac{e}{m} \Delta t \frac{i\hat{E}}{\varphi} - \dot{\vartheta}^n,$$

или

$$\frac{x^{n+1} - x^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (\dot{\vartheta}^{n+1} + \dot{\vartheta}^n) = -i \frac{\hat{E}}{B_z} c. \quad (5.21)$$

То есть в полном согласии с решением дифференциального уравнения [25] частица испытывает медленный дрейф перпендикулярно электрическому полю («E/B-дрейф»), сохраняя в то же время большую «тепловую» скорость, перпендикулярную магнитному полю.

#### § 4. Прямое моделирование дальнего действия в системе $N$ тел

Теперь мы в состоянии поставить задачу для системы взаимодействующих частиц. Чтобы продемонстрировать существо дела и в качестве примера важного класса таких задач мы рассмотрим систему из  $N$  частиц, взаимодействующих с силой, обратно пропорциональной квадрату расстояния (гравитационные или электрические силы). Состояние такой системы задается  $6N$ -мерным вектором  $\mathbf{u}$ , который образован пространственными координатами  $\mathbf{x}_\mu$  и компонентами скоростей  $\mathbf{v}_\mu$  всех частиц ( $1 \leq \mu \leq N$ ). Таким образом, согласно законам движения Ньютона, эволюция системы во времени определяется системой  $6N$  обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_\mu}{dt} &= \mathbf{v}_\mu, \\ \frac{d\mathbf{v}_\mu}{dt} &= \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{e_\mu e_\nu}{m_\mu} \cdot \frac{(\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_\nu)}{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_\nu|^3}, \quad 1 \leq \mu \leq N, \end{aligned} \quad (5.22)$$

где  $m_\mu$  — масса  $\mu$ -й частицы, а  $e_\mu$  — заряд  $\mu$ -й частицы в случае электростатического взаимодействия или величина, пропорциональная массе ( $e_\mu = m_\mu \sqrt{-G}$ ) в случае гравитационного взаимодействия.

При  $N = 2$  нетрудно найти аналитическое решение этой системы. Например, система уравнений часто упрощается, если перейти к системе координат, связанной с центром масс, так как при этом сразу же выделяется инвариант движения, а именно импульс центра масс. Другими инвариантами являются момент импульса и энергия. В случае трех частиц задача усложняется.

Одна из трудностей изучения системы с дальнедействующими силами состоит в том, что каждая частица может эффективно взаимодействовать с любой другой частицей. Поэтому в системе из  $N$  частиц, вообще говоря, существует  $1/2 N(N-1)$  взаимодействий. Следовательно, даже для численных методов число  $N$  ограничено

#### § 4. Прямое моделирование дальнего действия в системе $N$ тел

Теперь мы в состоянии поставить задачу для системы взаимодействующих частиц. Чтобы продемонстрировать существо дела и в качестве примера важного класса таких задач мы рассмотрим систему из  $N$  частиц, взаимодействующих с силой, обратно пропорциональной квадрату расстояния (гравитационные или электрические силы). Состояние такой системы задается  $6N$ -мерным вектором  $\mathbf{u}$ , который образован пространственными координатами  $x_\mu$  и компонентами скоростей  $v_\mu$  всех частиц ( $1 \leq \mu \leq N$ ). Таким образом, согласно законам движения Ньютона, эволюция системы во времени определяется системой  $6N$  обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{dx_\mu}{dt} &= v_\mu, \\ \frac{dv_\mu}{dt} &= \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{e_\mu e_\nu}{m_\mu} \cdot \frac{(x_\mu - x_\nu)}{|x_\mu - x_\nu|^3}, \quad 1 \leq \mu \leq N, \end{aligned} \quad (5.22)$$

где  $m_\mu$  — масса  $\mu$ -й частицы, а  $e_\mu$  — заряд  $\mu$ -й частицы в случае электростатического взаимодействия или величина, пропорциональная массе ( $e_\mu = m_\mu \sqrt{-G}$ ) в случае гравитационного взаимодействия.

При  $N = 2$  нетрудно найти аналитическое решение этой системы. Например, система уравнений часто упрощается, если перейти к системе координат, связанной с центром масс, так как при этом сразу же выделяется инвариант движения, а именно импульс центра масс. Другими инвариантами являются момент импульса и энергия. В случае трех частиц задача усложняется.

Одна из трудностей изучения системы с дальнедействующими силами состоит в том, что каждая частица может эффективно взаимодействовать с любой другой частицей. Поэтому в системе из  $N$  частиц, вообще говоря, существует  $1/2 N(N-1)$  взаимодействий. Следовательно, даже для численных методов число  $N$  ограничено

сверху величиной порядка  $10^3$ , так как при этом приходится следить за миллионом взаимодействий. Однако  $10^3$  частиц достаточно для проявления статистических свойств ансамбля, и это дает нам возможность «экспериментального» изучения статистической механики.

Рассмотрим сначала разностную аппроксимацию этих уравнений. Как и в случае движения одной частицы в потенциальном поле, уравнения для пространственных координат зависят только от компонент скоростей, а уравнения для скоростей зависят только от координат. Это означает, что наиболее простой и удивительный подход состоит в аппроксимации уравнений по методу с перешагиванием (гл. 5, § 2):

$$\begin{aligned} x_\mu^n &= x_\mu^{n-2} + v_\mu^{n-2} \Delta t, \\ v_\mu^{n+1} &= v_\mu^n + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{2e_\mu e_\nu \Delta t}{m_\mu} \cdot \frac{(x_\mu^n - x_\nu^n)}{|x_\mu^n - x_\nu^n|^3}, \quad 1 \leq \mu \leq N. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Мы обеспечим точное сохранение энергии и одновременно упростим вычисления, если будем использовать третий закон движения Ньютона, так чтобы увеличение импульса  $\mu$ -й частицы, обусловленное взаимодействием с  $\nu$ -й частицей, было равно уменьшению импульса  $\nu$ -й частицы, обусловленному  $\mu$ -й частицей.

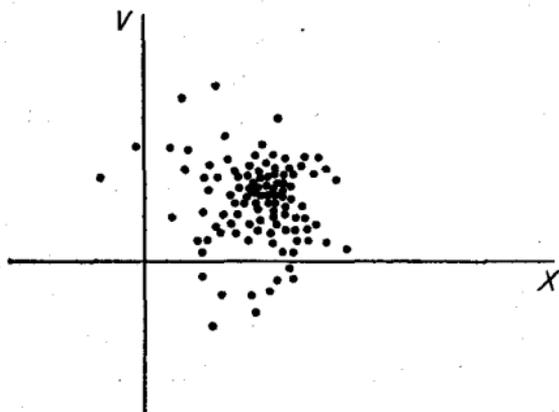
Если полный объем, занятый системой, равен  $V$ , то с каждой частицей можно связать свободный объем,

$$\frac{1}{n} = \frac{4\pi}{3} a^3 = \frac{V}{N}. \quad (5.24)$$

Здесь  $n$  — плотность частиц, а  $a$  — характерное расстояние взаимодействия. Следует выбирать достаточно малый шаг по времени, чтобы для всех  $\mu$  выполнялось условие

$$\Delta t \ll \frac{a}{|v|}. \quad (5.25)$$

Состояние системы в любой момент времени  $t$  наиболее удобно изображать, рисуя каждую частицу в виде точки в шестимерном фазовом пространстве  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ . Например, изображение в фазовом пространстве системы с одним



Фиг. 5.3. Наглядное описание системы взаимодействующих частиц в любой момент времени достигается изображением координат всех частиц в фазовом пространстве одной частицы.

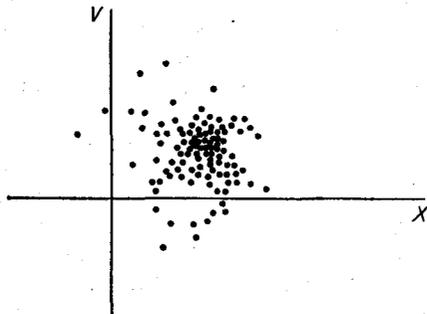
Здесь показана плотность или распределение частиц в фазовом пространстве.

пространственным измерением и одной компонентой скорости показано на фиг. 5.3.

## § 5. Равновесные статистические свойства в моделях с двухчастичным взаимодействием

«Точное» моделирование систем частиц, подчиняющихся непосредственно законам взаимодействия частиц, ограничено системами нескольких частиц ( $N \sim 1000$ ), поскольку в таких системах приходится прямым вычислением определять около  $N^2$  взаимодействий. Поэтому возможности непосредственного применения этих моделей к нестационарным системам многих тел невелики. Наиболее полезное приложение такой машинной модели состоит в определении термодинамических или равновесных макроскопических свойств системы, что достигается усреднением состояний отдельных частиц по всей системе. Очевидно, что, если мы хотим получить разумное статистическое среднее, нам нужно взять достаточно большое число частиц в системе, чтобы уменьшить

Состояние системы в любой момент времени  $t$  наиболее удобно изображать, рисуя каждую частицу в виде точки в шестимерном фазовом пространстве  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ . Например, изображение в фазовом пространстве системы с одним



Фиг. 5.3. Наглядное описание системы взаимодействующих частиц в любой момент времени достигается изображением координат всех частиц в фазовом пространстве одной частицы.

Здесь показана плотность или распределение частиц в фазовом пространстве.

пространственным измерением и одной компонентой скорости показано на фиг. 5.3.

### § 5. Равновесные статистические свойства в моделях с двухчастичным взаимодействием

«Точное» моделирование систем частиц, подчиняющихся непосредственно законам взаимодействия частиц, ограничено системами нескольких частиц ( $N \sim 1000$ ), поскольку в таких системах приходится прямым вычислением определять около  $N^2$  взаимодействий. Поэтому возможности непосредственного применения этих моделей к нестационарным системам многих тел невелики. Наиболее полезное приложение такой машинной модели состоит в определении термодинамических или равновесных макроскопических свойств системы, что достигается усреднением состояний отдельных частиц по всей системе. Очевидно, что, если мы хотим получить разумное статистическое среднее, нам нужно взять достаточно большое число частиц в системе, чтобы уменьшить

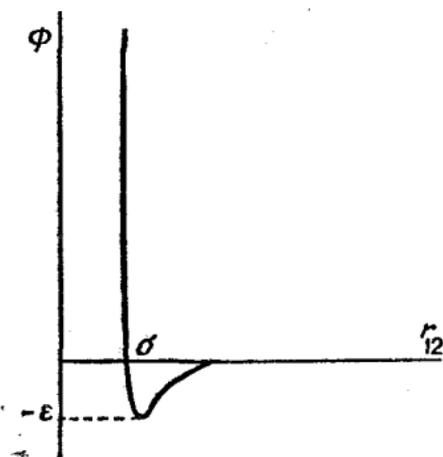
флуктуации, связанные с отдельными частицами. Так, в системах частиц с короткодействующими силами достаточно примерно 1000 частиц (миллион взаимодействий) для проявления статистических свойств. Поэтому, в частности, при изучении классических жидкостей и твердых тел, где молекулярные силы являются близкодействующими (например, вандерваальсовского типа), модели двухчастичного взаимодействия получили наибольшее распространение.

Если известны потенциалы или силы, действующие между молекулами, образующими классическую жидкость, машинная модель системы взаимодействующих молекул позволяет получить уравнение состояния среды, описывает такие термодинамические свойства, как фазовые переходы, магнитная и диэлектрическая проницаемости. Однако часто силы, действующие между молекулами, неизвестны. Несмотря на это, постулируя вид этих сил, можно с помощью моделей с двухчастичным взаимодействием получить предположительные свойства. В результате сравнения с экспериментом можно в свою очередь постулировать улучшенные молекулярные потенциалы. Таким образом, машинную модель системы  $N$  тел с дальним действием можно использовать для получения информации, во-первых, о макроскопических термодинамических свойствах жидкостей и, во-вторых, о микроскопических молекулярных свойствах.

Два подхода оказались особенно успешными при установлении связи между термодинамическими и микроскопическими молекулярными свойствами. В *методе молекулярной динамики* [26, 27] точная эволюция во времени системы из  $N$  молекул прослеживается путем постепенного интегрирования детерминистических уравнений движения для каждой молекулы. После достаточного числа шагов по времени предполагается, что термодинамическое равновесие наступило, и термодинамические свойства определяются с помощью *усреднения по времени* тех микроскопических свойств, которые служат предметом изучения. В *методе Монте-Карло* используются принципы статистической механики Гиббса и термодинамические свойства определяются путем *усреднения по ансамблю* [28]. Мы рассмотрим оба

подхода, но здесь подчеркнем, что второй из них, использующий метод Монте-Карло, имеет общее значение для широкого круга задач, и, как подсказывает название метода, решение получается в ограниченное время с помощью методики случайного выборочного исследования.

В обоих методах мы строим систему  $N$  молекул в некотором объеме  $V$ , а для описания бесконечной среды



Фиг. 5.4. Потенциал Леннарда-Джонса, используемый для описания взаимодействия между сферически-симметричными атомами или молекулами [уравнение (5.26)].

Потенциал описывает отталкивание на коротких расстояниях и слабое притяжение на больших расстояниях.

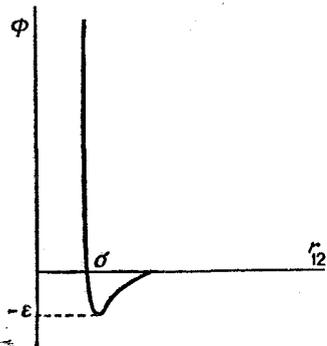
обычно используются периодические граничные условия. Допустим, что между  $1/2N(N-1)$  парами частиц действует двухчастичный потенциал. В качестве примера такого потенциала можно рассмотреть потенциал Леннарда-Джонса

$$\Phi(r_{12}) = 4\epsilon \left\{ \left( \frac{\sigma}{r_{12}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{12}} \right)^6 \right\}, \quad (5.26)$$

где  $r_{12}$  — расстояние между центрами молекул 1 и 2, а  $\epsilon$  и  $\sigma$  — постоянные. Такой потенциал изображен на фиг. 5.4 и описывает притяжение, когда молекулы удалены, и отталкивание, когда они сближены. В этом частном случае поле выбрано центральным и консервативным, но в общем случае можно легко использовать

подхода, но здесь подчеркнем, что второй из них, использующий метод Монте-Карло, имеет общее значение для широкого круга задач, и, как подсказывает название метода, решение получается в ограниченное время с помощью методики случайного выборочного исследования.

В обоих методах мы строим систему  $N$  молекул в некотором объеме  $V$ , а для описания бесконечной среды



Фиг. 5.4. Потенциал Леннарда-Джонса, используемый для описания взаимодействия между сферически-симметричными атомами или молекулами [уравнение (5.26)].

Потенциал описывает отталкивание на коротких расстояниях и слабое притяжение на больших расстояниях.

обычно используются периодические граничные условия. Допустим, что между  $1/2N(N-1)$  парами частиц действует двухчастичный потенциал. В качестве примера такого потенциала можно рассмотреть потенциал Леннарда-Джонса

$$\Phi(r_{12}) = 4\epsilon \left\{ \left( \frac{\sigma}{r_{12}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{12}} \right)^6 \right\}, \quad (5.26)$$

где  $r_{12}$  — расстояние между центрами молекул 1 и 2, а  $\epsilon$  и  $\sigma$  — постоянные. Такой потенциал изображен на фиг. 5.4 и описывает притяжение, когда молекулы удалены, и отталкивание, когда они сближены. В этом частном случае поле выбрано центральным и консервативным, но в общем случае можно легко использовать

потенциалы, описывающие более сложные явления, например полярные молекулы или молекулы с конечными размерами.

### 1. Определение термодинамических свойств классических сред с помощью усреднения по времени

Если потенциал взаимодействия молекул известен или выбран, то эволюция системы во времени протекает согласно детерминистическим законам движения каждой молекулы (гл. 5, § 4). Пусть каждая из частиц помечена индексом  $\mu$ , тогда дифференциальные уравнения движения для  $\mu$ -й частицы имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{dx_\mu}{dt} &= v_\mu, \\ \frac{dv_\mu}{dt} &= -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \Phi(|x_\mu - x_\nu|), \end{aligned} \quad (5.27)$$

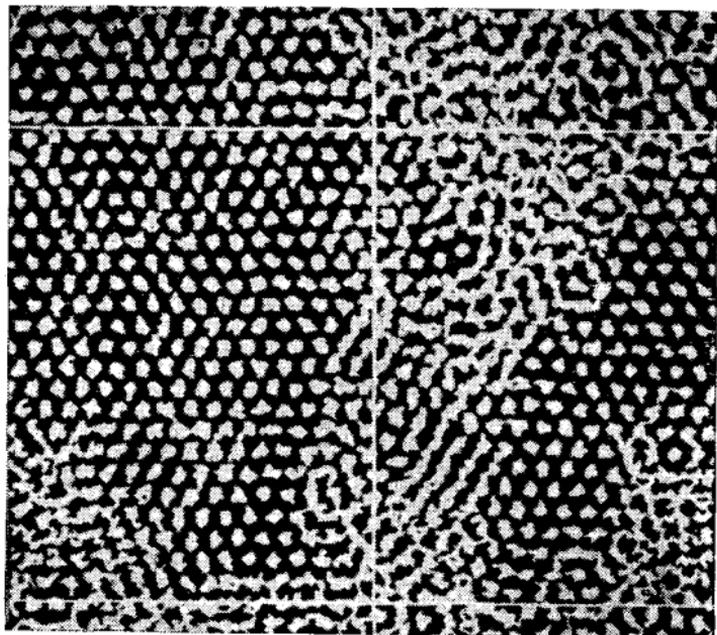
где пространственная производная в правой части уравнения (5.27) означает градиент, вычисленный в точке расположения  $\mu$ -й частицы. В вычислениях обычно используется скалярная сила  $F(r) = -\partial\Phi/\partial r$ , а не потенциал, так как это позволяет избежать разностного дифференцирования по пространству.

В этой записи (5.27) сила считается центральной и консервативной, поэтому, как и раньше (гл. 5, § 4), наиболее подходящим для интегрирования уравнений по времени оказывается метод с перешагиванием. В данный момент времени  $n-1$  частица  $\mu$  имеет координаты  $x_\mu^{n-2}$ ,  $v_\mu^{n-1}$  и уравнения движения интегрируются с двойным шагом по времени:

$$\begin{aligned} x_\mu^n &= x_\mu^{n-2} + 2\Delta t v_\mu^{n-1}, \\ v_\mu^{n+1} &= v_\mu^{n-1} + \frac{2\Delta t}{m} \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N F(|x_\mu^n - x_\nu^n|) \frac{x_\mu^n - x_\nu^n}{|x_\mu^n - x_\nu^n|}, \end{aligned} \quad (5.28)$$

$$1 \leq \mu \leq N.$$

Микроскопические или молекулярные свойства легко усреднить по всем частицам и по большому числу шагов по времени, в результате чего будут получены искомые макроскопические термодинамические свойства.



Фиг. 5.5. График пространственного расположения орбит множества взаимодействующих молекул.

Этот пример иллюстрирует существование твердой и жидкой фаз [29].

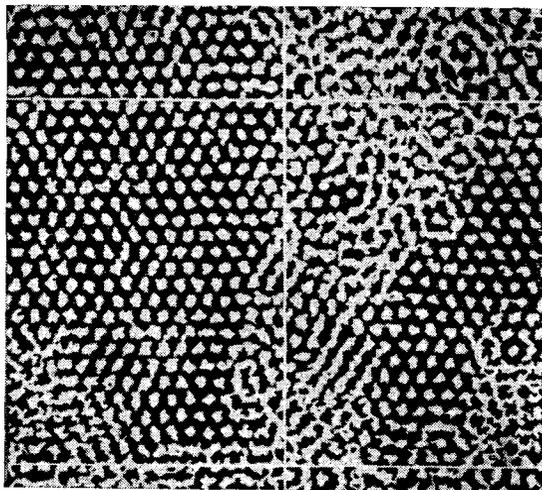
Например, термодинамическая величина — внутренняя энергия — определяется формулой

$$U = \frac{3}{2} kT + \bar{\Phi}, \quad (5.29)$$

где  $\frac{3}{2}kT$  — тепловая или средняя кинетическая энергия на одну частицу ( $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура), а  $\bar{\Phi}$  — усредненная потенциальная энергия, приходящаяся на одну частицу. Для определения температуры усредним полную кинетическую энергию системы по множеству шагов по времени  $p$ :

$$\frac{3}{2} kT = \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{p} \sum_{n=1}^p \sum_{\mu=1}^N \frac{1}{2} m (v_{\mu}^n)^2 \quad (5.30)$$

Микроскопические или молекулярные свойства легко усреднить по всем частицам и по большому числу шагов по времени, в результате чего будут получены искомые макроскопические термодинамические свойства.



Фиг. 5.5. График пространственного расположения орбит множества взаимодействующих молекул. Этот пример иллюстрирует существование твердой и жидкой фаз [29].

Например, термодинамическая величина — внутренняя энергия — определяется формулой

$$U = \frac{3}{2} kT + \bar{\Phi}, \quad (5.29)$$

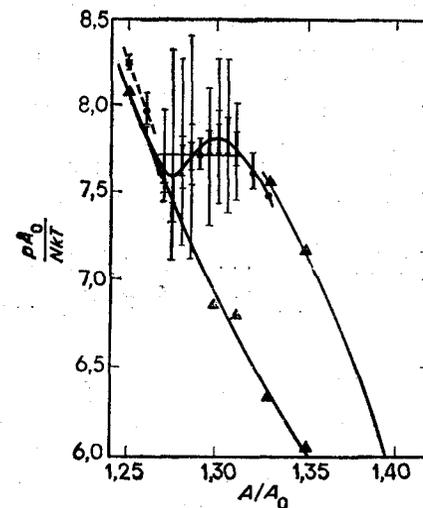
где  $\frac{3}{2}kT$  — тепловая или средняя кинетическая энергия на одну частицу ( $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура), а  $\bar{\Phi}$  — усредненная потенциальная энергия, приходящаяся на одну частицу. Для определения температуры усредним полную кинетическую энергию системы по множеству шагов по времени  $p$ :

$$\frac{3}{2} kT = \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{p} \sum_{n=1}^p \sum_{\mu=1}^N \frac{1}{2} m (v_{\mu}^n)^2 \quad (5.30)$$

и аналогично усредним полную потенциальную энергию:

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{2N} \cdot \frac{1}{p} \sum_{n=1}^p \sum_{\mu=1}^N \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \Phi(|\mathbf{x}_{\mu}^n - \mathbf{x}_{\nu}^n|). \quad (5.31)$$

Этот метод был применен к широкому кругу явлений в классических средах, в частности, при получении уравнения состояния неидеального газа и при изучении фазовых переходов (см. фиг. 5.5 и 5.6). Данный метод



Фиг. 5.6. Пример фазовой диаграммы, полученной методом молекулярной динамики [29].

Кривые показывают область (в трехмерном объеме) и значения давления, при которых происходят фазовые переходы.

применяется также в термодинамике неравновесных систем, когда решаются уравнения для макроскопической скорости движения системы к состоянию равновесия.

Рассмотренный подход был продемонстрирован в случае центрального консервативного потенциала, однако этот метод в полной мере пригоден и для изучения термодинамических свойств полярных молекул как

твердых тел, так и жидкостей, когда введены вращательные степени свободы. Последнее особенно важно при исследовании электрических и магнитных свойств веществ.

## 2. Усреднение по ансамблю: метод Монте-Карло

Ввиду сложности решения детерминистических уравнений движения для системы многих частиц статистическая механика Гиббса использует идею усреднения по ансамблю вместо усреднения по времени. Аналогично и вычислительная механика в качестве другого способа определения изучаемых термодинамических переменных использует непосредственное вычисление среднего по ансамблю систем [28].

Для простоты сформулируем двумерную задачу, причем, как и раньше, любое состояние системы  $N$  частиц можно представить в виде точки в  $4N$ -мерном фазовом пространстве. Элемент объема в таком пространстве равен

$$dv^{2N} dx^{2N} = (dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 \dots dx_N dy_N) \times \\ \times (dv_{x1} dv_{y1} dv_{x2} dv_{y2} \dots dv_{xN} dv_{yN}),$$

где нижний индекс означает номер частицы рассматриваемой системы. Задавшись микроскопической величиной  $u$ , определенной в каждой точке фазового пространства, мы хотим определить равновесное термодинамическое значение  $\bar{u}$ . Мы используем канонический ансамбль, и, согласно статистической механике,  $\bar{u}$  можно определить усреднением по ансамблю

$$\bar{u} = \frac{\int u \exp(-E/kT) dx^{2N} dv^{2N}}{\int \exp(-E/kT) dx^{2N} dv^{2N}}. \quad (5.32)$$

Величина  $E$  означает потенциальную энергию каждого состояния в фазовом пространстве или системы, принадлежащей ансамблю.

Теперь задача фактически состоит в вычислении многотысячекратного интеграла, и очевидно, что этого нельзя сделать методами разностного интегрирования. С математической точки зрения интеграл можно оце-

твердых тел, так и жидкостей, когда введены вращательные степени свободы. Последнее особенно важно при исследовании электрических и магнитных свойств веществ.

## 2. Усреднение по ансамблю: метод Монте-Карло

Ввиду сложности решения детерминистических уравнений движения для системы многих частиц статистическая механика Гиббса использует идею усреднения по ансамблю вместо усреднения по времени. Аналогично и вычислительная механика в качестве другого способа определения изучаемых термодинамических переменных использует непосредственное вычисление среднего по ансамблю систем [28].

Для простоты сформулируем двумерную задачу, причем, как и раньше, любое состояние системы  $N$  частиц можно представить в виде точки в  $4N$ -мерном фазовом пространстве. Элемент объема в таком пространстве равен

$$dv^{2N} dx^{2N} = (dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 \dots dx_N dy_N) \times \\ \times (dv_{x1} dv_{y1} dv_{x2} dv_{y2} \dots dv_{xN} dv_{yN}),$$

где нижний индекс означает номер частицы рассматриваемой системы. Задавшись микроскопической величиной  $u$ , определенной в каждой точке фазового пространства, мы хотим определить равновесное термодинамическое значение  $\bar{u}$ . Мы используем канонический ансамбль, и, согласно статистической механике,  $\bar{u}$  можно определить усреднением по ансамблю

$$\bar{u} = \frac{\int u \exp(-E/kT) dx^{2N} dv^{2N}}{\int \exp(-E/kT) dx^{2N} dv^{2N}}. \quad (5.32)$$

Величина  $E$  означает потенциальную энергию каждого состояния в фазовом пространстве или системы, принадлежащей ансамблю.

Теперь задача фактически состоит в вычислении многотысячекратного интеграла, и очевидно, что этого нельзя сделать методами разностного интегрирования. С математической точки зрения интеграл можно оце-

нить, *выбрав* статистическую совокупность значений подынтегрального выражения в формуле (5.32) в типичных точках фазового пространства. Такой подход широко применяется при вычислении интегралов и называется методом Монте-Карло.

Можно сформулировать математическую задачу, подойдя к усреднению по ансамблю с другой точки зрения. Если канонический ансамбль можно построить численно, то

$$\bar{u} = \frac{1}{M} \sum_{v=1}^M u_v, \quad (5.33)$$

где  $v$  обозначает индекс системы из ансамбля, а  $M$  — большое число — число систем в ансамбле. Однако ансамбль должен быть построен так, чтобы удовлетворять требованиям статистической механики. Согласно подходу Толмена [30], при допущении эквивалентности усреднения по времени и усреднения по ансамблю должно выполняться фундаментальное предположение, которое состоит в равенстве априорных вероятностей для равных объемов фазового пространства. Во-вторых, ансамбль должен быть каноническим, т. е. вероятность того, что система принадлежит ансамблю, пропорциональна  $\exp(-E/kT)$ .

Такой ансамбль можно построить численно с помощью процесса Маркова (фиг. 5.7), при котором набор систем образуется последовательно в мнимом времени. Выбрав систему как точку в фазовом пространстве на шаге  $p$ , мы получаем новую систему, входящую в ансамбль, перемещаясь на шаге  $p+1$  в соседнюю точку фазового пространства. Ансамбль состоит из всех состояний от  $p=1$  до  $p=M$ , через которые прошла система. Исходя из некоторого состояния на шаге  $p$ , мы имеем большое число возможностей выбора следующего состояния на шаге  $p'=p+1$ . Выбор производится случайно, и в результате осуществляется переход в одно из множества состояний, так что эту марковскую процедуру можно изобразить как путь по ветвям растущего дерева (фиг. 5.7). Очевидно, что после очень небольшого числа шагов ансамбль может содержать очень

большое разнообразие систем или состояний, хотя выбран лишь один частный путь. Если все частицы системы могут двигаться, то все состояния в конфигурационном пространстве доступны, что является очевидным предварительным условием выполнения предположения о равенстве априорных вероятностей.

Шаг

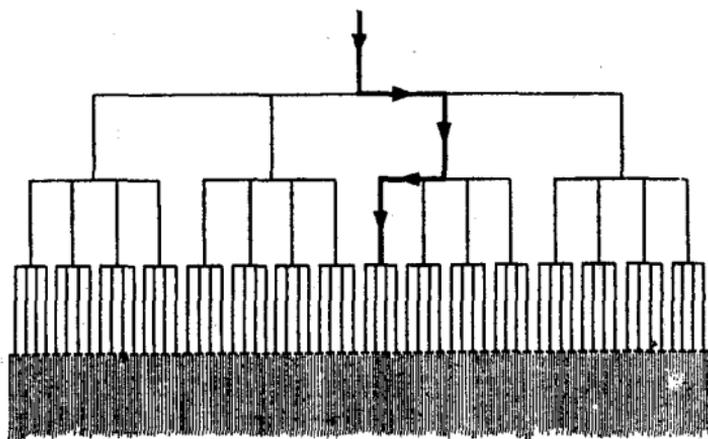
$p=1$

$p=2$

$p=3$

$p=4$

$p=5$



Фиг. 5.7. Схематическое изображение марковского процесса, используемого при построении допустимых систем, образующих канонический ансамбль в методе Монте-Карло.

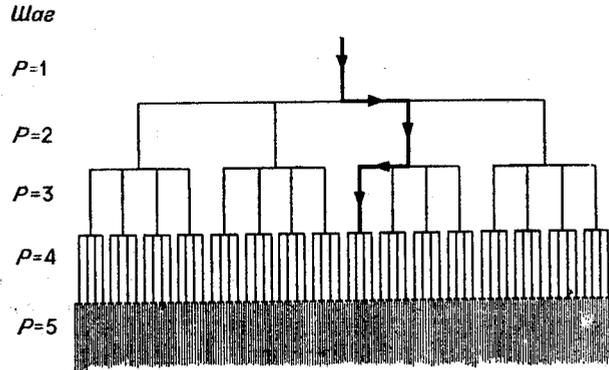
Количество допустимых систем, которые могут образоваться, растет геометрически. Случайным образом выбирается один частный путь.

Теперь можно количественно определить алгоритм, используемый в построении требуемого ансамбля. Пусть  $N$  частиц вначале распределены внутри объема  $V$  каким-нибудь произвольным способом. Возьмем некоторую частицу (например,  $\mu = 1$ ) и переместим ее случайным образом в любую точку квадрата площадью  $a^2$ ,

$$\begin{aligned} x_{\mu}^{p+1} &= x_{\mu}^p + a \left( R_1 - \frac{1}{2} \right), \\ y_{\mu}^{p+1} &= y_{\mu}^p + a \left( R_2 - \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (5.34)$$

где  $R_1$  и  $R_2$  — случайные числа из интервала  $0 \leq R \leq 1$ . В результате на шаге  $p+1$  образуется новая система

большое разнообразие систем или состояний, хотя выбран лишь один частный путь. Если все частицы системы могут двигаться, то все состояния в конфигурационном пространстве доступны, что является очевидным предварительным условием выполнения предположения о равенстве априорных вероятностей.



Фиг. 5.7. Схематическое изображение марковского процесса, используемого при построении допустимых систем, образующих канонический ансамбль в методе Монте-Карло.

Количество допустимых систем, которые могут образоваться, растет геометрически. Случайным образом выбирается один частный путь.

Теперь можно количественно определить алгоритм, используемый в построении требуемого ансамбля. Пусть  $N$  частиц вначале распределены внутри объема  $V$  каким-нибудь произвольным способом. Возьмем некоторую частицу (например,  $\mu = 1$ ) и переместим ее случайным образом в любую точку квадрата площадью  $a^2$ ,

$$\begin{aligned} x_{\mu}^{p+1} &= x_{\mu}^p + a \left( R_1 - \frac{1}{2} \right), \\ y_{\mu}^{p+1} &= y_{\mu}^p + a \left( R_2 - \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (5.34)$$

где  $R_1$  и  $R_2$  — случайные числа из интервала  $0 \leq R \leq 1$ . В результате на шаге  $p+1$  образуется новая система

в состоянии  $(x_1^p, y_1^p, \dots, x_{\mu}^{p+1}, y_{\mu}^{p+1}, \dots, x_N^p, y_N^p)$ . Так как случайные числа равновероятны, то новое состояние получено способом, который согласуется с требованием равенства априорных вероятностей. При перемещении системы произошло изменение энергии  $\Delta E$ , которое можно вычислить:

$$\Delta E = \sum_{\substack{v=1 \\ v \neq \mu}}^N \Phi(|x_{\mu}^{p+1} - x_v^{p+1}|) - \Phi(|x_{\mu}^p - x_v^p|). \quad (5.35)$$

Перед нами стоит задача построить канонический ансамбль так, чтобы частота появления систем, образующих ансамбль, была пропорциональна величине  $\exp(-E/kT)$ . Такое распределение по ансамблю можно получить, решая вопрос, является ли вновь полученная система допустимой или нет. Если  $\Delta E < 0$ , т. е. перемещение приводит к системе с меньшей энергией, то система включается в ансамбль. С другой стороны, если  $\Delta E > 0$ , т. е. образовалась система с большей энергией, то система включается в ансамбль лишь с вероятностью  $\exp(-\Delta E/kT)$ . Для этого выбирается третье случайное число  $R_3$ , и если  $R_3 < \exp(-\Delta E/kT)$ , то новая система присоединяется к ансамблю, а если  $R_3 > \exp(-\Delta E/kT)$ , то новая система отбрасывается и к ансамблю добавляется еще один раз старая система.

На этом данный шаг завершен, и в течение следующего шага перемещается другая частица  $\mu'$ . Очевидно, что, чем больше систем содержится в ансамбле ( $M$  — большое число), тем лучше будет решение, но для удовлетворения условия равенства априорных вероятностей необходимо построить по крайней мере  $M_{\min} = NL/a$  систем. Выбор параметра  $a$  тоже может быть произволен, однако установлено, что сходимость при определении термодинамических величин будет более быстрой, если значение  $a$  будет порядка расстояния между частицами. Искомую термодинамическую переменную можно получить просто как среднее по ансамблю (5.33).

В общем случае метод усреднения по ансамблю по способу Монте-Карло значительно превосходит по

быстродействию прямой метод усреднения по времени с использованием детерминистических уравнений движения (см. гл. 5, § 5, п. 1). Однако этот метод имеет более узкую область применения, так как он, очевидно, непригоден в неравновесной термодинамике. Тем не менее основная математическая процедура вычисления интеграла с помощью статистической выборки значений подынтегрального выражения имеет широкую применимость.

быстродействию прямой метод усреднения по времени с использованием детерминистических уравнений движения (см. гл. 5, § 5, п. 1). Однако этот метод имеет более узкую область применения, так как он, очевидно, непригоден в неравновесной термодинамике. Тем не менее основная математическая процедура вычисления интеграла с помощью статистической выборки значений подынтегрального выражения имеет широкую применимость.

### § 1. Среднее поле системы частиц

Количественное изучение системы  $N$  частиц при прямом использовании двухчастичных сил (гл. 5) имеет ограниченные возможности, так как для этого приходится рассчитывать примерно  $N^2$  взаимодействий. Если ввести усредненную силу или поле, создаваемое всеми частицами системы, то прямой расчет каждой пары взаимодействий становится ненужным. Это позволяет численно изучать системы очень большого числа частиц (обычно  $10^6$  частиц). В настоящей главе будут даны описания моделей полей частиц и их приложения, в частности, будут рассмотрены модели с дальнедействующими полями, с помощью которых можно численно изучать гравитационные галактики или плазменные явления. Поэтому нужно выяснить условия, при которых обосновано введение средних сил или полей системы, а также способ определения таких средних сил.

#### 1. Непрерывные поля дальнедействующих сил

На языке «точной» модели парного взаимодействия частиц (гл. 5) система  $N$  частиц описывается  $6N$  уравнениями первого порядка (5.22) для координат и скорости  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  каждой частицы:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_\mu}{dt} &= \mathbf{v}_\mu, \\ \frac{d\mathbf{v}_\mu}{dt} &= \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{e_\nu e_\mu (\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_\nu)}{m_\mu |\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_\nu|^3}, \quad 1 \leq \mu \leq N, \end{aligned} \quad (6.1)$$

где  $m_\mu$  — масса каждой частицы, а  $e_\mu$  — заряд частицы в случае электростатических сил и величина, пропорциональная массе, в случае гравитационных сил,  $e_\mu = m_\mu \sqrt{-G}$ . Таким образом, для каждой частицы правая часть уравнения для скорости образована суммированием по всем  $N-1$  действующим на частицу силам.

Вместо того чтобы явно определять силу, действующую на частицу, можно *без потери общности* ввести напряженность электрического или гравитационного поля в каждой точке  $x$ .

Для частицы с номером  $\mu$ ,  $1 \leq \mu \leq N$ ,

$$\frac{dv_\mu}{dt} = \frac{e_\mu}{m_\mu} \mathbf{E}(x_\mu) \quad (6.2)$$

и

$$\mathbf{E}(x) = \sum_{v=1}^N \mathbf{E}_v = \sum_{v=1}^N e_v \frac{x - x_v}{|x - x_v|^3}, \quad (6.3)$$

где предполагается, что собственное поле частицы в сумму не входит. Представление о поле применимо только для континуума. Для описания поля все конфигурационное пространство нужно разделить на ряд небольших ячеек. В трехмерном случае каждую ячейку пометим тремя индексами:  $i, j, k$  (в прямоугольном параллелепипеде содержится  $ijk$  ячеек).

Предпочтительнее определять не векторное поле на такой сетке, а электрический или гравитационный потенциал в каждой ячейке, так что уравнение движения каждой частицы  $\mu$  принимает вид

$$\frac{dv_\mu}{dt} = - \frac{e_\mu}{m_\mu} \frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu}, \quad (6.4)$$

где использованное в правой части обозначение производной следует понимать как градиент потенциала в точке  $x_\mu$ . Полный потенциал [потенциал поля (6.3)] складывается из потенциалов отдельных частиц

$$\Phi(x) = \sum_{v=1}^N \Phi_v = \sum_{v=1}^N \frac{e_v}{|x - x_v|}. \quad (6.5)$$

где  $m_\mu$  — масса каждой частицы, а  $e_\mu$  — заряд частицы в случае электростатических сил и величина, пропорциональная массе, в случае гравитационных сил,  $e_\mu = m_\mu \sqrt{-G}$ . Таким образом, для каждой частицы правая часть уравнения для скорости образована суммированием по всем  $N-1$  действующим на частицу силам.

Вместо того чтобы явно определять силу, действующую на частицу, можно *без потери общности* ввести напряженность электрического или гравитационного поля в каждой точке  $x$ .

Для частицы с номером  $\mu$ ,  $1 \leq \mu \leq N$ ,

$$\frac{dv_\mu}{dt} = \frac{e_\mu}{m_\mu} \mathbf{E}(x_\mu) \quad (6.2)$$

и

$$\mathbf{E}(x) = \sum_{v=1}^N \mathbf{E}_v = \sum_{v=1}^N e_v \frac{x - x_v}{|x - x_v|^3}, \quad (6.3)$$

где предполагается, что собственное поле частицы в сумму не входит. Представление о поле применимо только для континуума. Для описания поля все конфигурационное пространство нужно разделить на ряд небольших ячеек. В трехмерном случае каждую ячейку пометим тремя индексами:  $i, j, k$  (в прямоугольном параллелепипеде содержится  $ijk$  ячеек).

Предпочтительнее определять не векторное поле на такой сетке, а электрический или гравитационный потенциал в каждой ячейке, так что уравнение движения каждой частицы  $\mu$  принимает вид

$$\frac{dv_\mu}{dt} = - \frac{e_\mu}{m_\mu} \frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu}, \quad (6.4)$$

где использованное в правой части обозначение производной следует понимать как градиент потенциала в точке  $x_\mu$ . Полный потенциал [потенциал поля (6.3)] складывается из потенциалов отдельных частиц

$$\Phi(x) = \sum_{v=1}^N \Phi_v = \sum_{v=1}^N \frac{e_v}{|x - x_v|}. \quad (6.5)$$

Суммирование в правой части (6.5) при вычислении полного потенциала эквивалентно решению уравнения Пуассона<sup>1)</sup>, что и позволяет перейти к последнему:

$$\nabla^2 \Phi = -4\rho, \quad (6.6)$$

где  $\rho$  — плотность заряда или отрицательной массы в системе. Эта плотность заряда или массы определяется на сетке путем соотношения определенным образом (гл. 6, § 2) каждой частицы ячейке или ячейкам сетки.



Фиг. 6.1. Сравнение потенциала точечного заряда в непрерывном пространстве с потенциалом заряженного облака, отвечающего частице на разностной сетке.

На большом расстоянии от точки или от облака потенциалы совпадают.

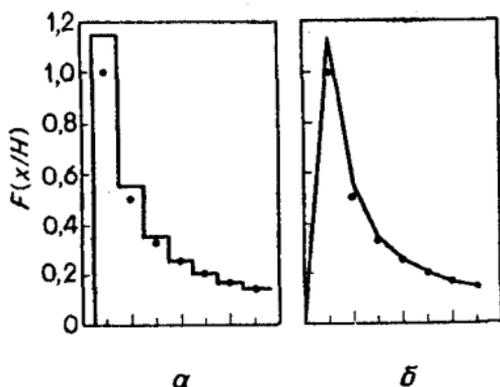
Очевидно, что для того чтобы описание взаимодействия «частица — поле» было столь же точным, как описание «частица — частица», разностная сетка должна быть очень мелкой, а именно шаг сетки  $\Delta$  должен быть много меньше среднего расстояния между частицами:

$$\Delta \ll \frac{L}{N^{1/3}}, \quad (6.7)$$

где система частиц занимает объем  $L^3$ . Ошибки возникают из-за того, что плотность зарядов, создающих потенциал, определяется на сетке размазыванием заряда частиц по всей площади соответствующей ячейки или группы ячеек. Следовательно, теперь уже описываются

<sup>1)</sup> См., например, работу [31].

не точечные частицы, а скорее система частиц конечного размера или система, состоящая из групп заряженных частиц с характерным объемом  $\Delta^3$  (см. фиг. 6.1 и 6.2). Такая группа или облако зарядов тем точнее аппроксимирует точечную частицу, чем больше расстояние от его центра, поэтому, если выполнено условие (6.7), система типа «частица — поле» вполне равносильна «точной» системе «частица — частица». Размазывание заряда, т. е.

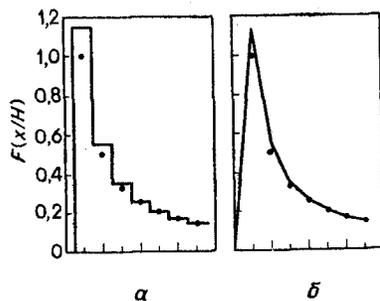


Фиг. 6.2. Силы, действующие на две заряженные частицы на разностной сетке (из работы [32]).  
 а — весь заряд частицы приписан ближайшему узлу сетки; б — заряд частицы распределен между четырьмя ближайшими ячейками.

замена его заряженным облаком, приводит к конечности потенциала, в то время как при приближении к точечной частице ее потенциал становится сколь угодно большим. При большом удалении от частицы потенциалы точки и облака будут неразличимы (фиг. 6.1). Если в машинной системе достигнуто большое [в смысле условия (6.7)] расстояние между частицами, то опять можно будет описывать лишь небольшое количество частиц, так как потребуется большое число арифметических операций для разностного решения уравнения Пуассона на такой сетке.

Теперь мы попробуем выяснить, что получится, если увеличить плотность частиц на сетке, нарушая условие (6.7) «точного» моделирования с помощью системы частица — поле. Очевидно, что такое решение будет плохо аппроксимировать точное решение, поскольку

не точечные частицы, а скорее система частиц конечного размера или система, состоящая из групп заряженных частиц с характерным объемом  $\Delta^3$  (см. фиг. 6.1 и 6.2). Такая группа или облако зарядов тем точнее аппроксимирует точечную частицу, чем больше расстояние от его центра, поэтому, если выполнено условие (6.7), система типа «частица — поле» вполне равносильна «точной» системе «частица — частица». Размазывание заряда, т. е.



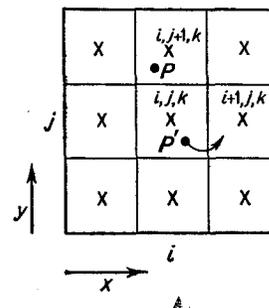
Фиг. 6.2. Силы, действующие на две заряженные частицы на разностной сетке (из работы [32]).

*a* — весь заряд частицы приписан ближайшему узлу сетки; *b* — заряд частицы распределен между четырьмя ближайшими ячейками.

замена его заряженным облаком, приводит к конечности потенциала, в то время как при приближении к точечной частице ее потенциал становится сколь угодно большим. При большом удалении от частицы потенциалы точки и облака будут неразличимы (фиг. 6.1). Если в машинной системе достигнуто большое [в смысле условия (6.7)] расстояние между частицами, то опять можно будет описывать лишь небольшое количество частиц, так как потребуются большое число арифметических операций для разностного решения уравнения Пуассона на такой сетке.

Теперь мы попробуем выяснить, что получится, если увеличить плотность частиц на сетке, нарушая условие (6.7) «точного» моделирования с помощью системы частица — поле. Очевидно, что такое решение будет плохо аппроксимировать точное решение, поскольку

каждая частица «чувствует» размазанное или усредненное поле, а не индивидуальное поле, создаваемое локальными точечными частицами. С другой стороны, если мы изучаем коллективные свойства всей системы, а не особенности точного решения, то основной интерес представляют именно общие свойства усредненных полей, а не индивидуальные поля. С увеличением числа частиц на сетке индивидуальные характеристики теряются, но можно надеяться, что общие характеристики сохранятся.



Фиг. 6.3. Флуктуации, возникающие в методе «частицы в ячейке». Если небольшая ошибка вызовет перемещение частицы из ячейки  $(i, j, k)$  в ячейку  $(i+1, j, k)$ , сила, действующая на частицу  $p$ , изменится радикальным образом.

Однако с увеличением плотности частиц появляется трудность, обусловленная тем, что малые возмущения решения приводят к большим флуктуациям. Чтобы пояснить этот эффект, предположим, что частица  $p$  находится в ячейке  $(i, j+1, k)$ , примыкающей к ячейкам  $(i, j, k)$  и  $(i+1, j, k)$  (фиг. 6.3), кроме того, допустим, что другая частица  $p'$  находится в ячейке  $(i, j, k)$  (увеличение числа частиц увеличивает вероятность занятости каждой ячейки, и вполне вероятно, что соседние ячейки окажутся занятыми). Если частица  $p'$  немного сместилась и заняла соседнюю ячейку  $(i+1, j, k)$ , то потенциал и соответственно поле, действующее на частицу  $p$ , изменятся коренным образом. Поэтому ясно, что шумы или флуктуации в такой системе очень велики. С другой стороны, мы можем уменьшить флуктуации

путем дальнейшего увеличения полного числа частиц до тех пор, пока число частиц в каждой ячейке не станет достаточно большим, так что, если одна частица сместится куда-нибудь, плотность в ячейке лишь немного изменится, и, следовательно, поле, действующее на частицу  $p$ , изменится так же незначительно. Это условие будет выполнено, если

$$\Delta \gg \frac{L}{N^{1/3}}. \quad (6.8)$$

Очевидно, что такая система является статистической и частицы движутся в усредненных полях, а не в локальном поле отдельных частиц. «Усреднение» достигается путем подсчета количества частиц в каждой ячейке, что позволяет определить средний заряд или плотность массы. Теперь мы займемся выяснением физических условий, если они существуют, законности такого подхода и пределов применимости предложенной модели.

## 2. Столкновения и непрерывность; дебаевский радиус

Для того чтобы раскрыть физический смысл статистической модели «частица — поле», рассмотрим систему заряженных частиц с однородной плотностью распределения заряда<sup>1)</sup>. В соответствии с вышеизложенным выясним происхождение электрического поля в некоторой произвольной точке  $p$  системы. Всю систему целесообразно разделить по отношению к точке  $p$  на два объема,  $V_1$  и  $V_2$ , где  $V_1$  — шар радиуса  $a$  с центром в  $p$ , а  $V_2$  — оставшаяся часть системы (фиг. 6.4). Если радиус, который мы обозначим  $\lambda_D = a$ , достаточно велик, то заряды внешнего объема по отношению к точке  $p$  ведут себя как непрерывная среда, а заряды, находящиеся внутри шара  $V_1$ , проявляются как дискретная структура, и поэтому их нужно описывать отдельно. Электрическое поле в точке  $p$  можно поэтому предста-

<sup>1)</sup> Такое представление непосредственно применимо к ионизованному газу. Аналогичные аргументы можно применить и к гравитационной системе звезд. Однако для простоты описания ниже будет использована терминология электростатики.

путем дальнейшего увеличения полного числа частиц до тех пор, пока число частиц в каждой ячейке не станет достаточно большим, так что, если одна частица сместится куда-нибудь, плотность в ячейке лишь немного изменится, и, следовательно, поле, действующее на частицу  $p$ , изменится так же незначительно. Это условие будет выполнено, если

$$\Delta \gg \frac{L}{N^{1/3}}. \quad (6.8)$$

Очевидно, что такая система является статистической и частицы движутся в усредненных полях, а не в локальном поле отдельных частиц. «Усреднение» достигается путем подсчета количества частиц в каждой ячейке, что позволяет определить средний заряд или плотность массы. Теперь мы займемся выяснением физических условий, если они существуют, законности такого подхода и пределов применимости предложенной модели.

## 2. Столкновения и непрерывность; дебаевский радиус

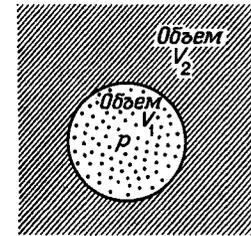
Для того чтобы раскрыть физический смысл статистической модели «частица—поле», рассмотрим систему заряженных частиц с однородной плотностью распределения заряда<sup>1)</sup>. В соответствии с вышеизложенным выясним происхождение электрического поля в некоторой произвольной точке  $p$  системы. Всю систему целесообразно разделить по отношению к точке  $p$  на два объема,  $V_1$  и  $V_2$ , где  $V_1$ —шар радиуса  $a$  с центром в  $p$ , а  $V_2$ —оставшаяся часть системы (фиг. 6.4). Если радиус, который мы обозначим  $\lambda_D = a$ , достаточно велик, то заряды внешнего объема по отношению к точке  $p$  ведут себя как непрерывная среда, а заряды, находящиеся внутри шара  $V_1$ , проявляются как дискретная структура, и поэтому их нужно описывать отдельно. Электрическое поле в точке  $p$  можно поэтому предста-

<sup>1)</sup> Такое представление непосредственно применимо к ионизованному газу. Аналогичные аргументы можно применить и к гравитационной системе звезд. Однако для простоты описания ниже будет использована терминология электростатики.

вить в виде суммы двух слагаемых: первое слагаемое  $E_1$ —локальное поле, создаваемое частицами объема  $V_1$ , и второе слагаемое  $E_2$ —среднее поле, созданное кажущимся континуумом зарядов внешнего объема  $V_2$ ,

$$E = E_1 + E_2. \quad (6.9)$$

Для того чтобы установить характерный радиус  $a = \lambda_D$  сферы, которая может служить границей двух



Фиг. 6.4. Дебаевская сфера.

Частица  $p$  взаимодействует с остальной системой, которую можно разделить на два объема: объем  $V_1$ , внутри которого проявляется дискретная природа частиц, и объем  $V_2$ , в котором оставшуюся часть системы можно рассматривать как континуум.

объемов, заметим, что если удалить все заряды из объема  $V_1$ , то потенциал внутри него принимает значение

$$4\pi n e a^2,$$

где  $n$ —значение плотности частиц. Пробная частица с кинетической энергией  $kT$ , входя внутрь сферы, приобретает потенциальную энергию

$$4\pi n e^2 a^2.$$

Если кинетическая энергия частицы  $kT$  значительно превосходит эту потенциальную энергию, то сфера лишь минимально повлияет на движение такой частицы. Поэтому дебаевская длина  $\lambda_D$  определяется из соотношения

$$4\pi n e^2 \lambda_D^2 = kT,$$

или

$$\lambda_D = \sqrt{\left(\frac{kT}{4\pi ne^2}\right)}. \quad (6.10)$$

На расстояниях, больших чем дебаевская длина, проявляются коллективные свойства системы; на расстояниях, меньших  $\lambda_D$ , важны микроскопические эффекты парного взаимодействия.

В статистической модели «частица — поле» нас интересуют коллективные явления (иначе можно в первом приближении ограничиться изучением движения отдельной частицы), поэтому в численной модели нужно брать макроскопический масштаб длин, больший чем дебаевская длина

$$L > \lambda_D. \quad (6.11)$$

Теперь ясен смысл каждого вклада в электрическое поле (6.9) в точке  $r$ . Поле  $E_2$ , обусловленное непрерывной средой  $V_2$ , представляет интерес как усредненное поле, связанное с коллективными явлениями.

Локальное поле  $E_1$  частиц, расположенных внутри дебаевского шара  $V_1$ , трудно определить количественно. Если в качестве поясняющего примера предположить, что заряды в шаре образуют правильную кубическую структуру, то из соображений симметрии понятно (и это было показано Лоренцем), что локальное поле  $E_1$  будет равно нулю. С другой стороны, локальное поле  $E_1$ , среднее по ансамблю шаров со случайным распределением зарядов в каждом из них, тоже составит нуль. Отсюда следует, что если в газообразной системе полное число заряженных частиц в дебаевском шаре объема  $V_1$  велико,

$$n_D \gg 1, \quad (6.12)$$

где

$$n_D = \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 n, \quad (6.13)$$

то с хорошей точностью локальное поле  $E_1$  можно положить равным нулю. Следует отметить, что небольшое локальное поле  $E_1$  все же будет присутствовать в связи с флуктуациями дебаевского числа  $n_D$ , и относительная амплитуда флуктуаций, очевидно, будет изменяться как

или

$$\lambda_D = \sqrt{\left(\frac{kT}{4\pi ne^2}\right)}. \quad (6.10)$$

На расстояниях, больших чем дебаевская длина, проявляются коллективные свойства системы; на расстояниях, меньших  $\lambda_D$ , важны микроскопические эффекты парного взаимодействия.

В статистической модели «частица — поле» нас интересуют коллективные явления (иначе можно в первом приближении ограничиться изучением движения отдельной частицы), поэтому в численной модели нужно брать макроскопический масштаб длин, больший чем дебаевская длина

$$L > \lambda_D. \quad (6.11)$$

Теперь ясен смысл каждого вклада в электрическое поле (6.9) в точке  $p$ . Поле  $E_2$ , обусловленное непрерывной средой  $V_2$ , представляет интерес как усредненное поле, связанное с коллективными явлениями.

Локальное поле  $E_1$  частиц, расположенных внутри дебаевского шара  $V_1$ , трудно определить количественно. Если в качестве поясняющего примера предположить, что заряды в шаре образуют правильную кубическую структуру, то из соображений симметрии понятно (и это было показано Лоренцем), что локальное поле  $E_1$  будет равно нулю. С другой стороны, локальное поле  $E_1$ , среднее по ансамблю шаров со случайным распределением зарядов в каждом из них, тоже составит нуль. Отсюда следует, что если в газообразной системе полное число заряженных частиц в дебаевском шаре объема  $V_1$  велико,

$$n_D \gg 1, \quad (6.12)$$

где

$$n_D = \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 n, \quad (6.13)$$

то с хорошей точностью локальное поле  $E_1$  можно положить равным нулю. Следует отметить, что небольшое локальное поле  $E_1$  все же будет присутствовать в связи с флуктуациями дебаевского числа  $n_D$ , и относительная амплитуда флуктуаций, очевидно, будет изменяться как

$1/\sqrt{n_D}$ . Точность приближения локального электрического поля к нулю будет тем выше, чем больше число частиц в дебаевском шаре.

### 3. Плазменная и гравитационная частоты

В соответствии с изложенным представлением о разделении явлений в системе на *парные* (частица — частица) *столкновительные* эффекты и *коллективные* эффекты можно каждому типу явлений сопоставить характерный масштаб времени. Время столкновений  $\tau_c$  определяется как время отклонения частицы на  $90^\circ$  под влиянием парных столкновений внутри дебаевской сферы.

Точно так же легко определить характерное время коллективных (плазменных или гравитационных) колебаний. Для этого заметим, что если в прямоугольной декартовой системе координат сместить все частицы из плоскости  $(y, z)$  на расстояние  $x$ , то, согласно закону Гаусса, возникнет электрическое поле

$$E_x = -4\pi e x. \quad (6.14)$$

Соответственно на каждую частицу будет действовать возвращающая сила

$$m\ddot{x} = eE_x, \quad (6.15)$$

откуда следует уравнение движения слоя частиц:

$$\ddot{x} + \left(\frac{4\pi ne^2}{m}\right)x = 0. \quad (6.16)$$

Это уравнение описывает простое гармоническое колебание с частотой (плазменная частота)

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi ne^2}{m}}, \quad (6.17)$$

или

$$\tau_p = \frac{2\pi}{\omega_p} = \sqrt{\frac{\pi m}{ne^2}}. \quad (6.18)$$

Период плазменных колебаний является основной мерой времени, характеризующей коллективные эффекты. Соответственно в галактике временным масшта-

бом служит период гравитационных колебаний звезды в потенциальной яме, образованной галактикой.

Не является неожиданным, и это можно показать строго [33], что время двухчастичных столкновений связано с временем коллективных колебаний соотношением

$$\frac{\tau_p}{\tau_c} = \frac{K}{n_D}, \quad (6.19)$$

где величина  $K$  примерно постоянна и по порядку равна единице. Поэтому если количество частиц внутри дебаевской сферы растет, то столкновительное время также увеличивается и столкновительные эффекты приобретают второстепенное значение. Такую систему называют *бесстолкновительной*. Во многих случаях в плазме и, как правило, в галактиках число частиц или звезд в дебаевском шаре очень велико (равновесная галактика по определению является дебаевским шаром и содержит обычно  $n_D \sim 10^{10}$  звезд), поэтому коллективные эффекты гораздо важнее столкновительных.

#### 4. Понятие бесстолкновительной модели

Выше было показано, что для систем частиц с дальним действием при большом числе  $n_D$  (6.13) частиц в дебаевском шаре первостепенное значение имеют эффекты коллективного, а не парного взаимодействия. Такую физическую систему можно описать моделью «частица — поле», причем макроскопический масштаб длины  $L$  численной модели должен быть больше дебаевской длины

$$L > \lambda_D.$$

Для описания среднего поля  $E_2$  с достаточной полнотой размер шага сетки  $\Delta$ , на которой определяется потенциал, должен быть выбран меньше дебаевской длины:

$$\Delta < \lambda_D. \quad (6.20)$$

Для того чтобы уменьшить флуктуации в ячейке, характерное число частиц в ячейке объема  $\Delta^3$  должно быть большим:

$$n\Delta^3 \gg 1. \quad (6.21)$$

бом служит период гравитационных колебаний звезды в потенциальной яме, образованной галактикой.

Не является неожиданным, и это можно показать строго [33], что время двухчастичных столкновений связано с временем коллективных колебаний соотношением

$$\frac{\tau_p}{\tau_c} = \frac{K}{n_D}, \quad (6.19)$$

где величина  $K$  примерно постоянна и по порядку равна единице. Поэтому если количество частиц внутри дебаевской сферы растет, то столкновительное время также увеличивается и столкновительные эффекты приобретают второстепенное значение. Такую систему называют *бесстолкновительной*. Во многих случаях в плазме и, как правило, в галактиках число частиц или звезд в дебаевском шаре очень велико (равновесная галактика по определению является дебаевским шаром и содержит обычно  $n_D \sim 10^{10}$  звезд), поэтому коллективные эффекты гораздо важнее столкновительных.

#### 4. Понятие бесстолкновительной модели

Выше было показано, что для систем частиц с дальним действием при большом числе  $n_D$  (6.13) частиц в дебаевском шаре первостепенное значение имеют эффекты коллективного, а не парного взаимодействия. Такую физическую систему можно описать моделью «частица — поле», причем макроскопический масштаб длины  $L$  численной модели должен быть больше дебаевской длины

$$L > \lambda_D.$$

Для описания среднего поля  $E_2$  с достаточной полнотой размер шага сетки  $\Delta$ , на которой определяется потенциал, должен быть выбран меньше дебаевской длины:

$$\Delta < \lambda_D. \quad (6.20)$$

Для того чтобы уменьшить флуктуации в ячейке, характерное число частиц в ячейке объема  $\Delta^3$  должно быть большим:

$$n\Delta^3 \gg 1. \quad (6.21)$$

Отсюда вытекает, что при выполнении условий (6.20) и (6.21) число машинных частиц в дебаевском шаре велико и в свою очередь машинная модель статистически описывает плазму или галактическую систему. Такую модель обычно называют бесстолкновительной моделью частиц в ячейке (PIC<sup>1</sup>)-модель. Характерные масштабы длины и времени для плазменной и гравитационной систем сведены в табл. 6.1.

Таблица 6.1  
Характерные масштабы длины и времени в системах частиц с дальним действием

	Плазма	Гравитационная система
1. Расстояние между частицами	$a$	$\frac{1}{n^{1/3}} = \frac{L}{N^{1/3}}$
2. Период коллективных колебаний	$\tau_p$	$2\pi \left( \frac{4\pi n e^2}{m} \right)^{-1/2}$ $2\pi (4\pi G m n)^{-1/2}$
3. Дебаевская длина	$\lambda_D$	$\left( \frac{kT}{4\pi n e^2} \right)^{1/2}$ $\left( \frac{kT}{4\pi G m^2 n} \right)^{1/2}$
4. Число частиц в дебаевском шаре	$n_D$	$\frac{4}{3} \pi n \lambda_D^3$
5. Столкновительное время	$\tau_c$	$\frac{n_D}{K} \tau_p$
6. Столкновительная длина	$\lambda_c$	$\left( \frac{3kT}{m} \right)^{1/2} \tau_c$

$k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура в системе,  $e$  — заряд частицы,  $n$  — плотность частиц,  $N$  — полное число частиц в системе,  $G$  — гравитационная постоянная,  $m$  — масса частицы,  $L^3$  — объем системы,  $K \sim 1$ .

## § 2. Бесстолкновительная модель частиц в ячейке

### 1. Описание PIC-модели

Физический смысл модели частиц в ячейке (PIC-модели) с дальнедействующими электростатическими или гравитационными силами уже обсуждался выше (гл. 6,

<sup>1</sup>) Particle-in-cell.

§ 1). Следует отметить, что локальные микроскопические поля не описываются ( $E_1 = 0$ ) ввиду статистического усреднения потенциалов и сил, создаваемых зарядами или массами всех частиц в каждой ячейке. Ниже будут рассмотрены формулировка, граничные условия, характерные параметры и границы применимости бесстолкновительной модели частиц в ячейке.

Для простоты будет описана двумерная модель в прямоугольных декартовых координатах, хотя излагаемый метод в равной степени применим и к одному, и к трем пространственным измерениям. Тем не менее интересно отметить, что, поскольку поле определяется из решения уравнения Пуассона, точный потенциал взаимодействия между частицами различен в случаях одного, двух и трех измерений. На практике в одномерном случае рассматриваются бесконечные плоскости или листы, несущие заряд или массу и перемещающиеся перпендикулярно собственной плоскости. В двумерном случае рассматриваются заряженные или массивные стержни, а в трехмерном — частицы.

Допустим, что площадь  $L \times L$  разделена на маленькие ячейки (обычно  $64 \times 64$ ) эйлеровской равномерной сетки (размером  $I \times I$ ). С помощью набора случайных чисел и подходящих весовых функций частицам приписываются компоненты скорости. Кроме того, в соответствии с предположением о большом количестве частиц в ячейке задается плотное начальное распределение. Если  $n_0$  — среднее число частиц в ячейке, то полное число частиц составит  $N = n_0 I^2$ . Обычно количество частиц в ячейке  $n_0$  выбирается от ста до четырехсот, так что полное число моделируемых частиц может приближаться к миллиону. В машинной памяти хранятся координаты  $(x_\mu, y_\mu, v_{x_\mu}, v_{y_\mu})$  всех частиц  $\mu$ ,  $1 \leq \mu \leq N$ , и для этого используются внешние запоминающие устройства, обычно магнитные диски или ленты.

Как и выше (см. гл. 5), наиболее удобной для интегрирования уравнений движения частиц оказывается схема «с перешагиванием», и для определения пространственных координат и компонент скорости всех частиц используются чередующиеся слои времени (напри-

§ 1). Следует отметить, что локальные микроскопические поля не описываются ( $E_1 = 0$ ) ввиду статистического усреднения потенциалов и сил, создаваемых зарядами или массами всех частиц в каждой ячейке. Ниже будут рассмотрены формулировка, граничные условия, характерные параметры и границы применимости бесстолкновительной модели частиц в ячейке.

Для простоты будет описана двумерная модель в прямоугольных декартовых координатах, хотя излагаемый метод в равной степени применим и к одному, и к трем пространственным измерениям. Тем не менее интересно отметить, что, поскольку поле определяется из решения уравнения Пуассона, точный потенциал взаимодействия между частицами различен в случаях одного, двух и трех измерений. На практике в одномерном случае рассматриваются бесконечные плоскости или листы, несущие заряд или массу и перемещающиеся перпендикулярно собственной плоскости. В двумерном случае рассматриваются заряженные или массивные стержни, а в трехмерном — частицы.

Допустим, что площадь  $L \times L$  разделена на маленькие ячейки (обычно  $64 \times 64$ ) эйлеровской равномерной сетки (размером  $I \times I$ ). С помощью набора случайных чисел и подходящих весовых функций частицам приписываются компоненты скорости. Кроме того, в соответствии с предположением о большом количестве частиц в ячейке задается плотное начальное распределение. Если  $n_0$  — среднее число частиц в ячейке, то полное число частиц составит  $N = n_0 I^2$ . Обычно количество частиц в ячейке  $n_0$  выбирается от ста до четырехсот, так что полное число моделируемых частиц может приближаться к миллиону. В машинной памяти хранятся координаты  $(x_\mu, y_\mu, v_{x_\mu}, v_{y_\mu})$  всех частиц  $\mu$ ,  $1 \leq \mu \leq N$ , и для этого используются внешние запоминающие устройства, обычно магнитные диски или ленты.

Как и выше (см. гл. 5), наиболее удобной для интегрирования уравнений движения частиц оказывается схема «с перешагиванием», и для определения пространственных координат и компонент скорости всех частиц используются чередующиеся слои времени (напри-

мер, временной слой  $n - 1$  и слой  $n - 2$  соответственно). Для вычисления координат частиц определяется сначала ячейка, в которой находится частица, и затем разностным дифференцированием потенциала — электрическое поле. Для частицы  $\mu$  из ячейки  $(i, j)$  на слое  $n - 1$

$$i = \text{Int} \left( \frac{x_\mu^{n-1}}{\Delta} \right), \quad j = \text{Int} \left( \frac{y_\mu^{n-1}}{\Delta} \right). \quad (6.22)$$

Символ  $\text{Int}(z)$  означает целую часть вещественного числа  $z$ . Электрическое поле в ячейке  $(i, j)$ , в которой находится частица  $\mu$ , определяется формулами

$$E_{xij}^{n-1} = - \frac{(\Phi_{i+1,j}^{n-1} - \Phi_{i-1,j}^{n-1})}{2\Delta},$$

$$E_{yij}^{n-1} = - \frac{(\Phi_{i,j+1}^{n-1} - \Phi_{i,j-1}^{n-1})}{2\Delta}. \quad (6.23)$$

Эти компоненты электрического поля поочередно используются для пересчета координат  $\mu$ -й частицы:

$$\mathbf{v}_\mu^n = \mathbf{v}_\mu^{n-2} + \frac{e_\mu}{m_\mu} 2 \Delta t \mathbf{E}_{ij}^{n-1}, \quad (6.24)$$

$$\mathbf{x}_\mu^{n+1} = \mathbf{x}_\mu^{n-1} + \mathbf{v}_\mu^n 2 \Delta t, \quad (6.25)$$

где  $\Delta t$  — шаг по времени.

После того как определены новые координаты всех частиц, по их распределению рассчитывается новая плотность заряда на разностной сетке (в момент времени  $n + 1$ ). Существует несколько методов определения новой пространственной плотности зарядов. Эти методы различаются способами распределения заряда частицы между ближайшими ячейками (см. гл. 6, § 2, п. 3 и фиг. 6.6). В простейшем из них весь заряд частицы приписывается «ближайшему узлу сетки», т. е. только той новой ячейке, в которую сместилась частица. При этом плотность заряда определяется простым сложением частиц в каждой ячейке:

$$\rho_{ij}^{n+1} = \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu=1}^N e_\mu \delta \left( \text{Int} \left( \frac{x_\mu^{n+1}}{\Delta} \right) - i \right) \delta \left( \text{Int} \left( \frac{y_\mu^{n+1}}{\Delta} \right) - j \right), \quad (6.26)$$

где

$$\delta(l-m) = \begin{cases} 1, & \text{если } l = m, \\ 0, & \text{если } l \neq m. \end{cases}$$

На втором этапе каждого двойного шага по времени на пространственной сетке решается разностное уравнение Пуассона, что позволяет определить новые значения потенциала  $\Phi_{ij}^{n+1}$  в каждой узловой точке

$$\Phi_{i+1,j}^{n+1} + \Phi_{i-1,j}^{n+1} + \Phi_{i,j+1}^{n+1} + \Phi_{i,j-1}^{n+1} - 4\Phi_{i,j}^{n+1} = -4\pi\Delta^2\rho_{i,j}^{n+1}. \quad (6.27)$$

Быстрые методы решения этого уравнения с разреженной матрицей обсуждались в гл. 4, § 4. Уравнения (6.22) — (6.27) определяют полный цикл по времени в модели частиц в ячейке и используются на каждом очередном шаге.

Для такой модели важно сформулировать общие граничные условия. Конечно, при решении частной физической задачи можно использовать граничные условия, отвечающие рассматриваемой задаче. Однако модель частиц в ячейке может применяться для изучения фундаментальных свойств плазменных или галактических сред, и тогда необходимо исключить влияние частных граничных условий на решение задачи. Поскольку неограниченную систему нельзя описать численно, важную роль играют периодические граничные условия, которые наиболее точно описывают бесконечную систему. Выше (гл. 4, § 4) уже обсуждалось использование периодических граничных условий при расчете потенциала. Столь же просто применяются периодические граничные условия и к уравнениям движения частиц. Если частица уходит из рассматриваемой области, то такая же частица вводится в эту область с другой стороны.

Все же следует отметить, что при периодических граничных условиях область расчетов повторяется в пространстве (фиг. 6.5), и, следовательно, явления, происходящие внутри области расчетов, могут «взаимодействовать» со своими периодическими повторениями вне этой области.

где

$$\delta(l-m) = \begin{cases} 1, & \text{если } l=m, \\ 0, & \text{если } l \neq m. \end{cases}$$

На втором этапе каждого двойного шага по времени на пространственной сетке решается разностное уравнение Пуассона, что позволяет определить новые значения потенциала  $\Phi_{ij}^{n+1}$  в каждой узловой точке

$$\Phi_{i+1,j}^{n+1} + \Phi_{i-1,j}^{n+1} + \Phi_{i,j+1}^{n+1} + \Phi_{i,j-1}^{n+1} - 4\Phi_{i,j}^{n+1} = -4\pi\Delta^2 \rho_{i,j}^{n+1}. \quad (6.27)$$

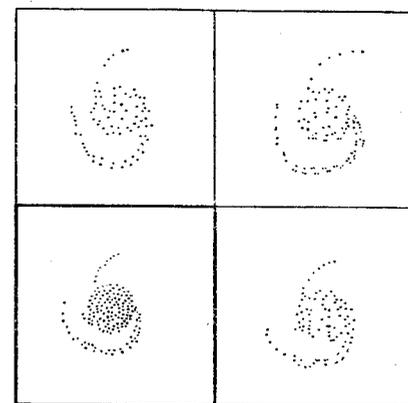
Быстрые методы решения этого уравнения с разреженной матрицей обсуждались в гл. 4, § 4. Уравнения (6.22)—(6.27) определяют полный цикл по времени в модели частиц в ячейке и используются на каждом очередном шаге.

Для такой модели важно сформулировать общие граничные условия. Конечно, при решении частной физической задачи можно использовать граничные условия, отвечающие рассматриваемой задаче. Однако модель частиц в ячейке может применяться для изучения фундаментальных свойств плазменных или галактических сред, и тогда необходимо исключить влияние частных граничных условий на решение задачи. Поскольку неограниченную систему нельзя описать численно, важную роль играют периодические граничные условия, которые наиболее точно описывают бесконечную систему. Выше (гл. 4, § 4) уже обсуждалось использование периодических граничных условий при расчете потенциала. Столь же просто применяются периодические граничные условия и к уравнениям движения частиц. Если частица уходит из рассматриваемой области, то такая же частица вводится в эту область с другой стороны.

Все же следует отметить, что при периодических граничных условиях область расчетов повторяется в пространстве (фиг. 6.5), и, следовательно, явления, происходящие внутри области расчетов, могут «взаимодействовать» со своими периодическими повторениями вне этой области.

## 2. Безразмерная форма уравнений и выбор шага по времени

Использование безразмерных переменных важно прежде всего потому, что это позволяет ясно видеть существенные для задачи параметры. Применение безразмерной записи уравнений численной модели может ока-



Расчетная  
область

Периодическое  
продолжение

Фиг. 6.5. Периодические граничные условия.  
Область расчетов периодически повторяется в пространстве.

заться существенным также и потому, что позволяет исключить очень большие или очень маленькие числа, а также уменьшить число арифметических операций в расчете за счет удаления несущественных констант. По этим причинам и для того, чтобы подчеркнуть расчетную простоту бесстолкновительной модели частиц, перепишем соответствующие разностные уравнения в безразмерной форме.

Примем пространственный шаг  $\Delta$  и временной шаг  $\Delta t$  в качестве основных единиц длины и времени. Обозначив безразмерные переменные волной, перепишем

координаты частиц следующим образом:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{x}}_{\mu} &= \mathbf{x}_{\mu} \frac{1}{\Delta}, \\ \tilde{\mathbf{v}}_{\mu} &= \mathbf{v}_{\mu} \frac{2 \Delta t}{\Delta}.\end{aligned}\quad (6.28)$$

Аналогично перепишем выражения характеристик поля:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{E}} &= \mathbf{E} \frac{4 (\Delta t)^2}{\Delta} \frac{e}{m}, \\ \tilde{\Phi} &= \Phi \frac{2 (\Delta t)^2}{\Delta^2} \frac{e}{m}, \\ \tilde{\rho} &= \rho \frac{\Delta^2}{4\pi e n_0},\end{aligned}\quad (6.29)$$

где, как и раньше,  $n_0$  — среднее число частиц в ячейке.

При таком выборе безразмерных переменных уравнения для частиц, которые используются на каждом шаге по времени для большого числа частиц, примут простейший вид. Определение номера ячейки, занимаемой частицей  $\mu$  на временном шаге  $n-1$ , сведется к вычислению целой части числа

$$i = \text{Int}(\tilde{x}_{\mu}^{n-1}), \quad j = \text{Int}(\tilde{y}_{\mu}^{n-1}). \quad (6.30)$$

Легко определяются также соответствующие компоненты электрического поля:

$$\begin{aligned}\tilde{E}_{xij}^{n-1} &= -\tilde{\Phi}_{i+1, j}^{n-1} + \tilde{\Phi}_{i-1, j}^{n-1}, \\ \tilde{E}_{yij}^{n-1} &= -\tilde{\Phi}_{i, j+1}^{n-1} + \tilde{\Phi}_{i, j-1}^{n-1}.\end{aligned}\quad (6.31)$$

Координаты частиц пересчитываются с помощью простого сложения:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{v}}_{\mu}^n &= \tilde{\mathbf{v}}_{\mu}^{n-2} + \tilde{\mathbf{E}}_{ij}^{n-1}, \\ \tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{n+1} &= \tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{n-1} + \tilde{\mathbf{v}}_{\mu}^n,\end{aligned}\quad (6.32)$$

где плотность заряда или массы определяется соотношением

$$\tilde{\rho}_{ij}^{n+1} = \frac{1}{n_0} \sum_{\mu=1}^N \delta(\text{Int}(\tilde{x}_{\mu}^{n+1}) - i) \delta(\text{Int}(\tilde{y}_{\mu}^{n+1}) - j). \quad (6.33)$$

координаты частиц следующим образом:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{x}}_{\mu} &= \mathbf{x}_{\mu} \frac{1}{\Delta}, \\ \tilde{\mathbf{v}}_{\mu} &= \mathbf{v}_{\mu} \frac{2 \Delta t}{\Delta}.\end{aligned}\quad (6.28)$$

Аналогично перепишем выражения характеристик поля:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{E}} &= \mathbf{E} \frac{4 (\Delta t)^2}{\Delta} \frac{e}{m}, \\ \tilde{\Phi} &= \Phi \frac{2 (\Delta t)^2}{\Delta^2} \frac{e}{m}, \\ \tilde{\rho} &= \rho \frac{\Delta^2}{4 \pi e n_0},\end{aligned}\quad (6.29)$$

где, как и раньше,  $n_0$  — среднее число частиц в ячейке.

При таком выборе безразмерных переменных уравнения для частиц, которые используются на каждом шаге по времени для большого числа частиц, примут простейший вид. Определение номера ячейки, занимаемой частицей  $\mu$  на временном шаге  $n-1$ , сведется к вычислению целой части числа

$$i = \text{Int}(\tilde{x}_{\mu}^{n-1}), \quad j = \text{Int}(\tilde{y}_{\mu}^{n-1}). \quad (6.30)$$

Легко определяются также соответствующие компоненты электрического поля:

$$\begin{aligned}\tilde{E}_{xij}^{n-1} &= -\tilde{\Phi}_{i+1,j}^{n-1} + \tilde{\Phi}_{i-1,j}^{n-1}, \\ \tilde{E}_{yij}^{n-1} &= -\tilde{\Phi}_{i,j+1}^{n-1} + \tilde{\Phi}_{i,j-1}^{n-1}.\end{aligned}\quad (6.31)$$

Координаты частиц пересчитываются с помощью простого сложения:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{v}}_{\mu}^n &= \tilde{\mathbf{v}}_{\mu}^{n-2} + \tilde{\mathbf{E}}_{ij}^{n-1}, \\ \tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{n+1} &= \tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{n-1} + \tilde{\mathbf{v}}_{\mu}^n,\end{aligned}\quad (6.32)$$

где плотность заряда или массы определяется соотношением

$$\tilde{\rho}_{ij}^{n+1} = \frac{1}{n_0} \sum_{\mu=1}^N \delta(\text{Int}(\tilde{x}_{\mu}^{n+1}) - i) \delta(\text{Int}(\tilde{y}_{\mu}^{n+1}) - j). \quad (6.33)$$

Нам осталось вычислить потенциал на разностной сетке в данный момент времени, для чего необходимо решить разностное уравнение Пуассона. При нашем удобном выборе безразмерных переменных все постоянные из уравнения Пуассона выпадают, и остается единственный безразмерный параметр  $\theta$ :

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_{i+1,j}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i-1,j}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i,j+1}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i,j-1}^{n+1} - 4\tilde{\Phi}_{i,j}^{n+1} = \\ = -\theta \tilde{\rho}_{i,j}^{n+1}.\end{aligned}\quad (6.34)$$

Из определения безразмерных переменных легко найти этот параметр:

$$\theta = \frac{4 \pi n_0 e^2}{\Delta^2 m} 2 (\Delta t)^2 = 2 \omega_p^2 (\Delta t)^2, \quad (6.35)$$

поскольку  $n_0/\Delta^2$  — средняя плотность на сетке. Соответственно для гравитационной системы

$$\theta = -2 \omega_p^2 (\Delta t)^2,$$

где, как и раньше,  $\omega_p$  — гравитационная частота (табл. 6.1). Параметр  $\theta$  еще предстоит выбрать, но уже заранее по виду уравнения ясно, что во избежание больших ошибок значение параметра  $\theta$  должно быть порядка или меньше единицы. Выбор параметра  $\theta$  можно уточнить, если учесть, что уравнения для координат частиц интегрируются по явной схеме с перешагиванием (см. гл. 3, § 6, п. 2). Поэтому шаг по времени ограничен сверху условием устойчивости, что и накладывает обязательное условие

$$|\theta| \leq \frac{1}{2}. \quad (6.36)$$

На практике для исключения флуктуаций, вызванных частицами, которые за один шаг по времени проходят много пространственных шагов, параметр  $\theta$  обычно выбирается значительно меньше единицы.

### 3. Замечания о пределах применимости PIC-модели

Ошибки, допускаемые бесстолкновительной моделью частиц в ячейке, обусловлены конечным размером шага как по пространству, так и по времени. Конечность

пространственного шага ведет прежде всего к тому, что не полностью описываются фурье-гармоники потенциала, и поэтому нелинейные явления и, в частности, турбулентность плазмы, в которых связано множество гармоник, не могут быть переданы адекватно. Кроме того, как было отмечено выше (см. гл. 5, § 2), схема с перешагиванием не полностью сохраняет энергию частицы, так что конечность временного шага может вызвать псевдонагрев и несохранение полной энергии.

Эти ошибки все же можно уменьшить, выбрав малые временной и пространственный шаги. Более опасный источник ошибок заключается в том, что модель описывает сравнительно небольшое число частиц (обычно  $10^6$ ). В гл. 6, § 1, было показано, что время столкновений  $\tau_c$  и время коллективных взаимодействий  $\tau_p$  (для плазменных и гравитационных колебаний) связаны с числом частиц в дебаевском шаре соотношением (6.19)

$$\frac{\tau_p}{\tau_c} = \frac{K}{n_D}. \quad (6.37)$$

В то же время для физической системы число частиц в дебаевском шаре может быть очень большим (в лабораторной плазме — обычно  $10^5$ , в галактике —  $10^{10}$ ), а столь большое число частиц нельзя моделировать численно. Соответственно частицы, которые используются в модели, — это псевдочастицы с большим зарядом и массой, и каждая из них представляет много частиц физической системы. Как видно по единственному безразмерному параметру  $\theta$ , возникающему в рассматриваемых уравнениях, он сам по себе не имеет большого значения, но мы установили, что модель приводит к псевдостолкновениям, которые происходят гораздо чаще, чем в изучаемой физической системе. Этот эффект ясен из уравнения (6.37) и вызван относительно низким числом моделирующих частиц в дебаевском шаре, что в свою очередь и создает повышенный уровень флуктуаций в машинной системе.

Таким образом, методу частиц в ячейке обязательно сопутствует эффект сильного уменьшения времени столкновений, что ведет к аномальному нагреву и диф-

пространственного шага ведет прежде всего к тому, что не полностью описываются фурье-гармоники потенциала, и поэтому нелинейные явления и, в частности, турбулентность плазмы, в которых связано множество гармоник, не могут быть переданы адекватно. Кроме того, как было отмечено выше (см. гл. 5, § 2), схема с перешагиванием не полностью сохраняет энергию частицы, так что конечность временного шага может вызвать псевдонагрев и несохранение полной энергии.

Эти ошибки все же можно уменьшить, выбрав малые временной и пространственный шаги. Более опасный источник ошибок заключается в том, что модель описывает сравнительно небольшое число частиц (обычно  $10^6$ ). В гл. 6, § 1, было показано, что время столкновений  $\tau_c$  и время коллективных взаимодействий  $\tau_p$  (для плазменных и гравитационных колебаний) связаны с числом частиц в дебаевском шаре соотношением (6.19)

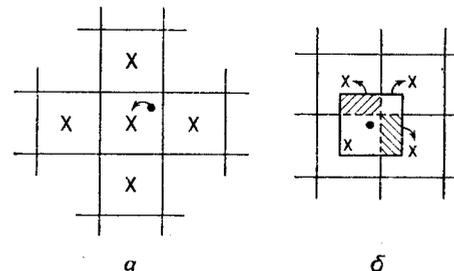
$$\frac{\tau_p}{\tau_c} = \frac{K}{n_D}. \quad (6.37)$$

В то же время для физической системы число частиц в дебаевском шаре может быть очень большим (в лабораторной плазме — обычно  $10^5$ , в галактике —  $10^{10}$ ), а столь большое число частиц нельзя моделировать численно. Соответственно частицы, которые используются в модели, — это псевдочастицы с большим зарядом и массой, и каждая из них представляет много частиц физической системы. Как видно по единственному безразмерному параметру  $\theta$ , возникающему в рассматриваемых уравнениях, он сам по себе не имеет большого значения, но мы установили, что модель приводит к псевдостолкновениям, которые происходят гораздо чаще, чем в изучаемой физической системе. Этот эффект ясен из уравнения (6.37) и вызван относительно низким числом моделирующих частиц в дебаевском шаре, что в свою очередь и создает повышенный уровень флуктуаций в машинной системе.

Таким образом, методу частиц в ячейке обязательно сопутствует эффект сильного уменьшения времени столкновений, что ведет к аномальному нагреву и диф-

фузии в пространстве скоростей. Тем не менее, если эффективное время столкновений достаточно велико, т. е. превышает время расчета, модель действительно является бесстолкновительной.

Пределы применимости модели с относительно небольшим числом частиц специально изучались в работах [32—34]. Авторам работы [33] удалось уменьшить уровень шумов или флуктуаций в системе за счет



Фиг. 6.6. Методы распределения заряда частицы на разностной сетке при решении уравнения Пуассона (из работы [32]).

а — метод «ближайшего узла сетки»; б — метод «облака в ячейке», при котором заряд распределяется по четырем ближайшим ячейкам пропорционально площадям.

усложнения алгоритма с помощью метода «облако в ячейке» (фиг. 6.2 и 6.6). В этом методе заряд или масса частицы интерполируются между ближайшими ячейками в соответствии с точным расположением частицы в ячейке (фиг. 6.6)<sup>1)</sup>.

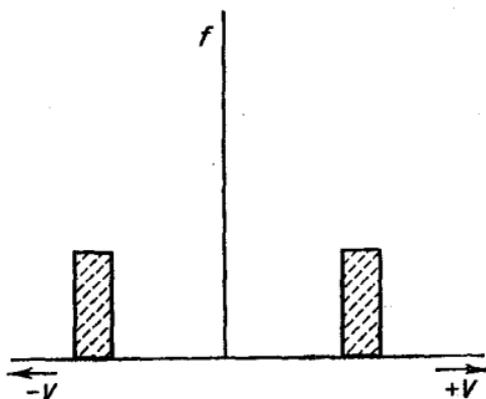
### § 3. Применение бесстолкновительной модели частиц в ячейке к моделированию плазмы

Метод частиц в ячейке имеет большое значение для изучения основных нелинейных явлений как в горячей ионизированной плазме, так и в «газе» свободных

<sup>1)</sup> Модель бесстолкновительной одномерной плазмы с частицами-листами, которая в основном совпадает с рассмотренной здесь моделью частиц конечных размеров в ячейке, была предложена Бунеманом [35] и Даусоном [36, 37].

электронов в металле. Этот метод имеет также разнообразные применения при моделировании лабораторных установок как для термоядерного синтеза, так и для физики твердого тела.

Мы проиллюстрируем применение модели на примере идеализированной задачи о «двухпучковой неустойчивости». Основной вопрос, возникающий в связи с бесстолкновительными системами частиц, — это вопрос о способе термализации среды<sup>1)</sup>. В рассматриваемой



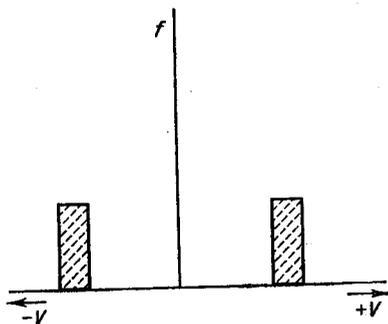
Фиг. 6.7. Двухпучковое распределение или плотность  $f$  частиц в пространстве скоростей.

задаче сильное неравновесное состояние представлено взаимопроникновением двух встречных пучков. Начальным условием в такой модели служит однородное распределение частиц в конфигурационном пространстве, причем частицы имеют некоторую скорость в положительном или отрицательном направлении оси  $x$  (фиг. 6.7). Сразу же отметим, что эта задача одномерна в конфигурационном пространстве, и начальные условия можно изобразить, располагая частицы в двумерном фазовом пространстве (фиг. 6.8, а). Предполагается, что тяжелые неподвижные ионы образуют однородный фон положительных зарядов.

<sup>1)</sup> Согласно классической статистической механике, термализация и тепловое равновесие достигаются благодаря столкновениям. Скорость этого процесса определяется  $H$ -теоремой Больцмана. Подробности читатель может найти в монографии [30] (гл. 6 и 7).

электронов в металле. Этот метод имеет также разнообразные применения при моделировании лабораторных установок как для термоядерного синтеза, так и для физики твердого тела.

Мы проиллюстрируем применение модели на примере идеализированной задачи о «двухпучковой неустойчивости». Основной вопрос, возникающий в связи с бесстолкновительными системами частиц, — это вопрос о способе термализации среды<sup>1)</sup>. В рассматриваемой

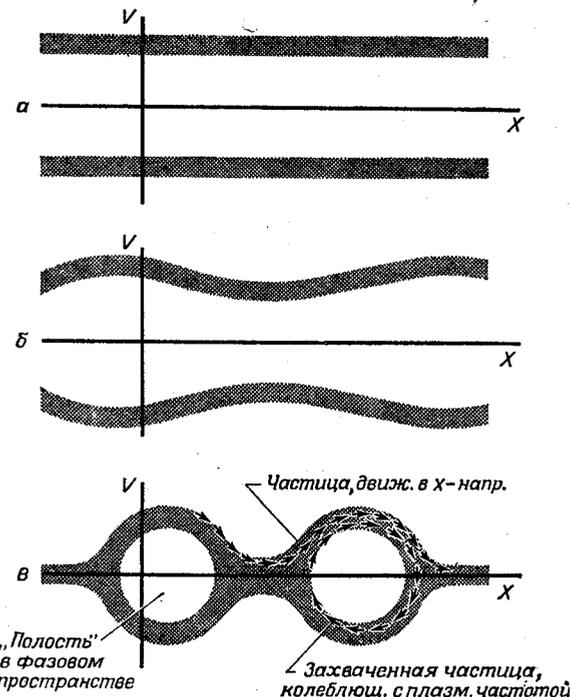


Фиг. 6.7. Двухпучковое распределение или плотность  $f$  частиц в пространстве скоростей.

задаче сильное неравновесное состояние представлено взаимопроникновением двух встречных пучков. Начальным условием в такой модели служит однородное распределение частиц в конфигурационном пространстве, причем частицы имеют некоторую скорость в положительном или отрицательном направлении оси  $x$  (фиг. 6.7). Сразу же отметим, что эта задача одномерна в конфигурационном пространстве, и начальные условия можно изобразить, располагая частицы в двумерном фазовом пространстве (фиг. 6.8, а). Предполагается, что тяжелые неподвижные ионы образуют однородный фон положительных зарядов.

<sup>1)</sup> Согласно классической статистической механике, термализация и тепловое равновесие достигаются благодаря столкновениям. Скорость этого процесса определяется H-теоремой Больцмана. Подробности читатель может найти в монографии [30] (гл. 6 и 7).

Установлено численно, что такое состояние неустойчиво. Вначале электростатическая потенциальная энергия равна нулю. В то же время ясно, что кинетическая



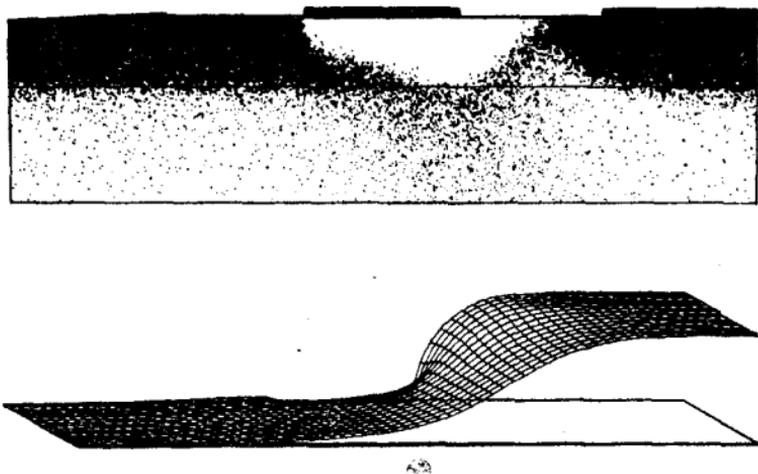
Фиг. 6.8. Развитие двухпучковой неустойчивости в фазовом пространстве.

а — два пучка с противоположной скоростью движутся один сквозь другой в конфигурационном пространстве; б — линейная стадия неустойчивости; в — нелинейная стадия неустойчивости, на которой частицы, колеблющиеся с плазменной частотой, образуют вихри в фазовом пространстве. Другие частицы не захвачены и облетают каждый вихрь. Неустойчивость приводит к термализации или к перемешиванию в фазовом пространстве.

энергия может уменьшиться, если два пучка термализуются и сблизятся в пространстве скоростей (фиг. 6.8, б). Этот начальный рост неустойчивости можно объяснить с помощью линейного анализа, но уже после нескольких плазменных колебаний перемешивание

и «термализация» двух пучков переходят в нелинейную стадию [38].

Долгое нелинейное развитие колебаний обнаруживает устойчивые «полости» в фазовом пространстве, в которых частицы захвачены колебаниями поля с плазменной частотой (фиг. 6.8, в). В аналогичных двух- и трехмерных моделях обнаружено, что в отсутствие



Фиг. 6.9. *Вверху* — движение электронов через переходный слой в полупроводнике; *внизу* — соответствующий потенциал.

столкновений в конце концов такие полости разрушаются и происходит полная термализация неравновесного начального состояния [39].

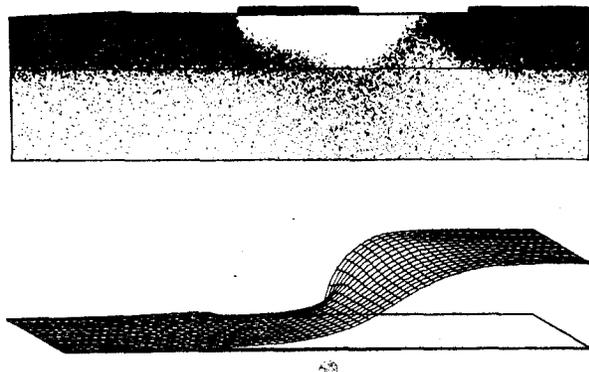
На фиг. 6.9 показано приложение модели частиц в ячейке к полупроводниковому триоду. После длительного времени достигнуто стационарное состояние, в котором электроны текут через переходный слой [40].

#### § 4. Применение бесстолкновительной модели частиц в ячейке к моделированию галактик

Происхождение, структура и эволюция галактик в течение многих лет вызвали глубокий интерес астрофизиков. Но объяснение широкой распространенности

и «термализация» двух пучков переходят в нелинейную стадию [38].

Долгое нелинейное развитие колебаний обнаруживает устойчивые «полости» в фазовом пространстве, в которых частицы захвачены колебаниями поля с плазменной частотой (фиг. 6.8, в). В аналогичных двух- и трехмерных моделях обнаружено, что в отсутствие



Фиг. 6.9. *Вверху* — движение электронов через переходный слой в полупроводнике; *внизу* — соответствующий потенциал.

столкновений в конце концов такие полости разрушаются и происходит полная термализация неравновесного начального состояния [39].

На фиг. 6.9 показано приложение модели частиц в ячейке к полупроводниковому триоду. После длительного времени достигнуто стационарное состояние, в котором электроны текут через переходный слой [40].

#### § 4. Применение бесстолкновительной модели частиц в ячейке к моделированию галактик

Происхождение, структура и эволюция галактик в течение многих лет вызывали глубокий интерес астрофизиков. Но объяснение широкой распространенности

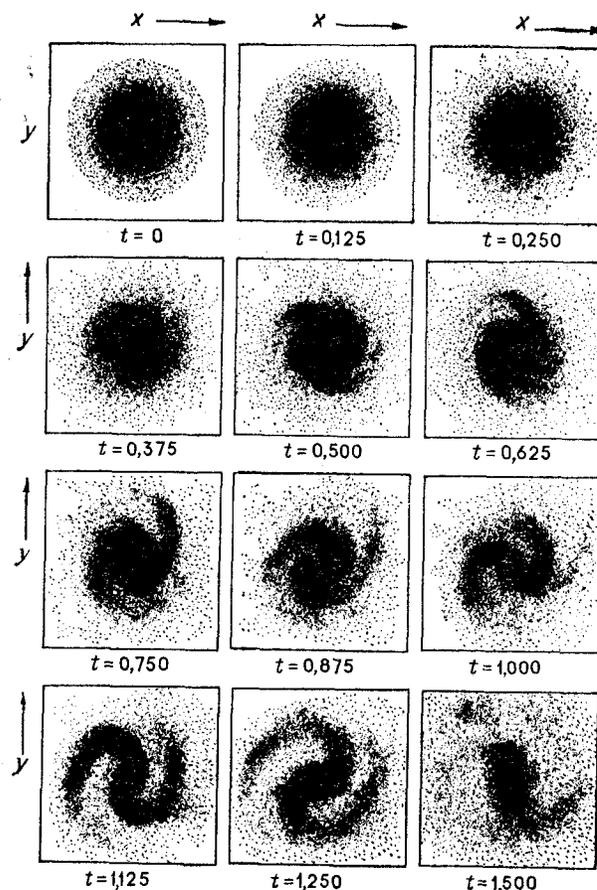
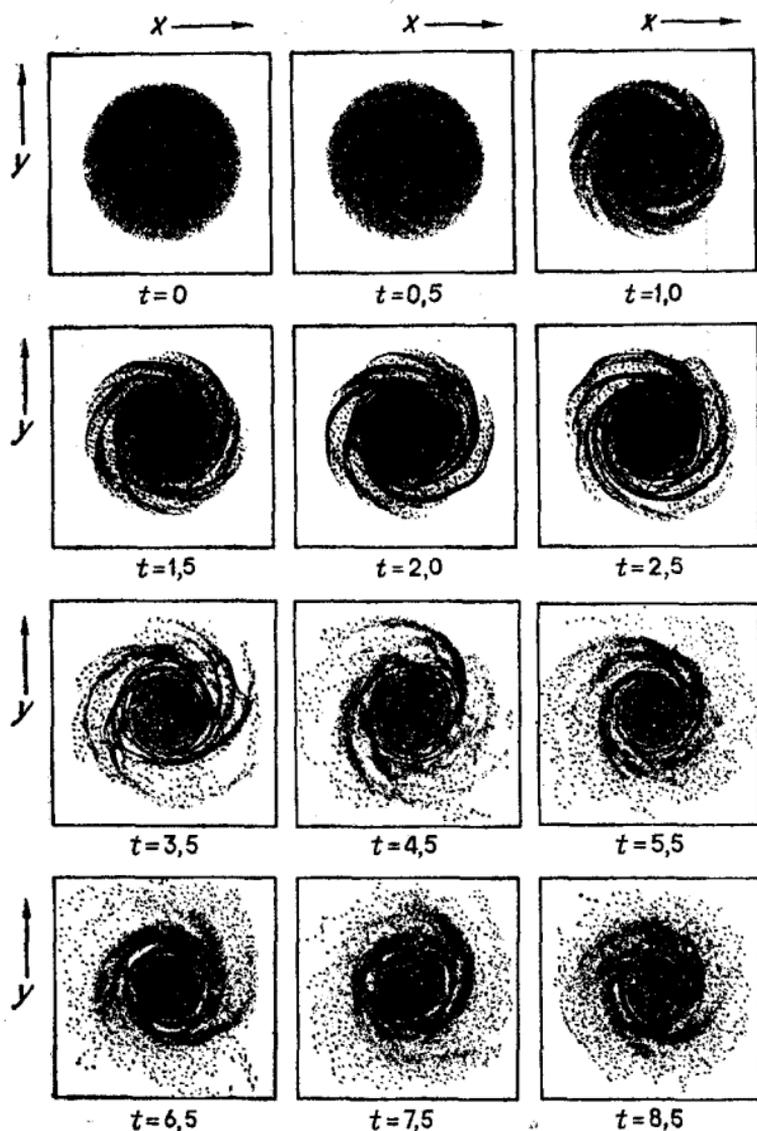
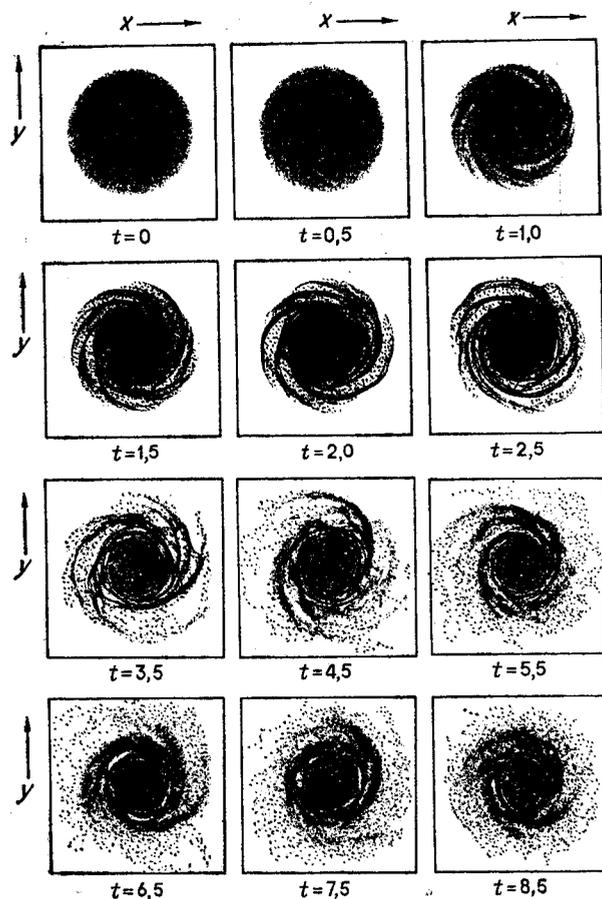


Рис. 6.10. Эволюция диска из 50 000 звезд. Время дано в долях периода оборота. При отсутствии дополнительной силы, созданной ядром галактики, развивающиеся спиральные ветви существуют лишь несколько оборотов (из работы [42]).



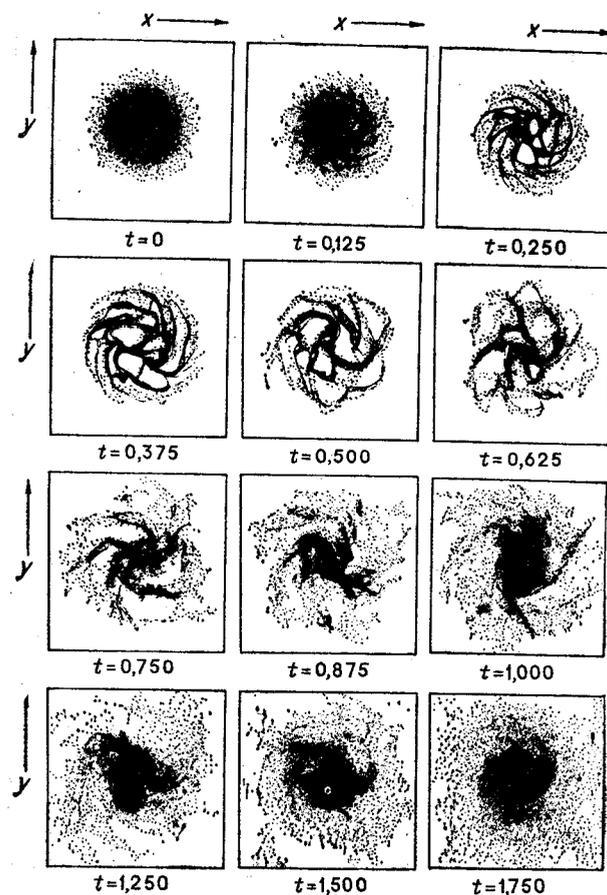
Фиг. 6.11. Эволюция диска из 50 000 звезд под действием центральной силы, созданной предполагаемым ядром галактики.

Звездный диск содержит 10% полной массы системы. Время измерено в долях периода вращения, и очевидно, что спиральные ветви существуют в течение многих периодов (из работы [42]).



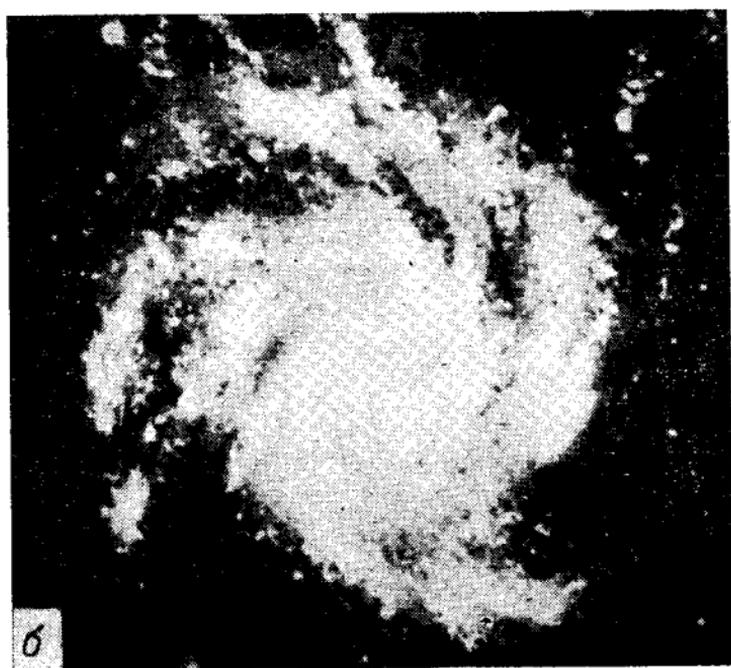
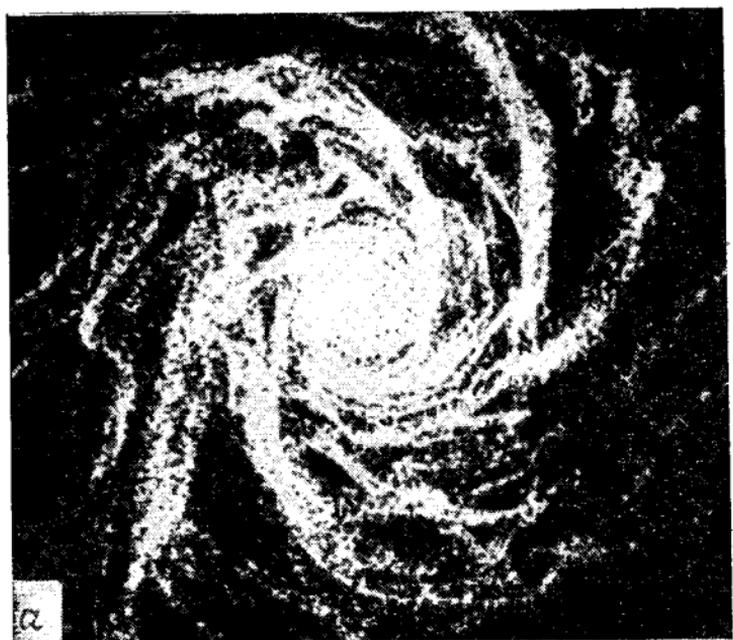
Фиг. 6.11. Эволюция диска из 50 000 звезд под действием центральной силы, созданной предполагаемым ядром галактики.

Звездный диск содержит 10% полной массы системы. Время измерено в долях периода вращения, и очевидно, что спиральные ветви существуют в течение многих периодов (из работы [42]).

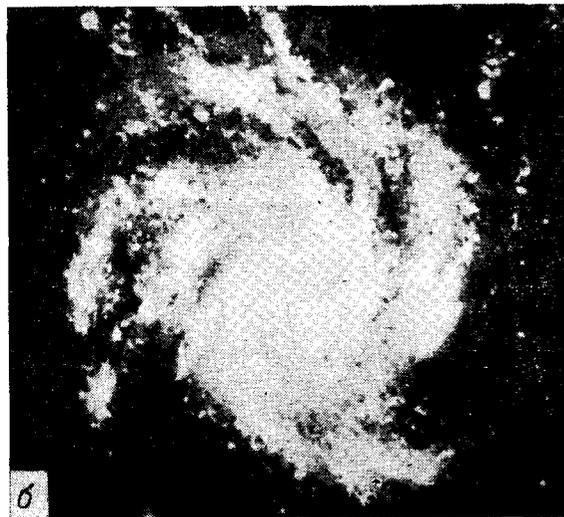
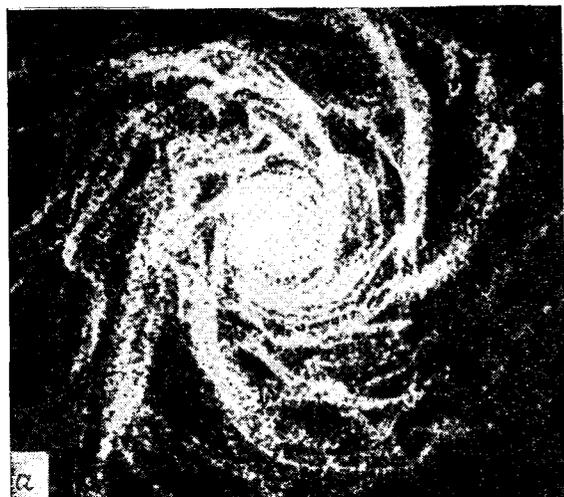


Фиг. 6.12. Эволюция вначале однородного вращающегося звездного диска (из работы [42]).

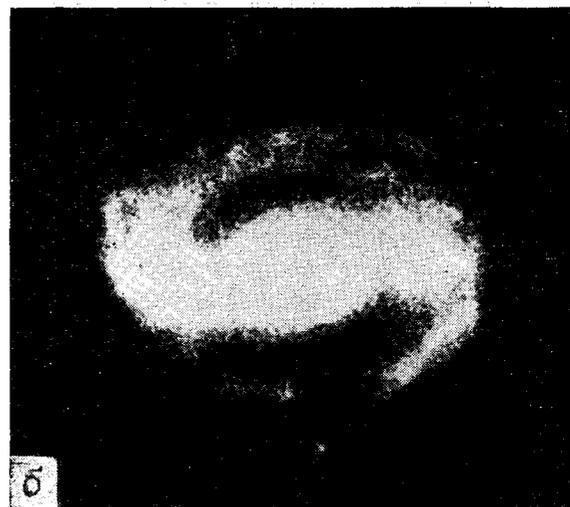
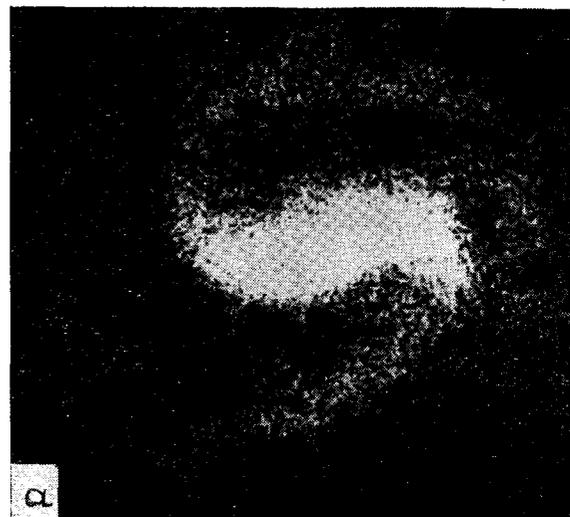
Модель показывает, как неустойчивость Рэля—Джинса разрушает однородное начальное распределение и образует в нем спиральные ветви.



Фиг. 6.13. Сравнение спиральной структуры, полученной в модели частиц в ячейке (а), с наблюдаемой спиральной галактикой М-101 (б) (из работы [44]).



Фиг. 6.13. Сравнение спиральной структуры, полученной в модели частиц в ячейке (а), с наблюдаемой спиральной галактикой М-101 (б) (из работы [44]).



Фиг. 6.14. Сравнение стержнеобразной структуры, часто устанавливающейся при моделировании методом частиц в ячейке (а), с наблюдаемой галактикой WGC-175 (б) (из работы [44]).

сложных и прекрасных спиральных структур, наблюдаемых в галактиках, ставит трудные теоретические задачи. Было высказано много идей, но аналитические методы сложны, и только с помощью моделей частиц в ячейке эти идеи можно проверить количественно. Здесь не делается попытки анализа проблемы<sup>1)</sup>, а приводится лишь несколько характерных примеров, иллюстрирующих моделирование гравитационных задач [42].

Наблюдаемые галактики состоят из трехмерного центрального ядра, окруженного двумерным звездным диском большой площади. Установлено, что большая часть галактик во Вселенной имеет спиральную или стержнеобразную форму. Для описания плоской галактики используется двумерная (четырёхмерная в фазовом пространстве) модель частиц в ячейке, причем такая модель описывает стержнеобразные звезды или, если модифицировать уравнение Пуассона, точечные звезды [42].

Начальным состоянием модели обычно служит однородный вращающийся диск звезд, находящийся в радиальном равновесии. Холь [42] установил, что в отсутствие дисперсии или разброса по скоростям такой вращающийся, как твердое тело, звездный диск неустойчив, и в нем быстро развиваются как радиальные, так и азимутальные моды. Появляется спиральная структура, но существует она недолго, хотя стержнеобразные галактики образуются в таких моделях довольно часто.

С другой стороны, если ввести дополнительную центральную силу, моделирующую ядро галактики (и соответствующую половине или большей части полной массы галактики), появляется спиральная структура, которая сохраняется в течение многих оборотов галактики (фиг. 6.10—6.12) [42, 43]. На фиг. 6.13 и 6.14 [44] сравниваются некоторые наблюдаемые галактики и структуры, полученные в расчетах.

---

<sup>1)</sup> Обсуждение вопроса читатель может найти в работе [41].

сложных и прекрасных спиральных структур, наблюдаемых в галактиках, ставит трудные теоретические задачи. Было высказано много идей, но аналитические методы сложны, и только с помощью моделей частиц в ячейке эти идеи можно проверить количественно. Здесь не делается попытки анализа проблемы<sup>1)</sup>, а приводятся лишь несколько характерных примеров, иллюстрирующих моделирование гравитационных задач [42].

Наблюдаемые галактики состоят из трехмерного центрального ядра, окруженного двумерным звездным диском большой площади. Установлено, что большая часть галактик во Вселенной имеет спиральную или стержнеобразную форму. Для описания плоской галактики используется двумерная (четырехмерная в фазовом пространстве) модель частиц в ячейке, причем такая модель описывает стержнеобразные звезды или, если модифицировать уравнение Пуассона, точечные звезды [42].

Начальным состоянием модели обычно служит однородный вращающийся диск звезд, находящийся в радиальном равновесии. Холь [42] установил, что в отсутствие дисперсии или разброса по скоростям такой вращающийся, как твердое тело, звездный диск неустойчив, и в нем быстро развиваются как радиальные, так и азимутальные моды. Появляется спиральная структура, но существует она недолго, хотя стержнеобразные галактики образуются в таких моделях довольно часто.

С другой стороны, если ввести дополнительную центральную силу, моделирующую ядро галактики (и соответствующую половине или большей части полной массы галактики), появляется спиральная структура, которая сохраняется в течение многих оборотов галактики (фиг. 6.10—6.12) [42, 43]. На фиг. 6.13 и 6.14 [44] сравниваются некоторые наблюдаемые галактики и структуры, полученные в расчетах.

<sup>1)</sup> Обсуждение вопроса читатель может найти в работе [41].

## § 5. Столкновительная PIC-модель в гидродинамике

В предыдущих параграфах мы убедились в успешности описания плазмы или галактики большим числом отдельных частиц, движущихся в среднем поле системы. Частицы описывают движение системы, а определяемые поля вычисляются на эйлеровой (фиксированной в конфигурационном пространстве) сетке. Поскольку гидродинамические течения газа и жидкости, которые мы собираемся изучать, являются на самом деле следствием молекулярного движения, то заманчиво попытаться описать движение среды с помощью подходящей модели многих частиц, движущихся на эйлеровой пространственной сетке. Однако уже при ответе на вопрос, как записать «уравнения движения» таких частиц, сразу же становится ясно, что здесь проявляются совсем другие микроскопические свойства.

В отличие от частиц галактики или плазмы молекулы, например, атмосферы или типичной лабораторной жидкости в рассматриваемом временном масштабе постоянно претерпевают соударения с соседними молекулами. Поэтому импульс и энергия таких «газовых» частиц не сохраняются, а распределяются между окружающими частицами. На языке статистической механики это означает, что молекулы газа в некотором небольшом объеме приходят к тепловому равновесию за короткое время, а скорости этих молекул распределены по закону Максвелла — Больцмана.

Исходя из основного молекулярного представления о характерных движениях среды, мы разработаем простую эвристическую модель, описывающую «идеальные» гидродинамические уравнения.

### 1. Лагранжево движение и гидродинамические уравнения

При разработке столкновительной модели частиц в ячейке (впервые этот метод был использован Харлоу [45]) нужно объединить алгоритм движения «частиц» с нестационарными уравнениями непрерывной среды. Уравнения для плотности  $\rho$  и потока плотности  $\rho v$

простой среды были получены (см. гл. 3, § 1) из законов сохранения вещества и импульса

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{v} = 0, \quad (6.38)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = - \nabla p, \quad (6.39)$$

где  $p$  — давление среды. Здесь плотность, скорость и давление — характеристики среды, определенные в каждой точке  $(\mathbf{x}, t)$  пространства и времени. Поучительно переписать эти уравнения относительно изменений, происходящих в локальном элементе среды при движении в конфигурационном пространстве. Для этого преобразуем второе слагаемое в уравнении непрерывности (6.38):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \rho + \rho \nabla \mathbf{v} = 0, \quad (6.40)$$

или

$$\frac{d\rho}{dt} = - \rho \nabla \mathbf{v}, \quad (6.41)$$

где

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla. \quad (6.42)$$

Оператор  $d/dt$  (6.42) описывает полную производную по времени в точке, движущейся вместе со средой, и мы говорим, что уравнение (6.41) записано в лагранжевой форме. Выше мы обсуждали (гл. 3) лагранжеву производную по времени, когда она возникала при переносе свойств среды движением центра масс среды.

Уравнение для плотности среды в лагранжевой форме (6.41) количественно выражает тот простой факт, что локальное увеличение плотности среды вызвано сжатием  $(\nabla \mathbf{v})$  среды. Уравнение для импульса можно преобразовать аналогично:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v} + \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\nabla \rho \mathbf{v}) \mathbf{v} + (\rho \mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = - \nabla p. \quad (6.43)$$

Первое и третье слагаемые сокращаются согласно уравнению сохранения вещества (6.38), а другие два

простой среды были получены (см. гл. 3, § 1) из законов сохранения вещества и импульса

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{v} = 0, \quad (6.38)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = - \nabla p, \quad (6.39)$$

где  $p$  — давление среды. Здесь плотность, скорость и давление — характеристики среды, определенные в каждой точке  $(\mathbf{x}, t)$  пространства и времени. Поучительно переписать эти уравнения относительно изменений, происходящих в локальном элементе среды при движении в конфигурационном пространстве. Для этого преобразуем второе слагаемое в уравнении непрерывности (6.38):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \rho + \rho \nabla \mathbf{v} = 0, \quad (6.40)$$

или

$$\frac{d\rho}{dt} = - \rho \nabla \mathbf{v}, \quad (6.41)$$

где

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla. \quad (6.42)$$

Оператор  $d/dt$  (6.42) описывает полную производную по времени в точке, движущейся вместе со средой, и мы говорим, что уравнение (6.41) записано в лагранжевой форме. Выше мы обсуждали (гл. 3) лагранжеву производную по времени, когда она возникала при переносе свойств среды движением центра масс среды.

Уравнение для плотности среды в лагранжевой форме (6.41) количественно выражает тот простой факт, что локальное увеличение плотности среды вызвано сжатием  $(\nabla \mathbf{v})$  среды. Уравнение для импульса можно преобразовать аналогично:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v} + \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\nabla \rho \mathbf{v}) \mathbf{v} + (\rho \mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = - \nabla p. \quad (6.43)$$

Первое и третье слагаемые сокращаются согласно уравнению сохранения вещества (6.38), а другие два

члена левой части этого уравнения образуют лагранжеву производную по времени:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = - \nabla p. \quad (6.44)$$

Таким образом, из уравнения сохранения импульса мы получили уравнение, из которого вытекает, что локальное ускорение среды обусловлено только давлением среды. Важно отметить, что именно это уравнение можно использовать для определения скоростей «частиц» в нужном нам алгоритме.

Для получения замкнутой системы уравнений необходимо определить давление среды. В идеальной политропической среде таким уравнением для давления служит адиабатический закон, так как для любого элемента среды

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \text{const}, \quad (6.45)$$

где  $\gamma$  — отношение теплоемкостей. Следовательно, лагранжева производная этой величины равна нулю:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho^\gamma} \right) = 0. \quad (6.46)$$

Следует отметить, что это уравнение справедливо лишь для идеального газа, если нет возрастания энтропии (более сложные случаи будут рассмотрены в гл. 9 и 10).

Гидродинамические уравнения имеют особенно простой вид в лагранжевой форме (6.41), (6.42), (6.46). Очевидно, этот факт является результатом переноса свойств среды при молекулярном движении, и он же оправдывает применение метода частиц в ячейке, так как перенос массы, импульса и энергии модельными частицами происходит аналогично лагранжеву переносу.

И наконец, имеет смысл представить инвариант  $p/\rho^\gamma$  для идеального газа в консервативной форме.

Используя уравнение сохранения вещества (6.38) и уравнение (6.46), получаем

$$\begin{aligned} \frac{p}{\rho^{\gamma}} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{v} \right\} + \rho \frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho^{\gamma}} \right) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \frac{p}{\rho^{\gamma}} \right) + \nabla \left( \rho \frac{p}{\rho^{\gamma}} \mathbf{v} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (6.47)$$

## 2. PIC-метод для идеального газа

Рассмотренные выше уравнения для идеального газа можно переписать, выразив законы сохранения [уравнения (6.38), (6.39), (6.47)] через конвекцию частиц:

$$\frac{\partial (nm)}{\partial t} + \nabla (nm\mathbf{v}) = 0, \quad (6.48)$$

$$\frac{\partial (nm\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla (nm\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p, \quad (6.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( n \frac{p}{\rho^{\gamma}} \right) + \nabla \left( n \frac{p}{\rho^{\gamma}} \mathbf{v} \right) = 0, \quad (6.50)$$

где  $n$  — значение плотности частиц в любой точке пространства и времени  $(\mathbf{x}, t)$ . Достаточно изложить PIC-алгоритм для двумерного случая, хотя метод одинаково применим к случаям одного, двух или трех пространственных измерений. Рассматриваемая область покрывается эйлеровой сеткой, по которой распределяется большое число модельных частиц таким образом, чтобы число частиц в ячейке было большим, что необходимо из общих соображений и для уменьшения флуктуаций. Координаты частицы  $\mu$  в момент  $t^n$  обозначим  $(x_{\mu}^n, y_{\mu}^n)$ .

Если каждой частице приписать определенное значение массы, импульса и инварианта  $e = p/\rho^{\gamma}$ , то в соответствии с уравнениями (6.48)–(6.50) сохранение частиц обеспечит также сохранение массы среды, импульса и инварианта  $p/\rho^{\gamma}$ . Поэтому на  $n$ -м шаге по времени, когда все частицы занимают новое положение, каждая частица характеризуется шестью переменными:

$$\mathbf{u}_{\mu}^n = (x_{\mu}^n, y_{\mu}^n, m_{\mu}, m_{\mu} v_{x\mu}^n, m_{\mu} v_{y\mu}^n, e_{\mu}^n), \quad 1 \leq \mu \leq N. \quad (6.51)$$

Используя уравнение сохранения вещества (6.38) и уравнение (6.46), получаем

$$\begin{aligned} \frac{p}{\rho^{\gamma}} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{v} \right\} + \rho \frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho^{\gamma}} \right) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \frac{p}{\rho^{\gamma}} \right) + \nabla \left( \rho \frac{p}{\rho^{\gamma}} \mathbf{v} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (6.47)$$

## 2. PIC-метод для идеального газа

Рассмотренные выше уравнения для идеального газа можно переписать, выразив законы сохранения [уравнения (6.38), (6.39), (6.47)] через конвекцию частиц:

$$\frac{\partial (nm)}{\partial t} + \nabla (nm\mathbf{v}) = 0, \quad (6.48)$$

$$\frac{\partial (nm\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla (nm\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p, \quad (6.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( n \frac{p}{\rho^{\gamma}} \right) + \nabla \left( n \frac{p}{\rho^{\gamma}} \mathbf{v} \right) = 0, \quad (6.50)$$

где  $n$  — значение плотности частиц в любой точке пространства и времени  $(\mathbf{x}, t)$ . Достаточно изложить PIC-алгоритм для двумерного случая, хотя метод одинаково применим к случаям одного, двух или трех пространственных измерений. Рассматриваемая область покрывается эйлеровой сеткой, по которой распределяется большое число модельных частиц таким образом, чтобы число частиц в ячейке было большим, что необходимо из общих соображений и для уменьшения флуктуаций. Координаты частицы  $\mu$  в момент  $t^n$  обозначим  $(x_{\mu}^n, y_{\mu}^n)$ .

Если каждой частице приписать определенное значение массы, импульса и инварианта  $e = p/\rho^{\gamma}$ , то в соответствии с уравнениями (6.48)–(6.50) сохранение частиц обеспечит также сохранение массы среды, импульса и инварианта  $p/\rho^{\gamma}$ . Поэтому на  $n$ -м шаге по времени, когда все частицы занимают новое положение, каждая частица характеризуется шестью переменными:

$$\mathbf{u}_{\mu}^n = (x_{\mu}^n, y_{\mu}^n, m_{\mu}, m_{\mu} v_{x\mu}^n, m_{\mu} v_{y\mu}^n, e_{\mu}^n), \quad 1 \leq \mu \leq N. \quad (6.51)$$

Для того чтобы определить значения величин в ячейках, допустим, что внутри ячейки частицы испытывают большое число столкновений и их импульсы и связанные с энергией переменные  $e_{\mu}$  выравниваются. Следовательно, значения переменных в ячейке — это средние значения, получаемые суммированием по всем частицам в ячейке:

$$\begin{aligned} n_{ij}^n &= \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu} \delta \left( \text{Int} \left( \frac{x_{\mu}^n}{\Delta} \right) - i \right) \delta \left( \text{Int} \left( \frac{y_{\mu}^n}{\Delta} \right) - j \right), \\ \rho_{ij}^n &= \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu} m_{\mu} \delta \left( \text{Int} \left( \frac{x_{\mu}^n}{\Delta} \right) - i \right) \delta \left( \text{Int} \left( \frac{y_{\mu}^n}{\Delta} \right) - j \right), \\ (\rho \mathbf{v})_{ij}^n &= \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu} m_{\mu} \mathbf{v}_{\mu}^n \delta \left( \text{Int} \left( \frac{x_{\mu}^n}{\Delta} \right) - i \right) \delta \left( \text{Int} \left( \frac{y_{\mu}^n}{\Delta} \right) - j \right), \\ n_{ij}^n \frac{p_{ij}^n}{(\rho_{ij}^n)^{\gamma}} &= \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu} e_{\mu} \delta \left( \text{Int} \left( \frac{x_{\mu}^n}{\Delta} \right) - i \right) \delta \left( \text{Int} \left( \frac{y_{\mu}^n}{\Delta} \right) - j \right), \end{aligned} \quad (6.52)$$

где использованы введенные ранее (см. § 2) обозначения, и в каждой ячейке определяются значения плотности, давления и скорости. Эйлерова часть расчета выполняется на сетке, а именно вычисление градиента давления в уравнении (6.49) для определения мгновенного (без учета лагранжева движения) значения скорости в ячейке. Следовательно, выбрав шаг по времени  $\Delta t$ , мы получим

$$\begin{aligned} \bar{v}_{xij}^{n+1} &= v_{xij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta \rho_{ij}^n} (p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n), \\ \bar{v}_{yij}^{n+1} &= v_{yij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta \rho_{ij}^n} (p_{i,j+1}^n - p_{i,j-1}^n). \end{aligned} \quad (6.53)$$

Необходимо убедиться в том, что шаг по времени и вновь полученные значения скорости удовлетворяют условию Куранта — Фридрихса — Леви (3.79). Если это не так, то берется уменьшенный шаг по времени и скорости пересчитываются.

Теперь можно вычислить новые характеристики частиц для проведения лагранжева этапа расчетной процедуры. Важную роль в этом алгоритме играет то, что, согласно предположению о термодинамическом равновесии частиц в ячейке, новые импульсы и энергии частиц определяются по характеристикам ячейки, а не по своим предшествующим значениям. То есть, если частица  $\mu$  находится в ячейке  $(i, j)$ , ей приписываются значения импульса и энергии в этой ячейке

$$\mathbf{u}_\mu^{n+1} = (x_\mu^n, y_\mu^n, m_\mu, m_\mu v_{xij}^{n+1}, m_\mu v_{yij}^{n+1}, \bar{e}_{ij}^{n+1}), \quad (6.54)$$

где

$$\bar{e}_{ij}^{n+1} = \frac{p_{ij}^n}{(\rho_{ij}^n)^\gamma}. \quad (6.55)$$

Таким образом, остается лишь вычислить новые координаты частиц по уравнениям

$$\frac{dx_\mu}{dt} = \bar{v}_{x\mu}, \quad \frac{dy_\mu}{dt} = \bar{v}_{y\mu}. \quad (6.56)$$

Следует отметить, что в этой схеме интегрирования частицы движутся со скоростью  $\mathbf{v}_\mu$ , которая не эквивалентна тому импульсу  $m\mathbf{v}_\mu^{n+1}$ , который переносит частица. Скорее значения скорости  $\bar{\mathbf{v}}_\mu$  нужно получать интерполированием по времени и пространству (фиг. 6.15), так чтобы для частицы в ячейке  $(i, j)$

$$\bar{\mathbf{v}}_\mu = \frac{1}{\Delta^2} (a_{i+1, j} \bar{\mathbf{v}}_{i+1, j} + a_{i+1, j+1} \bar{\mathbf{v}}_{i+1, j+1} + a_{i, j+1} \bar{\mathbf{v}}_{i, j+1} + a_{i, j} \bar{\mathbf{v}}_{i, j}), \quad (6.57)$$

где значения скорости в ячейках получены интерполированием во времени

$$\bar{\mathbf{v}}_{ij} = \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{v}}_{ij}^{n+1} + \mathbf{v}_{ij}^n), \quad (6.58)$$

причем коэффициенты  $a_{ij}$  равны площадям пересечения ячейки с центром в частице с четырьмя окружающими ячейками (метод с весами перекрывающихся площадей,

Теперь можно вычислить новые характеристики частиц для проведения лагранжева этапа расчетной процедуры. Важную роль в этом алгоритме играет то, что, согласно предположению о термодинамическом равновесии частиц в ячейке, новые импульсы и энергии частиц определяются по характеристикам ячейки, а не по своим предшествующим значениям. То есть, если частица  $\mu$  находится в ячейке  $(i, j)$ , ей приписываются значения импульса и энергии в этой ячейке

$$\mathbf{u}_\mu^{n+1} = (x_\mu^n, y_\mu^n, m_\mu, m_\mu v_{xij}^{n+1}, m_\mu v_{yij}^{n+1}, \bar{\epsilon}_{ij}^{n+1}), \quad (6.54)$$

где

$$\bar{\epsilon}_{ij}^{n+1} = \frac{p_{ij}^n}{(\rho_{ij}^n)^\gamma}. \quad (6.55)$$

Таким образом, остается лишь вычислить новые координаты частиц по уравнениям

$$\frac{dx_\mu}{dt} = \bar{v}_{x\mu}, \quad \frac{dy_\mu}{dt} = \bar{v}_{y\mu}. \quad (6.56)$$

Следует отметить, что в этой схеме интегрирования частицы движутся со скоростью  $\bar{\mathbf{v}}_\mu$ , которая не эквивалентна тому импульсу  $m\mathbf{v}_\mu^{n+1}$ , который переносит частица. Скорее значения скорости  $\bar{\mathbf{v}}_\mu$  нужно получать интерполированием по времени и пространству (фиг. 6.15), так чтобы для частицы в ячейке  $(i, j)$

$$\bar{\mathbf{v}}_\mu = \frac{1}{\Delta^2} (a_{i+1, j} \bar{\mathbf{v}}_{i+1, j} + a_{i+1, j+1} \bar{\mathbf{v}}_{i+1, j+1} + a_{i, j+1} \bar{\mathbf{v}}_{i, j+1} + a_{i, j} \bar{\mathbf{v}}_{i, j}), \quad (6.57)$$

где значения скорости в ячейках получены интерполированием во времени

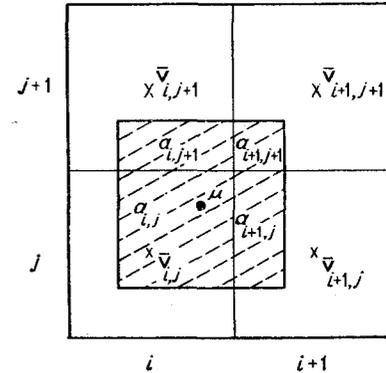
$$\bar{\mathbf{v}}_{ij} = \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{v}}_{ij}^{n+1} + \mathbf{v}_{ij}^n), \quad (6.58)$$

причем коэффициенты  $a_{ij}$  равны площадям пересечения ячейки с центром в частице с четырьмя окружающими ячейками (метод с весами перекрывающихся площадей,

(фиг. 6.15). В результате новые координаты частиц будут определены формулами

$$\begin{aligned} x_\mu^{n+1} &= x_\mu^n + \Delta t \bar{v}_{x\mu}, \\ y_\mu^{n+1} &= y_\mu^n + \Delta t \bar{v}_{y\mu}. \end{aligned} \quad (6.59)$$

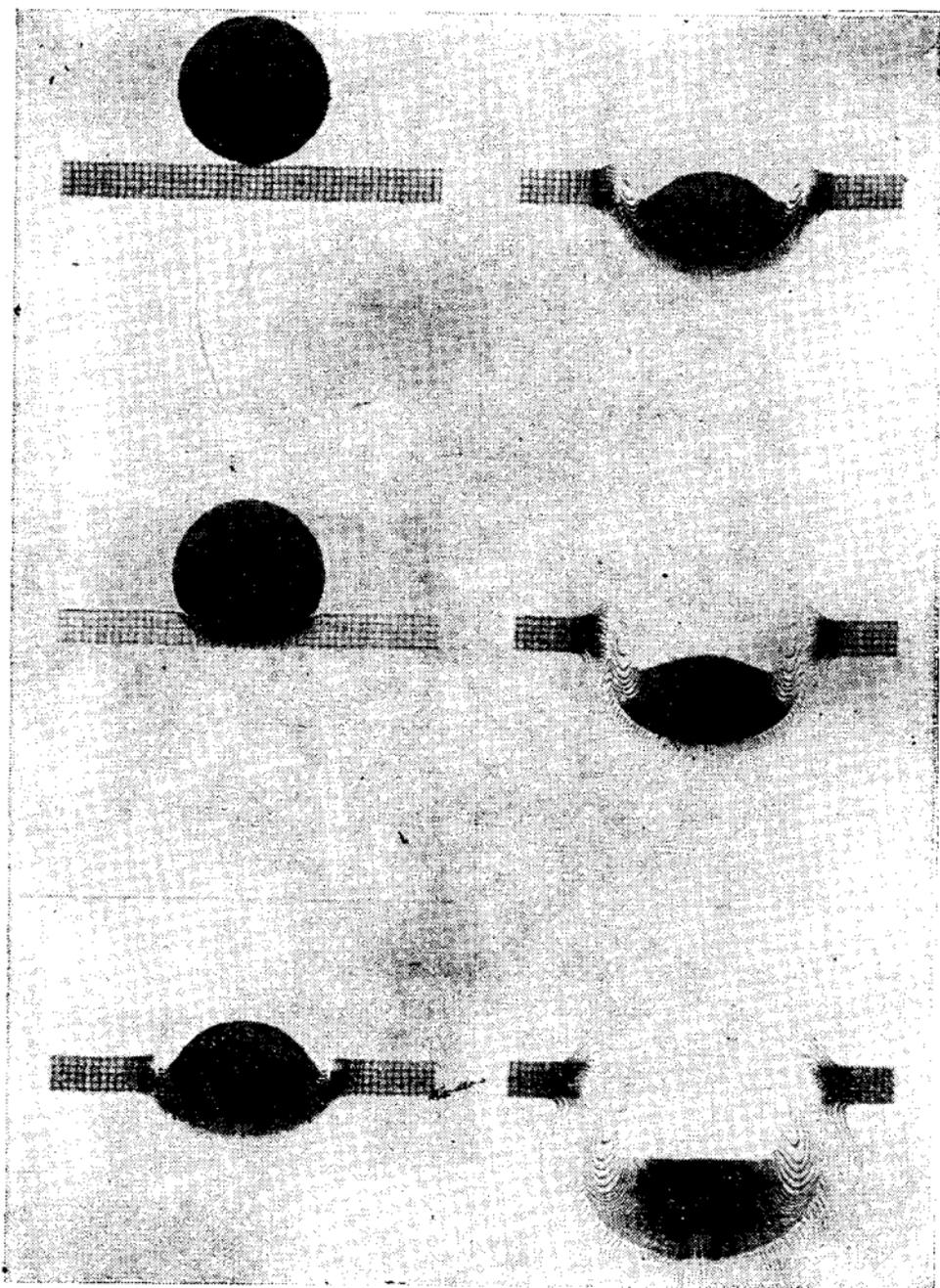
Шаг по времени на этом заканчивается, так как все переменные для частиц  $\mu^{n+1}$  найдены. Из алгоритма



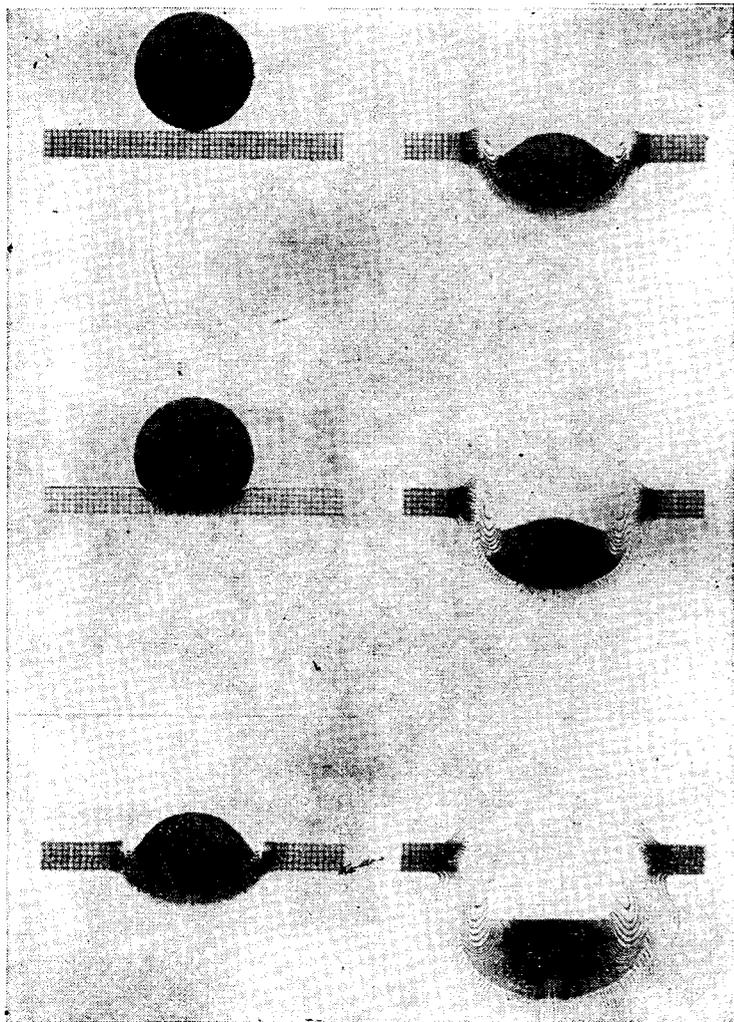
Фиг. 6.15. Определение скорости «частицы» в столкновительном PIC-методе с помощью интерполяции между скоростями в четырех ближайших ячейках.

ясно, что если частица в результате пересчета координат (6.59) пересечет границу ячейки, то масса, импульс и энергия новой ячейки увеличатся. Из алгоритма также легко следует, что масса, импульс и адиабатический инвариант  $p/\rho^\gamma$  на всей сетке тождественно сохраняются.

Столкновительный метод частиц в ячейке очень прост в применении и, кроме того, обладает большой гибкостью. Например, систему, состоящую из нескольких сред с внутренними границами, можно легко описать с помощью различных типов частиц. С другой стороны, PIC-модель использует гораздо больший объем памяти, чем необходимо, так как требуется запоминать



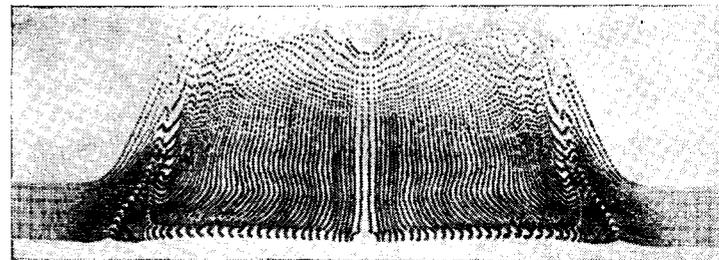
Фиг. 6.16. Удар сверхзвуковой пули в тонкую пластину, рассчитанный с помощью метода частиц в ячейке для уравнений гидродинамики сжимаемой жидкости (из работы [46]).



Фиг. 6.16. Удар сверхзвуковой пули в тонкую пластину, рассчитанный с помощью метода частиц в ячейке для уравнений гидродинамики сжимаемой жидкости (из работы [46]).

на каждом шаге по времени не только сеточные функции, но и характеристики всех частиц.

Более опасно, однако, то, что PIC-метод не центрирован точно во времени, и устойчивость обеспечивается благодаря диффузии, которая возникает при вычислении вспомогательных скоростей (6.53) и которая происходит в основном в дозвуковых потоках из-за весовой



Фиг. 6.17. Применение метода частиц в ячейке к расчету всплеска от падения капли в сжимаемую жидкость в мелком резервуаре (ср. с фиг. 9.12: всплеск в несжимаемой жидкости).

Изображены координаты частиц, используемых в методе, что дает представление о физическом решении (из работы [47]).

интерполяции. В результате имеется тенденция к диффузии импульса и энергии с коэффициентом диффузии, равным

$$D \sim \left\langle v^2 + \frac{\gamma p}{\rho} \right\rangle \Delta t. \quad (6.60)$$

Ввиду ограничений, накладываемых численной диффузией, столкновительная PIC-модель имеет наибольшее применение в сверхзвуковой гидродинамике. На фиг. 6.16 представлен результат PIC-моделирования удара сверхзвуковой пули в тонкую пластину [46]. Эффекты сжатия хорошо заметны, когда пуля пробивает пластину. На фиг. 6.17 показан всплеск жидкости в мелком резервуаре, вызванный падением капли сжимаемой жидкости [46]. Этот результат заметно отличается от решения, полученного для несжимаемой жидкости (см. гл. 9, § 4).

## Частицы в самосогласованном поле: атомы и твердые тела

---

### § 1. Самосогласованные поля в квантовой теории систем частиц

#### 1. Предварительные замечания

Применяя квантовую теорию к таким системам частиц первостепенной важности, как электроны в атоме, молекулы, кристаллическая структура, мы приходим к моделям полей — частиц, имеющим очень близкое сходство с описанным в гл. 6 классическим случаем<sup>1)</sup>. Ниже мы будем рассматривать только стационарные задачи и, значит, системы, находящиеся в состоянии с минимальной энергией. Применив вариационный принцип к задаче минимизации энергии всей системы, мы получим так называемые уравнения Хартри — Фока, которые описывают состояние каждой частицы системы отдельно. В результате  $N$  уравнений будут описывать  $N$  взаимодействующих независимых частиц. Такой подход очень близок к классической задаче, в которой мы описываем состояние, допустим, одного электрона, а затем определяем поле такого состояния. Совместное поле всех электронов системы используется для уточнения состояний отдельных электронов. Проблема, таким образом, может быть сформулирована как задача, в которой состояния отдельных частиц следует определять в «самосогласованных» полях всех остальных частиц системы.

Как и в классическом случае, гамильтониан, описывающий состояние частиц, сам зависит от состояния этих частиц, т. е. задача нелинейна. Можно сказать, что гамильтониан является функцией «распределения» частиц.

---

<sup>1)</sup> Предполагается, что читатель знаком с основами квантовой механики. См., например, работы [48, 49].

## Частицы в самосогласованном поле: атомы и твердые тела

### § 1. Самосогласованные поля в квантовой теории систем частиц

#### 1. Предварительные замечания

Применяя квантовую теорию к таким системам частиц первостепенной важности, как электроны в атоме, молекулы, кристаллическая структура, мы приходим к моделям полей — частиц, имеющим очень близкое сходство с описанным в гл. 6 классическим случаем<sup>1)</sup>. Ниже мы будем рассматривать только стационарные задачи и, значит, системы, находящиеся в состоянии с минимальной энергией. Применяв вариационный принцип к задаче минимизации энергии всей системы, мы получим так называемые уравнения Хартри — Фока, которые описывают состояние каждой частицы системы отдельно. В результате  $N$  уравнений будут описывать  $N$  взаимодействующих независимых частиц. Такой подход очень близок к классической задаче, в которой мы описываем состояние, допустим, одного электрона, а затем определяем поле такого состояния. Совместное поле всех электронов системы используется для уточнения состояний отдельных электронов. Проблема, таким образом, может быть сформулирована как задача, в которой состояния отдельных частиц следует определять в «самосогласованных» полях всех остальных частиц системы.

Как и в классическом случае, гамильтониан, описывающий состояние частиц, сам зависит от состояния этих частиц, т. е. задача нелинейна. Можно сказать, что гамильтониан является функцией «распределения» частиц.

<sup>1)</sup> Предполагается, что читатель знаком с основами квантовой механики. См., например, работы [48, 49]

Однако уравнения состояния частиц в квантовой теории алгебраически сложнее, чем в классических задачах, и в настоящее время даже численными методами можно описывать лишь относительно простые задачи. В этой главе мы рассмотрим системы частиц с дальним взаимодействием и, в частности, электростатическое взаимодействие между электронами и ядрами. Именно электростатические силы обычно определяют структуру атомов, молекул и кристаллических решеток. Кроме того, в первом приближении массивные ядра можно считать неподвижными и создающими зависящий от координат положительный электростатический потенциал.

Как и в классическом случае, мы будем различать системы нескольких частиц и системы многих частиц. В системах нескольких частиц, таких, как отдельный атом, ион или простая молекула, влияние связей между частицами или «парные взаимодействия», описываются в общем виде. В таких системах положение аналогично описанной в гл. 5 «точной» модели типа «частица — частица», включающей  $\frac{1}{2}N(N-1)$  взаимодействий. С другой стороны, в системах многих частиц типа кристаллической решетки невозможно описать каждое двухчастичное взаимодействие и, как и в классической задаче, нужно использовать усредненное поле, определенное с помощью простейшего «обменного потенциала» (см. гл. 7, § 2).

#### 2. Вариационный принцип и уравнения Хартри

Рассмотрим систему  $N$  электронов, взаимодействующих по закону электростатического взаимодействия Кулона. В соответствии с квантовой теорией, если пренебречь релятивистскими эффектами и спин-орбитальным взаимодействием, то состояние всей системы описывается волновой функцией  $\psi$ , зависящей от координат  $x_1, x_2, \dots, x_N$  всех частиц системы

$$\psi = \psi(x_1, x_2, \dots, x_N). \quad (7.1)$$

Функция  $\psi$ , описывающая всю систему, удовлетворяет уравнению Шредингера

$$H\psi = E\psi. \quad (7.2)$$

Собственное значение  $E$  равно полной энергии системы, а  $H$  — полный гамильтониан, равный сумме операторов потенциальной и кинетической энергии всех частиц:

$$H = \sum_{\mu=1}^N H_{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{e^2}{|x_{\mu} - x_{\nu}|}. \quad (7.3)$$

Первая сумма в правой части этого уравнения состоит из отдельных гамильтонианов для каждого электрона, причем каждый из гамильтонианов включает кинетическую энергию данного электрона и его потенциальную энергию в поле неподвижных заряженных ядер. Вторая двойная сумма описывает электростатическое отталкивание между  $\frac{1}{2}N(N-1)$  парами электронов. Гамильтониан  $H_{\mu}$   $\mu$ -го электрона в потенциальном поле ядер  $V_{\text{яд}}$  равен

$$H_{\mu} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 + V_{\text{яд}}(\mathbf{x}_{\mu}), \quad (7.4)$$

где  $\hbar$  — постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ , и, например, для атома с положительным ядром в начале координат потенциал  $V_{\text{яд}}$  имеет вид

$$V_{\text{яд}} = -\frac{Ne^2}{|x_{\mu}|}. \quad (7.5)$$

Задача состоит в определении из уравнения (7.2) собственной функции  $\psi$ , отвечающей собственному значению  $E$ . Если пренебречь спиновыми переменными, то функция  $\psi$  зависит от  $3N$  независимых переменных. Поэтому для определения  $\psi$ -функции только при десяти значениях каждого аргумента потребуется  $10^{3N}$  значений функции. Это означает, что если число независимых взаимодействующих частиц больше двух или трех, то необходимость какого-нибудь приближения или упрощенного описания очевидна.

Покажем, как можно получить упрощенное описание системы многих частиц. Способ перехода к такому упрощенному описанию приводится ниже для того, чтобы выделить существенные приближения, которые

Собственное значение  $E$  равно полной энергии системы, а  $H$  — полный гамильтониан, равный сумме операторов потенциальной и кинетической энергии всех частиц:

$$H = \sum_{\mu=1}^N H_{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{e^2}{|\mathbf{x}_{\mu} - \mathbf{x}_{\nu}|}. \quad (7.3)$$

Первая сумма в правой части этого уравнения состоит из отдельных гамильтонианов для каждого электрона, причем каждый из гамильтонианов включает кинетическую энергию данного электрона и его потенциальную энергию в поле неподвижных заряженных ядер. Вторая двойная сумма описывает электростатическое отталкивание между  $\frac{1}{2}N(N-1)$  парами электронов. Гамильтониан  $H_{\mu}$   $\mu$ -го электрона в потенциальном поле ядер  $V_{\text{яд}}$  равен

$$H_{\mu} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 + V_{\text{яд}}(\mathbf{x}_{\mu}), \quad (7.4)$$

где  $\hbar$  — постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ , и, например, для атома с положительным ядром в начале координат потенциал  $V_{\text{яд}}$  имеет вид

$$V_{\text{яд}} = -\frac{Ne^2}{|\mathbf{x}_{\mu}|}. \quad (7.5)$$

Задача состоит в определении из уравнения (7.2) собственной функции  $\psi$ , отвечающей собственному значению  $E$ . Если пренебречь спиновыми переменными, то функция  $\psi$  зависит от  $3N$  независимых переменных. Поэтому для определения  $\psi$ -функции только при десяти значениях каждого аргумента потребуется  $10^{3N}$  значений функции. Это означает, что если число независимых взаимодействующих частиц больше двух или трех, то необходимость какого-нибудь приближения или упрощенного описания очевидна.

Покажем, как можно получить упрощенное описание системы многих частиц. Способ перехода к такому упрощенному описанию приводится ниже для того, чтобы выделить существенные приближения, которые

в нем содержатся. Рассмотрим стационарную систему в основном состоянии с полной энергией  $E$ ,

$$E = \int \psi^* H \psi d\tau, \quad (7.6)$$

которую нужно минимизировать. Интегрирование в выражении (7.6) выполняется по всем координатам системы  $d\tau = dx_1 dx_2, \dots, dx_N$ . Варьируя волновую функцию  $\psi$ , находим то частное решение, которое минимизирует  $E$ :

$$\delta E = 0 = \delta \int \psi^* H \psi d\tau. \quad (7.7)$$

Второе ограничение, накладываемое при построении разумного описания системы многих частиц, состоит в предположении, что искомое частное решение имеет вид функции с разделенными переменными. То есть мы попытаемся описать систему набором из  $N$  независимых волновых функций  $u_{\mu}$ , отвечающих каждому электрону  $1 \leq \mu \leq N$  системы. В результате задачу можно сформулировать аналогично классической задаче  $N$  тел. Это приближение позволяет записать полную волновую функцию  $\psi$  как произведение индивидуальных волновых функций для каждого электрона

$$\psi = u_1(\mathbf{x}_1) u_2(\mathbf{x}_2) \dots u_N(\mathbf{x}_N). \quad (7.8)$$

Следует отметить, что такая волновая функция не удовлетворяет требованиям симметрии квантовой системы по отношению к перестановке частиц, и в дальнейшем мы изменим вид функции  $\psi$  с учетом этого требования. Волновая функция вида (7.8) не является точной, так как она не описывает корреляции между парами электронов, т. е. в формуле (7.8) содержится предположение, что все электроны движутся независимо друг от друга.

Теперь попробуем получить  $N$  отдельных уравнений, описывающих волновые функции  $u$  каждого из электронов системы, где каждый электрон движется в поле, создаваемом неподвижными ядрами и всеми остальными

электронами. Подействуем полным гамильтонианом (7.3) на волновую функцию (7.8),

$$H\psi = \sum_{\mu=1}^N (u_1 \dots u_{\mu-1} u_{\mu+1} \dots u_N) H_{\mu} u_{\mu} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N (u_1 \dots) \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\mu} u_{\nu}, \quad (7.9)$$

где обозначено  $x_{\mu\nu} = |\mathbf{x}_{\mu} - \mathbf{x}_{\nu}|$  и все слагаемые гамильтониана  $H_{\mu}$  действуют только на координаты  $\mathbf{x}_{\mu}$ . Если  $H\psi$  в таком виде подставить в интеграл для энергии (7.6), то можно вычислить интегралы по всем координатам, за исключением тех, которые стоят в правой части оператора Гамильтона. В результате мы получим выражение для энергии:

$$E = \sum_{\mu=1}^N \int u_{\mu}^* \left( H_{\mu} + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{1}{2} \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\nu} \mathbf{d}\mathbf{x}_{\nu} \right) u_{\mu} \mathbf{d}\mathbf{x}_{\mu}, \quad (7.10)$$

где использовано предположение о том, что волновые функции  $u_{\lambda}$  отдельных электронов нормированы,

$$\int u_{\lambda}^* u_{\lambda} \mathbf{d}\mathbf{x}_{\lambda} = 1. \quad (7.11)$$

Теперь можно минимизировать энергию  $E$  системы согласно вариационному принципу (7.7). Мы ищем набор одночастичных электронных волновых функций  $u_{\mu}$ , минимизирующих  $E$ , поэтому мы варьируем каждую волновую функцию  $\delta u_{\mu}$ , пока энергия не достигнет минимального значения. Вариации должны проводиться независимо, так чтобы каждая вариация была ортогональна соответствующей волновой функции, а именно:

$$\int \delta u_{\mu}^* u_{\mu} \mathbf{d}\mathbf{x}_{\mu} = 0. \quad (7.12)$$

При этом интеграл для энергии минимизируется:

$$\sum_{\mu} \int \delta u_{\mu}^* \left\{ H_{\mu} + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\nu} \mathbf{d}\mathbf{x}_{\nu} \right\} u_{\mu} \mathbf{d}\mathbf{x}_{\mu} = 0. \quad (7.13)$$

электронами. Подействуем полным гамильтонианом (7.3) на волновую функцию (7.8),

$$H\psi = \sum_{\mu=1}^N (u_1 \dots u_{\mu-1} u_{\mu+1} \dots u_N) H_{\mu} u_{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N (u_1 \dots) \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\mu} u_{\nu}, \quad (7.9)$$

где обозначено  $x_{\mu\nu} = |\mathbf{x}_{\mu} - \mathbf{x}_{\nu}|$  и все слагаемые гамильтониана  $H_{\mu}$  действуют только на координаты  $\mathbf{x}_{\mu}$ . Если  $H\psi$  в таком виде подставить в интеграл для энергии (7.6), то можно вычислить интегралы по всем координатам, за исключением тех, которые стоят в правой части оператора Гамильтона. В результате мы получим выражение для энергии:

$$E = \sum_{\mu=1}^N \int u_{\mu}^* \left( H_{\mu} + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{1}{2} \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\nu} d\mathbf{x}_{\nu} \right) u_{\mu} d\mathbf{x}_{\mu}, \quad (7.10)$$

где использовано предположение о том, что волновые функции  $u_{\lambda}$  отдельных электронов нормированы,

$$\int u_{\lambda}^* u_{\lambda} d\mathbf{x}_{\lambda} = 1. \quad (7.11)$$

Теперь можно минимизировать энергию  $E$  системы согласно вариационному принципу (7.7). Мы ищем набор одночастичных электронных волновых функций  $u_{\mu}$ , минимизирующих  $E$ , поэтому мы варьируем каждую волновую функцию  $\delta u_{\mu}$ , пока энергия не достигнет минимального значения. Вариации должны проводиться независимо, так чтобы каждая вариация была ортогональна соответствующей волновой функции, а именно:

$$\int \delta u_{\mu}^* u_{\mu} d\mathbf{x}_{\mu} = 0. \quad (7.12)$$

При этом интеграл для энергии минимизируется:

$$\sum_{\mu} \int \delta u_{\mu}^* \left\{ H_{\mu} + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\nu} d\mathbf{x}_{\nu} \right\} u_{\mu} d\mathbf{x}_{\mu} = 0. \quad (7.13)$$

Для того чтобы обеспечить выполнение условий (7.12) при независимости вариаций, умножим каждое из условий (7.12) на множитель Лагранжа  $\epsilon_{\mu}$  и вычтем их из уравнения (7.13):

$$\sum_{\mu} \int \delta u_{\mu}^* \left\{ H_{\mu} + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\nu} d\mathbf{x}_{\nu} - \epsilon_{\mu} \right\} u_{\mu} d\mathbf{x}_{\mu} = 0. \quad (7.14)$$

Использование множителей Лагранжа позволяет проводить вариации независимо, причем коэффициент при каждой вариации  $\delta u_{\mu}^*$  должен быть равен нулю. В результате мы получим  $N$  отдельных уравнений для каждой из волновых функций  $u_{\mu}$ :

$$\left( H_{\mu} + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\nu} d\mathbf{x}_{\nu} \right) u_{\mu} = \epsilon_{\mu} u_{\mu}, \quad 1 \leq \mu \leq N. \quad (7.15)$$

Эти уравнения, известные как уравнения Хартри, можно записать эвристически, если рассматривать их как систему  $N$  уравнений Шредингера для каждого из  $N$  электронов системы. Полный эффективный гамильтониан, действующий на волновую функцию каждого электрона, состоит из операторов кинетической и потенциальной энергии в поле ядра  $H_{\mu}$  и суммы «ожидаемых потенциалов»  $V_{\nu\mu}$  от каждого из остальных  $N-1$  электронов  $\nu$  при  $\nu \neq \mu$ ,

$$V_{\nu\mu} = e^2 \int \frac{u_{\nu}^* u_{\nu}}{|\mathbf{x}_{\mu} - \mathbf{x}_{\nu}|} d\mathbf{x}_{\nu}. \quad (7.16)$$

Эти члены описывают электростатическое отталкивание между всеми парами электронов и тем самым согласованное поле системы.

Система уравнений Хартри, описывающая ансамбль многих частиц, представляет собой систему  $N$  интегро-дифференциальных уравнений, причем, как и в классическом случае, они нелинейны, так как оператор Гамильтона, действующий на каждую электронную волновую функцию, зависит от состояния всех остальных

электронов системы. Целесообразно пойти дальше и выразить оператор потенциальной энергии межэлектронного взаимодействия  $V_{v\mu}$  (7.16) через электростатический потенциал  $\Phi_v$ , создаваемый электроном  $v$  и действующий на электрон  $\mu$  в точке  $x_\mu$ :

$$\Phi_v(x_\mu) = e \int \frac{u_v^* u_v}{|x_\mu - x_v|} dx_v. \quad (7.17)$$

Это уравнение является интегральной формой уравнения Пуассона (см. гл. 6, § 1) с плотностью зарядов  $\rho_v = eu_v^* u_v$ :

$$\nabla^2 \Phi_v = -4\pi e u_v^* u_v. \quad (7.18)$$

С помощью электростатических самосогласованных потенциалов  $\Phi_v$  уравнения Хартри можно переписать в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\mu^2 + V_{\text{яд}}(x_\mu) + \sum_{\substack{v=1 \\ v \neq \mu}}^N e \Phi_v(x_\mu) \right\} u_\mu = \epsilon_\mu u_\mu, \quad (7.19)$$

$$1 \leq \mu \leq N,$$

где самосогласованные потенциалы определяются из системы  $N$  уравнений Пуассона

$$\nabla^2 \Phi_v = -4\pi e u_v^* u_v, \quad 1 \leq v \leq N. \quad (7.20)$$

Следует отметить, что при очень большом числе электронов в системе ( $N$  велико) можно пренебречь вкладом собственного поля частицы в сумму потенциалов (7.19). Поэтому вместо отдельных потенциалов  $\Phi_v$  можно использовать потенциал  $\Phi$ , созданный всеми электронами. При этом  $N$  отдельных уравнений Пуассона переходят в одно уравнение для полного потенциала:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi e \sum_{v=1}^N u_v^* u_v. \quad (7.21)$$

Очевидно, что такое среднее поле значительно упрощает задачу. Однако, прежде чем искать такой средний по-

электронов системы. Целесообразно пойти дальше и выразить оператор потенциальной энергии межэлектронного взаимодействия  $V_{\nu\mu}$  (7.16) через электростатический потенциал  $\Phi_{\nu}$ , создаваемый электроном  $\nu$  и действующий на электрон  $\mu$  в точке  $x_{\mu}$ :

$$\Phi_{\nu}(x_{\mu}) = e \int \frac{u_{\nu}^* u_{\nu}}{|x_{\mu} - x_{\nu}|} dx_{\nu}. \quad (7.17)$$

Это уравнение является интегральной формой уравнения Пуассона (см. гл. 6, § 1) с плотностью зарядов  $\rho_{\nu} = eu_{\nu}^* u_{\nu}$ :

$$\nabla^2 \Phi_{\nu} = -4\pi eu_{\nu}^* u_{\nu}. \quad (7.18)$$

С помощью электростатических самосогласованных потенциалов  $\Phi_{\nu}$  уравнения Хартри можно переписать в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 + V_{\text{яд}}(x_{\mu}) + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N e\Phi_{\nu}(x_{\mu}) \right\} u_{\mu} = \varepsilon_{\mu} u_{\mu}, \quad (7.19)$$

$$1 \leq \mu \leq N,$$

где самосогласованные потенциалы определяются из системы  $N$  уравнений Пуассона

$$\nabla^2 \Phi_{\nu} = -4\pi eu_{\nu}^* u_{\nu}, \quad 1 \leq \nu \leq N. \quad (7.20)$$

Следует отметить, что при очень большом числе электронов в системе ( $N$  велико) можно пренебречь вкладом собственного поля частицы в сумму потенциалов (7.19). Поэтому вместо отдельных потенциалов  $\Phi_{\nu}$  можно использовать потенциал  $\Phi$ , созданный всеми электронами. При этом  $N$  отдельных уравнений Пуассона переходят в одно уравнение для полного потенциала:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi e \sum_{\nu=1}^N u_{\nu}^* u_{\nu}. \quad (7.21)$$

Очевидно, что такое среднее поле значительно упрощает задачу. Однако, прежде чем искать такой средний по-

тенциал, необходимо рассмотреть свойство симметрии полной волновой функции относительно перестановок частиц, которое в уравнениях Хартри не имеет места.

## § 2. Тождественность частиц и обменный потенциал

Уравнения Хартри были получены в предположении, что полная волновая функция системы может быть представлена в виде произведения одночастичных волновых функций (7.8). Однако электроны в системе неразличимы в том смысле, что, если поменять местами два электрона, система никак не изменится. Электроны нельзя пометить, поэтому полный гамильтониан (7.3), описывающий всю систему, инвариантен по отношению к перестановке или обмену координат отдельных частиц. Мы покажем, что простая волновая функция (7.8) не удовлетворяет требованию неразличимости электронов в системе, а затем выясним, как следует изменить уравнения Хартри для того, чтобы учесть это условие.

Достаточно рассмотреть здесь систему из двух электронов. Пусть электрон 1 находится в состоянии  $u_{\alpha}$ , а электрон 2 — в состоянии  $u_{\beta}$ . Согласно нашему прежнему предположению о представимости волновой функции в виде произведения (7.8), волновая функция всей системы равна

$$\psi = u_{\alpha}(1) u_{\beta}(2). \quad (7.22)$$

Однако если электроны в системе неразличимы, то волновая функция  $\psi'$ , описывающая электрон 1 в состоянии  $u_{\beta}$  и электрон 2 в состоянии  $u_{\alpha}$ , полностью эквивалентна функции (7.22):

$$\psi' = u_{\beta}(1) u_{\alpha}(2). \quad (7.23)$$

Если эти волновые функции эквивалентны для описания рассматриваемой системы, то, согласно принципу суперпозиции, любая их линейная комбинация также применима для описания этой системы:

$$\psi'' = c_1 u_{\alpha}(1) u_{\beta}(2) + c_2 u_{\beta}(1) u_{\alpha}(2),$$

где постоянные  $c_1$  и  $c_2$  подчинены условию нормировки функции  $\psi''$ :  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ . С другой стороны, так

как частицы неразличимы, нет оснований считать то или иное состояние  $\psi'$  (7.23) или  $\psi$  (7.22) более вероятным, что означает

$$|c_1|^2 = |c_2|^2.$$

Следовательно, для такой двухчастичной системы правильная запись полной волновой функции, составленной из одночастичных функций и удовлетворяющей условию неразличимости, имеет вид

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{u_\alpha(1) u_\beta(2) \pm u_\beta(1) u_\alpha(2)\}. \quad (7.24)$$

Возникает вопрос о том, какой из двух знаков в формуле (7.24) для волновой функции следует выбрать. Согласно эксперименту, для электронов нужно брать антисимметричную волновую функцию (отрицательный знак). Все частицы, которые в системе одинаковых частиц описываются антисимметричными волновыми функциями, называются фермионами.

Обобщение этой идеи на систему  $N$  неразличимых фермионов не представляет труда. В соответствии с экспериментом потребуем, чтобы волновая функция  $\psi$ , описывающая систему, была антисимметрична относительно перестановки любой пары частиц. Отсюда следует, что  $\psi$  можно записать в виде определителя, составленного из одночастичных волновых функций:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_\alpha(1) & u_\alpha(2) & \dots & u_\alpha(N) \\ u_\beta(1) & u_\beta(2) & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_\zeta(1) & u_\zeta(2) & \dots & u_\zeta(N) \end{vmatrix} \quad (7.25)$$

Это определитель Слэтера, и очевидно, что он удовлетворяет условию антисимметрии волновой функции, так как при перестановке двух столбцов определитель меняет знак. Замечательно также то, что из определителя Слэтера сразу же вытекает принцип запрета Паули. Согласно принципу Паули, система одинаковых фермионов не может находиться в состоянии, описываемом вол-

как частицы неразличимы, нет оснований считать то или иное состояние  $\psi'$  (7.23) или  $\psi$  (7.22) более вероятным, что означает

$$|c_1|^2 = |c_2|^2.$$

Следовательно, для такой двухчастичной системы правильная запись полной волновой функции, составленной из одночастичных функций и удовлетворяющей условию неразличимости, имеет вид

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{u_\alpha(1) u_\beta(2) \pm u_\beta(1) u_\alpha(2)\}. \quad (7.24)$$

Возникает вопрос о том, какой из двух знаков в формуле (7.24) для волновой функции следует выбрать. Согласно эксперименту, для электронов нужно брать антисимметричную волновую функцию (отрицательный знак). Все частицы, которые в системе одинаковых частиц описываются антисимметричными волновыми функциями, называются фермионами.

Обобщение этой идеи на систему  $N$  неразличимых фермионов не представляет труда. В соответствии с экспериментом потребуем, чтобы волновая функция  $\psi$ , описывающая систему, была антисимметрична относительно перестановки любой пары частиц. Отсюда следует, что  $\psi$  можно записать в виде определителя, составленного из одночастичных волновых функций:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_\alpha(1) & u_\alpha(2) & \dots & u_\alpha(N) \\ u_\beta(1) & u_\beta(2) & & \cdot \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_\zeta(1) & u_\zeta(2) & \dots & u_\zeta(N) \end{vmatrix} \quad (7.25)$$

Это определитель Слэтера, и очевидно, что он удовлетворяет условию антисимметрии волновой функции, так как при перестановке двух столбцов определитель меняет знак. Замечательно также то, что из определителя Слэтера сразу же вытекает принцип запрета Паули. Согласно принципу Паули, система одинаковых фермионов не может находиться в состоянии, описываемом вол-

новой функцией, содержащей хотя бы две одинаковые одночастичные волновые функции. Очевидно, что при двух совпадающих одночастичных волновых функциях определитель Слэтера обращается в нуль.

Следует отметить, что независимые координаты одной частицы состоят из трех пространственных координат и спиновой координаты. Поэтому в общем случае при построении определителя Слэтера (7.25) следует принять во внимание, что одночастичные волновые функции, отличающиеся спиновой координатой, описывают разные состояния. Но здесь мы не будем учитывать спиновое взаимодействие и ограничимся ссылкой на соответствующую литературу [48].

Теперь можно вернуться к основной проблеме и рассмотреть вопрос о том, как нужно видоизменить уравнения Хартри для того, чтобы включить в них принцип неразличимости электронов системы. Вариационный принцип применим точно в той же форме, что и в § 1, но теперь полная волновая функция  $\psi$  задается определителем Слэтера (7.25). Таким образом, принимая во внимание антисимметрию волновой функции, перепишем уравнения Хартри (7.15) в виде

$$H_\mu u_\mu(\mathbf{x}_\mu) + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \int u_\nu^*(\mathbf{x}_\nu) \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} \{u_\nu(\mathbf{x}_\nu) u_\mu(\mathbf{x}_\mu) - u_\nu(\mathbf{x}_\mu) u_\mu(\mathbf{x}_\nu)\} d\mathbf{x}_\nu = \epsilon_\mu u_\mu(\mathbf{x}_\mu), \quad 1 \leq \mu \leq N. \quad (7.26)$$

Интегральные члены под знаком суммы описывают электростатический потенциал отталкивания между электроном в состоянии  $\mu$  и всеми остальными электронными состояниями. В подынтегральном выражении появляется двухэлектронная волновая функция, так как собственный потенциал электрона должен быть исключен. Следует отметить, что суммирование в уравнении (7.26) проводится по  $N-1$  состояниям, однако без потери общности можно распространить суммирование на все  $N$  состояний, включая случай  $\nu = \mu$ , так как при этом двухэлектронная волновая функция обращается

в нуль. Поэтому систему  $N$  уравнений (7.26) можно переписать в виде

$$H_{\mu} u_{\mu} + \left( \sum_{\nu=1}^N \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\nu} d\mathbf{x}_{\nu} \right) u_{\mu} - \\ - \sum_{\nu=1}^N \left( \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\mu} d\mathbf{x}_{\nu} \right) u_{\nu} = \varepsilon_{\mu} u_{\mu}, \quad 1 \leq \mu \leq N. \quad (7.27)$$

Эта система  $N$  уравнений для  $N$  одноэлектронных состояний называется системой уравнений Хартри — Фока. Все члены, стоящие под знаком второй суммы, определяют обменный потенциал, который возникает из-за того, что электрон не взаимодействует сам с собой. Члены, стоящие под знаком первой суммы, выражают полный электростатический потенциал системы электронов. Как и в § 1, полезно выразить интегралы через потенциалы частиц, которые в свою очередь можно найти как решения уравнения Пуассона. Первая сумма дает полный потенциал электронов системы

$$e\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{\nu} \int u_{\nu}^*(\mathbf{s}) \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{s}|} u_{\nu}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}. \quad (7.28)$$

Дифференциальной формой последнего соотношения, как и ранее, будет уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi e \sum_{\nu=1}^N u_{\nu}^* u_{\nu}. \quad (7.29)$$

Каждый из членов второй суммы можно отдельно выразить через обменные потенциалы  $\Phi_{\mu\nu}$  между парами состояний:

$$e\Phi_{\mu\nu}(\mathbf{x}) = \int u_{\nu}^*(\mathbf{s}) \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{s}|} u_{\mu}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}. \quad (7.30)$$

Потенциалы  $\Phi_{\mu\nu}$  удовлетворяют дифференциальному уравнению Пуассона

$$\nabla^2 \Phi_{\mu\nu} = -4\pi e u_{\nu}^* u_{\mu}. \quad (7.31)$$

в нуль. Поэтому систему  $N$  уравнений (7.26) можно переписать в виде

$$H_{\mu}u_{\mu} + \left( \sum_{\nu=1}^N \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\nu} dx_{\nu} \right) u_{\mu} - \sum_{\nu=1}^N \left( \int u_{\nu}^* \frac{e^2}{x_{\mu\nu}} u_{\mu} dx_{\nu} \right) u_{\nu} = \varepsilon_{\mu} u_{\mu}, \quad 1 \leq \mu \leq N. \quad (7.27)$$

Эта система  $N$  уравнений для  $N$  одноэлектронных состояний называется системой уравнений Хартри — Фока. Все члены, стоящие под знаком второй суммы, определяют обменный потенциал, который возникает из-за того, что электрон не взаимодействует сам с собой. Члены, стоящие под знаком первой суммы, выражают полный электростатический потенциал системы электронов. Как и в § 1, полезно выразить интегралы через потенциалы частиц, которые в свою очередь можно найти как решения уравнения Пуассона. Первая сумма дает полный потенциал электронов системы

$$e\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{\nu} \int u_{\nu}^*(\mathbf{s}) \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{s}|} u_{\nu}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}. \quad (7.28)$$

Дифференциальной формой последнего соотношения, как и ранее, будет уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi e \sum_{\nu=1}^N u_{\nu}^* u_{\nu}. \quad (7.29)$$

Каждый из членов второй суммы можно отдельно выразить через обменные потенциалы  $\Phi_{\mu\nu}$  между парами состояний:

$$e\Phi_{\mu\nu}(\mathbf{x}) = \int u_{\nu}^*(\mathbf{s}) \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{s}|} u_{\mu}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}. \quad (7.30)$$

Потенциалы  $\Phi_{\mu\nu}$  удовлетворяют дифференциальному уравнению Пуассона

$$\nabla^2 \Phi_{\mu\nu} = -4\pi e u_{\nu}^* u_{\mu}. \quad (7.31)$$

Система  $1/2N(N-1)$  таких уравнений описывает все пары состояний. Уравнения Хартри — Фока с использованием этих потенциалов принимают простой вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{яд}} + e\Phi \right\} u_{\mu} - \sum_{\nu=1}^N e\Phi_{\mu\nu} u_{\nu} = \varepsilon_{\mu} u_{\mu}, \quad (7.32)$$

$$1 \leq \mu \leq N.$$

Следует отметить несколько моментов, касающихся этих уравнений, и при этом полезно провести аналогию с классической системой частиц с дальним взаимодействием. Уравнения Хартри — Фока (7.32) образуют систему  $N$  нелинейных уравнений, которая описывает  $N$  одночастичных состояний системы<sup>1)</sup>. Уравнения нелинейны и связаны самосогласованным потенциалом (7.29) и (7.31). В системе существует  $1/2N(N-1)$  взаимодействий между всеми парами частиц, которые описываются обменными потенциалами  $\Phi_{\mu\nu}$ , и мы можем по аналогии с «точным» классическим случаем (гл. 5) рассматривать такое описание как «точное» в том смысле, что описываются все пары взаимодействий. И вновь, как и в классическом случае, ясно, что в такой модели можно численно описать лишь ограниченное число одночастичных состояний, так как приходится определять  $1/2N(N-1)$  взаимодействий с помощью  $1/2N(N-1)$  уравнений Пуассона для обменных потенциалов (7.31). Поэтому полные уравнения Хартри — Фока применимы только к системам нескольких электронов, таким, как атом или простая молекула. С другой стороны, для многоэлектронной системы (например, электроны в кристаллической решетке) нужно ввести средний самосогласованный потенциал тем же способом, которым было введено среднее поле для плазменной или гравитационной системы многих частиц (гл. 6).

Для системы многих частиц с дальнедействующими электростатическими силами в первом приближении можно считать, что парные взаимодействия, описываемые

<sup>1)</sup> Согласно теореме Купмана, уравнения Хартри — Фока (7.32), кроме основного состояния, описывают еще и возбужденные состояния многоэлектронной системы.

обменным потенциалом, малы по сравнению с коллективным потенциалом  $\Phi$  (гл. 6). При более строгом подходе следовало бы усреднить обменный потенциал, чтобы учесть дебаевское экранирование. Такое усреднение показывает, что влияние обменного потенциала проявляется только на коротких расстояниях [50, 51]. В связи с этим Слэтер [52, 53] предложил заменить точный обменный потенциал усредненным обменным потенциалом в виде

$$\Phi_{\text{обм}} = 3|e| \left\{ \frac{3}{4\pi} n_e \right\}^{1/3}, \quad (7.33)$$

где  $n_e$  — плотность электронов. Таким образом, уравнения Хартри — Фока для многоэлектронной системы описывают состояния в усредненном поле:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{яд}} + e\Phi - e\Phi_{\text{обм}} \right\} u_{\mu} = \epsilon_{\mu} u_{\mu}. \quad (7.34)$$

С введением такого усредненного поля задача самосогласованного движения многих электронов существенно упрощается, так как исчезает необходимость прямого описания  $1/2 N(N-1)$  парных взаимодействий. При этом остается только одно уравнение для поля.

Мы рассмотрим эти два предельных случая систем квантовых частиц. При изучении структуры атомов электроны нужно считать системой нескольких электронов, содержащей обменные члены для двухчастичных состояний (7.32). С другой стороны, электроны в кристаллической решетке следует рассматривать как систему многих частиц, и для ее описания следует использовать уравнения Хартри — Фока с усредненным полем (7.34).

### § 3. Атом как система нескольких частиц

При использовании уравнений Хартри — Фока (7.31), (7.32) для изучения структуры атомов применяемый электростатический ядерный потенциал имеет особенно простую центральную форму. Поэтому предположим, что ядро закреплено в начале координат, и будем использовать сферическую систему координат  $(r, \theta, \varphi)$  (фиг. 7.1). Потенциальная энергия электрона в поле ядра атома

обменным потенциалом, малы по сравнению с коллективным потенциалом  $\Phi$  (гл. 6). При более строгом подходе следовало бы усреднить обменный потенциал, чтобы учесть дебаевское экранирование. Такое усреднение показывает, что влияние обменного потенциала проявляется только на коротких расстояниях [50, 51]. В связи с этим Слэтер [52, 53] предложил заменить точный обменный потенциал усредненным обменным потенциалом в виде

$$\Phi_{\text{обм}} = 3|e| \left\{ \frac{3}{4\pi} n_e \right\}^{1/2}, \quad (7.33)$$

где  $n_e$  — плотность электронов. Таким образом, уравнения Хартри — Фока для многоэлектронной системы описывают состояния в усредненном поле:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{яд}} + e\Phi - e\Phi_{\text{обм}} \right\} u_{\mu} = \epsilon_{\mu} u_{\mu}. \quad (7.34)$$

С введением такого усредненного поля задача самосогласованного движения многих электронов существенно упрощается, так как исчезает необходимость прямого описания  $1/2 N(N-1)$  парных взаимодействий. При этом остается только одно уравнение для поля.

Мы рассмотрим эти два предельных случая систем квантовых частиц. При изучении структуры атомов электроны нужно считать системой нескольких электронов, содержащей обменные члены для двухчастичных состояний (7.32). С другой стороны, электроны в кристаллической решетке следует рассматривать как систему многих частиц, и для ее описания следует использовать уравнения Хартри — Фока с усредненным полем (7.34).

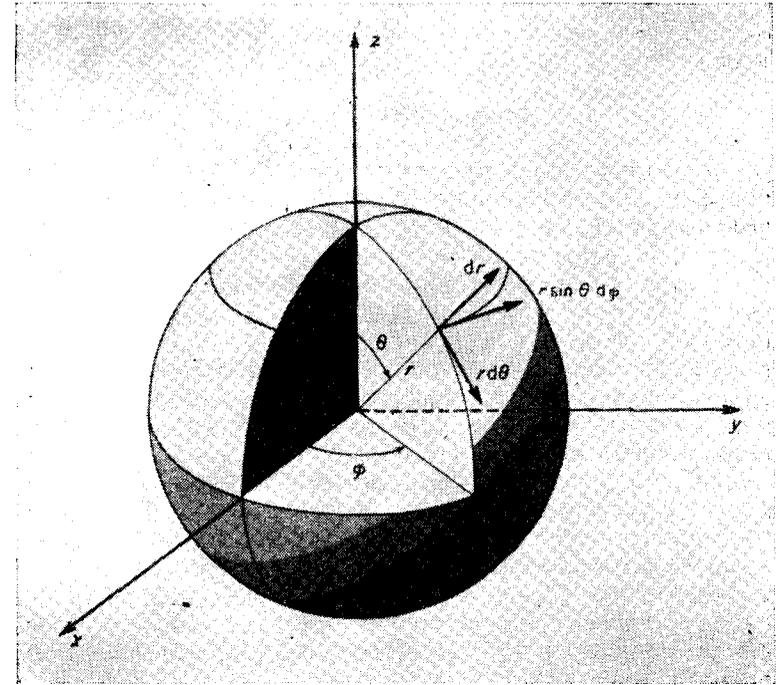
### § 3. Атом как система нескольких частиц

При использовании уравнений Хартри — Фока (7.31), (7.32) для изучения структуры атомов применяемый электростатический ядерный потенциал имеет особенно простую центральную форму. Поэтому предположим, что ядро закреплено в начале координат, и будем использовать сферическую систему координат  $(r, \theta, \varphi)$  (фиг. 7.1). Потенциальная энергия электрона в поле ядра атома

с атомным номером  $N$  имеет простой вид:

$$V_{\text{яд}} = -\frac{Ne^2}{r}. \quad (7.35)$$

Полезно ввести безразмерные переменные, выбрав в качестве единицы длины борковский радиус  $\hbar^2/me^2$ , а в каче-



Фиг. 7.1. Сферические координаты.

стве единицы энергии —  $me^4/\hbar^2$ . Тогда состояния  $u_{\mu}$   $N$  электронов атома описываются системой  $N$  уравнений Хартри — Фока:

$$\left( \frac{1}{2} \nabla^2 - \Phi + \epsilon_{\mu} \right) u_{\mu} + \sum_{\nu=1}^N \Phi_{\mu\nu} u_{\nu} = 0; \quad 1 \leq \mu \leq N, \quad (7.36)$$

где  $\Phi$  — полный потенциал ядра и всех электронных состояний:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi N \delta(r) + 4\pi \sum_{\mu} u_{\mu}^* u_{\mu}, \quad (7.37)$$

а обменный потенциал между парами электронных состояний определяется системой  $1/2 N(N-1)$  уравнений Пуассона:

$$\nabla^2 \Phi_{\mu\nu} = 4\pi u_{\nu}^* u_{\mu}. \quad (7.38)$$

Эффективные гамильтонианы (7.36), действующие на каждое электронное состояние  $u_{\mu}$ , имеют вид операторов дифференцирования по пространству. Поэтому в качестве общего подхода к решению таких уравнений можно представить уравнения на трехмерной разностной сетке, и тогда в соответствии со сказанным в гл. 4 гамильтониан станет семидиагональной матрицей. Затем можно будет определить (гл. 4) собственные векторы и собственные значения такой матрицы. Однако для обеспечения приемлемого разрешения вдоль каждой из координат  $(r, \theta, \varphi)$  матрицу разностной аппроксимации оператора Гамильтона придется брать очень большой, что делает численную задачу очень трудной. Так как определяющую роль играет центральный потенциал ядра, успешным будет другой подход, который состоит в аналитическом отделении зависимости от угловых координат  $(\theta, \varphi)$  с сохранением разностного метода в радиальном направлении.

В сферических координатах оператор Лапласа, входящий как в уравнение Пуассона, так и в оператор кинетической энергии Гамильтона, имеет вид

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \Lambda^2. \end{aligned} \quad (7.39)$$

Очевидно, что собственные функции  $s_{\mu}$  оператора Лапласа получаются разделением переменных

$$s_{\mu} = R_l(r) P_l^m(\theta) e^{im\varphi}, \quad (7.40)$$

где  $\Phi$  — полный потенциал ядра и всех электронных состояний:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi N \delta(r) + 4\pi \sum_{\mu} u_{\mu}^* u_{\mu}, \quad (7.37)$$

а обменный потенциал между парами электронных состояний определяется системой  $1/2 N(N-1)$  уравнений Пуассона:

$$\nabla^2 \Phi_{\mu\nu} = 4\pi u_{\nu}^* u_{\mu}. \quad (7.38)$$

Эффективные гамильтонианы (7.36), действующие на каждое электронное состояние  $u_{\mu}$ , имеют вид операторов дифференцирования по пространству. Поэтому в качестве общего подхода к решению таких уравнений можно представить уравнения на трехмерной разностной сетке, и тогда в соответствии со сказанным в гл. 4 гамильтониан станет семидиагональной матрицей. Затем можно будет определить (гл. 4) собственные векторы и собственные значения такой матрицы. Однако для обеспечения приемлемого разрешения вдоль каждой из координат  $(r, \theta, \varphi)$  матрицу разностной аппроксимации оператора Гамильтона приходится брать очень большой, что делает численную задачу очень трудной. Так как определяющую роль играет центральный потенциал ядра, успешным будет другой подход, который состоит в аналитическом отделении зависимости от угловых координат  $(\theta, \varphi)$  с сохранением разностного метода в радиальном направлении.

В сферических координатах оператор Лапласа, входящий как в уравнение Пуассона, так и в оператор кинетической энергии Гамильтона, имеет вид

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \Lambda^2. \end{aligned} \quad (7.39)$$

Очевидно, что собственные функции  $s_{\mu}$  оператора Лапласа получаются разделением переменных

$$s_{\mu} = R_l(r) P_l^m(\theta) e^{im\varphi}, \quad (7.40)$$

где функции  $P_l^m$  удовлетворяют обобщенному уравнению Лежандра

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} P_l^m + \left\{ l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right\} P_l^m = 0 \quad (7.41)$$

с целыми  $l$  и  $m$ . Соответствующая радиальная функция  $R_l$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r R_l - \frac{l(l+1)}{r^2} R_l = \lambda_l R_l, \quad (7.42)$$

где  $\lambda_l$  — собственное значение. Обобщенное уравнение Лежандра хорошо изучено, и искомые решения (присоединенные функции Лежандра, табл. 7.1) можно выразить аналитически в виде степенных рядов [3]. Поэтому мы можем использовать известные собственные функции угловой части оператора Лапласа  $(1/r^2)\Lambda^2$  при записи решений уравнений Хартри — Фока для атома (7.36).

### 1. Приближение центрального поля

Приближение центрального поля вводится для упрощения трехмерных уравнений Хартри — Фока, так что в результате они сводятся к дифференциальным уравнениям относительно одного радиального измерения [54]. Конечно, для внутренних электронных состояний определяющим потенциалом является центральный потенциал ядра. Поэтому естественно предположить, что в уравнениях Хартри — Фока полный эффективный потенциал, созданный положительным ядром и отрицательными электронами, сильно зависит от радиуса и слабо зависит от полярных углов  $(\theta, \varphi)$ . Если пренебречь обменным потенциалом и предположить, что полный действующий потенциал  $\Phi$  сферически симметричен, например  $\tilde{\Phi}(r)$ , то каждое решение уравнений Хартри — Фока можно записать в виде

$$u_{\mu} = R_{nl}(r) P_l^m(\theta) e^{im\varphi}, \quad (7.43)$$

где  $P_l^m$ , как и выше, — присоединенные функции Лежандра, а радиальные волновые функции удовлетворяют обыкновенному дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2}{dr^2} (r R_{nl}) - \left\{ 2\tilde{\Phi}(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - 2\varepsilon_{nl} \right\} R_{nl} = 0. \quad (7.44)$$

Таблица 7.1

## Сферические функции

Присоединенные функции Лежандра  $P_l^m(\cos \theta)$  [решения уравнения (7.41)] связаны с нормированными сферическими функциями  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  соотношением

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$$l=0 \quad Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$l=1 \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$l=2 \quad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos \theta - \frac{1}{2} \right)$$

$$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_{22} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{i2\varphi}$$

$$l=3 \quad Y_{30} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left( \frac{5}{2} \cos^3 \theta - \frac{3}{2} \cos \theta \right)$$

$$Y_{31} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{i\varphi}$$

$$Y_{32} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{i2\varphi}$$

$$Y_{33} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} \sin^3 \theta e^{i3\varphi}$$

Прежде чем рассматривать более точное самосогласованное решение, сделаем некоторые замечания относительно решений вида (7.43). Электронную волновую функцию простого мультипликативного вида (7.43) называют решением для центрального поля, и она харак-

Таблица 7.1

## Сферические функции

Присоединенные функции Лежандра  $P_l^m(\cos \theta)$  [решения уравнения (7.41)] связаны с нормированными сферическими функциями  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  соотношением

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$l=0$	$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$l=1$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$
$l=2$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$
	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$
	$Y_{22} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{i2\varphi}$
$l=3$	$Y_{30} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left( \frac{5}{2} \cos^3 \theta - \frac{3}{2} \cos \theta \right)$
	$Y_{31} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{i\varphi}$
	$Y_{32} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{i2\varphi}$
	$Y_{33} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} \sin^3 \theta e^{i3\varphi}$

Прежде чем рассматривать более точное самосогласованное решение, сделаем некоторые замечания относительно решений вида (7.43). Электронную волновую функцию простого мультипликативного вида (7.43) называют решением для центрального поля, и она харак-

теризуется тремя параметрами  $\mu = (n, l, m_l)$ , относящимися к трем координатам  $(r, \theta, \varphi)$  соответственно. Параметр  $n$  — это главное квантовое число,  $l$  относится к полному моменту количества движения, а  $m_l$  называется магнитным квантовым числом. В частном случае атома водорода радиальная потенциальная энергия совпадает с потенциалом ядра

$$\Phi(r) = -\frac{1}{r}, \quad (7.47)$$

и нетрудно показать, что собственные значения энергии имеют простую зависимость от главного квантового числа <sup>1)</sup>

$$\epsilon_n = -\frac{1}{2n^2}. \quad (7.46)$$

Для каждого  $n$  орбитальное квантовое число  $l$  может принимать  $n$  значений:

$$l+1 \leq n. \quad (7.47)$$

Однако в более общем случае уравнения (7.44) собственные значения энергии  $\epsilon_{nl}$  зависят от обоих квантовых чисел  $n$  и  $l$  и, говорят, что набор электронных состояний с одинаковыми значениями  $n$  и  $l$  образует « $nl$ -подоболочку» атома.

Для каждого уровня  $nl$  магнитное квантовое число  $m_l$  может принимать  $2l+1$  значений:

$$-l \leq m_l \leq l. \quad (7.48)$$

Если учесть два возможных спиновых состояния, каждой  $nl$ -подоболочке отвечают  $2(2l+1)$  состояний электронов. Согласно принципу запрета Паули, никакие два электрона не могут находиться в одинаковом состоянии. Отсюда следует, что электроны можно связать с  $N$  собственными функциями с наименьшими значениями энергии.

Теперь можно вернуться к нашей основной задаче определения самосогласованного решения уравнений Хартри — Фока (7.36) — (7.38). В приближении центрального поля и в соответствии с вышеизложенным все волновые функции имеют вид (7.43). Необходимо найти самосогласованные потенциалы и обменные потенциалы,

<sup>1)</sup> См., например, работу [48].

определяемые волновыми функциями для поля центрального типа. Уравнения для обменных потенциалов (7.38) в этом приближении примут вид

$$\left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^3} \Lambda^2 \right\} r \Phi_{nl, n'l'} = 4\pi R_{nl} R_{n'l'} Y_{l'm}^* Y_{lm}, \quad (7.49)$$

где  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  — сферические функции (табл. 7.1). Отсюда следует, что полный потенциал и обменные потенциалы зависят от полярных углов  $(\theta, \varphi)$ . Однако очевидно, что эти потенциалы сильно упрощаются, если применить теорему сложения для сферических функций [3]

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (7.50)$$

где  $\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$ . Отсюда немедленно вытекает, что обменные потенциалы всех электронов, образующих «заполненную  $nl$ -подоболочку», не зависят от азимутального угла  $\varphi$ . Обменные потенциалы между электронными состояниями, образующими заполненную подоболочку, можно выразить через полиномы Лежандра  $P_k$ :

$$\Phi_{nl, n'l'} = \sum_{k=|l-l'|}^{l+l'} \hat{\Phi}_{nl, n'l', k}(r) P_k. \quad (7.51)$$

Таким образом, для конфигураций с заполненными подоболочками система уравнений Хартри — Фока и соответствующих уравнений Пуассона имеет вид

$$\left\{ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{k(k+1)}{r^2} \right\} \Phi_{nl, n'l', k}(r) = (2k+1) R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \quad (\text{для всех } nl, n'l' \text{ и } k, 0 \leq k \leq l+l'). \quad (7.52)$$

Соответственно для каждой  $nl$ -подоболочки существует  $m$  уравнений Хартри — Фока для  $m$  волновых функций:

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} - \right. \\ & \left. - 2 \left[ \frac{N}{r^2} - \sum_{n'l'} 2(2l'+1) \hat{\Phi}_{n'l', n'l', 0} \right] + 2\epsilon_{nl} \right\} R_{nl}(r) = \\ & = 2 \sum_{n'l'} \sum_{k=0}^{l+l'} \beta_{ll'k} \hat{\Phi}_{nl, n'l', k}(r) R_{n'l'}(r). \quad (7.53) \end{aligned}$$

определяемые волновыми функциями для поля центрального типа. Уравнения для обменных потенциалов (7.38) в этом приближении примут вид

$$\left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^3} \Lambda^2 \right\} r \Phi_{nl, n'l'} = 4\pi R_{nl} R_{n'l'} Y_{l'm} Y_{l'm}, \quad (7.49)$$

где  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  — сферические функции (табл. 7.1). Отсюда следует, что полный потенциал и обменные потенциалы зависят от полярных углов  $(\theta, \varphi)$ . Однако очевидно, что эти потенциалы сильно упрощаются, если применить теорему сложения для сферических функций [3]

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (7.50)$$

где  $\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$ . Отсюда немедленно вытекает, что обменные потенциалы всех электронов, образующих «заполненную  $nl$ -подоболочку», не зависят от азимутального угла  $\varphi$ . Обменные потенциалы между электронными состояниями, образующими заполненную подоболочку, можно выразить через полиномы Лежандра  $P_k$ :

$$\Phi_{nl, n'l'} = \sum_{k=|l-l'|}^{l+l'} \hat{\Phi}_{nl, n'l', k}(r) P_k. \quad (7.51)$$

Таким образом, для конфигураций с заполненными подоболочками система уравнений Хартри — Фока и соответствующих уравнений Пуассона имеет вид

$$\left\{ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{k(k+1)}{r^2} \right\} \Phi_{nl, n'l', k}(r) = (2k+1) R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \quad (\text{для всех } nl, n'l' \text{ и } k, 0 \leq k \leq l+l'). \quad (7.52)$$

Соответственно для каждой  $nl$ -подоболочки существует  $m$  уравнений Хартри — Фока для  $m$  волновых функций:

$$\left\{ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2 \left[ \frac{N}{r^2} - \sum_{n'l'} 2(2l'+1) \hat{\Phi}_{n'l', n'l', 0} \right] + 2\varepsilon_{nl} \right\} R_{nl}(r) = 2 \sum_{n'l'} \sum_{k=0}^{l+l'} \beta_{ll'k} \hat{\Phi}_{nl, n'l', k}(r) R_{n'l'}(r). \quad (7.53)$$

Легко выяснить смысл различных членов этого уравнения. Гамильтониан в левой части равенства включает радиальную кинетическую энергию, орбитальную кинетическую энергию, потенциал положительно заряженного ядра и суммарный потенциал всех  $2(2l'+1)$  электронов каждой  $n'l'$ -подоболочки. Правая часть равенства описывает эффективные обменные потенциалы, причем коэффициенты  $\beta_{ll'k}$  появляются из соотношений для полиномов Лежандра и определяются разложением произведения полиномов  $P_l P_k$  ( $0 \leq k \leq l+l'$ ):

$$P_l P_k = \sum_{l'} \beta_{ll'k} P_{l'}. \quad (7.54)$$

Коэффициенты  $\beta_{ll'k}$  приведены в табл. 7.2, причем  $\beta_{ll'k}$  отличны от нуля только для значений  $k$ , удовлетворяющих неравенству  $|l-l'| \leq k \leq l+l'$ .

Таблица 7.2

Коэффициенты связи гармоник обменного потенциала для замкнутых оболочек

	$\beta_{ll'k}$		
	$l'=0$	$l'=1$	$l'=2$
$l=0$	$\beta_{000} = 1$	$\beta_{011} = 1$	$\beta_{022} = 1$
$l=1$	$\beta_{101} = \frac{1}{3}$	$\beta_{110} = 1$	$\beta_{121} = \frac{2}{3}$
		$\beta_{112} = \frac{2}{5}$	$\beta_{123} = \frac{3}{7}$
$l=2$	$\beta_{202} = \frac{1}{5}$	$\beta_{211} = \frac{2}{5}$	$\beta_{220} = 1$
		$\beta_{213} = \frac{9}{35}$	$\beta_{222} = \frac{2}{7}$
			$\beta_{224} = \frac{2}{7}$

## 2. Последовательное определение потенциалов и радиальных волновых функций

С помощью приближения центрального поля система  $N$  трехмерных уравнений Хартри — Фока для волновых функций  $N$  электронных состояний была сведена

к системе обыкновенных дифференциальных уравнений с независимой переменной  $r$  (7.53). Все электроны, заполняющие подоболочку  $nl$ , описываются одинаковой радиальной волновой функцией  $R_\mu$ , где индекс  $\mu$  относится к отдельной  $nl$ -подоболочке. Применим разностный метод (гл. 2), переходя к дискретной радиальной координате  $r_j$ ,  $1 \leq j \leq J$ , в результате чего система уравнений (7.52), (7.53) примет матричный вид (гл. 4):

$$(H_\mu + 2\varepsilon_\mu) R_\mu = \sum_\nu h_{\mu\nu} R_\nu, \quad 1 \leq \mu \leq m, \quad (7.55)$$

$$L_k \hat{\Phi}_{\mu\nu k} = R_\mu R_\nu \quad \text{для любых } \mu, \nu, k, \quad (7.56)$$

где  $m$  — полное число  $nl$ -подоболочек в атоме. Дифференциальная форма операторов  $H_\mu$ ,  $L_k$  и  $h_{\mu\nu}$  имеет вид

$$H_\mu = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2 \left\{ \frac{N}{r^2} - \sum_{\nu=1}^m 2(2l' + 1) \hat{\Phi}_{\nu\nu 0} \right\}; \quad (7.57)$$

$$L_k = \left\{ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{k(k+1)}{r^2} \right\} \frac{1}{2k+1}; \quad (7.58)$$

$$h_{\mu\nu} = \sum_{k=0}^{l+l'} \beta_{ll'k} \hat{\Phi}_{\mu\nu k}. \quad (7.59)$$

Соответственно разностные операторы  $H_\mu$  и  $L_k$  имеют вид *трехдиагональных* матриц, а  $h_{\mu\nu}$  — диагональная матрица на сетке  $r_j$ . Задача нелинейна, поскольку трехдиагональные матрицы  $H_\mu$  зависят от потенциалов  $H_\mu(\Phi_{\nu\nu})$ .

Итак, требуется найти радиальную волновую функцию  $R_\mu$ , удовлетворяющую двум граничным условиям

$$R_\mu(0) = 0, \quad R_\mu(r) \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty \quad (7.60)$$

и условию нормировки

$$\int_0^\infty R_\mu^2(r) r^2 dr = 1. \quad (7.61)$$

к системе обыкновенных дифференциальных уравнений с независимой переменной  $r$  (7.53). Все электроны, заполняющие подоболочку  $nl$ , описываются одинаковой радиальной волновой функцией  $R_\mu$ , где индекс  $\mu$  относится к отдельной  $nl$ -подоболочке. Применим разностный метод (гл. 2), переходя к дискретной радиальной координате  $r_j$ ,  $1 \leq j \leq J$ , в результате чего система уравнений (7.52), (7.53) примет матричный вид (гл. 4):

$$(H_\mu + 2\epsilon_\mu) R_\mu = \sum_\nu h_{\mu\nu} R_\nu, \quad 1 \leq \mu \leq m, \quad (7.55)$$

$$L_k \hat{\Phi}_{\mu\nu k} = R_\mu R_\nu \quad \text{для любых } \mu, \nu, k, \quad (7.56)$$

где  $m$  — полное число  $nl$ -подоболочек в атоме. Дифференциальная форма операторов  $H_\mu$ ,  $L_k$  и  $h_{\mu\nu}$  имеет вид

$$H_\mu = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2 \left\{ \frac{N}{r^2} - \sum_{\nu=1}^m 2(2l'+1) \hat{\Phi}_{\nu\nu 0} \right\}; \quad (7.57)$$

$$L_k = \left\{ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{k(k+1)}{r^2} \right\} \frac{1}{2k+1}; \quad (7.58)$$

$$h_{\mu\nu} = \sum_{k=0}^{l+l'} \beta_{ll'k} \hat{\Phi}_{\mu\nu k}. \quad (7.59)$$

Соответственно разностные операторы  $H_\mu$  и  $L_k$  имеют вид *трехдиагональных* матриц, а  $h_{\mu\nu}$  — диагональная матрица на сетке  $r_j$ . Задача нелинейна, поскольку *трехдиагональные* матрицы  $H_\mu$  зависят от потенциалов  $H_\mu(\Phi_{\nu\nu})$ .

Итак, требуется найти радиальную волновую функцию  $R_\mu$ , удовлетворяющую двум граничным условиям

$$R_\mu(0) = 0, \quad R_\mu(r) \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty \quad (7.60)$$

и условию нормировки

$$\int_0^\infty R_\mu^2(r) r^2 dr = 1. \quad (7.61)$$

Для потенциала граничные условия имеют вид

$$\begin{aligned} \Phi_{\mu\nu}(r) &\rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \\ \frac{d\Phi_{\mu\nu}}{dr} &= 0 \quad \text{при } r = 0. \end{aligned} \quad (7.62)$$

Эти граничные условия (7.60) и (7.62) можно включить в разностной форме в *трехдиагональные* матрицы  $H_\mu$  и  $L_k$  соответственно, пользуясь методом, изложенным в гл. 4, § 2. Тогда условия нормировки (7.61) определяют собственные значения для неоднородных уравнений (7.55). Алгоритмы решения *трехдиагональных* матричных уравнений изложены в гл. 4, § 2, 3 и 7 и являются достаточно быстрыми.

Основная трудность решения этой системы уравнений связана с нелинейной зависимостью гамильтониана от потенциалов, поэтому для получения самосогласованного решения нужно применить итерационный метод. Следует отметить, что система содержит  $m$  уравнений для радиальных волновых функций и очень большое число уравнений для радиальных компонент потенциалов и обменных потенциалов. Всего имеется  $1/2 m(m-1)$  пар подоболочек, и для каждой пары — порядка  $k = |l-l'|$  компонент потенциалов.

Простейший итерационный процесс начинается с выбора подходящего набора радиальных волновых функций, по которым определяются потенциалы. Затем по этим потенциалам строятся гамильтонианы и члены с обменным потенциалом в уравнениях для радиальных волновых функций. После этого вновь определяются улучшенные решения для радиальных волновых функций, и процесс продолжается до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность.

На итерационном шаге  $p$  радиальные функции  $R_\mu^{(p)}$  и соответствующие собственные значения  $\epsilon_\mu^{(p)}$  известны. Далее можно найти потенциалы и обменные потенциалы из уравнений

$$L_k \hat{\Phi}_{\mu\nu k}^{(p)} = R_\mu^{(p)} R_\nu^{(p)}. \quad (7.63)$$

Так как все матрицы  $L_k$  *трехдиагональны* и линейны, эти уравнения легко решить методом прогонки (см. гл. 4,

§ 3). По потенциалам строятся гамильтонианы и операторы обменных потенциалов

$$H_{\mu}^{(p)} = H_{\mu}(\hat{\Phi}_{\mu\nu 0}^{(p)}), \quad h_{\mu\nu}^{(p)} = h_{\mu\nu}(\hat{\Phi}_{\mu\nu k}^{(p)}). \quad (7.64)$$

Соответственно новые радиальные волновые функции вычисляются из  $m$  уравнений Шредингера:

$$\{H_{\mu}^{(p)} + 2\varepsilon_{\mu}^{(p+1)}\} R_{\mu}^{(p+1)} = \sum_{\nu} h_{\mu\nu}^{(p)} R_{\nu}^{(p)} \quad (7.65)$$

и условий нормировки

$$\sum_j (R_{\mu j}^{(p+1)})^2 r_j^2 \Delta r_j = 1. \quad (7.66)$$

Условия нормировки определяют собственные значения  $\varepsilon_{\mu}^{(p+1)}$  для неоднородных уравнений (7.65). Простейшая процедура решения таких уравнений на каждом шаге  $p$  состоит в итерационном определении  $\varepsilon_{\mu}^{(p+1)}$ , исходя из некоторого предварительного значения (например,  $\varepsilon_{\mu}^{(p)}$ ). При этом сначала решается (гл. 4, § 3) простое трехдиагональное матричное уравнение (7.65). Вычисленная радиальная волновая функция не удовлетворяет условию нормировки (7.66), поэтому собственное значение изменяется и вновь решается уравнение (7.65), пока не будет получено совместное решение уравнений (7.65) и (7.66).

Изложенный здесь в общих чертах метод отыскания волновых функций атома был с успехом использован для большей части атомов периодической системы<sup>1)</sup>. Мы обсудили только методы решения для атомов или ионов с заполненными подоболочками, так как в этом случае строго выполнено условие независимости радиальной волновой функции от магнитного квантового числа  $m_l$ . Если же атом или ион содержит незаполненную  $nl$ -подоболочку (например, атом калия), то предположение о том, что волновую функцию можно представить в виде сферически-симметричного решения (7.43) или решения с разделенными переменными, строго говоря, несправедливо. Однако если на этой подоболочке  $nl$  находится

<sup>1)</sup> Подробное обсуждение этих методов можно найти в работе [54].

немного электронов, то приближение центрального поля очень хорошо выполняется. Для атомов с незаполненными подболочками радиальные волновые функции уже не являются строго независимыми, и для сохранения ортогональности радиальных волновых функций в приближенные уравнения Хартри — Фока (7.53) приходится вводить внедиагональные множители Лагранжа [54].

Другой подход к изучению разностных уравнений на радиальной сетке состоит в разложении решений по известным радиальным функциям. Более того, метод разложения можно рассматривать как общий подход к отысканию атомных и молекулярных волновых функций [55]. Обсуждение метода разложения читатель может найти в работах [56, 57].

#### § 4. Твердое тело как пример системы многих электронов

Электронная структура твердых тел представляет собой классический пример системы многих частиц, описываемой квантовой теорией. Как ясно из предыдущего рассмотрения, квантовомеханическое описание системы многих частиц сопряжено со значительными алгебраическими трудностями, и поэтому для твердого тела до сих пор удалось успешно применить весьма ограниченное число машинных моделей. При описании твердых тел нужно учитывать множество явлений, в том числе самосогласованные взаимодействия между ионами и электронами, между фононами и электронами и между дислокациями и электронами.

Для сведения задачи к обозримому виду делается множество приближений. В качестве первого и основного приближения при определении электронной структуры кристалла будем считать, что все ядра холодные и жестко закреплены в узлах пространственной решетки. То есть предполагается, что ядра неподвижны и образуют идеальный кристалл. Теперь можно определить элементарную ячейку кристалла, которая повторяется в пространстве и которую можно задать тремя базисными векторами ( $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$ ). Здесь достаточно рассмотреть кристалл, состоящий из одного типа ядер, с одним

ядром на элементарную ячейку. Местоположение каждого ядра в кристалле определяется вектором решетки  $\mathbf{R}_i$ .

$$\mathbf{R}_i = ia_1 + ja_2 + ka_3, \quad (7.67)$$

где  $i, j, k$  — целые числа. По базисным векторам  $\mathbf{a}_i$  можно определить векторы обратной решетки  $\mathbf{b}_j$ , такие, что

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = \delta_{ij}. \quad (7.68)$$

Задачу многих электронов в кристалле можно упростить, пренебрегая влиянием поверхности твердого тела и считая, что элементарная ячейка периодически повторяется в пространстве. Это означает, что можно ограничиться изучением элементарной ячейки решетки с дополнительными граничными условиями периодичности, так что функции, которые предполагаются периодическими, всегда можно продолжить с элементарной ячейки на бесконечный набор векторов обратной решетки  $\mathbf{K}_i$ ,

$$\mathbf{K}_i = 2\pi (i_1 \mathbf{b}_1 + i_2 \mathbf{b}_2 + i_3 \mathbf{b}_3), \quad (7.69)$$

где  $i_1, i_2, i_3$  — целые числа. Например, электростатический потенциал ядер  $\Phi_{\text{яд}}$  можно описать набором фурье-компонент  $\hat{\Phi}(\mathbf{K}_i)$ :

$$\Phi_{\text{яд}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}_i} \hat{\Phi}(\mathbf{K}_i) e^{i\mathbf{K}_i \mathbf{r}}. \quad (7.70)$$

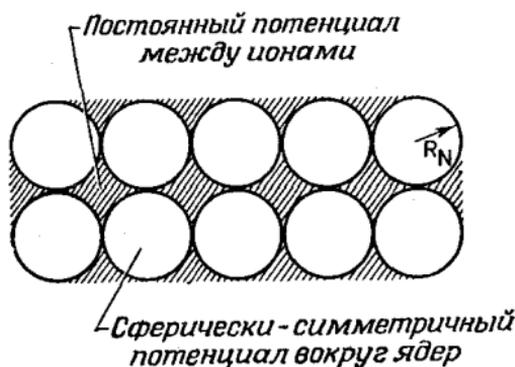
Таким образом, нам нужно решить систему уравнений Хартри — Фока для  $N$  электронов в кристалле ( $N$  — большое число):

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + e\Phi_{\text{яд}} + e\Phi - e\bar{\Phi}_{\text{обм}} \right\} u_{\mu} = \epsilon_{\mu} u_{\mu}, \quad (7.71)$$

$$1 \leq \mu \leq N$$

в общем случае для  $N$  нижних уровней энергии  $\epsilon_{\mu}$ . Как и выше,  $\Phi$  — потенциал электронов, который в принципе можно найти как самосогласованное решение уравнения Пуассона (7.29), и в соответствии со сказанным § 2 будем считать, что усредненный обменный потенциал  $\bar{\Phi}_{\text{обм}}$  определяется уравнением (7.33).

Однако даже если мы знаем потенциалы в уравнениях Хартри — Фока (7.71), то и в этом случае остаются весьма значительные трудности при решении образующихся линейных уравнений для достаточно большого числа электронов. Поэтому до настоящего времени сделано лишь несколько попыток решения самосогласованной задачи для изучения электронных конфигураций в твердых телах.



Фиг. 7.2. Модельный потенциал.

Потенциал внутри касающихся сфер с центрами в ядрах предполагается сферически-симметричным. Потенциал между сферами считается постоянным.

Для начала зададим потенциал, обусловленный ядрами, электронами и обменным взаимодействием. Допустим, что полная потенциальная энергия кристалла  $V$  равна

$$V = e\Phi_{\text{яд}} + e\Phi - e\bar{\Phi}_{\text{обм.}} \quad (7.72)$$

Примером такого искусственно выбранного потенциала может служить обычно используемый модельный потенциал, изображенный на фиг. 7.2. Предполагается, что каждое ядро окружено сферой и каждые две соседние сферы касаются между собой. Внутри каждой сферы потенциал кристалла предполагается сферически-симметричным, а в промежутках между сферами — постоянным, причем это постоянное значение можно считать равным нулю, выбрав его за точку отсчета.

При таких предположениях (как очевидно, весьма жестких) можно вернуться к рассмотрению методов решения линейных уравнений Хартри — Фока:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} u_\mu = \varepsilon_\mu u_\mu, \quad 1 \leq \mu \leq N. \quad (7.73)$$

Поскольку потенциал  $V(\mathbf{r})$  задан периодическим продолжением элементарной ячейки, очевидно, что к волновым функциям  $u_\mu$  можно подойти иначе. Если потенциал равен постоянной, то решением уравнений Шредингера является плоская волна с волновым вектором  $\mathbf{k}$ :

$$u(\mathbf{r}) = e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (7.74)$$

где  $\hbar\mathbf{k}/m$  — импульс, связываемый с частицей. Соответственно для периодического потенциала по важной теореме Блоха (в математике — теорема Флоке) решения уравнения (7.73) должны иметь вид

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}} \pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (7.75)$$

где  $\pi_{\mathbf{k}}$  — периодическая функция <sup>1)</sup>:

$$\pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i). \quad (7.76)$$

И так как  $\pi_{\mathbf{k}}$  — периодическая функция с периодом, равным вектору решётки  $\mathbf{R}_i$ , ее можно разложить в ряд Фурье, используя вектор обратной решетки  $\mathbf{K}_i$ :

$$\pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}_i} C(\mathbf{K}_i) e^{i\mathbf{K}_i \mathbf{r}}. \quad (7.77)$$

С другой стороны, и саму волновую функцию (7.75) можно записать как суперпозицию плоских волн:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}_i} C(\mathbf{K}_i) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_i)\mathbf{r}}. \quad (7.78)$$

Отметим несколько особенностей такой волновой функции. Если кристалл бесконечен, параметр  $\mathbf{k}$  может принимать любые значения. Однако в силу свойств бло-

<sup>1)</sup> Элементарное обсуждение волн Блоха и их простейших свойств можно найти, например, в работе [58].

ховских функций значения  $\mathbf{k}$ , отличающиеся на вектор обратной решетки, связаны:  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}_j$

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{K}_j)\mathbf{r}} \pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}_j\mathbf{r}}.$$

Но так как  $\pi_{\mathbf{k}}$  — периодическая функция, получаем

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \pi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \quad (7.79)$$

То есть  $u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$  также волновая функция блоховского вида (7.75). Следовательно, мы можем рассматривать только те длины волн, для которых значения  $k$  лежат между нулем и наименьшим вектором обратной решетки. Эта область  $\mathbf{k}$ -пространства называется первой зоной Бриллюэна. Волновые функции внутри первой зоны Бриллюэна имеют наименьшие значения энергии, и говорят, что они принадлежат первой зоне энергий. Более высокие зоны Бриллюэна содержат волновые функции, последовательно связываемые с более высокими зонами энергии.

На самом деле в конечных кристаллах граничные условия для волновых функций приводят к дискретизации значений  $\mathbf{k}$ , хотя эти значения лежат очень близко в  $\mathbf{k}$ -пространстве. Если кристалл состоит из  $N$  элементарных ячеек, то  $\mathbf{k}$  может принимать  $2N$  значений в первой зоне Бриллюэна. Из принципа запрета Паули следует, что к первой энергетической зоне можно отнести  $2N$  электронов, следующие  $2N$  электронов — ко второй энергетической зоне и т. д.

Следовательно, задачу определения электронной конфигурации твердого тела можно сформулировать как задачу решения уравнений Хартри — Фока для различных значений  $\mathbf{k}$ ,  $0 \leq |\mathbf{k}| \leq |\mathbf{K}_1|$ , и отыскания основных и первых возбужденных состояний для достаточно большого числа зон  $n$ . Поставим целью также изобразить собственные значения энергии  $\epsilon_n(\mathbf{k})$  как функции  $\mathbf{k}$  для низших зон  $n$ .

## § 5. Разложение уравнений Хартри — Фока для волн Блоха

При подходящем выборе базисных функций оператор Гамильтона в уравнениях Хартри — Фока можно выразить в виде матричного оператора бесконечного порядка

для каждого значения  $\mathbf{k}$  (§ 4). Тогда наименьшие собственные значения такой матрицы дадут значения энергии электронов в кристалле для низших зон.

### 1. Плоские волны

Чтобы описать процедуру решения, разложим сначала оператор Гамильтона по плоским волнам. Как уже отмечалось выше, выбранный потенциал (фиг. 7.2) периодически продолжен с элементарной ячейки с помощью разложения на этой ячейке в ряд Фурье

$$V(\mathbf{r}) = \sum_l \hat{V}(\mathbf{K}_l) e^{i\mathbf{K}_l \mathbf{r}}, \quad (7.80)$$

где  $\hat{V}(\mathbf{K}_l)$  — амплитуда гармоник Фурье с волновым вектором  $\mathbf{K}_l$  — вектором обратной решетки. Амплитуды гармоник Фурье определяются интегральными формулами для коэффициентов Фурье (гл. 2). Искомая волновая функция должна иметь вид функции Блоха

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_i C(\mathbf{K}_i) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_i) \mathbf{r}},$$

которую можно рассматривать как суперпозицию бесконечного числа плоских волн с волновыми числами  $\mathbf{k} + \mathbf{K}_i$ . Рассмотрим далее гамильтониан Хартри — Фока (7.73), действующий на такую функцию:

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_l \hat{V}(\mathbf{K}_l) e^{i\mathbf{K}_l \mathbf{r}} \right\} \sum_i C(\mathbf{K}_i) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_i) \mathbf{r}} = \\ = \varepsilon(\mathbf{k}) \sum_i C(\mathbf{K}_i) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_i) \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (7.81)$$

Плоские волны являются собственными функциями оператора кинетической энергии, поэтому уравнение (7.81) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \sum_i \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_i)^2 e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_i) \mathbf{r}} + \sum_l \hat{V}(\mathbf{K}_l) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_l + \mathbf{K}_i) \mathbf{r}} \right\} C(\mathbf{K}_i) = \\ = \varepsilon(\mathbf{k}) \sum_i C(\mathbf{K}_i) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_i) \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (7.82)$$

Умножив это уравнение на плоскую волну  $e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_j)\mathbf{r}}$  и проинтегрировав по объему элементарной ячейки, в силу ортогональности плоских волн получим

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_j)^2 C(\mathbf{K}_j) + \sum_i \hat{V}(\mathbf{K}_j - \mathbf{K}_i) C(\mathbf{K}_i) = \varepsilon(\mathbf{k}) C(\mathbf{K}_j). \quad (7.83)$$

Получена бесконечная система линейных однородных уравнений для коэффициентов  $C(\mathbf{K}_1), C(\mathbf{K}_2), \dots$  блоховских волн, по которым разложена функция  $u$ . Систему (7.83) удобно интерпретировать как матричное уравнение, у которого элементы матричного гамильтониана равны

$$H_{ji} = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_j)^2 \delta_{ij} + \hat{V}(\mathbf{K}_j - \mathbf{K}_i). \quad (7.84)$$

Заметим, что диагональные элементы зависят от волнового вектора  $\mathbf{k}$ , изменяющегося в первой зоне Бриллюэна. Уравнения (7.83) при каждом значении  $\mathbf{k}$  образуют задачу на собственные векторы и собственные значения:

$$H_{ji}(\mathbf{k}) C(\mathbf{K}_i) = \varepsilon(\mathbf{k}) C(\mathbf{K}_j). \quad (7.85)$$

Для каждого  $\mathbf{k}$  матрица  $H_{ji}$  имеет бесконечный порядок и каждое собственное значение  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  относится к некоторой энергетической зоне. Соответствующие собственные векторы  $C_n(\mathbf{K}_i)$  определяют искомую волновую функцию в виде разложения в блоховскую сумму. Конечно, численными методами нельзя решить матричное уравнение бесконечного порядка, но если взять матрицу достаточно высокого конечного порядка (малые значения  $\mathbf{K}_i$ ), то можно считать, что низшие собственные значения  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  (малые  $n$ ) аппроксимируют искомые точные значения. При этом мы имеем дело только с определением энергий в низших энергетических зонах. Впрочем, и в первой зоне Бриллюэна процедуру решения нужно повторять для различных значений  $\mathbf{k}$ .

Численное решение такого матричного уравнения обсуждалось в гл. 4, и там было установлено, что для матриц со всеми ненулевыми элементами (7.84) задача является весьма трудной. Поэтому для получения решений

необходимо обрезать матрицу оператора Гамильтона до матрицы допустимо малой размерности. В этом случае точность решения для энергии  $\epsilon_n(\mathbf{k})$  зависит от выбора функций, используемых в качестве базиса при разложении гамильтониана (7.84). Выше с этой целью были использованы простые плоские волны, и понятно, что для описания внутренних электронов, т. е. электронов, сильно связанных с ядром, потребуется большое число плоских волн, поскольку они явно недостаточно хорошо аппроксимируют внутренние или ближайшие к ним электроны атома. Таким образом, разложение по плоским волнам вместе с обрезанием гамильтониана будет неэффективным методом решения задачи.

Мы получим более сильный метод решения, если базисные функции будут точнее аппроксимировать предполагаемые волновые функции кристалла. Мы кратко обсудим принципы такого улучшенного подхода к задаче. Более полное изложение читатель сможет найти в работе [59].

## 2. Ортогонализированные плоские волны

В предыдущем пункте было указано, что, хотя разложение по плоским волнам будет, вероятно, хорошим описанием для валентных или почти свободных электронов кристалла, для описания атомных или почти атомных орбиталей потребуется большое число таких плоских волн. Плоские волны описывают свободные электроны, поэтому противоположный подход состоит в конструировании волновых функций из атомных орбиталей  $a_\alpha$  свободного атома (§ 3). Однако волновые функции кристалла должны быть блоховскими функциями, которые можно построить с помощью сумм атомных волновых функций в различных узлах решетки кристалла  $\mathbf{R}_l$ :

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_l e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} a_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l). \quad (7.86)$$

Легко видеть, что такая функция является функцией Блоха (7.75). Если использовать такие функции в качестве базисных для разложения гамильтониана, то такой метод будет приближением сильной связи. С другой сто-

роны, такое упрощенное описание будет неудовлетворительно описывать валентные электроны.

В методе ортогонализированных плоских волн [59, 60] выбирается составной набор базисных функций. Этот набор включает в себя небольшое число блоховских сумм атомных орбиталей и для описания валентных электронов — некоторое число плоских волн:

$$\zeta_{ik} = e^{i(k+K_i)r}. \quad (7.87)$$

В общем случае система базисных функций (7.86), (7.87) не будет ортогональной. Хотя атомные орбитали  $a_\alpha$  в одном узле решетки ортогональны между собой, блоховские суммы  $\varphi_\alpha$  не будут ортогональны. Однако интегралы от произведения  $\varphi_\alpha$  будут отличны от нуля только из-за очень небольшой области перекрытия между соседними атомами. Если пренебречь этим эффектом, то блоховские суммы  $\varphi_\alpha$  можно считать ортогональными. Или же можно провести процедуру ортогонализации, например, по методу Шмидта.

Систему базисных функций (7.86), (7.87) можно также улучшить, потребовав, чтобы плоские волны  $\zeta_{jh}$  были ортогональны блоховским суммам  $\varphi_{\alpha k}$ . Для этого плоские волны нужно видоизменить, вычитая из них перекрытие с суммой волновых функций каждого атома,

$$\psi_{ik}(r) = e^{i(k+K_i)r} - \sum_{\alpha} A_{\alpha i}(k) \varphi_{\alpha k}(r), \quad (7.88)$$

где суммирование распространено на все атомные орбитали  $\alpha$ , а коэффициенты  $A_{\alpha i}$  определяются интегралами

$$A_{\alpha i} = \int \varphi_{\alpha k}^* e^{i(k+K_i)r} d\tau, \quad (7.89)$$

причем функции  $\varphi_{\alpha k}$  предполагаются нормированными. Очевидно, что теперь функции (7.88) будут ортогональны каждой блоховской сумме  $\varphi_{\alpha k}$ , и такие функции  $\psi_{ik}(r)$  называются ортогонализированными плоскими волнами.

В результате процедура свелась к тому, чтобы использовать составную систему базисных функций (7.86) и (7.88) для определения матричных элементов

гамильтониана аналогично тому, как это было изложено выше. Следует подчеркнуть, что и теперь решение не будет самосогласованным, так как потенциал кристалла  $V(\mathbf{r})$  предполагается заранее заданным. Все же процедура с ортогонализированными плоскими волнами дает более точное численное решение, несмотря на то, что получающийся в результате разложения бесконечный матричный гамильтониан приходится обрезать до конечного.

Был разработан эффективный метод, основанный на эвристическом подходе, тесно связанном с идеей ортогонализированных плоских волн [61, 62]. В этом методе используется *псевдопотенциал*, так что гамильтониан можно раскладывать в ряд просто по плоским волнам.

Еще одна процедура, использованная для получения решений линейных уравнений Хартри — Фока, основана на методе расширенных плоских волн [59]. Если принять модель потенциала, изображенную на фиг. 7.2, то ясно, что в промежутках между сферами волновые функции будут плоскими волнами. Аналогично решения внутри сфер должны удовлетворять радиальному уравнению Шредингера. В методе расширенных плоских волн задача сводится к сшивке решений и их производных на границах сфер [59].

## Фазовые среды

---

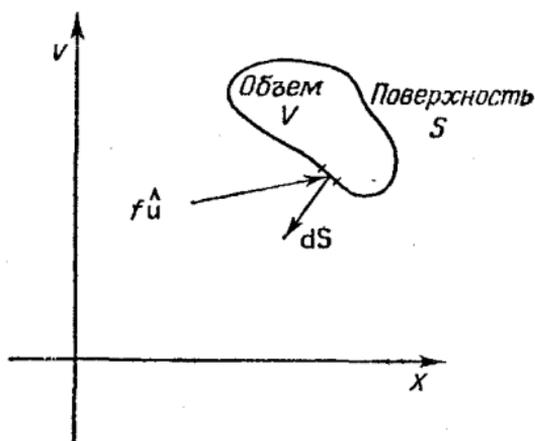
### § 1. Плотность частиц в фазовом пространстве и уравнение Власова

В предыдущих главах задачи вычислительной механики формулировались в терминах частиц и систем взаимодействующих частиц. Такое описание физических систем с помощью прямого моделирования движения составляющих частиц имеет ограниченные возможности. Это обусловлено тем, что одновременно можно следить лишь за относительно небольшим числом частиц. В гл. 5 обсуждалось «точное» решение для системы  $N$  частиц, взаимодействующих по законам парных взаимодействий. Но, так как в такой системе существует  $\frac{1}{2}N(N-1)$  взаимодействий, можно было рассматривать лишь  $N \sim 10^3$  частиц. В предположении, что движение частиц обусловлено средними полями, удавалось (гл. 6) изучать системы из  $N \sim 10^6$  частиц с помощью модели частиц в ячейке, но для распространения методов вычислительной механики на системы очень большого числа частиц необходимо использовать концепцию сплошной среды. Непрерывные функции, описывающие системы частиц (функции среды), можно определять в фазовом пространстве или в физическом пространстве, и мы начнем эту главу с рассмотрения фазовых сред.

Предположим, что изучаемая система состоит из столь большого числа частиц, что фактически число  $N$  можно считать бесконечным и вместо координат всех частиц система описывается *плотностью* или распределением частиц в фазовом пространстве. Функция распределения  $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ , определяющая состояние фазовой среды, является непрерывной функцией координат одной частицы и компонент скорости  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ . Определим функцию  $f$  в каждой точке  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  как число частиц  $dn$  в «объеме»  $d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ :

$$dn = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v}. \quad (8.1)$$

Применив уравнения движения Гамильтона к предельному случаю многих частиц, можно получить [63] интегро-дифференциальное уравнение для плотности  $f$ . В общем случае трех пространственных измерений функция распределения зависит от трех пространственных координат, трех компонент импульса и времени, но для простоты мы ограничимся случаем двумерного фазового



Фиг. 8.1. Применение законов сохранения частиц и импульса (в отсутствие столкновений) к конечному объему фазового пространства. Следствием законов сохранения является уравнение, описывающее временную зависимость функции распределения в фазовом пространстве.

пространства  $(x, v)$ . Наша цель состоит в получении детерминистического уравнения для функции  $f$  и в выяснении некоторых важных свойств фазовых сред с тем, чтобы затем эффективно использовать эти свойства в численных моделях.

В частном случае бесстолкновительных систем, что соответствует системам частиц с дальнодействием (гл. 6), таким, как гравитационные или плазменные системы, дифференциальное уравнение для плотности  $f$  принимает особенно простой вид. Будем рассматривать фиксированный «объем»  $V$  сплошной среды в фазовом пространстве (фиг. 8.1). В соответствии с определением функции  $f$  полное число частиц  $N_V$  в объеме  $V$  выражается

интегралом по объему  $V$  от  $f d\tau$ , где  $d\tau$  — элемент объема  $d\tau = dx dv$ :

$$N_V = \int_V f dx dv. \quad (8.2)$$

Найдем изменение числа частиц  $N_V$  в объеме  $V$  с течением времени. Во-первых, понятно, что если между частицами происходят столкновения, то в момент столкновения частица покинет одну точку пространства скоростей и появится в другой, так как в случае столкновения импульс частицы изменяется скачком. С другой стороны, в отсутствие столкновений мы можем, исходя из законов сохранения частиц (массы) и импульса, утверждать, что частицы могут попасть в объем  $V$  или покинуть его, только пересекая поверхность  $S$  объема  $V$  в фазовом пространстве. Отсюда следует, что скорость изменения числа частиц в объеме  $V$  должна быть равна потоку частиц через поверхность  $S$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V f dx dv = - \oint_S f \hat{u} dS. \quad (8.3)$$

Величина  $f \hat{u}$  описывает поток частиц в фазовом пространстве, а  $\hat{u}$  — вектор скорости фазовой среды:

$$\hat{u} = (v, a). \quad (8.4)$$

Здесь  $v$  — скорость фазовой среды в  $x$ -направлении и  $a$  — ускорение, т. е. скорость в  $v$ -направлении. Применяя к поверхностному интегралу (8.3) теорему Гаусса — Остроградского, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V f dx dv + \int_V \nabla' (f \hat{u}) dx dv = 0, \quad (8.5)$$

где  $\nabla'$  — оператор дивергенции в фазовом пространстве. Интегральное уравнение (8.5) применимо к любому фиксированному объему  $V$ , поэтому, приравнявая подынтегральное выражение нулю, получаем дифференциальное уравнение для плотности среды в фазовом пространстве:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla' (f \hat{u}) = 0.$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (fv) + \frac{\partial}{\partial v} (fa) = 0. \quad (8.6)$$

В случае системы частиц с консервативными силами взаимодействия мы можем пойти дальше, заметив, что обе частные производные  $(\partial v / \partial x)_v$  и  $(\partial a / \partial v)_v$  равны нулю:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + a \frac{\partial f}{\partial v} = 0. \quad (8.7)$$

Поэтому плотность  $f$  в фазовом пространстве удовлетворяет простому уравнению переноса. Это и есть *уравнение Власова*, которое описывает бесстолкновительную систему многих частиц с консервативными силами взаимодействия.

## § 2. Некоторые замечания и примеры применения уравнения Власова

Рассмотрим некоторые важные свойства фазовых сред вообще и уравнения Власова в частности. Следует отметить, что явное задание функции распределения позволяет определить состояние среды в конфигурационном пространстве, так как, интегрируя функцию распределения по пространству скоростей, легко получить пространственные зависимости плотности среды  $n(x, t)$ , скорости центра масс  $u(x, t)$  или температуры  $T(x, t)$ . Эти свойства среды в конфигурационном пространстве определяются как моменты функции распределения, и очевидно, что существует бесконечная последовательность таких моментов. Например, плотность среды и скорость центра масс определяются моментами

$$n(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(v, x, t) dv, \quad (8.8)$$

$$nu(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} vf(v, x, t) dv. \quad (8.9)$$

Высшие моменты, такие, как температура или поток тепла, могут представлять или не представлять интереса,

так как эти характеристики зависят от того, установилось ли тепловое равновесие путем столкновений или посредством какого-нибудь другого механизма.

Уравнение Власова (8.7) однородно и описывает идеальную бесстолкновительную систему. Исследование уравнения (8.7) показывает, что величина  $f$  сохраняется и сохраняются все ее степени. В частности, очевидно, что сохраняется величина  $f \ln f$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f \ln f dx dv = 0. \quad (8.10)$$

Величина  $f \ln f$  пропорциональна энтропии системы [30], откуда следует, что уравнение Власова при описании бесстолкновительной системы сохраняет энтропию.

Следует отметить, что область применимости уравнения Власова шире, чем можно было бы заключить из § 1. Общий и содержательный способ записи уравнения Власова основан на использовании гамильтониана системы  $H = H(p, q)$  [64], где  $q$  и  $p$  — обобщенные координаты и импульсы. Тогда уравнения Гамильтона имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p}, \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} \end{aligned} \quad (8.11)$$

и соответственно уравнение Власова можно переписать в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial f}{\partial p} = 0,$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial (f, H)}{\partial (q, p)} = 0, \quad (8.12)$$

где второй член записан в форме якобиана. Отсюда следует, что в равновесной конфигурации распределение  $f$  зависит только от гамильтониана  $f = f(H)$ .

Для использования уравнения Власова необходимо задать гамильтониан рассматриваемой системы, но в самосогласованных задачах гамильтониан, как правило, определяется функцией распределения. Поэтому для

получения замкнутой системы уравнений уравнение Власова нужно дополнить «законом действующих сил», т. е. уравнением, определяющим гамильтониан по функции распределения. Мы проиллюстрируем такую постановку задачи примерами двух частных систем уравнений для гравитационной и для плазменной систем.

### 1. Бесстолкновительная гравитационная система

Гравитирующая среда в фазовом пространстве одной пространственной координаты и одной компоненты скорости описывается следующим уравнением Власова:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + g \frac{\partial f}{\partial v} = 0, \quad (8.13)$$

где  $g(x, t)$  — локальное гравитационное ускорение. Определим  $g$  с помощью уравнения Пуассона для гравитационного потенциала

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = 4\pi Gmn(x). \quad (8.14)$$

Здесь  $G$  — гравитационная постоянная,  $m$  — масса частицы и  $n(x)$  — плотность частиц в конфигурационном пространстве, определяемая по функции  $f$ :

$$n(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(v, x, t) dv. \quad (8.15)$$

Определив потенциал  $\Phi$  из уравнения Пуассона, найдем ускорение  $g$  по формуле

$$g = -\frac{\partial\Phi}{\partial x}. \quad (8.16)$$

Следует отметить, что в этом примере одномерное уравнение Пуассона описывает не систему точечных звезд, а скорее потенциал системы бесконечных тяготеющих «листов», перемещающихся перпендикулярно собственной плоскости.

## 2. Бесстолкновительная однокомпонентная плазма

Уравнения, описывающие однокомпонентную (электронную) плазму на однородном фоне положительных ионных зарядов, вполне аналогичны гравитационным уравнениям, но ускорение в уравнении Власова определяется электрическим полем  $E$ ,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{e}{m} E \frac{\partial f}{\partial v} = 0, \quad (8.17)$$

где  $e$  — заряд (отрицательный), а  $m$  — масса частицы. Электростатический потенциал и в этом случае удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -4\pi\sigma, \quad (8.18)$$

где  $\sigma$  — плотность заряда, определяемая по функции распределения

$$\sigma(x, t) = |e| \left( n_0 - \int_{-\infty}^{\infty} f dv \right), \quad (8.19)$$

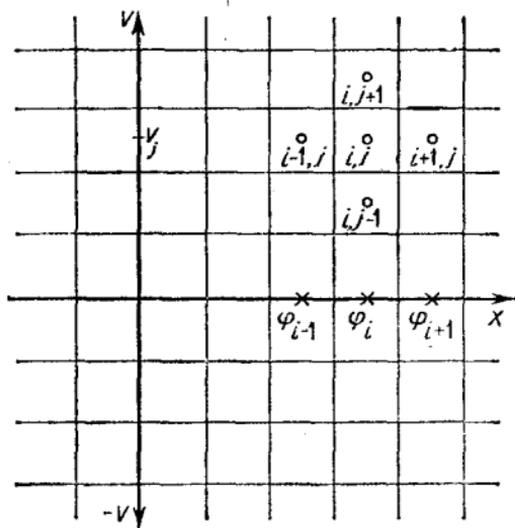
а  $n_0$  — плотность однородного ионного фона.

## § 3. Разностное решение уравнения Власова

Уравнение Власова привлекательно своей простотой в описании бесстолкновительного движения «бесконечного числа тел», так как это движение описывается одним нестационарным уравнением в частных производных с двумя или в общем случае шестью «пространственно-подобными» переменными. Фактически приходится решать уравнение переноса (см. гл. 3, § 1), и очевидно, что это решение можно найти прямыми разностными методами.

Возьмем в рассматриваемом фазовом пространстве эйлерову разностную сетку с пространственным шагом  $\Delta x$  и шагом по скорости  $\Delta v$  и будем считать, что это фазовое пространство состоит из большого числа мелких ячеек, определяемых индексами  $(i, j)$  (фиг. 8.2). Функцию распределения  $f$  нужно определить в каждой ячейке

таким образом, чтобы количество частиц в ячейке  $(i, j)$  в момент  $t^n$  было равно  $f_{ij}^n \Delta x \Delta v$ . Можно использовать любой из описанных в гл. 3, § 7, методов интегрирования уравнения переноса, но ниже мы запишем уравнение с помощью разностной схемы Лакса. В соответствии



Фиг. 8.2. Уравнение Власова можно интегрировать на разностной сетке в фазовом пространстве.

с алгоритмом (3.58) плотность  $f_{ij}^{n+1}$  в новый момент времени  $t^{n+1}$  можно найти по формуле

$$\begin{aligned}
 f_{ij}^{n+1} = & \frac{1}{4} (f_{i+1,j}^n + f_{i-1,j}^n + f_{i,j+1}^n + f_{i,j-1}^n) - \\
 & - \frac{\Delta t v_j}{2 \Delta x} (f_{i+1,j}^n - f_{i-1,j}^n) + \\
 & + \frac{\Delta t}{2 \Delta v} \frac{\Phi_{i+1}^n - \Phi_{i-1}^n}{\Delta x} (f_{i,j+1}^n - f_{i,j-1}^n). \quad (8.20)
 \end{aligned}$$

Следует отметить, что, хотя эта разностная форма уравнения и не является строго консервативной [см. уравнение (3.80)], тем не менее величина  $f$  точно сохраняется на разностной сетке, поскольку коэффициенты  $v_j$  не зависят от индекса  $i$  (от координаты  $x$ ) и аналогично потенциал  $\Phi$  не зависит от скорости. Уравнение (8.20)

описывает гравитационный случай, столь же просто формулируются и другие задачи. В завершение каждого шага по времени вычисляется плотность вещества в каждой пространственной ячейке в соответствии с интегральной формулой (8.15),

$$m_i^{n+1} = m_0 \sum_{j=-J}^J f_{i,j}^{n+1} \Delta v, \quad (8.21)$$

где  $m_0$  — масса звезды, и границы изменения скорости  $J$  и  $-J$  выбираются достаточно большими, чтобы с уверенностью считать, что функция распределения  $f$  равна нулю в точках  $J$  и  $-J$ . Остается еще определить потенциал в момент времени  $t^{n+1}$  на основании разностного уравнения Пуассона

$$\Phi_{i+1}^{n+1} - 2\Phi_i^{n+1} + \Phi_{i-1}^{n+1} = 4\pi G (\Delta x)^2 m_i^{n+1}, \quad (8.22)$$

методы решения которого описаны в гл. 4.

Казалось бы, что такой подход дает простое решение уравнения Власова. Однако этому методу сопутствуют некоторые трудности. Так как используется явная схема, разностное решение следует подчинить условию устойчивости (3.62), для чего выразим отдельно скорости переноса вдоль каждой из координат фазового пространства. В  $x$ -направлении наибольшая скорость переноса равна  $v_J$  и шаг по времени ограничен неравенством

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{v_J}. \quad (8.23)$$

Вдоль переменной  $v$  скорость переноса характеризуется ускорением и

$$\Delta t \leq \frac{\Delta v}{|g|_{\max}}, \quad (8.24)$$

где

$$|g|_{\max} = \max \left( \frac{\Phi_{i+1}^{n+1} - \Phi_{i-1}^{n+1}}{2 \Delta x} \right).$$

Это второе ограничение на шаг по времени связано с гравитационной частотой (см. гл. 6, § 6, п. 3), так как по

закону Гаусса ускорение  $g$  выражается через плотность вещества формулой

$$g \sim 4\pi G m n \Delta x, \\ (\Delta t)^2 \leq \frac{\Delta v}{v_j} \frac{1}{\omega_G^2}, \quad (8.25)$$

т. е. условия устойчивости накладывают жесткие ограничения на допустимый шаг по времени.

Кроме того, разностные методы решения могут вызывать аномальную численную диффузию (см. гл. 3, § 5), что и происходит при решении уравнения Власова по методу Лакса. Хотя полностью устранить этот эффект нельзя, для его уменьшения можно применить схемы более высокого порядка точности, например метод Лакса — Вендроффа или метод «с перешагиванием» (см. гл. 3, § 7). Численная диффузия является нежелательным эффектом, присущим разностному решению уравнения Власова, так как разностная модель не сохраняет величину  $f \ln f$  и тем самым ведет к возрастанию энтропии. Поэтому можно показать, что эффект численной диффузии эквивалентен внесению аномальных столкновений.

#### § 4. Несжимаемость фазовой среды

Было показано, что плотность среды в фазовом пространстве изменяется в соответствии с процессом переноса. Мы можем подойти к свойствам фазовой среды с иной точки зрения. Этот подход, основанный на использовании лагранжевых представлений об изменении плотности фазовой среды, позволяет разработать новые разностные методы решения.

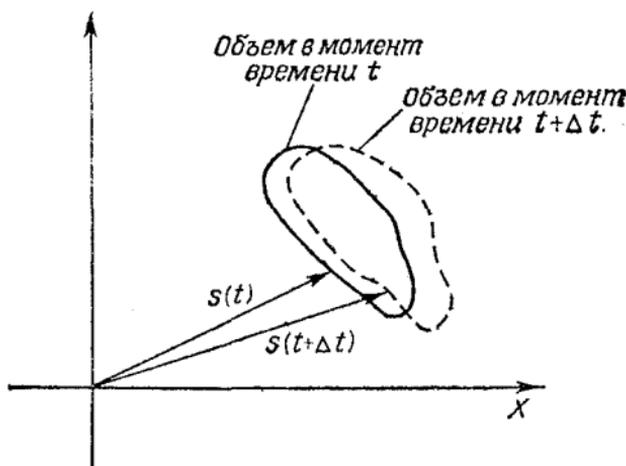
Для этого рассмотрим свойства объема  $V$  в фазовом пространстве  $(x, v)$ , который перемещается вместе с фазовой средой (фиг. 8.3). В отсутствие столкновений количество частиц  $N_V$  в объеме  $V$ , перемещающемся вместе со средой, должно оставаться постоянным. Действительно, предположим, что некоторая частица приближается к границе объема  $V$  с какой-нибудь стороны. В этом случае она должна двигаться вместе с границей, так как граница объема  $V$  везде перемещается вместе

с изменением координат частиц, и это означает, что ни одна частица не может пересечь границу объема  $V$ . Поэтому количество частиц в объеме  $V$  сохраняется.

С другой стороны, величину выделенного объема в любой момент времени можно выразить формулой

$$V = \iint dx dv = \frac{1}{2} \oint [s, dl], \quad (8.26)$$

где  $s = \{x, v\}$  — радиус-вектор точек границы объема  $V$  в фазовом пространстве,  $dl$  — элемент длины в фазовом



Фиг. 8.3. Диаграмма показывает движение произвольного объема, жестко связанного со средой.

В отсутствие столкновений среда фазового пространства несжимаема.

пространстве, касательной к границе. Через небольшой промежуток времени  $\Delta t$  изменение объема равно

$$\Delta V = \frac{1}{2} \oint [s(t + \Delta t), dl] - \frac{1}{2} \oint [s(t), dl]. \quad (8.27)$$

Точка  $s(t + \Delta t)$  фазового объема по определению связана с точкой  $s(t)$  соотношением

$$s(t + \Delta t) = (x + v \Delta t, v + a \Delta t) = s(t) + \{v, a\} \Delta t. \quad (8.28)$$

Отсюда следует

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{1}{2} \oint [\{v, a\}, dl] = \frac{1}{2} \oint (v dv - a dx). \quad (8.29)$$

Если на частицу действует потенциальная сила, то ускорение частицы  $a$  можно выразить через потенциал  $\Phi$ ,

$$a = -\frac{1}{m} \frac{\partial \Phi}{\partial x},$$

откуда следует, что изменение рассматриваемого объема со временем можно записать в виде интеграла по замкнутому контуру от полного дифференциала:

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{1}{2m} \oint d\left(\frac{mv^2}{2} + \Phi\right) = 0. \quad (8.30)$$

Величина любого объема, перемещающегося вместе с фазовой средой, является *инвариантом* движения, так что фазовую среду можно считать *несжимаемой*. В дальнейшем мы используем такой подход при выводе конечной модели, описывающей систему Власова (модель «водяного мешка»), а здесь отметим, что уравнение Власова можно получить также методами, изложенными в настоящем параграфе. Действительно, если рассмотреть бесконечно малый элемент  $dV$  среды, то его объем при движении сохраняется и сохраняется также количество частиц в этом объеме. Следовательно, плотность  $f$  в фазовом пространстве сохраняется при движении среды:

$$\frac{df}{dt} = 0. \quad (8.31)$$

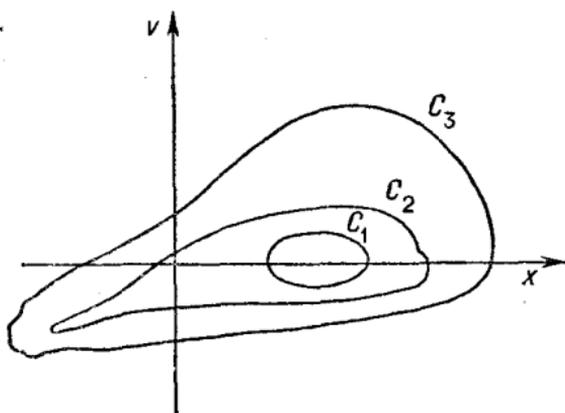
Это уравнение описывает перенос, причем лагранжева производная в фазовом пространстве имеет вид

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} + a \frac{\partial}{\partial v}. \quad (8.32)$$

### § 5. Метод «водяного мешка»

Выше было выведено несколько свойств системы, описываемой уравнением Власова. Особенно важным из них является свойство несжимаемости фазовой среды, в результате чего плотность  $f$  подвергается только переносу. Это свойство позволяет построить особенно простое описание рассматриваемой системы, в котором распределение частиц  $f$  описывается не функцией координат

$f(x, v, t)$ , а набором контуров (линий уровня плотности  $f$ ) в двумерном фазовом пространстве (фиг. 8.4). Так как среда несжимаема, площадь, ограниченная каждым контуром, является инвариантом движения, но с течением времени эти контуры перемещаются в плоскости и описывают эволюцию системы. Конечно, контуры искажаются со временем, но они сохраняют свой смысл линий уровня, и никакие два контура не могут пересекаться.



Фиг. 8.4. Модель «водяного мешка».

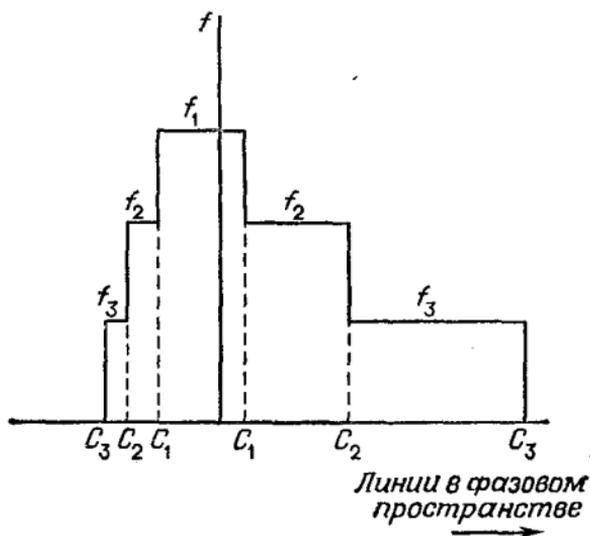
Функция распределения представлена конечным набором контуров в фазовом пространстве.

Для описания эволюции рассматриваемой системы во времени можно использовать численную модель «водяного мешка» [65]. Распределение частиц описывается ступенчатой функцией  $f$  (фиг. 8.5), так что между контурами плотность  $f$  постоянна. Обозначим все контуры буквами  $C_j$  ( $1 \leq j \leq J$ ) и каждый контур зададим конечным числом точек  $(x_i, v_i)$ , лежащих на этом контуре (фиг. 8.6). Эти точки можно рассматривать как точки фазового пространства, и, следовательно, их движение определяется уравнениями Гамильтона. Для точки  $(x_i, v_i)$  контура  $C_j$  уравнения движения имеют вид

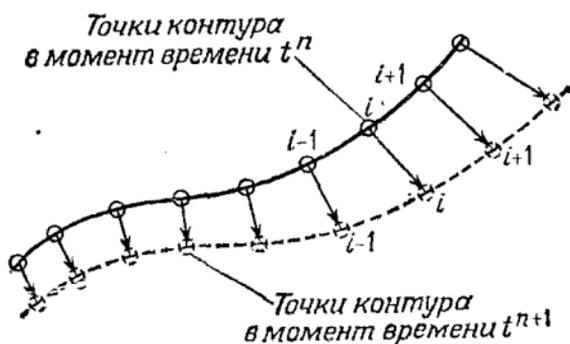
$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= v_i, \\ \frac{dv_i}{dt} &= g(x_i), \end{aligned} \tag{8.33}$$

где  $g$  — ускорение в гравитационной системе.

Интегрирование по времени осуществляется перемещением контуров через небольшие промежутки времени, причем новое положение каждого контура определяется



Фиг. 8.5. Плотность частиц между контурами в фазовом пространстве предполагается постоянной.



Фиг. 8.6. Каждый контур в модели «водяного мешка» определяется набором точек, лежащих на контуре. Перемещение каждой точки подчинено уравнениям движения Гамильтона.

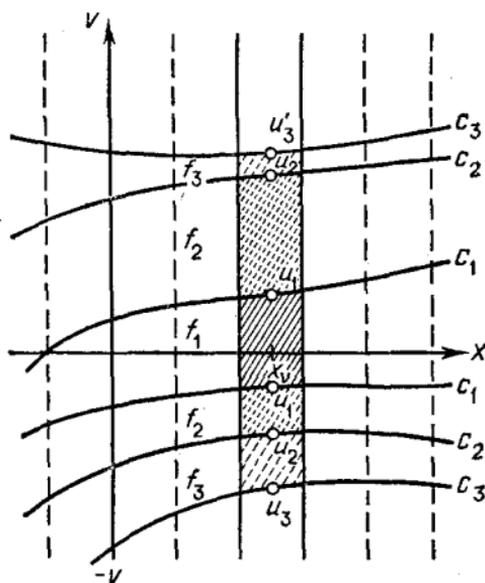
интегрированием уравнений для координат точек:

$$v_i^n = v_i^{n-2} + 2 \Delta t g(x_i^{n-1}), \quad (8.34)$$

$$x_i^n = x_i^{n-2} + 2 \Delta t v_i^{n-1}. \quad (8.35)$$

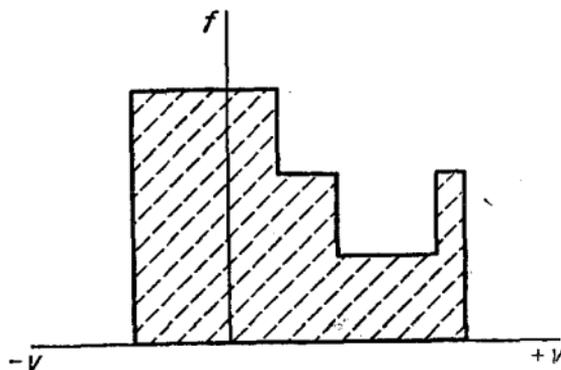
Здесь использована схема «с перешагиванием», что дает второй порядок точности, но, так как и координаты, и скорости вычисляются во все моменты времени, в схеме

может произойти рассогласование временных уровней (см. гл. 2, § 6, п. 2). Для того чтобы избежать значи-



Фиг. 8.7. Интегрирование функции распределения в модели «водяного мешка» для вычисления плотности в каждой точке конфигурационного пространства.

тельных ошибок, вызванных таким рассогласованием, через некоторый интервал (обычно через каждые 100 шагов по времени), необходимо производить перестройку

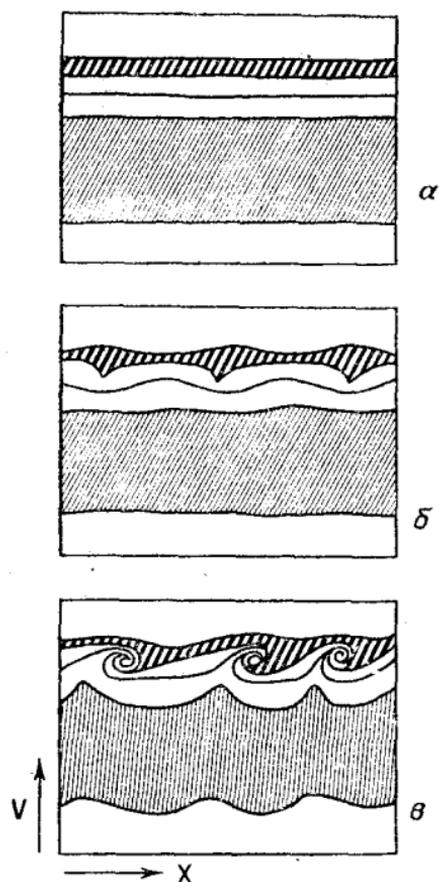


Фиг. 8.8. Распределение типа «горб на хвосте».

переменных в промежуточные моменты времени путем интерполяции между соседними временными слоями.

Для того чтобы определить плотность вещества (или в электростатическом случае плотность зарядов)

в конфигурационном пространстве на  $n$ -м шаге по времени, ось  $x$  покрывается эйлеровой сеткой (фиг. 8.7). Каждый контур может вообще не пересекать данную эйлерову ячейку, а может пересекать ее несколько раз, но в любом случае определены значения скорости  $u_j^n$ , при



Фиг. 8.9. Эволюция распределения типа «Горб на хвосте» в фазовом пространстве  $(x, v)$ , рассчитанная методом «водяного мешка» [65].

Заштрихованная площадь показывает область высокой плотности в фазовом пространстве, связанную с «горбом на хвосте». Неустойчивость начального распределения (а) имеет двухпучковую природу и приводит к вихревому движению (в) и перемешиванию среды фазового пространства.

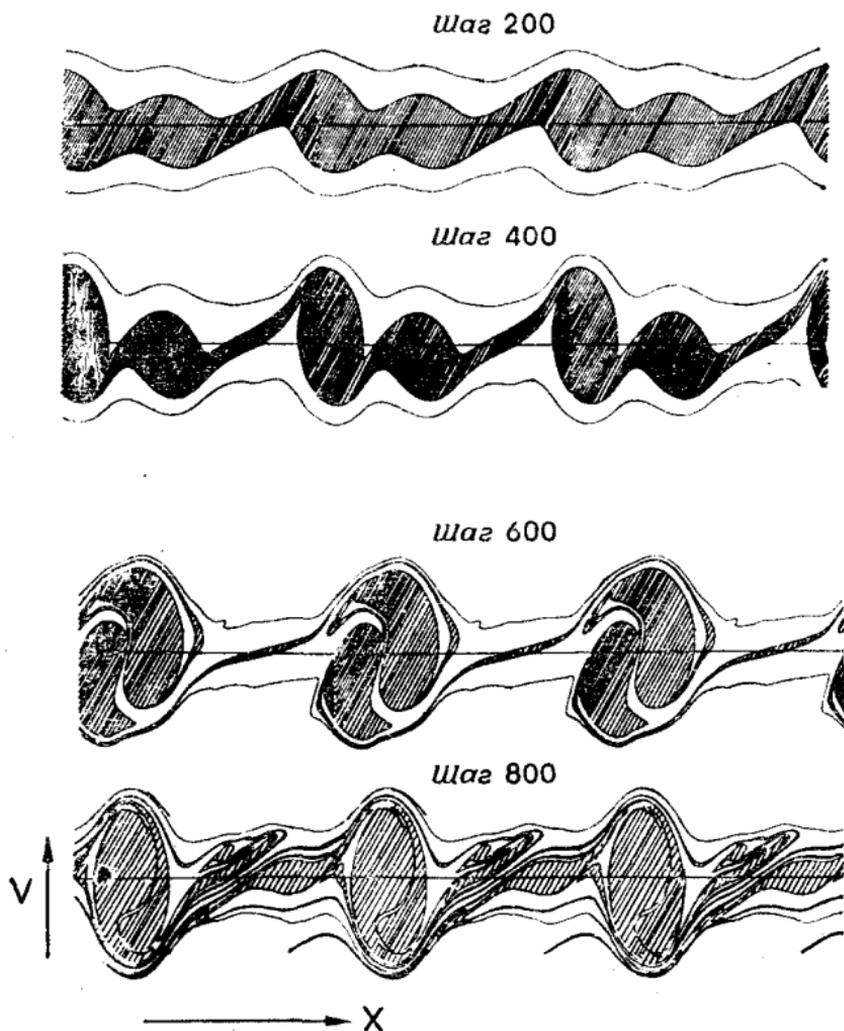
которых контур пересекает ячейку. Масса вещества в каждой ячейке вычисляется по формулам

$$m_v^n = m_0 \int_{-\infty}^{\infty} f dv; \quad (8.36)$$

$$m_v^n = m_0 \left( f v \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} v df \right); \quad (8.37)$$

$$m_v^n \approx m_0 \sum_j u_{vj}^n \Delta f_j; \quad (8.38)$$

где использованы формула интегрирования по частям и условие  $f = 0$  при  $v = \pm\infty$ . В формуле (8.38)  $\Delta f_j$  означает изменение функции  $f$  при переходе через контур  $C_j$  (фиг. 8.5), и если на каждом контуре выбрано



Фиг. 8.10. Двухлучковая неустойчивость в методе «водяного мешка». На нелинейном этапе в фазовом пространстве образуются «вихри». Контур удлиняется и принимает сложную форму [65].

направление обхода по часовой стрелке, то знак  $\Delta f_j$  зависит от того, пересекает контур линию  $x = x_v$  в положительном или отрицательном направлении. Таким образом, пользуясь уравнением (8.38), нетрудно вычислить плотность вещества в любой момент времени.

Когда найдена плотность вещества, можно определить потенциал, решая уравнение Пуассона

$$\Phi_{v+1}^n - 2\Phi_v^n + \Phi_{v-1}^n = 4\pi\Delta^2 Gm_v^n. \quad (8.39)$$

В работе [65] модель «водяного мешка» была применена к термически неравновесной задаче для функции распределения типа «горб на хвосте» (фиг. 8.8). В физике плазмы такое распределение часто встречается, так как в отсутствие столкновений электрическое поле ускоряет преимущественно горячие электроны. Распределение «горб на хвосте» неустойчиво из-за двухпучковой неустойчивости (гл. 6, § 3), и на нелинейной стадии происходит термализация «хвоста» путем развития вихрей в фазовом пространстве (фиг. 8.9).

Модель «водяного мешка» свободна от диффузии, которая, если она происходит в пространстве скоростей, обладает тем же действием, что и столкновения. С другой стороны, движение контуров приводит к их удлинению и усложнению их формы (фиг. 8.10), и если расчет продолжается достаточно длительное время, то появляется необходимость в упрощении и уменьшении длины каждого контура. Такая операция содержит произвол и ведет к диффузии в численной модели.

## Классическая гидродинамика

---

### § 1. Вводные замечания об уравнениях гидродинамики

Классическая гидродинамика описывает динамику сред, с которыми мы повседневно имеем дело. Это такие явления, как приливы и отливы, волны в океане, ветер, вихри и движения атмосферы, водопады, дым, поднимающийся из трубы, звуковые волны и гром. Однако здесь перечислены лишь некоторые из эффектов, возникающих в непрерывных средах, широкая распространенность которых и объясняет нашу естественную интуицию и интерес к гидродинамике. С другой стороны, сложность и многообразие явлений в непрерывной среде отражается в сложности гидродинамических уравнений, которые нелинейны и трудноразрешимы, так как непрерывная среда представляет собой частный случай задачи многих тел.

Используя основные законы сохранения (гл. 3, § 1), можно вывести уравнения гидродинамики из макроскопических соображений без рассмотрения структуры «непрерывной текучей среды». Однако, поскольку мы пытаемся описать систему многих тел, важно рассмотреть уравнения и с молекулярной точки зрения [63].

Основы описания системы многих тел непрерывной функцией были разобраны на примере уравнения Власова. Бесстолкновительное уравнение Власова может описывать произвольное расположение частиц в пространстве скоростей. С другой стороны, в обычно изучаемых средах, например в метеорологии, океанографии, аэродинамике, молекулярные столкновения в рассматриваемом масштабе времени происходят очень часто. Это позволяет использовать уравнения с меньшим числом степеней свободы и тем самым уравнения, которые легче поддаются решению. Благодаря такой большой частоте

межмолекулярных столкновений можно сделать важное предположение о том, что все частицы в окрестности любой точки пространства находятся в почти полном тепловом равновесии. Здесь тепловым равновесием в точке мы называем такое состояние, когда распределение частиц по скоростям в любой точке подчиняется максвелловскому или почти максвелловскому закону, откуда следует, что такое распределение можно описывать скоростью центра масс  $v$  и температурой  $T$  или, что то же самое, квадратом ширины распределения. Поэтому для описания столкновительной системы многих частиц можно вместо функции распределения частиц в фазовом пространстве использовать гидродинамические характеристики системы в конфигурационном пространстве, т. е. плотность  $\rho$ , скорость  $v$  и температуру  $T$  (или давление  $p$ , или внутреннюю энергию  $\epsilon$ ).

Несмотря на важность молекулярного подхода к уравнениям гидродинамики, ниже мы ограничимся кратким обсуждением формы и основных свойств этих уравнений <sup>1)</sup>.

### 1. Консервативная, эйлерова и лагранжева формы уравнений

Уравнения идеальной гидродинамики были получены в гл. 3, § 1, и в гл. 6, § 5. Система уравнений гидродинамики содержит пять уравнений для плотности  $\rho$ , скорости  $v$  и плотности внутренней энергии  $\epsilon$ , которая связана с температурой, причем в общем случае каждое из этих уравнений зависит от трех пространственных координат и времени  $(x, t)$ . Запишем уравнения гидродинамики в эйлеровой форме, т. е. в дифференциальной форме относительно некоторой неподвижной системы отсчета:

масса:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho v = 0; \quad (9.1)$$

импульс:

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + (\nabla \rho v) v = - \nabla p; \quad (9.2)$$

<sup>1)</sup> Вывод уравнений гидродинамики с точки зрения молекулярной функции распределения читатель сможет найти в [63].

внутренняя энергия:

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \rho \nabla \mathbf{v} + \nabla (\rho \epsilon \mathbf{v}) = 0. \quad (9.3)$$

Эти основные уравнения нужно дополнить «уравнением состояния», описывающим конкретные термодинамические свойства рассматриваемой среды. Уравнение состояния связывает локальное значение удельной внутренней энергии с плотностью и давлением среды:

$$\epsilon = \epsilon(\rho, p). \quad (9.4)$$

Простым примером служит уравнение состояния идеального газа:

$$\epsilon = \frac{kT}{m(\gamma - 1)} = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}, \quad (9.5)$$

где  $\gamma$  — отношение теплоемкостей ( $\gamma = 5/3$  для одноатомного газа),  $m$  — масса молекулы,  $k$  — постоянная Больцмана, а  $T$  — температура среды.

Мы уже отмечали выше, что перенос свойств среды движением самой среды — это один из важнейших процессов, описываемых гидродинамическими уравнениями (гл. 3, § 1 и 5). Если записать уравнения с помощью лагранжевой производной  $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{v}\nabla$  — производной по времени в системе координат, связанной с движущейся средой, — то уравнения гидродинамики примут особенно простой вид. Вычисляя дивергенцию в уравнениях (9.1) — (9.3), приходим к лагранжевой форме записи:

масса:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \mathbf{v}; \quad (9.6)$$

ускорение:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p; \quad (9.7)$$

внутренняя энергия:

$$\rho \frac{d\epsilon}{dt} = -\rho \nabla \mathbf{v}. \quad (9.8)$$

В частном случае (9.5) идеального газа уравнение (9.8) допускает дальнейшее упрощение и переходит

в выражение для адиабатического закона. Следует отметить, что лагранжева производная по времени описывает эффект переноса, в то время как правые части каждого из уравнений связаны со сжатием среды.

Свойства сохранения физических величин следует выделить как с точки зрения физического смысла (см. гл. 3, § 1), так и с точки зрения разностного моделирования (см. гл. 3, § 6). Эйлера уравнения для массы (9.1) и для импульса (9.2) имеют консервативную форму. Аналогично можно неконсервативное уравнение для внутренней энергии (9.3) заменить уравнением сохранения энергии, если заметить, что плотность полной энергии среды равна сумме плотности внутренней энергии и плотности кинетической энергии центра масс  $\frac{1}{2}\rho v^2$ . Поэтому, прибавив к уравнению (9.3) уравнение (9.2), скалярно умноженное на  $\mathbf{v}$  и уравнение (9.1), умноженное на  $(-\frac{1}{2}v^2)$ , мы получим консервативное уравнение для энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho e + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) + \nabla \cdot \left\{ \left( \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho e + p \right) \mathbf{v} \right\} = 0. \quad (9.9)$$

Поток энергии под знаком дивергенции складывается из потока кинетической энергии центра масс, потока внутренней энергии и работы, выполняемой давлением вещества, соответственно.

## 2. Процессы диффузии

Полученные выше гидродинамические уравнения являются гиперболическими и описывают перенос и сжатие, связанное со звуковыми волнами в среде. Эти уравнения применимы, когда свойства среды локализованы двухчастичными столкновениями, а распределение частиц в фазовом пространстве имеет максвелловский вид. Свойства среды локализованы, если средняя длина  $\lambda$  свободного пробега частицы между столкновениями мала. Более точно, записанные выше уравнения справедливы, если длина  $\lambda$  много меньше, чем характерная длина  $L$  изменения параметров среды, т. е. плотности, скорости и энергии.

Если среднюю длину свободного пробега  $\lambda$  нельзя считать малой, то следует учитывать перенос импульса и энергии через среду, осуществляемый диффузией частиц в конфигурационном пространстве. Мы будем говорить, что среда становится вязкой, если импульс диффундирует сквозь среду в процессе микроскопического движения частиц. Этот эффект описывается уравнением для импульса (9.2) путем включения в него тензора вязкости  $\mathbf{V}$  с равной нулю сверткой,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} + \nabla (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + p \mathbf{I} + \mathbf{V}) = 0, \quad (9.10)$$

где  $\mathbf{I}$  — единичный тензор.

Аналогично перенос внутренней энергии сквозь среду и поток тепла  $\mathbf{q}$  обусловлены теплопроводностью (в газе — диффузией количества теплоты):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \varepsilon + (p \mathbf{I} + \mathbf{V}) : \nabla \mathbf{v} + \nabla (\rho \varepsilon \mathbf{v} + \mathbf{q}) = 0. \quad (9.11)$$

Кроме теплопроводности, в уравнение для внутренней энергии мы включили эффект вязкого нагрева среды. Очевидно, что если в уравнение для импульса включен тензор вязкости, то из соображений сохранения энергии необходимо учесть работу, выполняемую в газе силами вязкости. Эта работа описывается вторым слагаемым в уравнении для внутренней энергии.

Установим связь между диффузионными потоками, обусловленными теплопроводностью и вязкостью, и градиентами температуры и скорости среды. Как и в твердом теле (см. гл. 3, § 1), тепло передается в направлении, противоположном градиенту температуры, и, следовательно, поток тепла выражается формулой

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T, \quad (9.12)$$

где  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности.

Аналогично тензор вязкости выражает перенос импульса как при скольжении слоев среды, так и при сжатиях. Тензор вязкости  $\mathbf{V}$  связан с тензором Навье — Стокса  $\mathbf{U}$  соотношением [66]

$$\mathbf{V} = -\mu \mathbf{U}, \quad (9.13)$$

где

$$\mathbf{U} = \nabla \mathbf{v} + \tilde{\nabla} \mathbf{v} - \frac{2}{3} (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{I}, \quad (9.14)$$

$\mu$  — вязкость среды, а матрица  $\tilde{\nabla} \mathbf{v}$  транспонирована с  $\nabla \mathbf{v}$ .

Как теплопроводность  $\kappa$ , так и вязкость  $\mu$  зависят от частоты столкновений между частицами, причем  $\kappa$  и  $\mu$  могут зависеть и от локальной температуры, и от плотности среды, в результате чего члены уравнения, описывающие перенос, могут стать нелинейными [63].

Учет этих диффузионных явлений приводит к тому, что уравнения становятся параболическими и описывают эффект диффузии или сглаживания импульса и температуры среды.

### 3. Понятие сжимаемых и несжимаемых сред

Как было отмечено выше, уравнения гидродинамики применимы к очень широкому классу сред и связанных с ними явлений, столь несхожих, как аэродинамические эффекты и эффекты, наблюдаемые в водопаде. Мы же будем различать здесь два типа задач по признаку сжимаемости или несжимаемости изучаемой среды.

Общий случай описывается уравнениями гидродинамики сжимаемых сред, причем система уравнений состоит из пяти нестационарных трехмерных уравнений для плотности  $\rho$ , трех компонент импульса  $\rho \mathbf{v}$  и внутренней энергии  $\rho e$ . Эффекты вязкости и теплопроводности могут быть несущественными.

Плотность энергии среды состоит из двух частей:

$$\rho e + \frac{1}{2} \rho v^2,$$

а именно из внутренней или тепловой энергии и кинетической энергии центра масс. В сжимаемых средах может происходить перераспределение между плотностями тепловой и кинетической энергий: так, в некоторой области бóльшая часть локальной энергии среды может находиться в тепловой форме, в то время как в другом месте будет преобладать энергия течения. С другой стороны, во многих интересных случаях, например в океане или в атмосфере, энергия течения среды мала по срав-

нению с внутренней или тепловой энергией. При таком соотношении энергий течение не может сжимать среду, так что обмен энергиями невозможен, и среда называется несжимаемой.

Можно провести сравнение сжимаемых и несжимаемых сред с другой точки зрения. В отсутствие вязкости и теплопроводности уравнения гидродинамики имеют гиперболическую форму и содержат две характерные скорости: скорость центра масс  $v$  и скорость звука  $v_s = \sqrt{\gamma p/\rho}$ , связанную с тепловой скоростью. Очевидно, что при решении этих уравнений по явной разностной схеме нужно выбрать шаг по времени  $\Delta t$  так, чтобы удовлетворить условию устойчивости

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v| + v_s}, \quad (9.15)$$

где  $\Delta$  — пространственный шаг сетки (гл. 3). Можно провести разделение задач по классам в зависимости от величины отношения скоростей течения и звука. Если скорость течения мала в этом смысле, то для того, чтобы избежать жесткого ограничения на шаг по времени из-за высокой скорости звука, можно использовать приближение несжимаемой среды:

$$\frac{d\rho}{dt} = 0. \quad (9.16)$$

С учетом уравнения непрерывности (9.6) это условие несжимаемости среды эквивалентно условию

$$\nabla \mathbf{v} = 0. \quad (9.17)$$

В результате уравнения значительно упрощаются, что является следствием предположения о бесконечности скорости звука.

Таким образом, в гидродинамике несжимаемых сред отпадает необходимость в уравнении для энергии, так как три уравнения для скорости (9.7) вместе с условием соленоидальности поля скоростей (9.17) определяют четыре функции, описывающие давление и три компоненты скорости.

В последующих параграфах мы сначала рассмотрим способы описания и решения уравнений несжимаемой

среды с помощью разностных методов. Если в уравнения несжимаемой среды включить движущиеся поверхности, а также выталкивающую силу, обусловленную тяжестью на поверхности земли, то эти уравнения применимы к описанию таких явлений, как всплески, водопады и приливно-отливные течения в океане. Далее мы рассмотрим разностное решение уравнений гидродинамики сжимаемых сред, что позволит изучать гидродинамические явления типа ударных волн и сжимаемых течений, возможных в аэродинамике.

## § 2. Разностное решение уравнений несжимаемой среды

Движение несжимаемой среды определяется тремя уравнениями для ускорения среды и условием соленоидальности поля скоростей (§ 1):

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (9.18)$$

$$\nabla \mathbf{v} = 0, \quad (9.19)$$

где  $\nu$  — кинематическая вязкость,  $\nu = \mu/\rho$ , и для однокомпонентной среды плотность  $\rho$  предполагается постоянной. Эти четыре уравнения определяют четыре функции: три компоненты скорости и скалярное давление.

Существует два подхода к решению уравнений несжимаемой среды. Можно сначала исключить давление, вычислив ротор от обеих частей уравнения (9.18) и получив таким образом уравнение для вектора завихренности среды. Используя условие соленоидальности (9.19), можно ввести функцию тока, которая связана с завихренностью уравнением Пуассона. При другом подходе к уравнению (9.18) применяется оператор дивергенции, что дает уравнение Пуассона для прямого определения давления по центробежной и кориолисовой силам.

### 1. Завихренность и функция тока

Течение несжимаемой среды неизбежно является вихревым, и поэтому целесообразно ввести завихренность  $\xi(\mathbf{x}, t)$  среды:

$$\xi = [\nabla, \mathbf{v}]. \quad (9.20)$$

Исключим давление из уравнений движения среды, для чего возьмем ротор от уравнения (9.18):

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + [\mathbf{V}, (\mathbf{v}\nabla) \mathbf{v}] = \nu \nabla^2 \xi.$$

В результате получим нестационарное уравнение для завихренности среды:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla) \xi = \nu \nabla^2 \xi, \quad (9.21)$$

где использовано условие соленоидальности (9.19). Последнее уравнение дает простое описание нестационарного течения среды, так как если отбросить эффекты вязкости, то уравнение (9.21) просто выражает перенос завихренности движущейся средой.

Компоненты скорости определяются по завихренности путем интегрирования условия соленоидальности (9.19) и вычисления векторной величины  $\psi$  — функции тока:

$$\mathbf{v} = [\mathbf{V}, \psi], \quad (9.22)$$

которая существует, так как поле скоростей соленоидально. Найдем связь функции тока  $\psi$  и завихренности,

$$[\mathbf{V}, [\mathbf{V}, \psi]] = [\mathbf{V}, \mathbf{v}] = \xi. \quad (9.23)$$

Преобразуя оператор  $\text{rot rot}$ , получим

$$\nabla^2 \psi - \nabla (\nabla \psi) = -\xi. \quad (9.24)$$

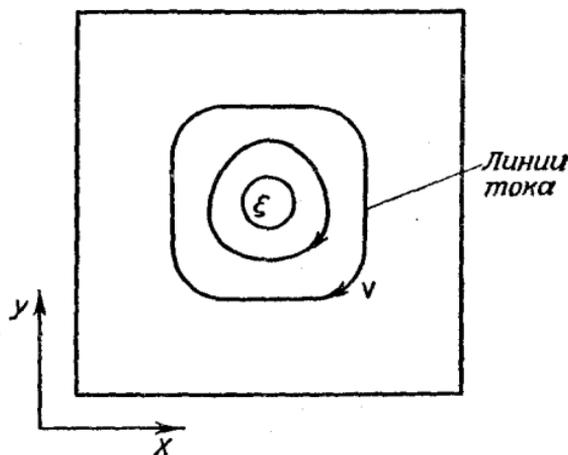
Следует отметить, что функция тока  $\psi$  определена уравнением (9.22) неоднозначно и имеется некоторый произвол в выборе «калибровки» функции тока. Наиболее удобно выбрать следующее условие:

$$\nabla \psi = 0.$$

Тогда три компоненты функции тока по отдельности связаны с тремя компонентами завихренности уравнениями Пуассона

$$\nabla^2 \psi = -\xi. \quad (9.25)$$

Для описания движения несжимаемой среды получена простая замкнутая система уравнений: нестационарное уравнение для завихренности (9.21) и уравнение Пуассона для функции тока (9.25), по которой можно найти скорость (9.22). В особенно важном двумерном случае эти уравнения приобретают весьма простую и красивую форму. Предположим, что движение среды про-



Фиг. 9.1. Завихренность и функция тока для несжимаемой среды. Течение среды происходит вдоль линий уровня функции тока.

исходит в плоскости  $(x, y)$ ,  $\mathbf{v} = \{v_x, v_y, 0\}$ , тогда завихренность и функция тока содержат только  $z$ -компоненты (фиг. 9.1):

$$\xi = \{0, 0, \xi\},$$

$$\psi = \{0, 0, \psi\}.$$

Полная система уравнений имеет вид

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \xi = \nu \nabla^2 \xi,$$

$$\nabla^2 \psi = -\xi,$$

$$\mathbf{v} = [\nabla, \psi \mathbf{e}_z], \quad (9.26)$$

где  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор оси  $z$ , а функцию тока и завихренность можно рассматривать как псевдоскаляры.

В то время как завихренность в среде подвержена переносу и вязкостной диффузии, эллиптическое уравнение Пуассона для функции тока означает, что передача «информации» в среде осуществляется с бесконечной скоростью (см. гл. 3, § 1). Такой эффект является следствием бесконечности скорости звука, что в свою очередь следует из предположения о несжимаемости среды. Уравнения сохраняют нелинейность, обусловленную переносным членом уравнения для завихренности.

Систему уравнений (9.26) можно аппроксимировать на эйлеровой сетке обычным способом, например с помощью метода Лакса. Однако для уменьшения численной диффузии лучше использовать схему по крайней мере второго порядка точности, такую, как в двухшаговом методе Лакса — Вендроффа (см. гл. 3, § 7). В методе используют эйлеровскую разностную сетку типа кристаллической решетки NaCl, где каждый основной узел окружен четырьмя вспомогательными узлами, и наоборот (фиг. 9.2).

На каждом шаге по времени  $n$  переменные  $\psi$  и  $\xi$  определены только в промежуточных основных узлах. Дополнительные или вспомогательные переменные определяются по методу Лакса во вспомогательных узлах в дробные моменты времени  $n + 1/2$ :

*вспомогательный шаг:*

$$\begin{aligned} v_{x_{i,j+1}}^n &= (\psi_{i,j+2}^n - \psi_{i,j}^n) \frac{1}{2\Delta}; \\ v_{y_{i,j+1}}^n &= -(\psi_{i+1,j+1}^n - \psi_{i-1,j+1}^n) \frac{1}{2\Delta}; \end{aligned} \quad (9.27)$$

$$\begin{aligned} \xi_{i,j+1}^{n+1/2} &= \frac{1}{4} (\xi_{i,j}^n + \xi_{i+1,j+1}^n + \xi_{i-s,j+1}^n + \xi_{i,j+2}^n) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta} v_{x_{i,j+1}}^n (\xi_{i+1,j+1}^n - \xi_{i-1,j+1}^n) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta} v_{y_{i,j+1}}^n (\xi_{i,j+2}^n - \xi_{i,j}^n). \end{aligned} \quad (9.28)$$

Получив новые значения завихренности, мы решаем уравнение Пуассона на вспомогательной сетке и находим

вспомогательные значения функции тока:

$$\begin{aligned} (\psi_{i,j+1}^{n+1/2} + \psi_{i,j-1}^{n+1/2} + \psi_{i+2,j+1}^{n+1/2} + \psi_{i+2,j-1}^{n+1/2}) - 4\psi_{i+1,j}^{n+1/2} = \\ = -2\Delta^2 \xi_{i+1,j}^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (9.29)$$

Теперь используем эти вспомогательные переменные в основном расчете для определения скоростей в основных узлах на шаге по времени  $n+1$ :

*основной шаг:*

$$\begin{aligned} v_{x_{ij}}^{n+1/2} &= (\psi_{i,j+1}^{n+1/2} - \psi_{i,j-1}^{n+1/2}) \frac{1}{2\Delta}; \\ v_{y_{ij}}^{n+1/2} &= -(\psi_{i+1,j}^{n+1/2} - \psi_{i-1,j}^{n+1/2}) \frac{1}{2\Delta}; \\ \xi_{ij}^{n+1} &= \xi_{ij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_{x_{ij}}^{n+1/2} (\xi_{i+1,j}^{n+1/2} - \xi_{i-1,j}^{n+1/2}) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_{y_{ij}}^{n+1/2} (\xi_{i,j+1}^{n+1/2} - \xi_{i,j-1}^{n+1/2}) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\Delta^2} v (\xi_{i+1,j+1}^n + \xi_{i-1,j+1}^n + \xi_{i+1,j-1}^n + \xi_{i-1,j-1}^n - 4\xi_{i,j}^n). \end{aligned} \quad (9.31)$$

Член с вязкостной диффузией завихренности здесь включен в схему с помощью явного метода первого порядка (с поворотом) (см. гл. 3, § 7). Полный шаг по времени завершается решением уравнения Пуассона (гл. 4, § 4) в основных узлах и вычислением значений функции тока  $\psi$  на  $n+1$  шаге по времени:

$$\begin{aligned} (\psi_{i+1,j+1}^{n+1} + \psi_{i-1,j+1}^{n+1} + \psi_{i+1,j-1}^{n+1} + \psi_{i-1,j-1}^{n+1}) - 4\psi_{i,j}^{n+1} = \\ = -2\Delta^2 \xi_{i,j}^{n+1}. \end{aligned} \quad (9.32)$$

Отметим несколько моментов этого метода решения уравнений гидродинамики несжимаемой среды. Мы исключили явную зависимость от скорости звука, но перенос завихренности мы аппроксимировали с помощью явного метода. Это означает, что разностная схема должна удовлетворять условию устойчивости Куранта — Фридрихса — Леви (гл. 3), где характерная скорость

равна скорости переноса или скорости центра масс среды:

$$\Delta t \leq \frac{2\Delta}{\sqrt{2} |v|_{\max}}. \quad (9.33)$$

Здесь  $|v|_{\max}$  — наибольшее по модулю значение скорости на сетке.

Кроме того, член вязкостной диффузии (если он присутствует) описан явно с первым порядком точности, что тоже накладывает на шаг по времени ограничение, зависящее от кинематической вязкости (гл. 3):

$$\Delta t \leq \frac{\Delta^2}{\nu}. \quad (9.34)$$

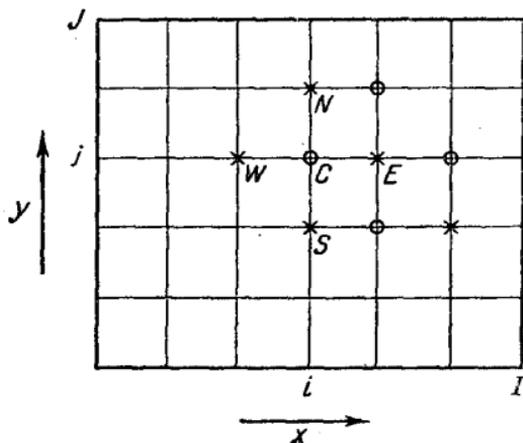
Обычно вязкость хотя и существенна, но невелика (большое число Рейнольдса), откуда следует, что ограничение на шаг по времени накладывается только временем переноса (9.33), а не временем диффузии (9.34). По этой же причине мы ввели член с вязкостной диффузией только в основной этап расчета и лишь с первым порядком точности относительно шага по времени. Вычисление члена вязкостной диффузии по пятиточечной схеме с поворотом связывает все узлы в методе Лакса — Вендроффа (см. фиг. 3.14).

Рассмотренный здесь разностный метод описывает преобладающий переносный член со вторым порядком точности по пространственному и временному шагам. Следует, однако, отметить, что, в то время как в системе дифференциальных уравнений сохраняется большое число физических величин, и, в частности, завихренность, разностная аппроксимация переносного члена ведет к несохранению завихренности [67]. Ценой небольшого усложнения рассматриваемой задачи можно изменить разностную схему так, чтобы завихренность сохранялась, но невозможно сделать так, чтобы все сохраняющиеся физические величины сохранялись и в разностной схеме (§ 3).

Другая разностная аппроксимация, основанная на методе Адамса — Башфорта почти второго порядка точности (гл. 3, § 7), проста в применении и позволяет избежать трудностей, характерных для сетки NaCl (фиг. 9.2),

## 2. Метод с рассмотрением давления

В другом подходе к решению уравнений гидродинамики несжимаемых сред (9.18), (9.19) используются непосредственно переменные, описывающие скорость и давление. Уравнение для давления получим, потребовав, чтобы поле скоростей, соленоидальное в начальный момент  $t = 0$ , оставалось соленоидальным во все



Фиг. 9.2. Разностная сетка, используемая в методе Лакса — Вендроффа для несжимаемой среды.

Основные и вспомогательные узлы чередуются.

последующие моменты времени. Для этого вычислим дивергенцию от уравнения ускорения среды (9.18)

$$\nabla^2 \bar{p} = -(\nabla(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v}) = -\nabla\mathbf{v} : \nabla\mathbf{v}, \quad (9.35)$$

где использовано условие (9.19) для скоростей,  $\bar{p}$  — давление, нормированное на постоянную плотность,  $\bar{p} = p/\rho$ , и коэффициент вязкости предполагается постоянным.

В уравнении Пуассона (9.35) роль потенциала играет нормированное давление, входящее в левую часть уравнения, а «источники» в правой части связаны с центробежной и кориолисовой силами, обусловленными вращательным движением среды. Можно опять сказать, что эллиптическое уравнение Пуассона выражает бесконечную скорость распространения информации в простран-

стве в полном соответствии с предположением о несжимаемости, которое эквивалентно предположению о бесконечности скорости звука. Общая форма записи уравнений (9.18) и (9.35) в равной степени справедлива для двух- и трехмерной гидродинамики несжимаемой среды.

Ради простоты мы изложим метод решения на примере двумерной задачи в прямоугольной декартовой системе координат  $(x, y)$ . Если  $x$ -компоненту скорости обозначить буквой  $u$ , а  $y$ -компоненту —  $v$ , то двумерные дифференциальные уравнения примут вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial u^2}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \nu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (9.36)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial v^2}{\partial y} - \frac{\partial uv}{\partial x} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} + \nu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right), \quad (9.37)$$

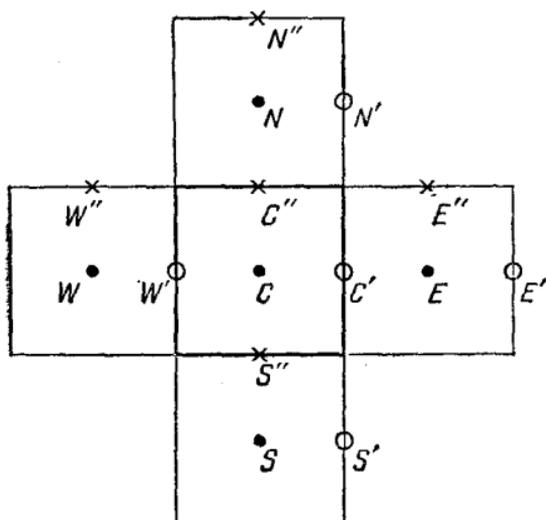
с уравнением Пуассона для давления:

$$\frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial y^2} = - \left\{ \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} + \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right\}. \quad (9.38)$$

Отметим, что если для дифференциальной системы уравнений соленоидальность поля скоростей в начальный момент времени означает соленоидальность этого поля и в любой последующий момент, то в разностных уравнениях это свойство может нарушаться. Поэтому разностную схему нужно записать так, чтобы независимо от ошибок округления строго выполнялся разностный аналог условия соленоидальности (9.19). Если этого не сделать, то течение быстро станет сжимаемым.

Для того чтобы выполнить требования, предъявляемые к разностному решению, рассмотрим равномерную эйлерову сетку, причем каждую ячейку или клетку (фиг. 9.3) будем считать элементарной в том смысле, что для потока через эту ячейку должно быть строго выполнено условие несжимаемости. У нас есть три независимых переменных  $(\bar{p}, u, v)$ , и каждую из них мы определим в отдельной точке сетки: давление задается только в центре  $(x_i, y_j)$  каждой ячейки, «горизонтальная» скорость  $u$  определяется только на «вертикальных» ( $x = \text{const}$ ) границах ячеек  $(x_{i+1/2}, y_j)$  и аналогично «вертикальная» скорость  $v$  определяется только

на «горизонтальных» ( $y = \text{const}$ ) границах ячеек ( $x_i, y_{j+1/2}$ ) (фиг. 9.3). Соответственно каждая из трех функций определена на одной из трех смещенных относительно друг друга сеток (фиг. 9.3). Для простоты мы будем обозначать пять соседних точек для каждой зави-



- Давление
- × Вертикальная скорость
- Горизонтальная скорость

Фиг. 9.3. Разностная сетка, используемая для аппроксимации уравнений несжимаемой среды в методе с рассмотрением давления.

Суммарный поток через границу каждой ячейки строго равен нулю.

симой переменной первыми буквами названий сторон света (фиг. 9.3).

$$\begin{aligned} \bar{p}_C &= \bar{p}(x_i, y_j, t^n), \\ u_{C'} &= u(x_{i+1/2}, y_j, t^n), \\ v_{C''} &= v(x_i, y_{j+1/2}, t^n). \end{aligned} \quad (9.39)$$

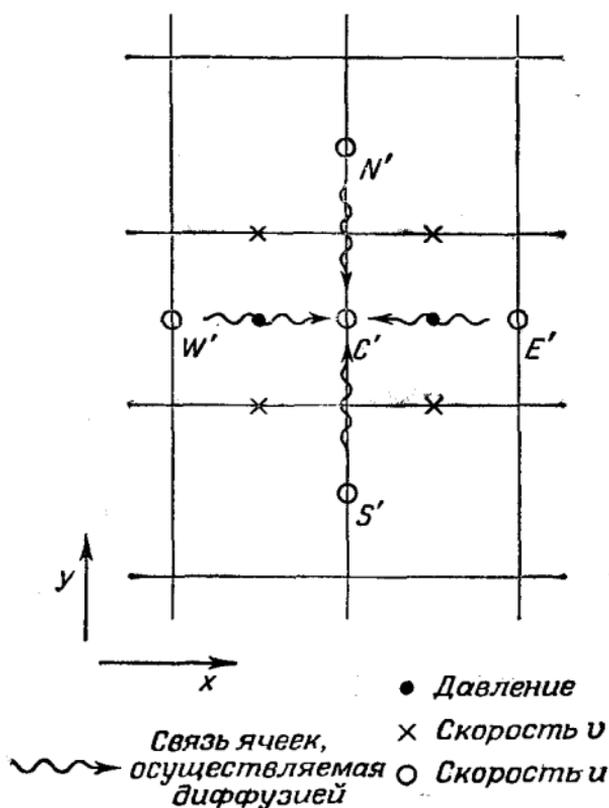
Практичность таких обозначений очевидна, так как теперь мы можем ясно и наглядно записать разностный аналог дивергенции скорости:

$$D_C = \frac{1}{\Delta} (u_{C'} - u_{W'}) + \frac{1}{\Delta} (v_{C''} - v_{S''}). \quad (9.40)$$

И соответственно разностный аналог условия несжимаемости среды (9.19) примет вид

$$D_C = 0 \quad (9.41)$$

для любой ячейки в любой момент времени.



Фиг. 9.4. Разностная сетка для вычисления горизонтальной скорости  $u$  методом Лакса.

Если все функции заданы указанным образом (9.39) в момент времени  $t^n$ , то новые значения скоростей через промежуток времени  $\Delta t$  определяются интегрированием уравнений Навье—Стокса (9.36), (9.37). Для этого используется консервативный метод Лакса (см. гл. 3, § 8), который дает на новом шаге  $n \pm 1$  новые значения

скорости в  $x$ -направлении (фиг. 9.4):

$$u_{C'}^{n+1} = \frac{1}{4} (u_{N'} + u_{E'} + u_{W'} + u_{S'}) - \frac{\Delta t}{2\Delta} (u_{E'}^2 - u_{W'}^2) - \\ - \frac{\Delta t}{2\Delta} \left\{ \frac{v_{E''} + v_{C''}}{2} (u_{N'} + u_{C'}) - \frac{v_{S''} + v_{SE''}}{2} (u_{S'} + u_{C'}) \right\} - \\ - \frac{\Delta t}{\Delta} (\bar{p}_E - \bar{p}_C) + \frac{v \Delta t}{\Delta^2} (u_{N'} + u_{S'} + u_{E'} + u_{W'} - 4u_{C'}). \quad (9.42)$$

Первый член в правой части равенства, как и требуется в методе Лакса, равен среднему по пространству значению функции на шаге  $n$ , смысл остальных членов очевиден. Следует отметить, однако, что в нелинейный перекрестный член  $div \partial u / \partial y$  входит скорость  $v$ , которая не определена в узлах сетки для скорости  $u$ , поэтому значения  $v$  вычисляются усреднением по пространству. Аналогично определяются скорости в  $y$ -направлении (фиг. 9.5):

$$v_{C''}^{n+1} = \frac{1}{4} (v_{N''} + v_{E''} + v_{S''} + v_{W''}) - \frac{\Delta t}{2\Delta} (v_{N''}^2 - v_{S''}^2) - \\ - \frac{\Delta t}{2\Delta} \left\{ \frac{u_{N'} + u_{C'}}{2} (v_{E''} + v_{C''}) - \frac{u_{NW'} + u_{W'}}{2} (v_{C''} + v_{W''}) \right\} - \\ - \frac{\Delta t}{\Delta} (\bar{p}_N - \bar{p}_C) + \frac{v \Delta t}{\Delta^2} (v_{N''} + v_{E''} + v_{S''} + v_{W''} - 4v_{C''}). \quad (9.43)$$

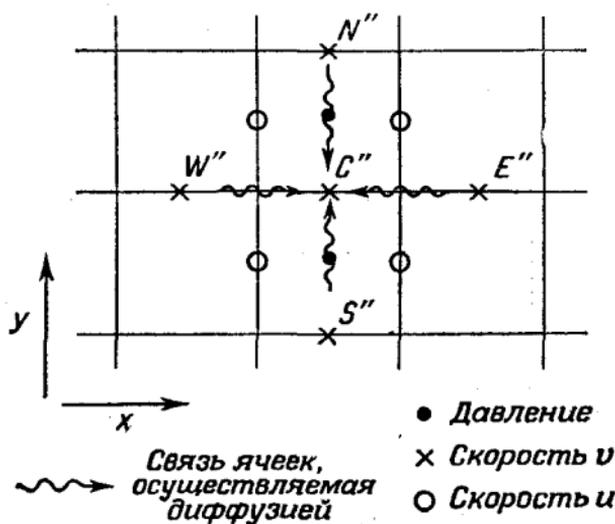
Теперь мы в состоянии сформулировать разностный аналог уравнения Пуассона, из которого нужно найти значения давления в центре каждой ячейки, а также мы можем оценить поток скорости в момент  $t^{n+1}$  через границу каждой ячейки  $C$  [уравнение (9.40)]. Используя разностные уравнения (9.42) для скорости  $u$  в  $x$ -направлении в точках  $C'$  и  $W'$  и уравнение (9.43) для скорости  $v$  в  $y$ -направлении в точках  $C''$  и  $S''$  (фиг. 9.3), находим выражение для дивергенции (9.40):

$$D_C^{n+1} = \frac{1}{4} (D_N + D_S + D_E + D_W) - \\ - S_C \frac{\Delta t}{2\Delta^2} - \frac{\Delta t}{\Delta^2} (\bar{p}_N + \bar{p}_S + \bar{p}_E + \bar{p}_W - 4\bar{p}_C) + \\ + \frac{v \Delta t}{\Delta^2} (D_N + D_S + D_E + D_W - 4D_C), \quad (9.44)$$

где функция источников  $S_C$  равна

$$S_C = (u_{E'}^2 - u_{C'}^2 - u_{W'}^2 + u_{W'W'}^2) + (v_{N''}^2 - v_{C''}^2 - v_{S''}^2 + v_{S''S''}^2) + \\ + \frac{v_{E''} + v_{C''}}{2} (u_{N'} + u_{C'}) - \frac{v_{S''} + v_{S''E''}}{2} (u_{S'} + u_{C'}) - \\ - \frac{u_{NW'} + u_{W''}}{2} (v_{C''} + v_{W''}) + \frac{u_{W'} + u_{SW'}}{2} (v_{S''} + v_{SW''}). \quad (9.45)$$

Так как дивергенция  $D$  в каждой ячейке должна быть равна нулю, давление следует определять на каждом



Фиг. 9.5. Разностная сетка для вычисления вертикальной скорости  $v$  методом Лакса.

временном слое, пользуясь только функцией источников  $S_C$ :

$$\bar{p}_N + \bar{p}_S + \bar{p}_E + \bar{p}_W - 4\bar{p}_C = -\frac{1}{2} S_C. \quad (9.46)$$

Такой метод определения давления будет удовлетворительным лишь при полном отсутствии ошибок в процессе решения (гл. 4) уравнения Пуассона (9.46). Однако ошибки округления неизбежны, и, конечно, при итерационном решении уравнения Пуассона окончательные значения давления будут неточными. Эти ошибки в свою очередь создадут течение с не равной нулю дивергенцией скорости. Поэтому во избежание накопления

ошибок будем решать уравнение Пуассона следующего вида:

$$\begin{aligned} \bar{p}_N + \bar{p}_E + \bar{p}_S + \bar{p}_W - 4\bar{p}_C = \\ = -\frac{1}{2} S_C + \nu (D_N + D_S + D_E + D_W - 4D_C) + \\ + \frac{\Delta^2}{4\Delta t} (D_N + D_S + D_E + D_W), \end{aligned} \quad (9.47)$$

где дивергенция скорости строго равна нулю, несмотря на ошибки округления.

Нестационарные уравнения (9.42), (9.43) и матричное уравнение (9.47) определяют решение уравнений несжимаемой среды на всех временных слоях разностной сетки. Перенос и вязкостная диффузия вычисляются явно с помощью метода Лакса в сочетании с явным методом первого порядка точности (гл. 3). Отсюда следует, что численное решение будет устойчиво, если шаг по времени удовлетворяет условию устойчивости

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{\sqrt{2(u_C^2 + v_C^2)}} \quad (\text{для всех ячеек } C), \quad (9.48)$$

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\nu}. \quad (9.49)$$

Подход, который использует завихренность и функцию тока (см. гл. 9, § 2, п. 2), безусловно, более прост, чем подход, описанный в настоящем пункте. Однако последний обладает большей гибкостью, легче распространяется на случай трех измерений, лучше приспособлен для описания сложных граничных условий, в частности на движущейся границе (§ 4). В § 4 мы рассмотрим граничные условия и применение этого метода к реальным, а не к идеализированным физическим явлениям. Основные идеи описанного в настоящем пункте алгоритма были предложены в работе [68].

### § 3. Несжимаемое течение как система вихревых частиц

#### 1. Законы сохранения для несжимаемой среды

Основные уравнения двумерной несжимаемой среды представляют особый интерес, потому что, во-первых, они описывают широкий круг явлений природы и, во-

вторых, в основном отвечают на вопрос о возможности описания турбулентного течения в детерминистической модели. Конечно, дифференциальные уравнения однозначно определяют состояние среды во все последующее время. Но численная модель всегда дискретна и, вообще говоря, не описывает коротковолновые явления в среде. Уже при небольшой вязкости многие среды турбулизуются, и возникает вопрос: как описать такие турбулентные коротковолновые эффекты, чтобы правильно передать макроскопическое движение среды? Ответ на такой вопрос важен, например, для прогноза погоды [69].

Поэтому полезно разработать и другой подход к уравнениям несжимаемой среды. В двумерном случае в отсутствие вязкости движение среды можно описать псевдоскалярными завихренностью  $\xi$  и функцией тока  $\psi$  (9.26):

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial y} = 0, \quad (9.50)$$

где, как и выше, функция тока связана с завихренностью уравнением Пуассона. Уравнение (9.50) удобно записать с помощью якобиана:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial (\xi, \psi)}{\partial (x, y)} = 0$$

или используя скобки Пуассона:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + [\xi, \psi] = 0. \quad (9.51)$$

Без потери общности уравнение (9.50) можно переписать также и в любой из двух консервативных форм:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \xi \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \xi \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) &= 0; \\ \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} \left( \psi \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (9.52)$$

Каждое из этих уравнений выражает сохранение завихренности. При этом, с одной стороны, завихренность на сетке будет сохраняться, если пользоваться разностной аппроксимацией любого из двух консервативных уравнений. С другой стороны, если уравнение (9.52) умножить

на  $\xi^{p-1}$ , то видно, что любая степень  $p$  завихренности будет сохраняющейся величиной. Это означает, что на самом деле уравнения гидродинамики несжимаемой среды описывают бесконечный набор сохраняющихся величин, из которых лишь несколько могут точно сохраняться на разностной сетке.

Полезно также убедиться в сохранении энергии. В двумерной задаче мы рассмотрим криволинейный интеграл от функции  $\psi \mathbf{v}$  по некоторому контуру  $C$ , ограничивающему область  $S$  плоскости  $(x, y)$ , и применим теорему Стокса:

$$\oint_C \psi \mathbf{v} \, d\mathbf{l} = \iint_S (\text{rot } \psi \mathbf{v}) \, d\mathbf{S}. \quad (9.53)$$

Так как  $\psi$  и  $\xi$  — псевдоскаляры, или, другими словами, эти величины описываются одномерными векторами, перпендикулярными плоскости  $S$ , то

$$\begin{aligned} \oint_C \psi \mathbf{v} \, d\mathbf{l} &= \iint_S \psi \text{rot } \mathbf{v} \, d\mathbf{S} + \iint_T (\mathbf{v} \text{rot } \psi) \, d\mathbf{S} = \\ &= \iint_S \psi \xi \, dS + \iint_S \mathbf{v} \mathbf{v} \, dS. \end{aligned} \quad (9.54)$$

Таким образом, если скорость  $v$  равна нулю на контуре  $C$ , то полная энергия  $E$  несжимаемой среды принимает вид

$$E = \frac{1}{2} \rho_0 \iint_S \mathbf{v} \mathbf{v} \, dS = -\frac{1}{2} \rho_0 \iint_S \psi \xi \, dS. \quad (9.55)$$

Поэтому при разработке соответствующих конечных численных моделей несжимаемого течения на первый взгляд следует попытаться обеспечить как можно более точное сохранение завихренности, ее степеней и кинетической энергии  $E$ . Однако, как это ясно из содержания настоящего параграфа, более важно то, что двумерные уравнения для несжимаемой среды принимают гамильтонову форму, причем завихренность играет роль плотности, а функция тока — роль потенциала.

## 2. Модель «частиц в ячейке» для несжимаемой среды

Согласно предыдущему параграфу, существует тесная аналогия между уравнением переноса для завихренности и уравнением Пуассона для функции тока в несжимаемой среде, с одной стороны, и уравнениями для функции распределения и гравитационного или электростатического потенциала в фазовой среде, описываемой уравнением Власова (гл. 8), с другой стороны. Как и в случае уравнения Власова, уравнения двумерной несжимаемой среды компактно записываются в гамильтоновой форме [70]:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + [\xi, \psi] = 0; \quad (9.56)$$

$$\nabla^2 \psi = -\xi. \quad (9.57)$$

Поэтому вполне допустимо представление о двумерной несжимаемой среде как о системе «вихревых частиц». При этом фиксированные элементы завихренности заменяются частицами, и тогда плотность таких частиц в пространстве  $(x, y)$  определяет распределение завихренности. Аналогично функция тока, которая соответствует потенциалу и гамильтониану (кинетическая энергия отсутствует) системы, определяется из уравнения Пуассона. Следовательно, мы будем моделировать двумерную несжимаемую среду бесстолкновительной моделью «частиц в ячейке» в полной аналогии с электростатической или гравитационной системой в двумерном фазовом пространстве [71].

Возьмем в двумерном конфигурационном пространстве  $(x, y)$  равномерную эйлерову разностную сетку размером  $(I \times J)$ . На сетке распределяется достаточно большое число частиц-вихрей, и каждой частице  $\mu$  приписываются значения канонических координат  $(x_\mu, y_\mu)$ . Говоря «достаточно большое число частиц», мы подразумеваем, что среднее количество частиц в ячейке велико, так что флуктуации в системе малы, и по аналогии с системой, описываемой уравнением Власова, движение частиц «бесстолкновительно» (гл. 6). Уравнения

характеристик для задачи (9.56) совпадают с «уравнениями движения» каждой частицы:

$$\begin{aligned}\frac{dx_\mu}{dt} &= \frac{\partial \psi}{\partial y_\mu}, \\ \frac{dy_\mu}{dt} &= -\frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}.\end{aligned}\quad (9.58)$$

В простейшем случае каждой частице соответствует постоянное значение завихренности  $\xi_0$ , а поскольку вдоль характеристик или траекторий частиц завихренность сохраняется [уравнение (9.56)], то отсюда немедленно вытекает, что сохранение частиц влечет сохранение завихренности и всех ее степеней (§ 3, п. 1). Кроме того, можно представить себе модель двух сортов частиц, в которой используются положительные и отрицательные вихри. Завихренность в среде в любой момент времени легко определяется по плотности вихревых частиц, и соответственно функция тока определяется из уравнения Пуассона.

Для решения уравнений используется разностная схема с перешагиванием, и координаты всех частиц  $(x_\mu, y_\mu)$  на двух временных слоях, например  $t^{n-1}$  и  $t^n$ , хранятся в машинной памяти.

Если для всех  $\mu$ ,  $1 \leq \mu \leq N$ , ячейка  $(i, j)$  определяется как

$$i = \text{Int}\left(\frac{x_\mu^n}{\Delta}\right), \quad j = \text{Int}\left(\frac{y_\mu^n}{\Delta}\right), \quad (9.59)$$

то в соответствии с уравнениями движения (9.58) координаты частиц на  $n+1$  шаге по времени вычисляются по формулам

$$\begin{aligned}x_\mu^{n+1} &= x_\mu^{n-1} + \frac{\Delta t}{2\Delta} (\psi_{i, j+1}^n - \psi_{i, j-1}^n), \\ y_\mu^{n+1} &= y_\mu^{n-1} - \frac{\Delta t}{2\Delta} (\psi_{i+1, j}^n - \psi_{i-1, j}^n),\end{aligned}\quad (9.60)$$

где  $\Delta t$  — шаг по времени,  $\Delta$  — шаг по пространству и функция  $\text{Int}(z)$  означает целую часть вещественного числа  $z$ .

Частицы в каждой ячейке  $(i, j)$  суммируются для определения завихренности среды,

$$\xi_{ij}^{n+1} = \xi_0 \sum_{\mu=1}^N \delta\left(i - \text{Int}\left(\frac{x_{\mu}^{n+1}}{\Delta}\right)\right) \delta\left(j - \text{Int}\left(\frac{y_{\mu}^{n+1}}{\Delta}\right)\right), \quad (9.61)$$

где

$$\delta(l - m) = \begin{cases} 1, & \text{если } l = m, \\ 0, & \text{если } l \neq m. \end{cases}$$

Можно использовать более сложный метод суммирования «с весами площадей» (гл. 6). В завершение шага по времени вычисляется функция тока  $\psi_{i,j}^{n+1}$  из разностного уравнения Пуассона (гл. 4):

$$\psi_{i+1,j}^{n+1} + \psi_{i-1,j}^{n+1} + \psi_{i,j+1}^{n+1} + \psi_{i,j-1}^{n+1} - 4\psi_{i,j}^{n+1} = -\Delta^2 \xi_{i,j}^{n+1}. \quad (9.62)$$

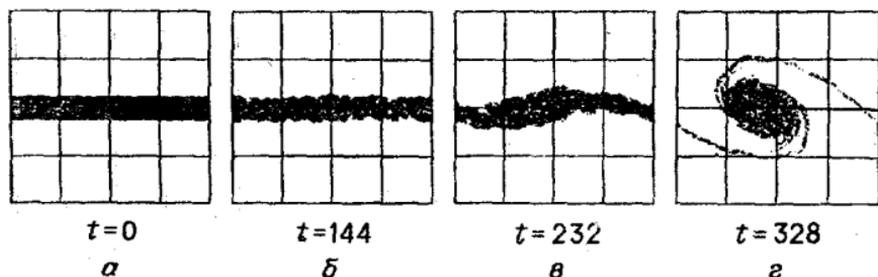
Следует отметить, что в этом примере в отличие от модели фазового пространства для электростатической или гравитационной модели (гл. 6) оба нестационарных уравнения движения каждой частицы зависят от градиента  $\psi$  и, следовательно, зависят от  $(x_{\mu}, y_{\mu})$ . Поэтому обе координаты частиц нужно хранить в машинной памяти на двух временных слоях, а использование схемы «с перешагиванием» ведет в этом примере к появлению нефизических численных мод. Для того чтобы избежать рассогласования двух соседних временных слоев (см. гл. 2, § 6, п. 2), нужно через определенное число (обычно 100) шагов по времени пересчитывать или согласовывать переменные на двух временных слоях.

### 3. Некоторые важнейшие результаты для несжимаемого течения

Установлено, что во многих интересных природных явлениях несжимаемое ламинарное течение неустойчиво, что приводит к его турбулизации. Хотя для многих случаев линейная стадия (малые возмущения) неустойчивостей уже давно хорошо изучена, конечная нелинейная стадия — а именно она представляет особый интерес — была изучена с помощью описанных в настоящей

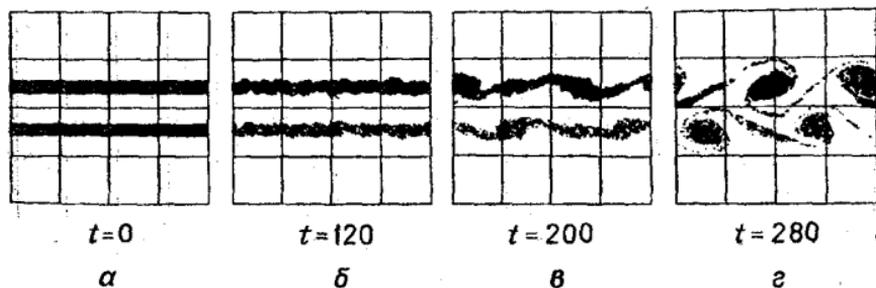
главе численных моделей лишь в последнее время. Мы приведем некоторые результаты моделирования таких явлений с помощью систем вихревых частиц [71].

Основной интерес представляет неустойчивость Кельвина — Гельмгольца, которая возникает, если в потоке



Фиг. 9.6. Неустойчивость Кельвина — Гельмгольца (из работы [71]). *a* — слой вихревых частиц описывает относительное проскальзывание слоев среды; *г* — на нелинейной стадии образуются большие вихри, которые приводят к перемешиванию двух движущихся навстречу сред.

невязкой несжимаемой текучей среды существует относительное скольжение слоев. Такое скольжение эквивалентно слою с завихренностью (фиг. 9.6, *a*), который определяет начальные условия для модели частиц



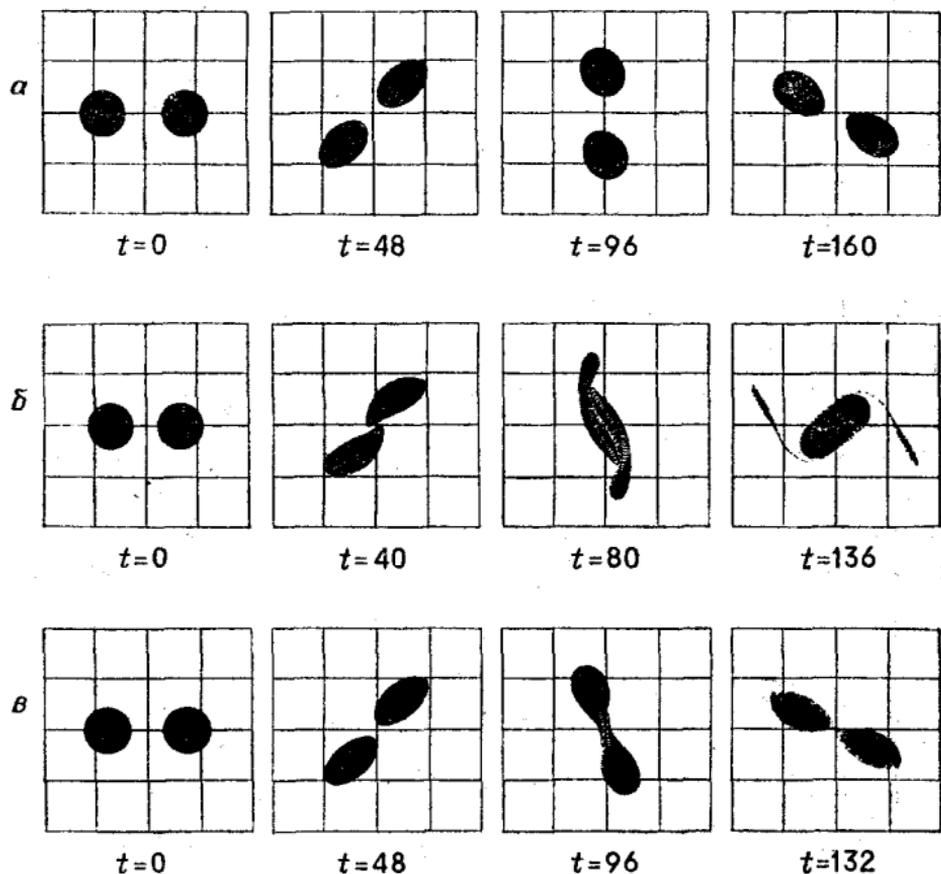
Фиг. 9.7. Вихревая дорожка Кармана (из работы [71]).

*a* — два слоя вихревых частиц противоположного знака ограничивают теневую область спокойной среды; *г* — на нелинейной стадии за препятствием образуются вихри противоположного знака.

в ячейке. На фиг. 9.6, *б* показана линейная стадия неустойчивости Кельвина — Гельмгольца, но она быстро переходит в нелинейную стадию, на которой образуется ряд больших вихрей на границе проскальзывающих потоков (фиг. 9.6, *в* и 9.6, *г*). Дальнейшее развитие образовавшихся нелинейных вихрей ведет к перемешиванию

и выравниванию потока, так что с макроскопической точки зрения турбулентность приводит к тому же результату, что и вязкостная диффузия.

Неустойчивость того же типа, что и неустойчивость Кельвина — Гельмгольца, развивается в задаче об об-



Фиг. 9.8. Взаимодействие двух водоворотов, или вихрей одного знака (из работы [71]).

а — вращение достаточно удаленных вихрей относительно друг друга; б — слияние достаточно близких вихрей; в — критическое расстояние.

текании, т. е. всякий раз, когда в потоке движущейся среды имеется препятствие, например телеграфные провода в потоке ветра. Позади препятствия среда стационарна, в то время как с обеих сторон существуют потоки. Такая начальная конфигурация задается двумя слоями вихрей противоположного знака (фиг. 9.7, а). На линейной стадии (фиг. 9.7, б) в каждом слое

независимо развивается неустойчивость Кельвина — Гельмгольца, а на нелинейной стадии возникает взаимодействие между слоями (фиг. 9.7, в). Наконец, на нелинейной квазистационарной стадии возникает красивая структура, которая носит название вихревой дорожки Кармана (фиг. 9.7, г) и в которой позади препятствия образуется ряд больших вихрей. Эти вихри служат источником «поющего» шума ветра в проводах, такой же эффект можно наблюдать в дыме, поднимающемся из трубы.

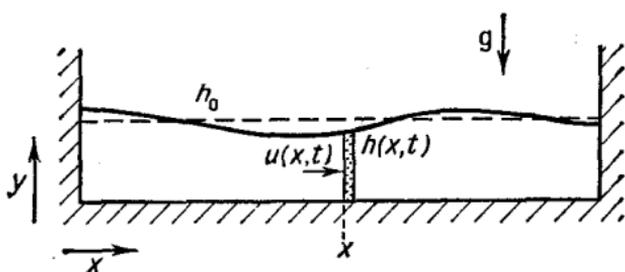
На фиг. 9.8 показано взаимодействие двух больших вихрей. Вихри одного знака притягиваются и искажают друг друга, а если они достаточно близки, то они сливаются и образуют один большой вихрь.

#### **§ 4. Метод маркеров на сетке для описания поверхностей и тяжелых сред: всплески, водопады, опрокидывание волн**

В предыдущих параграфах сформулированы уравнения гидродинамики несжимаемых сред и рассмотрены основные методы их решения. Помимо того что эти методы имеют теоретическое значение для описания идеального несжимаемого течения, они применимы для изучения широкого круга прикладных задач и интересных природных явлений, происходящих на земной поверхности, которые ввиду своей нелинейности и сложности многие годы не поддавались аналитическому изучению. С одной стороны, изучение всплеска от падения капли жидкости, опрокидывания волны, падения водопада на основании решения задач с начальными условиями уже само по себе доставляет подлинное удовлетворение, но, может быть, более важно то, что эти результаты показывают круг и сложность задач, к которым применимы численные методы.

При изучении реальных явлений на земной поверхности с помощью численных методов для несжимаемых сред (§ 2, 3) необходимо учитывать влияние свободных поверхностей, ограничивающих среду, и земное тяготение. Даже в простейшем случае, например воды в резервуаре, это ставит трудные задачи, так как прихо-

дится решать уравнение Пуассона в неудобной области с подвижной границей, а в более сложных задачах нужно описывать несжимаемую среду переменной плотности. В частности, можно выделить две задачи: как на эйлеровой сетке определить поверхность движущейся среды и каковы физические эффекты действия земного тяготения?



Фиг. 9.9. Волны на поверхности тяжелой жидкости в мелком резервуаре.

Каждый вертикальный столб жидкости перемещается как целое и характеризуется высотой  $h(x, t)$  и горизонтальной скоростью  $u(x, t)$ .

На земной поверхности влияние притяжения легко учесть в уравнениях гидродинамики несжимаемой среды (9.18) и (9.19) в виде объемной силы:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{g}, \quad (9.63)$$

$$\nabla \mathbf{v} = 0, \quad (9.64)$$

где  $\mathbf{g}$  — постоянное ускорение силы тяжести на земной поверхности, а эффекты вязкости не учитываются. Так как  $\mathbf{g}$  — это постоянное, заранее заданное (т. е. несогласованное) ускорение, его легко ввести в любую разностную схему, но оно обуславливает волны, приливы и сопутствующие явления. Свойства тяжелой жидкости со свободной поверхностью можно понять, рассматривая мелкую воду в канале (фиг. 9.9). Мы называем воду мелкой, если ее характерная глубина  $h_0$  значительно меньше, чем длина волн на поверхности. Будем также предполагать, что дно канала ( $y = 0$ ) расположено в горизонтальной плоскости.

Естественно предположить, что в такой мелкой жидкости вертикальная скорость  $v$  мала, и поэтому

уравнение Навье — Стокса (9.63) для вертикальной компоненты скорости можно заменить предположением о гидростатическом равновесии по вертикали:

$$\frac{\partial p}{\partial y} = -\rho g. \quad (9.65)$$

Интегрируя это уравнение, получаем выражение для давления среды:

$$p = -\int_h^y \rho g \, dy = -\rho g (y - h), \quad (9.66)$$

где  $h(x, t)$  — высота каждой точки поверхности жидкости над дном. Отсюда немедленно получаем уравнение для горизонтальной скорости:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = -g \frac{\partial h}{\partial x}. \quad (9.67)$$

Здесь тоже отброшена инерция вертикального движения. Уравнение для высоты поверхности получаем из условия несжимаемости (9.64):

$$v(x, y, t) = -\int_0^y \frac{\partial u}{\partial x} \, dy = -y \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (9.68)$$

где в соответствии с уравнением (9.67) предполагается, что каждый столб воды движется как целое таким образом, что горизонтальная скорость  $u(x, t)$  не зависит от  $y$ . На поверхности жидкости  $y = h$

$$v = \frac{dh}{dt},$$

поэтому

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} = -h \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (9.69)$$

или, в консервативной форме,

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (hu) = 0.$$

Уравнения мелкой воды (9.67) и (9.69) определяют высоту поверхности  $h(x, t)$  и горизонтальную скорость

$u(x, t)$ . Очевидно, что равновесным решением служит  $u = 0$  и  $h = h_0$  — неподвижная жидкость с плоской поверхностью. Возмущения поверхности с малой амплитудой  $h = h_0 + h'$ ,  $u = u'$  можно приближенно описать системой двух линейных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial u'}{\partial t} + g \frac{\partial h'}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial h'}{\partial t} + h_0 \frac{\partial u'}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \quad (9.70)$$

где отброшены члены второго порядка малости. Переходя к одному уравнению второго порядка, получаем

$$\frac{\partial^2 h'}{\partial t^2} - h_0 g \frac{\partial^2 h'}{\partial x^2} = 0. \quad (9.71)$$

Таким образом, возмущения малой амплитуды распространяются со скоростью  $v_s = \sqrt{gh_0}$ . При возмущениях большой амплитуды уравнения (9.67) и (9.69) нелинейны и содержат как волновые явления, так и перенос.

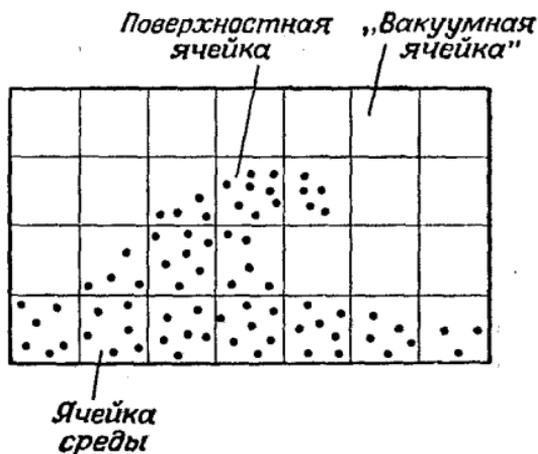
Уравнения мелкой воды описывают основные волновые процессы на поверхности тяжелой жидкости, но хотелось бы изучить такие эффекты в случае более общего двумерного или трехмерного течения глубокой жидкости. Для этого нужно решать полные двумерные уравнения несжимаемой среды с учетом объемной силы тяжести (9.63) и (9.64), что можно сделать с помощью методов, описанных в § 2, но учет гравитационной силы вводит дополнительное ограничение на шаг по времени, связанное с появлением поверхностных волн:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{\sqrt{gh}}, \quad (9.72)$$

где  $h$  — наибольшая глубина жидкости. Для описания тяжелой жидкости с движущейся поверхностью наиболее подходит метод [68] (§ 2, п. 2), в котором скорость определяется из уравнения Навье — Стокса, а давление подчиняется уравнению Пуассона, и который более приспособлен к описанию сложных граничных условий, чем метод, использующий завихренность (§ 2, п. 1).

Таким образом, мы подошли к задаче определения положения движущейся поверхности плотной среды на

эйлеровой сетке. В методе маркеров на сетке [68] по эйлеровой сетке распределяются частицы (маркеры), причем не только на поверхности, но и по всему объему плотной среды. Маркеры движутся со скоростью, вычисляемой интерполированием между значениями локальной скорости среды в соседних ячейках эйлеровой сетки, которые предварительно были найдены разностным решением (§ 2, п. 2). В результате конфигурация



Фиг. 9.10. Метод маркеров на сетке.  
Маркеры определяют ячейки, занятые жидкостью.

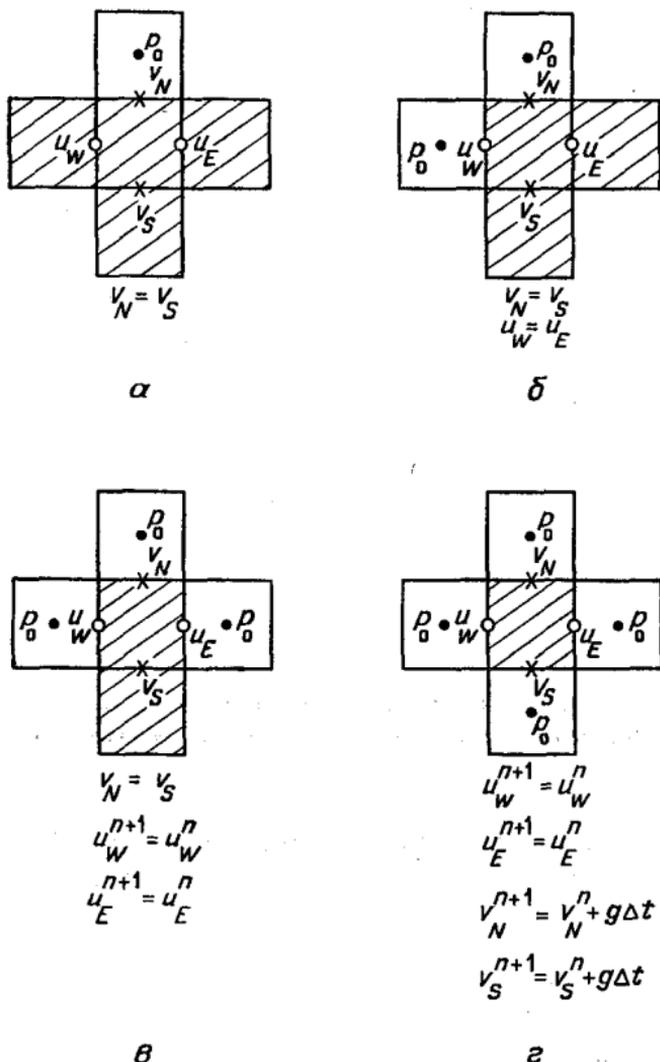
тяжелой среды определяется распределением маркеров на эйлеровой сетке, которая состоит из ячеек трех типов: «вакуумные» ячейки, в которых нет маркеров, поверхностные ячейки, содержащие один или более маркеров, но граничащие с вакуумными ячейками, и остальные ячейки, содержащие маркеры (фиг. 9.10).

Свободная поверхность жидкости в этом методе определяется маркерами, и вакуумные ячейки в расчете не используются. Вдоль поверхностных ячеек, которые могут быть четырех типов (фиг. 9.11), задаются граничные условия для компонент скорости, а граничным условием для давления в уравнении Пуассона служит постоянное значение давления в вакуумных ячейках. На жестких стенках обычно можно использовать простые граничные условия. Если  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, на-

правленный по нормали к стенке, то условие для давления имеет вид

$$n \nabla \bar{p} = gn.$$

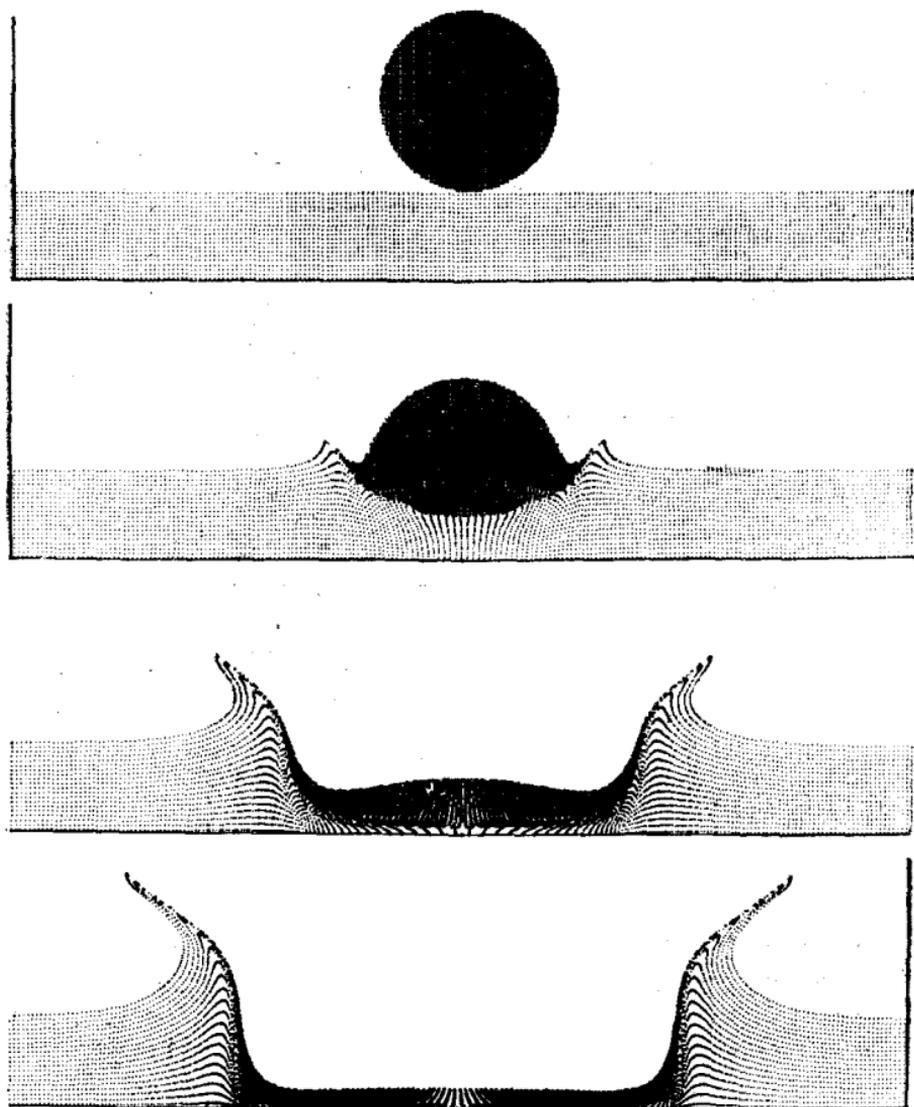
Что касается компонент скорости, то нормальная со-



Фиг. 9.11. Четыре типа поверхностных ячеек, расположенных на границе между движущейся жидкостью и атмосферой.

Для каждого случая показаны соответствующие граничные условия.

ставляющая равна нулю, а тангенциальная скорость  $v_{||}$  удовлетворяет либо условию свободного скольжения  $dv_{||}/dn = 0$ , либо условию прилипания  $v_{||} = 0$ .



Фиг. 9.12. Всплеск от падения капли жидкости в мелкий бассейн. Моделирование выполнено методом маркеров на сетке в двумерном случае (из работы [73]). Эту фигуру можно сравнить с фотографией всплеска от капли (фиг. 9.13) и с всплеском в сжимаемой жидкости, рассчитанным с помощью метода частиц в ячейке (фиг. 6.17).

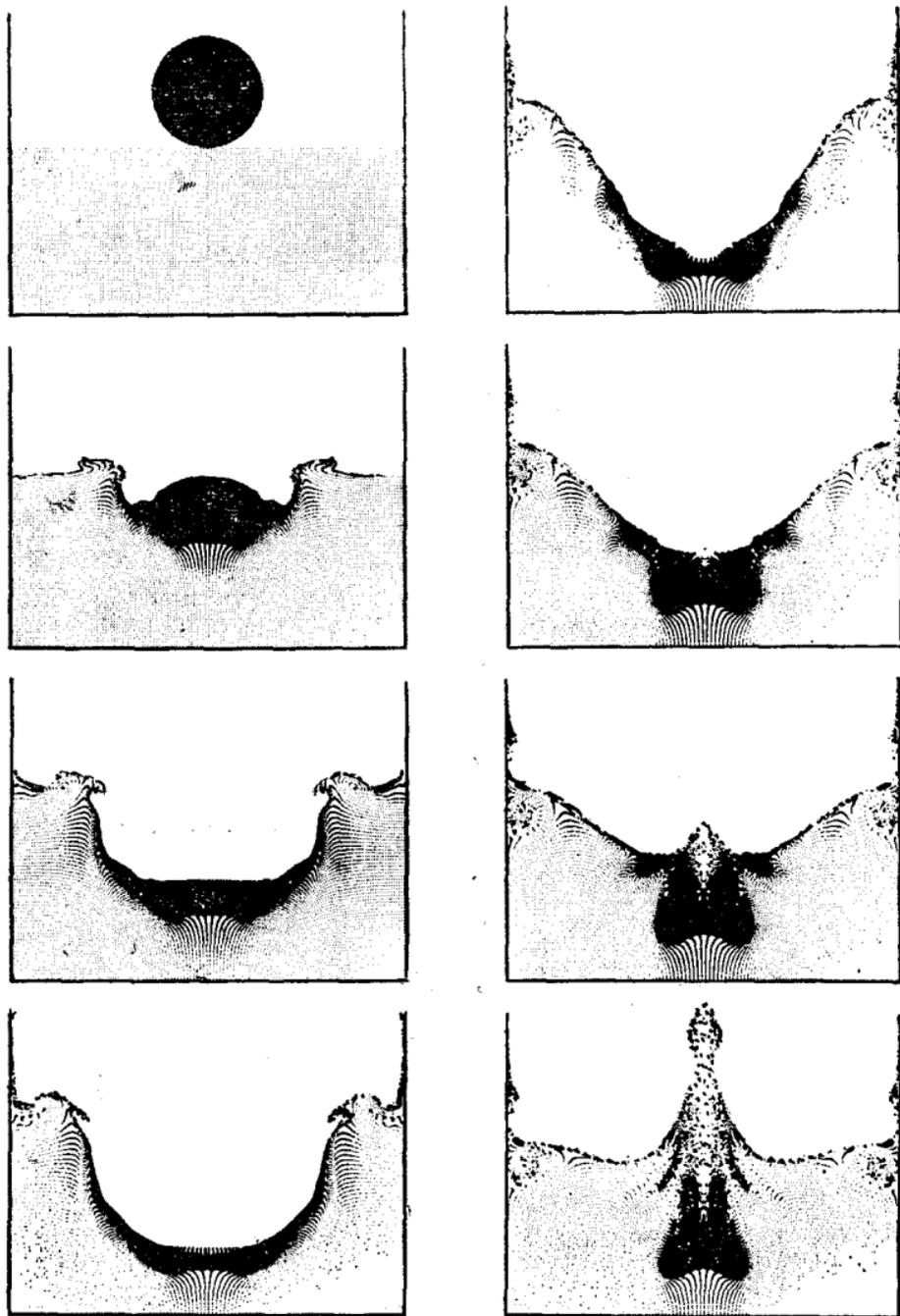
Следует отметить, что «частицы» в методе маркеров на сетке никак не используются при определении характеристик среды, и последние вычисляются с помощью эйлерова разностного метода (§ 2, п. 2). Основная цель введения маркеров состоит в том, что они позволяют



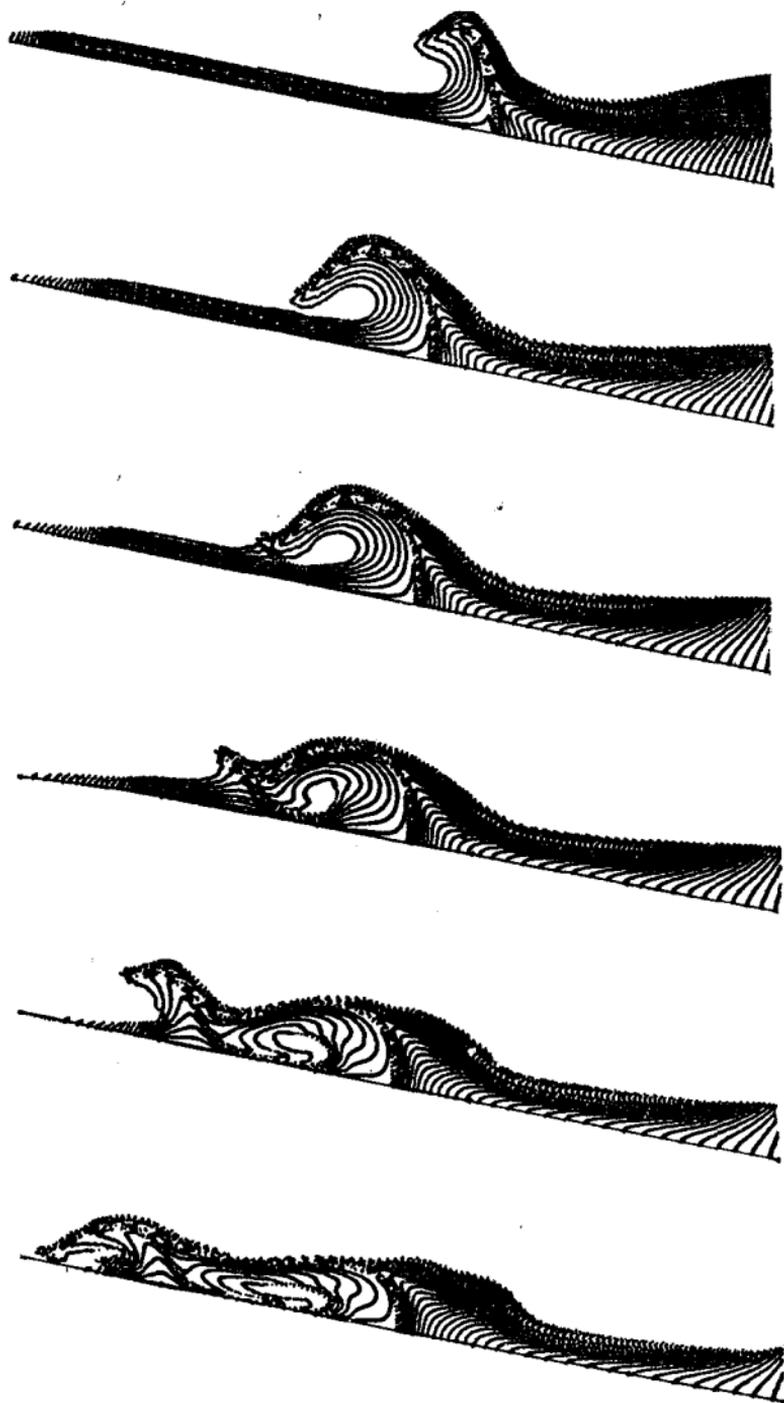
Фиг. 9.13. Фотография всплеска от капли жидкости (из работы [47])  
В трехмерном случае край короны неустойчив из-за неустойчивости Рэлея —  
Тейлора.

определить свободную поверхность движущейся несжимаемой среды, так как на подвижной границе необходимо использовать соответствующие граничные условия. Маркеры распределены также по всему объему среды, для того чтобы, изобразив их координаты графически, более наглядно показать движение среды.

С помощью моделирования методом маркеров на сетке можно изучать широкий круг физических явлений. Несколько интересных примеров приведено на фиг. 9.12—9.16 [68, 47]. На фиг. 9.12 показан всплеск от падения капли жидкости в мелкий бассейн, видна характерная расширяющаяся корона. Результат можно сравнить с фотографией этого явления (фиг. 9.13) [72] и

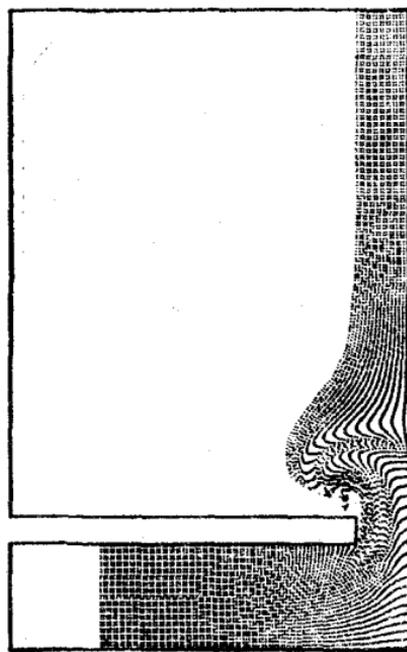
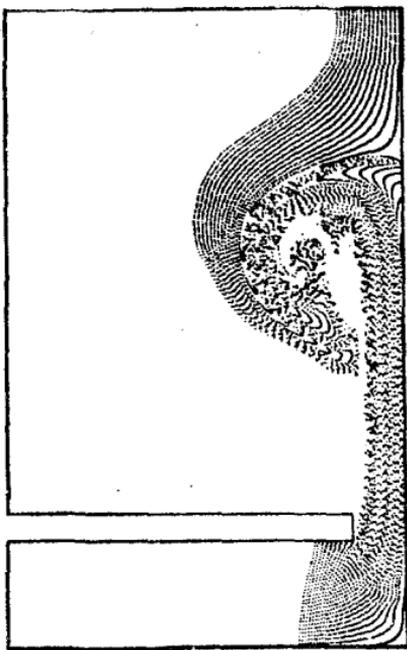
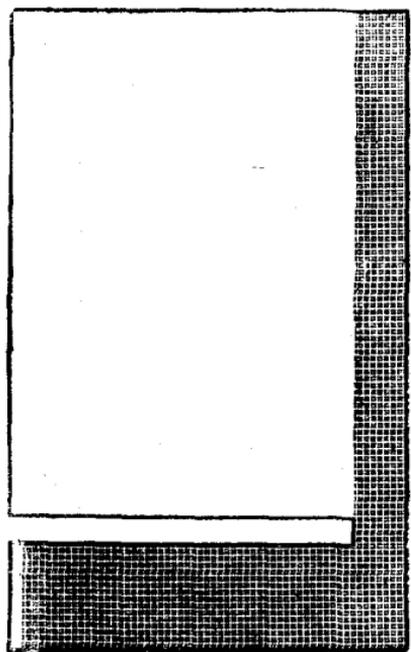
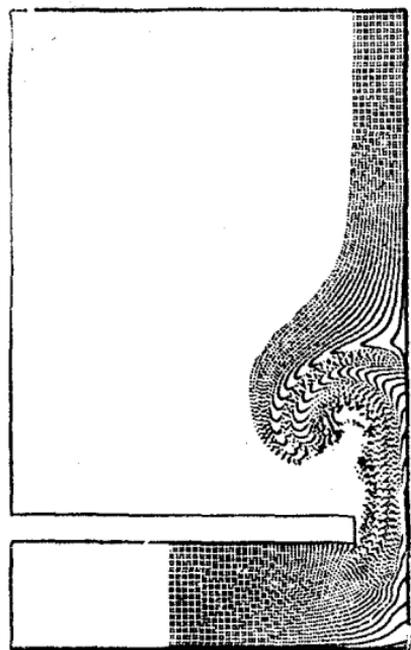


Фиг. 9.14. Всплеск от падения капли жидкости в глубокий бассейн, рассчитанный методом маркеров на сетке (из работы [73]).



Фиг. 9.15. Прибой на морском берегу, рассчитанный методом маркеров на сетке (из работы [68]).

Изображенные в виде точек меченые частицы (маркеры) показывают области ламинарного течения и области турбулентности.



Фиг. 9.16. Метод маркеров на сетке, использованный при расчете течения воды из ворот шлюза (из работы [74]).

с моделированием всплеска в глубоком бассейне с водой (фиг. 9.14), где явление имеет совершенно иные характерные особенности. Сходство фиг. 9.13 и фиг. 9.14 чрезвычайно велико, за исключением того, что двумерная модель не описывает небольшой трехмерный эффект образования маленьких капелек, возникающих в эксперименте вдоль края короны. На фиг. 9.15 приведена модель математически очень сложного явления — приборя. Прибой аналогичен опрокидыванию ударной волны. Ясно видно образование буруна, причем маркеры одинаково хорошо передают и турбулентное движение в гребне волны, и ламинарный поток в ее основании. На фиг. 9.16 показана модель, описывающая открытие ворот шлюза.

### § 5. Разностное решение уравнений гидродинамики сжимаемых сред

Если скорость течения среды нельзя считать малой по сравнению со скоростью звука или с тепловой скоростью частиц среды, то предположение о несжимаемости становится несостоятельным и необходимо полностью учитывать все эффекты сжатия среды. Уравнения гидродинамики сжимаемых сред (§ 1) применимы для изучения произвольных сред и описывают широкий круг физических процессов и явлений. К основным процессам относятся перенос и звуковые волны, описываемые гиперболическими уравнениями, а если существуют возмущения большой амплитуды, то в среде могут возникнуть разрывы и ударные волны. Как и в несжимаемых средах, относительное движение потоков ведет к неустойчивостям, и неламинарные потоки или турбулентность могут оказаться существенными. В многих средах важны также процессы теплопроводности и вязкости, и их тоже следует включить в уравнения гидродинамики сжимаемых сред.

Многообразие физических явлений, описываемых уравнениями гидродинамики сжимаемых сред, отражается в сложности этих уравнений, и именно по причине многообразия описываемых явлений и широте применений разработано очень много методов решения

этих уравнений. В вычислительной физике не существует единого подхода, который был бы пригоден для всех задач гидродинамики сжимаемых сред. Такое положение вещей будет понятно, если заметить, что уравнения гидродинамики применимы к столь различным задачам, как атмосферный поток вокруг космического корабля, движение атмосферы и одномерная ударная волна. Каждая задача или класс задач может потребовать специальной методики расчета или особой постановки граничных условий.

Выше уже был рассмотрен один частный подход к разностному решению уравнений гидродинамики, а именно столкновительный метод «частиц в ячейке», в котором «частицы» несут массу, импульс и энергию среды (см. гл. 6, § 5). Однако ошибки в этом методе велики, и его возможности ограничены. Фундаментальной основой для решения уравнений гидродинамики сжимаемых сред служат разностные методы (гл. 3), но, учитывая многообразие разностных методов, следует отметить, что в каждой конкретной задаче необходимо специальное рассмотрение при выборе способа ее решения. Разностные методы могут использовать эйлеровы или лагранжевы сетки, консервативную запись, явное или неявное интегрирование по времени и различные способы разностной аппроксимации диффузионных членов.

В лагранжевой форме уравнения гидродинамики сжимаемых сред (§ 1, п. 1) принимают особенно простой вид, и в случае одного пространственного измерения нетрудно построить лагранжеву сетку, т. е. сетку, которая движется вместе со средой и на которой решаются принявшие простой вид разностные уравнения. Лагранжев подход позволяет упростить трудную задачу переноса и является общим методом решения одномерных задач. Однако в общем случае двух или трех пространственных измерений приходится описывать перемещения сдвига, а также сжатие среды. Для такого описания лагранжев метод редко бывает пригоден, так как в этом случае трудно построить лагранжеву сетку, и она быстро становится неприемлемо деформированной.

Наиболее общий подход к решению многомерных задач для сжимаемых сред основан на явных эйлеровых разностных методах (гл. 3, § 7 и 8). Однако точность моделирования при этом уменьшается из-за ухудшения описания процессов переноса, поэтому обычно используются методы второго порядка точности, такие, как схема Лакса — Вендроффа, схема с перешагиванием или схема почти второго порядка точности (гл. 3, § 7). Эти схемы можно формулировать так, чтобы они были консервативными или неконсервативными относительно соответствующих характеристик среды (гл. 3, § 6), причем с линейной точки зрения консервативные и неконсервативные разностные схемы эквивалентны. С одной стороны, консервативная аппроксимация обычно предпочтительнее, так как она обеспечивает строгое выполнение основных интегральных законов физики — законов сохранения вещества, импульса и энергии. Установлено также, что консервативные уравнения приводят к уменьшению фиктивных нелинейных численных эффектов. С другой стороны, в таких специальных случаях, как сверхзвуковые потоки, использование неконсервативных уравнений для тепловой энергии может оказаться полезным, так как это позволяет избежать ошибок, связанных с большой величиной кинетической энергии.

Если важны диффузионные процессы, обусловленные теплопроводностью и вязкостью (§ 1), то в большинстве случаев их можно ввести в рассмотрение с помощью методов гл. 3 для параболических уравнений. Учет этих процессов следует проводить совместно с аппроксимацией переноса и сжатия. В некоторых приложениях гидродинамики сжимаемых сред влияние вязкости и теплопроводности может быть очень велико, и во избежание слишком жестких ограничений на величину шага по времени при расчете течений среды приходится использовать неявные методы, например схему Кранка — Никольсона (см. гл. 3, § 9). Это в свою очередь ставит более трудные алгебраические задачи, так как на каждом шаге по времени нужно решать матричное уравнение (гл. 4). Отметим, что неявные методы следует применять и для рассмотрения эффектов,

связанных с давлением среды, в тех случаях дозвуковых потоков, когда скорость потока мала по сравнению со скоростью звука, но достаточно велика для того, чтобы среду нельзя было считать несжимаемой.

Мы рассмотрим общую гидродинамику сжимаемой среды сначала в одномерном, а затем в многомерном случаях. Согласно сказанному выше, в одномерной задаче мы выделим лагранжеву аппроксимацию в качестве основного подхода. Соответственно в многомерном случае мы рассмотрим явный эйлеров метод решения, который дает наиболее полное решение уравнения гидродинамики сжимаемых сред.

### 1. Лагранжев метод для одномерной задачи

Так как во все уравнения гидродинамики входит переносный член [§ 1, уравнения (9.6) — (9.8)], то их лагранжева форма имеет особенно простой вид:

$$\text{плотность:} \quad \frac{d\rho}{dt} = -\rho \frac{dv}{dx}, \quad (9.73)$$

$$\text{импульс:} \quad \rho \frac{dv}{dt} = -\frac{dp}{dx}, \quad (9.74)$$

$$\text{давление:} \quad \frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho^{\gamma}} \right) = 0. \quad (9.75)$$

Здесь  $x$  — декартова пространственная координата, а  $d/dt = d/dt + v(d/dx)$  — лагранжева производная по времени. В уравнении (9.75) содержится предположение о конкретном уравнении состояния, а именно об уравнении состояния идеального газа, т. е. законе адиабаты, хотя описанный ниже лагранжев подход пригоден и для более сложных уравнений состояния, а также для учета диффузионных членов.

При использовании лагранжевых координат процесс переноса описывается точно, а разностный алгоритм очень прост. Лагранжева сетка строится таким образом, чтобы каждый узел  $j$ , представляющий собой границу между ячейками, двигался с локальной скоростью среды (фиг. 9.17):

$$x_j(t') = x_j(t) + \int_t^{t'} v_j(s) ds. \quad (9.76)$$

На практике наиболее удобно пользоваться двойной сеткой. Границы ячеек  $x_j$  определены на сетке, допустим  $1 \leq j \leq J$ , и аналогично скорости  $v_j$  среды, отождествляемой теперь с узлами сетки  $x_j$ , определены на этой сетке  $j$ . Объемные переменные, плотность и давление определены в ячейках, а не в узлах. Согласно такому определению, центры всех ячеек находятся в узлах второй сетки  $i$ ,  $1 < i < I$ . Каждая ячейка  $i$  имеет ширину



Фиг. 9.17. Лагранжева сетка в одномерном случае.

Каждая ячейка  $i$  задана граничными точками  $J$ .

$\Delta_i = x_{j+1} - x_j$ . Закон сохранения вещества принимает вид

$$\frac{d}{dt}(\rho\Delta) = 0, \quad (9.77)$$

т. е. масса вещества, заключенного внутри каждой ячейки, постоянна (так как границы ячеек движутся вместе со средой). Теперь лагранжевы уравнения можно записать очень просто. Каждая точка среды  $x$  движется со скоростью центра масс

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (9.78)$$

и элемент среды имеет плотность  $\rho$  и давление  $p$ , определяемые уравнениями

$$\frac{d}{dt}(\rho\Delta) = 0, \quad \frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho^{\gamma}} \right) = 0. \quad (9.79)$$

При интегрировании по времени со вторым порядком точности все граничные точки ячеек  $x_j$  определены в

моменты  $t^{n-1}$ , а скорости граничных точек определены в полуцелые моменты времени  $v_j^{n-1/2}$ . Шаг по времени начинается вычислением новых значений границ ячеек:

$$x_j^n = x_j^{n-1} + v_j^{n-1/2} \Delta t. \quad (9.80)$$

Затем можно найти плотность и давление в каждой ячейке на сетке  $i$  в момент  $t^n$ :

$$\rho_i^n = \rho_i^{n-1} \frac{x_{j+1}^{n-1} - x_j^{n-1}}{x_{j+1}^n - x_j^n} \quad (9.81)$$

и

$$p_i^n = \left( \frac{\rho_i^n}{\rho_i^{n-1}} \right)^\gamma p_i^{n-1}. \quad (9.82)$$

В свою очередь давление в каждой ячейке позволяет пересчитать значения скорости на границах ячеек,

$$v_i^{n+1/2} = v_i^{n-1/2} - \frac{2\Delta t}{(\rho_i^n + \rho_{i-1}^n)} \frac{(p_i^n - p_{i-1}^n)}{(x_i^n - x_{i-1}^n)}, \quad (9.83)$$

где центр каждой ячейки  $x_i^n$  определен на равном расстоянии от ее границ:

$$x_i^n = \frac{1}{2} (x_i^n + x_{i+1}^n).$$

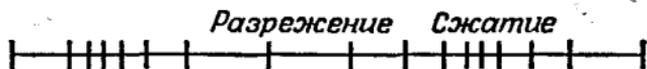
Временной цикл расчета завершен, и его можно повторить для проведения следующего шага по времени.

Следует отметить, что такая аппроксимация имеет второй порядок точности как по пространству, так и по времени. Движущаяся лагранжева сетка сама иллюстрирует гидродинамические явления, например, звуковые волны будут выглядеть на сетке как последовательные сгущения и разрежения границ ячеек (фиг. 9.18). Преимущество такой сетки состоит также в том, что движение ее приводит к повышенной концентрации узлов в областях, представляющих особый интерес, например в ударной волне, в результате чего пространственное разрешение и точность расчета увеличиваются именно в таких областях. Дополнительные члены, воз-

никающие в уравнениях гидродинамики, например диффузионные члены, можно ввести в рассмотрение обычными способами.

## 2. Явные эйлеровы методы для общей многомерной задачи

Наиболее общими и широко используемыми методами решения многомерных задач динамики сжимаемых сред являются явные методы интегрирования на эйлеровой сетке (см. гл. 3, § 7). Поясним характерные



Фиг. 9.18. Звуковые волны на лагранжевой сетке.

особенности такого подхода на примере простейших одномерных уравнений идеального газа. Запишем отдельно все слагаемые в уравнениях для плотности, скорости и давления среды (9.6) — (9.8):

$$\text{плотность:} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -v \frac{\partial \rho}{\partial x} - \rho \frac{\partial v}{\partial x},$$

$$\text{скорость:} \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -v \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (9.84)$$

$$\text{давление:} \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -v \frac{\partial p}{\partial x} - \gamma p \frac{\partial v}{\partial x},$$

где использовано предположение о том, что уравнением состояния служит простое уравнение для идеального газа  $\varepsilon = p/[\rho(\gamma - 1)]$ . Первые слагаемые в правой части каждого уравнения описывают перенос, а вторые слагаемые связаны со сжатием.

Уравнения (9.84) записаны в неконсервативной форме. Если эти уравнения аппроксимировать непосредственно по схеме Лакса (3.80) на эйлеровой сетке с узлами  $1 \leq j \leq J$ , с шагом по пространству  $\Delta$  и с шагом по времени  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ , то мы получим

плотность:

$$\rho_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\rho_{j+1}^n + \rho_{j-1}^n) - v_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (\rho_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n) - \rho_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n);$$

скорость:

$$v_j^{n+1} = \frac{1}{2}(v_{j+1}^n + v_{j-1}^n) - v_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta} \frac{1}{\rho_j^n} (p_{j+1}^n + p_{j-1}^n); \quad (9.85)$$

давление:

$$p_j^{n+1} = \frac{1}{2}(p_{j+1}^n + p_{j-1}^n) - v_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (p_{j+1}^n - p_{j-1}^n) - \gamma \frac{p_j^n \Delta t}{2\Delta} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n).$$

Было показано (гл. 3), что метод Лакса устойчив для линейного уравнения переноса и для линейного волнового уравнения, но уравнения среды (9.85) имеют более сложную природу и, кроме того, они нелинейны. Для того чтобы доказать устойчивость этих нелинейных разностных уравнений, мы, следуя методам гл. 3, *линеаризуем* уравнения (9.85) в предположении, что величины  $\rho_j^n$ ,  $v_j^n$  и  $p_j^n$  в некоторой области постоянны. Очевидно, что такой подход разумен при определении степени роста малой ошибки. Тогда для гармоники Фурье с волновым вектором  $k$  матрица перехода равна

$$G(\Delta t, k) = \begin{pmatrix} \beta - i\alpha v_j^n & -i\alpha p_j^n & 0 \\ 0 & \beta - i\alpha v_j^n & -i\alpha \frac{1}{\rho_j^n} \\ 0 & i\alpha \gamma p_j^n & \beta - i\alpha v_j^n \end{pmatrix}, \quad (9.86)$$

где  $\beta = \cos(k\Delta)$ ,  $\alpha = \frac{\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta)$ .

Собственные значения матрицы перехода равны

$$g_1(\Delta t, k) = \cos(k\Delta) - i \frac{\Delta t}{\Delta} v_j^n \sin(k\Delta);$$

$$g_2(\Delta t, k) = \cos(k\Delta) - i \left\{ v_j^n + \sqrt{\frac{\gamma p_j^n}{\rho_j^n}} \right\} \frac{\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta);$$

$$g_3(\Delta t, k) = \cos(k\Delta) - i \left\{ v_j^n - \sqrt{\frac{\gamma p_j^n}{\rho_j^n}} \right\} \frac{\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta). \quad (9.87)$$

Очевидно, что эти собственные значения соответствуют переносу и доплеровски смещенным звуковым волнам, распространяющимся в направлении переноса и в противоположном направлении. Величина  $g_2$  или  $g_3$  будет наибольшей по модулю в зависимости от знака  $v_j^n$ :

$$|gg^*| = 1 - \sin^2(k\Delta) \left\{ 1 - \left[ |v_j^n| + \sqrt{\frac{\gamma p_j^n}{\rho_j^n}} \right]^2 \frac{(\Delta t)^2}{\Delta^2} \right\}. \quad (9.88)$$

Теперь можно использовать условие устойчивости Неймана (3.47), требующее, чтобы наибольшее собственное значение было меньше единицы. Тогда условие на шаг по времени получим в виде

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v_j^n| + \sqrt{\gamma p_j^n / \rho_j^n}}. \quad (9.89)$$

Это и есть условие Куранта — Фридрихса — Леви для уравнений гидродинамики сжимаемых сред, аппроксимированных по методу Лакса. Сделаем несколько замечаний относительно этого результата и метода, которым он был получен. Две скорости, стоящие в знаменателе, представляют собой скорость переноса и скорость звука, и они складываются вследствие доплеровского эффекта, так как звуковая волна распространяется со скоростью звука в системе отсчета движущейся среды. Их сумма равна наибольшей локальной скорости распространения информации. Так как исходные уравнения нелинейны, эти скорости меняются от одного узла сетки к другому, и соответственно ограничение на шаг по времени носит локальный характер и должно быть выполнено в каждом

узле сетки  $j$ . Условие Куранта — Фридрихса — Леви (9.89) требует, чтобы шаг по времени в любой момент был ограничен наибольшей скоростью, где бы на сетке она ни возникла.

Очевидно, что дифференциальные уравнения для плотности, импульса и удельной энергии сжимаемой среды можно записать множеством способов (гл. 1), и хотя дифференциальные формы уравнений в точности эквивалентны, их разностные аналоги не являются эквивалентными. В гл. 3, § 6, было введено понятие консервативной разностной схемы, которая обладает преимуществом точного сохранения массы, импульса и энергии на разностной сетке, и, что более важно, было установлено, что консервативные разностные схемы имеют полезные численные свойства в отношении нелинейных эффектов [67]. Поэтому в общем случае больше подходят те разностные схемы, которые сохраняют массу, импульс и энергию сжимаемой среды [уравнения (9.1), (9.2), (9.9)]. Уравнениям в неконсервативной форме (9.85) следует предпочесть консервативные разностные уравнения:

*плотность:*

$$\rho_j^{n+1} = \frac{1}{2} (\rho_{j+1}^n + \rho_{j-1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta} (\rho_{j+1}^n v_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n v_{j-1}^n),$$

*импульс:*

$$\begin{aligned} \rho_j^{n+1} v_j^{n+1} = & \frac{1}{2} (\rho_{j+1}^n v_{j+1}^n + \rho_{j-1}^n v_{j-1}^n) - \\ & - \frac{\Delta t}{2\Delta} [\rho_{j+1}^n (v_{j+1}^n)^2 + p_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n (v_{j-1}^n)^2 - p_{j-1}^n], \end{aligned}$$

*энергия:*

$$\begin{aligned} \rho_j^{n+1} \left[ \varepsilon_j^{n+1} + \frac{1}{2} (v_j^{n+1})^2 \right] = \\ = \frac{1}{2} \left\{ \rho_{j+1}^n \left[ \varepsilon_{j+1}^n + \frac{1}{2} (v_{j+1}^n)^2 \right] + \rho_{j-1}^n \left[ \varepsilon_{j-1}^n + \frac{1}{2} (v_{j-1}^n)^2 \right] \right\} - \\ - \frac{\Delta t}{2\Delta} \left\{ \left[ \rho_{j+1}^n \varepsilon_{j+1}^n + p_{j+1}^n + \frac{1}{2} \rho_{j+1}^n (v_{j+1}^n)^2 \right] v_{j+1}^n - \right. \\ \left. - \left[ \rho_{j-1}^n \varepsilon_{j-1}^n + p_{j-1}^n + \frac{1}{2} \rho_{j-1}^n (v_{j-1}^n)^2 \right] v_{j-1}^n \right\}, \quad (9.90) \end{aligned}$$

где для идеального газа  $p_j^n = (\gamma - 1) \rho_j^n \epsilon_j^n$ . Что касается линейных свойств, то эти уравнения ничем не отличаются от неконсервативных разностных уравнений (9.85), и условие устойчивости для них в точности сохраняет свой вид.

Мы рассмотрели разностную эйлерову аппроксимацию уравнений гидродинамики сжимаемых сред на примере метода Лакса. Численную диффузию, которая возникает из-за первого порядка точности этого метода, нужно устранять во многих моделях (см. гл. 3, § 5), поэтому обычно используются методы второго порядка точности (схемы Лакса — Вендроффа, метод с перешагиванием, метод почти второго порядка точности Адамса — Башфорта, гл. 3, § 7). В трехмерном случае в декартовой системе координат  $(x, y, z)$  уравнения гидродинамики сжимаемых сред выражаются в консервативной форме (9.1), (9.2), (9.9):

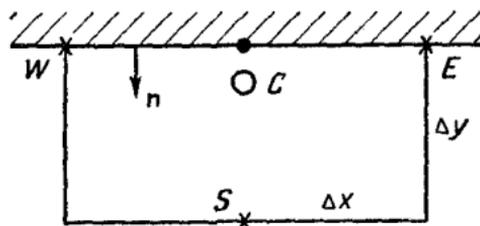
$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{F}_z}{\partial z} = 0, \quad (9.91)$$

где неизвестные функции образуют вектор-столбец  $\mathbf{u} = \{\rho, \rho v_x, \rho v_y, \rho v_z, \frac{1}{2} \rho v^2 + p\}$ . При этом потоки определены соотношениями

$$\mathbf{F}_x = \begin{bmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + p \\ \rho v_y v_x \\ \rho v_z v_x \\ \left(\rho \epsilon + \frac{1}{2} \rho v^2 + p\right) v_x \end{bmatrix}; \quad \mathbf{F}_y = \begin{bmatrix} \rho v_y \\ \rho v_x v_y \\ \rho v_y^2 + p \\ \rho v_z v_y \\ \left(\rho \epsilon + \frac{1}{2} \rho v^2 + p\right) v_y \end{bmatrix};$$

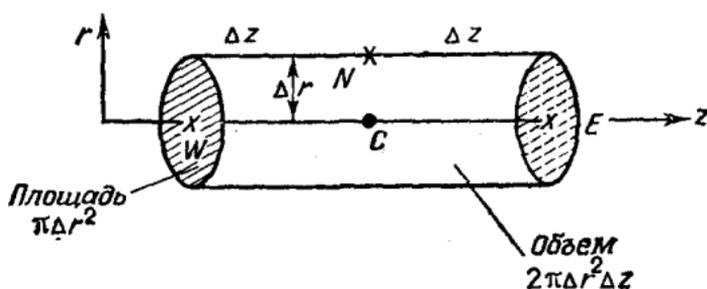
$$\mathbf{F}_z = \begin{bmatrix} \rho v_z \\ \rho v_x v_z \\ \rho v_y v_z \\ \rho v_z^2 + p \\ \left(\rho \epsilon + \frac{1}{2} \rho v^2 + p\right) v_z \end{bmatrix}. \quad (9.92)$$

Теперь можно непосредственно применять подходящий алгоритм (см. гл. 3, § 7 и 8). Для каждого из этих методов в условии Куранта — Фридрихса — Леви следует



$$\frac{du_C}{dt} = \frac{(F_E - F_W)}{2\Delta x} + \frac{2F_S}{\Delta y}$$

а



$$\frac{du_C}{dt} = \frac{(F_E - F_W)}{2\Delta z} - \frac{2F_N}{\Delta r}$$

б

Фиг. 9.19. Рассмотрение граничных точек в явном консервативном методе.

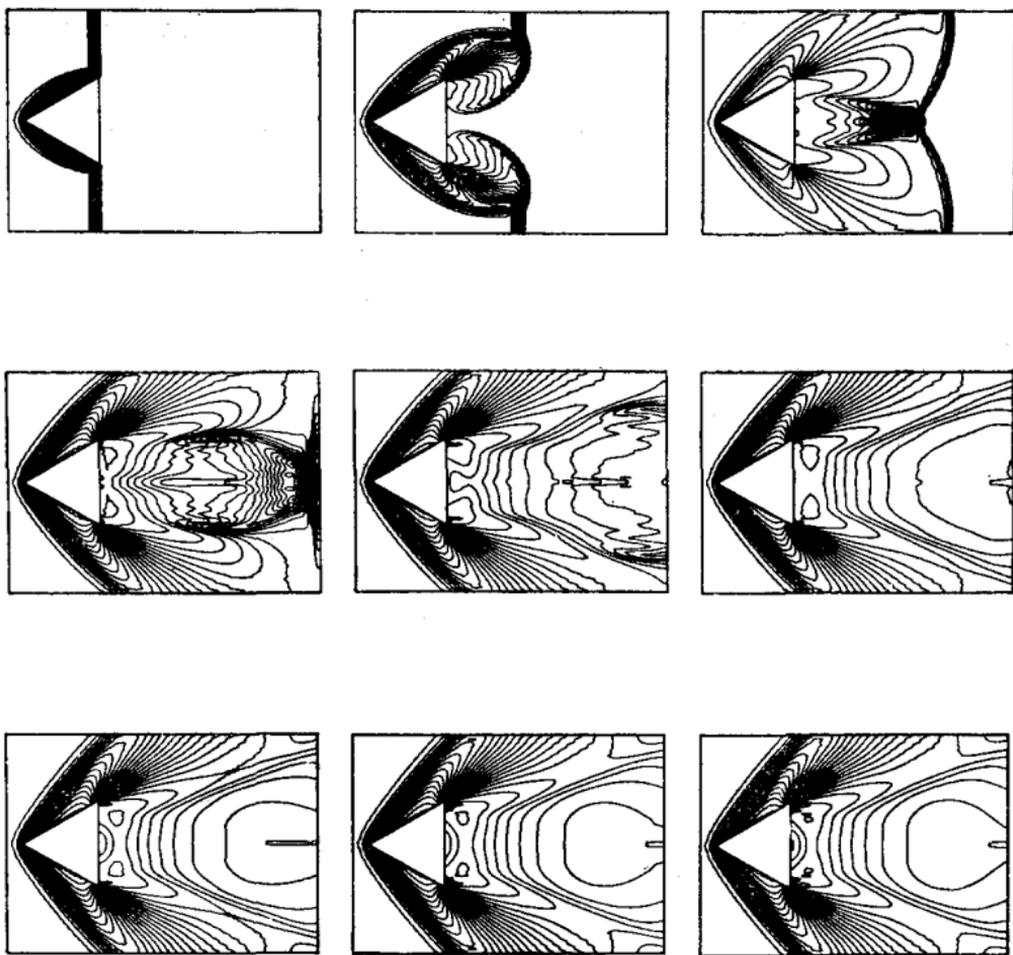
К каждой граничной ячейке применяются проинтегрированные консервативные уравнения: а — на непроницаемой стенке; б — на оси в цилиндрической геометрии.

использовать наибольшую доплеровски смещенную скорость звука:

$$v_c = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} + \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}. \quad (9.93)$$

Наиболее грубые ошибки в этих методах возникают из-за численной дисперсии (см. гл. 3, § 5), которая особенно влияет на коротковолновые моды на разностной

сетке. Однако устранить эту дисперсию можно лишь ценой значительного усложнения алгоритма с помощью схем четвертого порядка точности [10]. Кроме того, погрешности разностной аппроксимации разрывов и ударных волн могут быть причиной ложных эффектов, и часто



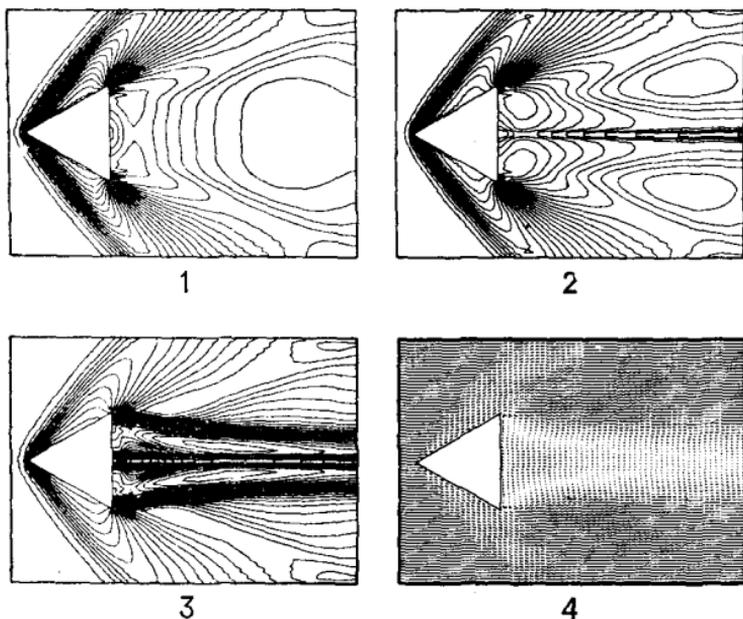
Фиг. 9.20. Диффузия ударной волны и образование стационарного состояния при сверхзвуковом входе конуса с углом раствора  $30^\circ$  в однородный газ.

Показаны линии уровня давления [75].

возникает необходимость в уширении таких эффектов путем введения искусственной диффузии (§ 6).

Наконец, следует отметить, что граничные условия должны быть согласованы с численной схемой, используемой в произвольной внутренней точке. Для

дифференциальной системы граничные условия могут быть вполне определены, и в то же время при выборе их разностной формы возможна некоторая степень произвола. Мы рассмотрим граничные условия для широко распространенных случаев непроницаемой стенки и геометрической особенности на оси в цилиндрической геометрии. На непроницаемой стенке перпендикулярная ей



Фиг. 9.21. Диаграммы стационарных состояний при сверхзвуковом движении конуса с углом  $30^\circ$  при вершине через однородный газ. 1 — давление; 2 — плотность; 3 — удельная внутренняя энергия; 4 — скорость. Решения получены эйлеровым разностным методом.

скорость равна нулю  $v_{\perp} = 0$ , и соответственно перпендикулярный поток у стенки будет равен нулю. В консервативных явных методах во избежание несогласованностей и ложных численных граничных эффектов следует применить консервативные уравнения в интегральной форме к ячейкам, непосредственно примыкающим к границе (фиг. 9.19). Например, в двумерной цилиндрической геометрии граничная ячейка на оси является цилиндром объема  $2\pi(\Delta r)^2\Delta z$ . Для нее потоки вычисляются на торцах цилиндра площадью  $\pi(\Delta r)^2$  и на

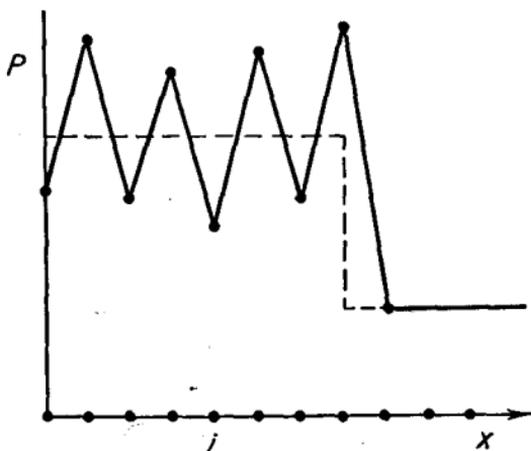
криволинейной поверхности площадью  $2\pi\Delta r\Delta z$ . При таком подходе способ вычисления неизвестных функций на осевой границе в центре каждого цилиндрического элемента вполне определен (фиг. 9.19).

Фигуры 9.20 и 9.21 иллюстрируют применение гидродинамической модели сжимаемой среды к движению ударной волны, распространяющейся за конусом с углом при вершине в  $30^\circ$ , и последующему образованию равновесной стоячей ударной волны. Этот расчет можно рассматривать как моделирование космического корабля, входящего в земную атмосферу. На фиг. 9.20 показаны линии уровня давления, причем хорошо видны сложная структура ударной волны и ее дифракция на ракете. На фиг. 9.21 показаны диаграммы линий уровня плотности и удельной внутренней энергии для стационарного состояния.

## § 6. Расчет ударных волн и разрывов

Выше были рассмотрены линейные свойства гидродинамических уравнений (гл. 9, § 5, гл. 3, § 1), когда независимые волны малой амплитуды могут распространяться со звуковой скоростью и со скоростью переноса. Если в сжимаемой среде существуют возмущения большой амплитуды, то волны разной длины связаны и взаимодействуют. В частности, имеется тенденция к передаче энергии от длинных волн к коротким. Имеется также тенденция к возрастанию крутизны фронта длинных волн, что приводит к образованию разрывов и ударных волн в сжимаемой среде [76]. С точки зрения гиперболических гидродинамических уравнений (отсутствуют вязкость и теплопроводность) изменения в состоянии среды происходят скачком или разрывно. В действительности же толщина ударной волны определяется характерной длиной вязкости, а последняя может быть очень малой в соответствии со средней длиной свободного пробега частиц среды. Ударные волны обуславливают возрастание энтропии, так как внутри них происходит переход кинетической энергии коротких волн в тепловую энергию.

Появление ударных волн или разрывов в отсутствие вязкостной диффузии ставит трудные задачи перед разностными методами, так как на разностной сетке нельзя описывать волны, длина которых короче, чем шаг сетки  $\Delta$ . Как в случае дискретной ионной структуры твердого тела, где энергия передается от длинных волн большой амплитуды к коротким волнам, так и на разностной сетке энергия накапливается в волнах наименьшей длины. Следовательно, возникновение ударной волны



Фиг. 9.22. Ложные нелинейные колебания за фронтом ударной волны, образующиеся при эйлеровом разностном расчете в отсутствие искусственной вязкости.

Длина колебаний связана с шагом сетки.

В разностном решении уравнений гидродинамики сжимаемых сред вызовет очень большие колебания значений функций в соседних узлах сетки (фиг. 9.22). Этот численный эффект не имеет отношения к физическим процессам и к более точным дифференциальным уравнениям и может сильно исказить длинноволновую часть численного решения.

Для того чтобы избавиться от этих коротковолновых эффектов в разностном решении, Нейман и Рихтмайер [77] вводили нефизическую искусственную вязкость, которая преобразует энергию колебаний на крупной сетке в тепловую энергию среды. В результате все ударные волны автоматически уширяются на разностной сетке так, что глубина фронта каждой ударной волны со-

ставляет по крайней мере несколько шагов сетки. Поэтому по аналогии с физической вязкостью (§ 1, п. 2) в уравнения гидродинамически сжимаемых сред (9.1) — (9.3) нужно добавить искусственную вязкость  $\mathbf{W}$ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{v} = 0, \quad (9.94)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + (\nabla \rho \mathbf{v}) \mathbf{v} = -\nabla (\rho \mathbf{l} + \mathbf{W}), \quad (9.95)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \rho \nabla \mathbf{v} + \nabla \rho \varepsilon \mathbf{v} = -\mathbf{W} : \nabla \mathbf{v}. \quad (9.96)$$

С другой стороны, если в рассматриваемой задаче достаточно велика естественная вязкость, то, конечно, нет необходимости включать в уравнения дополнительную искусственную вязкость.

Поэтому попытаемся выяснить, в какой форме нужно брать искусственную вязкость  $\mathbf{W}$  или диффузию. Искусственная вязкость должна приводить к диффузионному уширению любого разрыва до размера, большего чем шаг сетки, но при этом не должны искажаться длинноволновые по сравнению с шагом сетки компоненты решения. Оба эти требования можно совместить, если использовать коэффициент искусственной вязкости, зависящий от длины волны, так чтобы он был большим для коротких волн и малым — для длинных. В одномерном случае уравнения для ускорения и внутренней энергии можно записать в виде

$$\rho \frac{dv}{dt} = -\frac{\partial}{\partial x} (p + w), \quad (9.97)$$

$$\rho \frac{de}{dt} = -p \frac{\partial v}{\partial x} - w \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (9.98)$$

где  $w$  — искусственная вязкость, которая определена соотношением

$$w = -c\rho\Delta^2 \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (9.99)$$

где  $c$  — постоянная и  $\Delta$  — пространственный шаг сетки [1, 77].

Члены искусственной вязкости аппроксимируются по явной разностной схеме первого порядка точности (см. гл. 3, § 9, п. 1). Оптимальное значение постоянной  $a$

зависит от той конкретной разностной схемы, которая используется для решения системы уравнений, и наилучшее значение нужно определять с помощью численного эксперимента. Обычно постоянная  $c$  лежит в области

$$0,05 < c < 2,0. \quad (9.100)$$

Коэффициент диффузии для используемой искусственной вязкости равен

$$\nu = c\Delta^2 \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| \quad (9.101)$$

и принимает большие значения только в области быстрых изменений скорости. Можно найти число Рейнольдса  $R_N$ , характеризующее численную искусственную вязкость схемы с шагом по времени  $\Delta t$  и пространственным шагом  $\Delta$

$$\frac{1}{R_N} = \frac{c\Delta^2\Delta t |\delta v|}{\Delta} k^2 \leq c(k\Delta)^3 \frac{\Delta t |v|}{\Delta}, \quad (9.102)$$

где  $\delta v$  — разность между значениями скорости среды в двух соседних узлах сетки, а  $k$  — волновое число. Отметим, что все сомножители в правой части неравенства (9.102) имеют значения порядка или меньше единицы, так как  $k$  — волновое число колебаний среды на сетке ( $k\Delta \leq 1$ ), а  $\Delta t |v| / \Delta$  должно быть выбрано меньше единицы в силу условия Куранта — Фридрихса — Леви (9.89). Отсюда следует, что для длинных волн число Рейнольдса всегда очень велико, и, таким образом, длинные волны на сетке минимально подвержены воздействию искусственной диффузии.

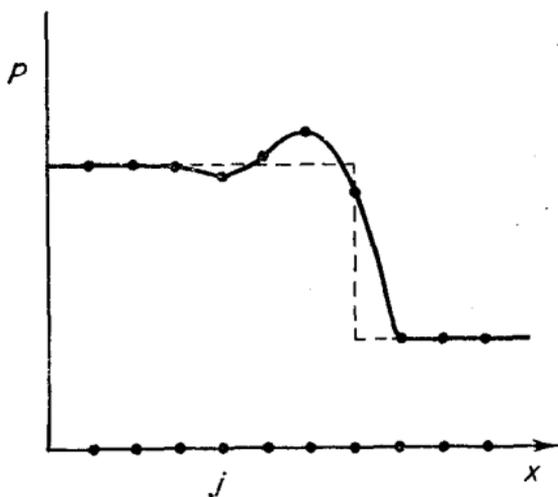
Если параметр  $c$  велик и близок к единице, то шаг по времени может быть ограничен коэффициентом искусственной вязкости  $\nu$  [уравнение (3.53)], так как член с искусственной вязкостью аппроксимируется по явному методу первого порядка точности, для которого должно быть выполнено линейное условие численной устойчивости Куранта — Фридрихса — Леви (9.89):

$$\begin{aligned} (|v| + v_s) \frac{\Delta t}{\Delta} + \frac{2\Delta t \nu}{\Delta^2} &\leq 1, \\ \Delta t &\leq \frac{\Delta}{2c|\delta v| + (|v| + v_s)}. \end{aligned} \quad (9.103)$$

Существует множество других методов рассмотрения разрывов или ударных волн на разностной сетке [1, 8]. В частности, может оказаться удобным вводить искусственную диффузию только во время сжатия, т. е. выбрать член с искусственной вязкостью  $\omega$  в виде

$$\omega = \begin{cases} c\mu\Delta^2\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2, & \text{если } \frac{\partial v}{\partial x} < 0, \\ 0, & \text{если } \frac{\partial v}{\partial x} \geq 0. \end{cases} \quad (9.104)$$

Если используются методы, отличные от разобранных, то всегда важно добавлять соответствующий член



Фиг. 9.23. Ударная волна на разностной сетке при внесении искусственной вязкости.

Энергия колебаний, обусловленных дискретностью сетки, преобразуется в тепловую энергию.

и в уравнение энергии или внутренней энергии (9.98), так чтобы внесение искусственной вязкости было согласовано с законом сохранения энергии. На фиг. 9.23 показано влияние дополнительной искусственной вязкости на распространение ударной волны по разностной сетке.

В двумерном случае искусственная вязкость должна иметь тензорную форму (9.95) и (9.96). Проще всего этот двумерный тензор получить, обобщая искусственную

вязкость Неймана на двумерный случай с учетом сжатия вдоль каждого измерения. Тогда в декартовых координатах с компонентами скорости  $u$  и  $v$  вдоль осей  $x$  и  $y$  соответственно члены искусственной вязкости примут вид [78]

$$W = - \left( \begin{array}{cc} \rho c \Delta^2 \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| \frac{\partial u}{\partial x} & \rho c \Delta^2 \left| \frac{\partial v}{\partial y} \right| \frac{\partial u}{\partial y} \\ \rho c \Delta^2 \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| \frac{\partial v}{\partial x} & \rho c \Delta^2 \left| \frac{\partial v}{\partial y} \right| \frac{\partial v}{\partial y} \end{array} \right), \quad (9.105)$$

причем все члены аппроксимируются с помощью явного метода первого порядка точности по аналогии с одномерным случаем.

Следует отметить, что добавление искусственной вязкости в разностные уравнения приводит к численной диффузии, которая подавляет короткие волны на разностной сетке. Так как разностными методами изучают в основном длинноволновое приближение, введение такой искусственной диффузии вполне оправдано, и этот прием можно использовать и в других системах гиперболических уравнений, отличных от уравнений гидродинамики сжимаемых сред. С другой стороны, важно обеспечить лишь минимальное искажение длинных волн на разностной сетке, в связи с чем следует использовать диффузию третьего или четвертого порядка (по  $k\Delta$ ), и при этом следует избегать численной диффузии более низкого порядка, обусловленной плохой разностной схемой (гл. 3, § 5).

## § 7. Гидростатическое равновесие в моделях атмосферы и Мирового океана

### 1. Уравнение мелкой среды на земной поверхности

Численное моделирование земной атмосферы и океанов является, очевидно, главным приложением вычислительной физики как с точки зрения предсказания погоды, так и с точки зрения понимания циклических процессов и структуры земной атмосферы и Мирового океана. Впервые в 1922 г. Ричардсон предпринял попытку гидродинамического описания земной атмосферы [79], но даже в настоящее время моделирование земной

атмосферы и океанов на крупнейших вычислительных машинах представляется весьма трудной задачей<sup>1)</sup>.

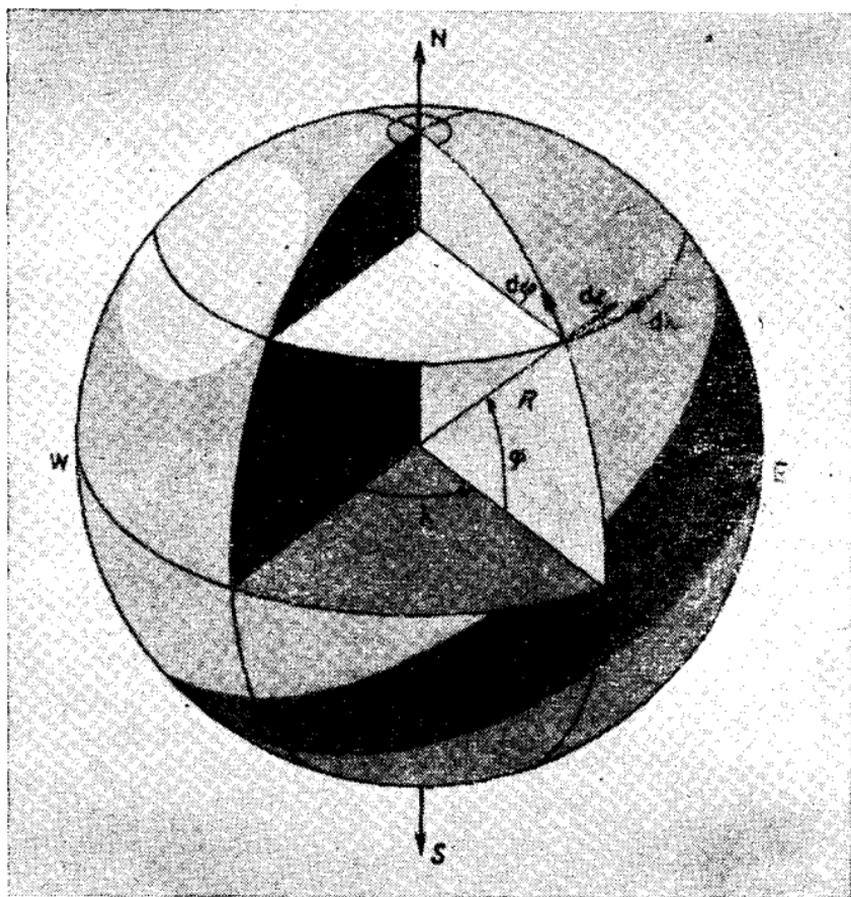
Прежде всего описание как земной атмосферы, так и Мирового океана требует решения трехмерной нестационарной граничной задачи, хотя для точного и подробного описания динамики атмосферы и океана во времени нужно еще использовать и очень сложные граничные условия и учитывать термодинамические процессы. Модель океана должна содержать сложную двумерную топографию дна, а кроме того, должна учитывать соленость, ветры и турбулентные процессы [80]. В случае атмосферы граничные условия более просты, хотя и здесь следует учитывать горные районы. В то же время термодинамические процессы в атмосфере, такие, как испарение воды, дождеобразование, солнечная радиация и т. д., могут быть чрезвычайно сложными. Эти эффекты происходят локально, но они связаны в динамике среды как источники и поглотители энергии [81]. Мы не будем здесь рассматривать ни эти очень интересные и тонкие термодинамические процессы, ни методы подробного учета краевых эффектов [82], а лишь наметим в общих чертах основной способ формулировки уравнений динамики. Именно решение уравнений динамики среды и является основой моделирования атмосферы и океана.

Динамика движения как атмосферы, так и океана описывается уравнением Навье — Стокса (§ 1) в сферических координатах (фиг. 9.24). Впрочем, задача заметно упрощается, если заметить, что вертикальная глубина как океана, так и атмосферы мала по сравнению с их горизонтальными размерами. Это позволяет сделать два важных приближения. Во-первых, мы будем считать, что радиус  $R$  и ускорение силы тяжести  $g$  не зависят от вертикальной координаты  $z$ , и, во-вторых, мы можем ограничиться приближением мелкой среды, считая, что вертикальные скорости малы по сравнению

---

<sup>1)</sup> До сих пор не утратили своего иронического смысла слова Ричардсона, сказанные им в 1922 г.: «Может быть, когда-нибудь в далеком будущем можно будет предсказывать погоду раньше, чем она наступит, и стоит это будет меньше, чем средства, сэкономленные благодаря полученным данным. Но пока это лишь мечта».

с горизонтальными. Поэтому предположим, что как в океане, так и в атмосфере среда находится в вертикальном гидростатическом равновесии [уравнение



Фиг. 9.24. Сферические координаты, используемые для описания атмосферы и Мирового океана.

(9.65)] и что давление среды в точности уравновешивает ее вес.

Используем координаты, имеющие смысл широты  $\varphi$ , долготы (с запада на восток)  $\lambda$  и вертикальной высоты  $z$ . Малый элемент длины  $dh$  выражается вектором (фиг. 9.24):

$$dh = \{Rd\varphi, dz, R \cos \varphi d\lambda\} \quad (9.106)$$

Три компоненты скорости среды найдем как

$$\begin{aligned} u &= R \cos \varphi \dot{\lambda}, \\ v &= R \dot{\varphi}, \\ \omega &= \dot{z}, \end{aligned} \quad (9.107)$$

где

$$\omega \ll u, v.$$

Хотя скорость ветра в атмосфере много меньше скорости звука, она достаточна для небольшого сжатия разреженного воздуха, и для того чтобы описать эффекты сжимаемости, нужно использовать уравнение непрерывности для плотности (9.1). Напротив, течение жидкости в океане считается несжимаемым, а поле скоростей — соленоидальным (9.19).

Прежде всего горизонтальная компонента скорости среды определяется из уравнения сохранения импульса (9.2) в сферических координатах, в котором мы выпишем явно все члены:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho v) + \frac{1}{R \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} [(\rho v v) \cos \varphi] + \frac{1}{R \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\rho u v) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u \omega) = -\rho \left( 2\Omega + \frac{u}{R \cos \varphi} \right) u \sin \varphi - \frac{1}{R} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + F_{\varphi}; \end{aligned} \quad (9.108)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{1}{R \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} [(\rho u v) \cos \varphi] + \frac{1}{R \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\rho u u) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u \omega) = \rho \left( 2\Omega + \frac{u}{R \cos \varphi} \right) v \sin \varphi - \frac{1}{R \cos \varphi} \frac{\partial p}{\partial \lambda} + F_{\lambda}. \end{aligned} \quad (9.109)$$

Первые слагаемые в правых частях этих уравнений описывают кориолисову и центробежную силы, которые обусловлены вращением Земли с угловой скоростью  $\Omega$  и вращением среды на сферической поверхности<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> Форму этих слагаемых легко установить, рассматривая направленное к экватору действие центробежной силы на меридиональную скорость  $v$  и изменение широтной скорости  $u$ , обусловленное сохранением момента количества движения относительно земной оси (см., например, работу [83]).

$F_\varphi$  и  $F_\lambda$  — вязкостные силы, которые создают турбулентность. Так как рассматривается приближение мелкой среды, то вертикальная скорость определяется совсем по-другому, а именно из условия вертикального гидростатического равновесия (9.65):

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g. \quad (9.110)$$

Так как вертикальный шаг сетки должен быть малым по сравнению с шагами в горизонтальных измерениях, то важно, чтобы вертикальная скорость  $w$  вычислялась по неявной схеме. Это можно сделать как для атмосферы, так и для океана, используя условие (9.110) и определяя вертикальную скорость во все моменты времени как решение задачи с граничными условиями.

Рассматривая атмосферу, мы дополним эти динамические уравнения уравнением для удельной внутренней энергии среды и уравнением переноса для локального водяного пара. В океане среда предполагается несжимаемой, но нужно еще дополнительно учесть влияние температуры и солености на выталкивающую силу среды.

## 2. Решение уравнений динамики атмосферы

Движение атмосферы определяется тремя «силовыми» уравнениями (9.108) — (9.110) и нестационарными уравнениями для плотности (9.1) и удельной внутренней энергии (9.3):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{v} = 0, \quad (9.111)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \rho \nabla \mathbf{v} + \nabla (\rho \varepsilon \mathbf{v}) = Q, \quad (9.112)$$

где  $Q$  описывает дополнительные источники внутренней энергии и зависит от конкретной модели, но обычно величина  $Q$  содержит эффекты солнечного излучения, скрытой теплоты конденсации и парообразования, и эффекты нагрева, обусловленного диффузией [82]. В ис-

пользуемых сферических координатах дивергенция вектора  $\mu \mathbf{v}$  принимает вид

$$\nabla_{\mu \mathbf{v}} = \frac{1}{R \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} [(\mu v) \cos \varphi] + \frac{1}{R \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\mu u) + \frac{\partial}{\partial z} (\mu w).$$

Связь между удельной внутренней энергией и давлением устанавливается с помощью уравнения состояния. Обычно с этой целью используют уравнение состояния идеального газа

$$p e = \frac{p}{\gamma - 1}, \quad (9.113)$$

где  $\gamma$  — отношение удельных теплоемкостей. Наконец, система уравнений может содержать дополнительное уравнение, описывающее перенос водяного пара в атмосфере.

Нестационарные уравнения для плотности, удельной внутренней энергии и для горизонтальных компонент импульса в общем случае нужно аппроксимировать на трехмерной эйлеровой разностной сетке  $(\varphi, z, \lambda)$  с помощью явных методов второго порядка точности (см. гл. 9, § 6 и гл. 3). Однако метод определения вертикальной скорости  $w$  совершенно иной. Скорость  $w$  вычисляется в конце каждого шага (или половинного шага) по времени из условия вертикального гидростатического равновесия. Чтобы получить уравнение для  $w$ , продифференцируем уравнение гидростатического равновесия (9.110), взяв от обеих частей равенства лагранжу производную по времени

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{dp}{dt} \right) + g \left( \frac{d\rho}{dt} \right) = 0. \quad (9.114)$$

Тогда при условии, что в момент  $t = 0$  начальные условия задают гидростатически равновесное по вертикали состояние атмосферы, давление и плотность среды в любой точке будут изменяться в соответствии с уравнением (9.114). Это накладывает определенное условие на вертикальную скорость в любой момент времени в любой точке пространства, которое мы получим, переписав уравнения для плотности (9.111) и давления (9.112).

среды в лагранжевой форме и предполагая выполненным уравнение состояния идеального газа (9.113):

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \mathbf{v}; \quad (9.115)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\gamma p \nabla \mathbf{v} + (\gamma - 1) Q. \quad (9.116)$$

Выразив дивергенцию скорости в виде суммы вертикальной и горизонтальной  $\nabla \mathbf{v}_h$  частей,

$$\nabla \mathbf{v} = \frac{\partial w}{\partial z} + \nabla \mathbf{v}_h, \quad (9.117)$$

мы из уравнений (9.114) — (9.116) получим стационарное уравнение

$$-\frac{\partial}{\partial z} \left( \gamma p \frac{\partial w}{\partial z} + \gamma p \nabla \mathbf{v}_h \right) + (\gamma - 1) \frac{\partial Q}{\partial z} - \rho g \left( \frac{\partial w}{\partial z} + \nabla \mathbf{v}_h \right) = 0.$$

Откуда с помощью гидростатического уравнения (9.110) придем к более удобному соотношению

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{(\gamma - 1) \rho g}{\gamma p} \frac{\partial w}{\partial z} &= \\ &= \frac{(\gamma - 1)}{\gamma p} \frac{\partial Q}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} (\nabla \mathbf{v}_h) - \frac{(\gamma - 1) \rho g}{\gamma p} (\nabla \mathbf{v}_h). \end{aligned} \quad (9.118)$$

Это уравнение можно рассматривать как одномерное (по оси  $z$ ) дифференциальное уравнение второго порядка относительно  $w$ , из которого можно найти вертикальную скорость вдоль каждого вертикального столба в расчете. На разностной сетке  $(\varphi, z, \lambda)$  уравнение (9.118) принимает вид трехдиагонального матричного уравнения для вертикальной скорости вдоль каждого вертикального столба сетки, и это уравнение можно решить с помощью простого метода прогонки (см. гл. 4, § 3). Обычно используются граничные условия обраще-

ния вертикальной скорости в нуль в основании  $z_0$  и у вершины  $z_T$  атмосферного столба <sup>1)</sup>

$$\omega(z_0) = 0, \quad \omega(z_T) = 0.$$

В зависимости от требуемых конкретных приложений используются разнообразные модели атмосферы. Для краткосрочных прогнозов погоды (на один или несколько дней) моделируется ограниченная часть поверхности Земли, так как это дает возможность уменьшить шаг сетки и соответственно повысить точность прогноза на ближайшее время. Например, для суточного предсказания погоды в Европе обычно используется модель, покрывающая пространство от экватора до полярных широт и от побережья Ньюфаундленда до Урала. С другой стороны, для больших масштабов времени важно описывать всю атмосферу, для чего используются глобальные модели. На фиг. 9.25 показан пример решения, полученного с помощью глобальной модели [84].

Следует отметить, что на одном шаге сетки (примерно 10—100 км), используемой в моделях атмосферы, молекулярная вязкость пренебрежимо мала и может возникнуть мелкомасштабная турбулентность. Такие коротковолновые явления нельзя точно описать в дискретной модели, что и приводит в конце концов к потере точности расчета. Поэтому обычно используются эвристические модели вихревой или турбулентной вязкости [85, 86], однако эта проблема останется основной трудностью до тех пор, пока не будет разработана статистическая механика турбулентностей <sup>2)</sup>.

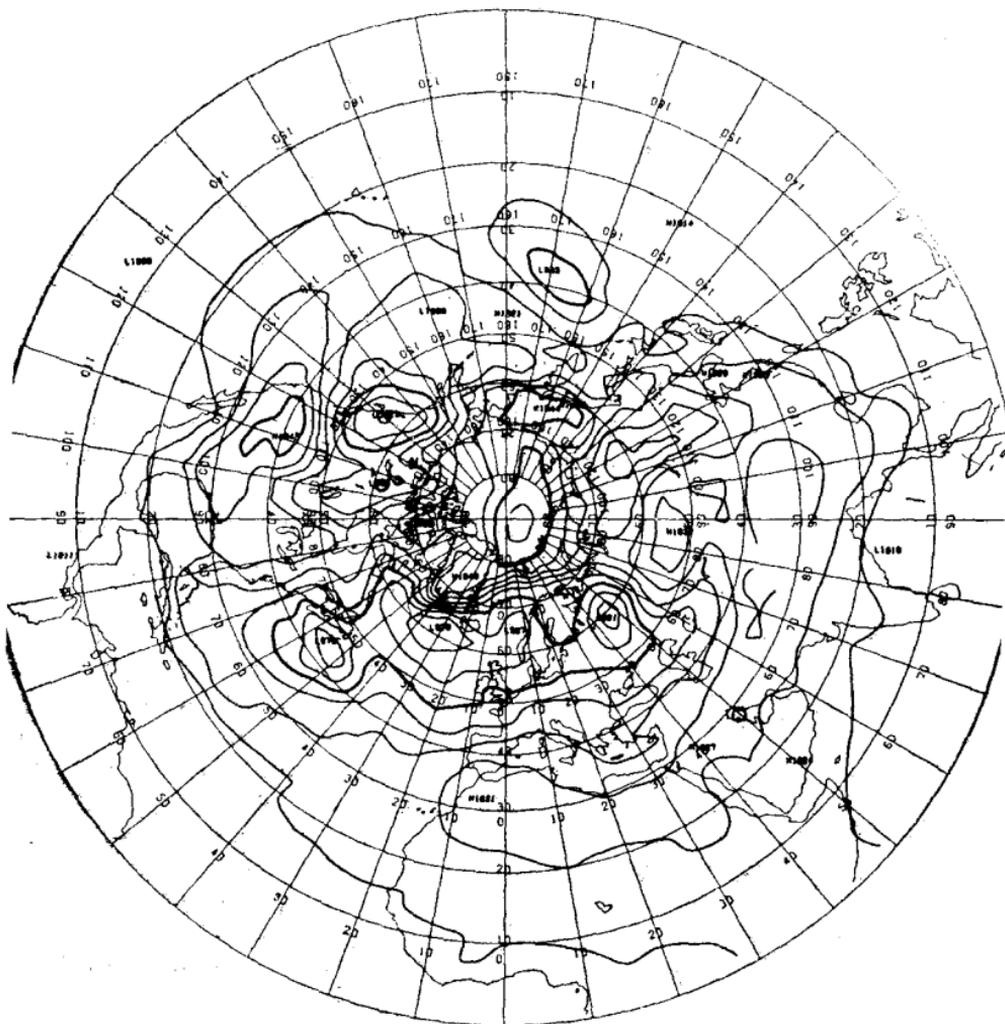
### 3. Модель Мирового океана

Модели, описывающие движение океанических вод, тесно связаны с аналогичными моделями для атмосферы.

---

<sup>1)</sup> Во многих моделях атмосферы вертикальную независимую переменную  $z$  заменяют поверхностями уровня геопотенциала  $d\psi = -g dz$ , при этом, например, гидростатическое уравнение упрощается и принимает вид  $dp/d\psi = 1$ . С другой стороны, усложняются граничные условия на поверхности Земли. Основные методы, используемые в обеих моделях, аналогичны. См., например, работу [82].

<sup>2)</sup> См., например, работу [87].



Фиг. 9.25. Линии уровня атмосферного давления на поверхности Земли в северном полушарии.

Решение получено с помощью полусферической модели земной атмосферы и на фигуре показан результат предсказания на 64 дня. Линии уровня проведены через каждые 8 мбар. [84].

Основное различие состоит в том, что вода даже при огромных давлениях несжимаема, и поэтому движение ее можно описывать как несжимаемое течение. С другой стороны, нужно учитывать подъемную силу, обусловленную очень небольшими изменениями плотности

воды, связанными с тепловым расширением и содержанием соли в массах воды. Следовательно, нужно использовать модели, в которых течения строго соленоидальны [уравнение (9.19)], но небольшие изменения плотности определяются из уравнения состояния (приближение Буссинеска). Существенно, что из уравнений для импульса удается исключить члены высокого давления, но еще остается выталкивающая сила, обусловленная тепловым расширением.

В простейших моделях океана вертикальная скорость  $w$  не учитывается и используется двумерная модель, покрывающая поверхность Земли. Течение описывается условием несжимаемости (9.19) совместно с уравнениями для горизонтальных компонент скорости [уравнения (9.108) и (9.109), в которых плотность предполагается постоянной  $\rho_0$ ]. Для такой системы уравнений наиболее подходит метод решения, использующий завихренность и функцию тока (§ 2, п. 2), в котором уравнение Пуассона для функции тока  $\psi_s$  принимает вид

$$\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (\psi_s \cos \varphi) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 \psi_s}{\partial \lambda^2} = -\xi_s, \quad (9.119)$$

а горизонтальные компоненты поверхностной скорости определяются по функции тока:

$$u = \frac{1}{R \cos \varphi} \frac{\partial (\psi_s \cos \varphi)}{\partial \varphi}, \quad v = -\frac{1}{R} \frac{\partial \psi_s}{\partial \lambda}. \quad (9.120)$$

Из уравнений для импульса мы получаем нестационарное уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi_s}{\partial t} + \frac{v}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} (\xi_s + \Omega') + \frac{u}{R \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\xi_s + \Omega') = \\ = \frac{1}{R \cos \varphi} \left( \frac{\partial F_\varphi}{\partial \lambda} - \frac{\partial F_\lambda}{\partial \varphi} \right), \end{aligned} \quad (9.121)$$

где

$$\Omega' = \left( 2\Omega + \frac{u}{R \cos \varphi} \right) \sin \varphi.$$

Без членов, стоящих в правой части и описывающих диффузию вихрей и поверхностный ветер, уравнение

(9.121) имеет смысл уравнения переноса для полной завихренности среды  $\xi_s + \Omega'$ , которая состоит из вращения среды относительно Земли и вращения вместе с Землей. Систему уравнений (9.119) — (9.121) можно разрешить методами, описанными в § 2, п. 2, настоящей главы.

Брайан [80] решил полную трехмерную задачу, в которой были учтены малая вертикальная скорость и топография океанского дна. Процедура решения состояла из решения поверхностных уравнений с помощью метода, изложенного выше, и отыскания отклонений от поверхностных скоростей на всех глубинах. Если

$$u' = \frac{\partial u}{\partial z}, \quad v' = \frac{\partial v}{\partial z}.$$

то поправки к горизонтальным скоростям определяются из уравнений Навье — Стокса

$$\begin{aligned} \frac{\partial u'}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla u' + \mathbf{v}'\nabla u = & \left(2\Omega + \frac{u}{R \cos \varphi}\right) v' \sin \varphi + \\ & + \frac{u'v \sin \varphi}{R \cos \varphi} + \frac{g}{R \cos \varphi} \frac{\partial \rho}{\partial \lambda} + \frac{\partial F_\lambda}{\partial z}; \end{aligned} \quad (9.122)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v'}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla v' + \mathbf{v}'\nabla v = \\ = \left(2\Omega + \frac{2u}{R \cos \varphi}\right) u' \sin \varphi + \frac{g}{R} \frac{\partial \rho}{\partial \varphi} + \frac{\partial F_\varphi}{\partial z}. \end{aligned} \quad (9.123)$$

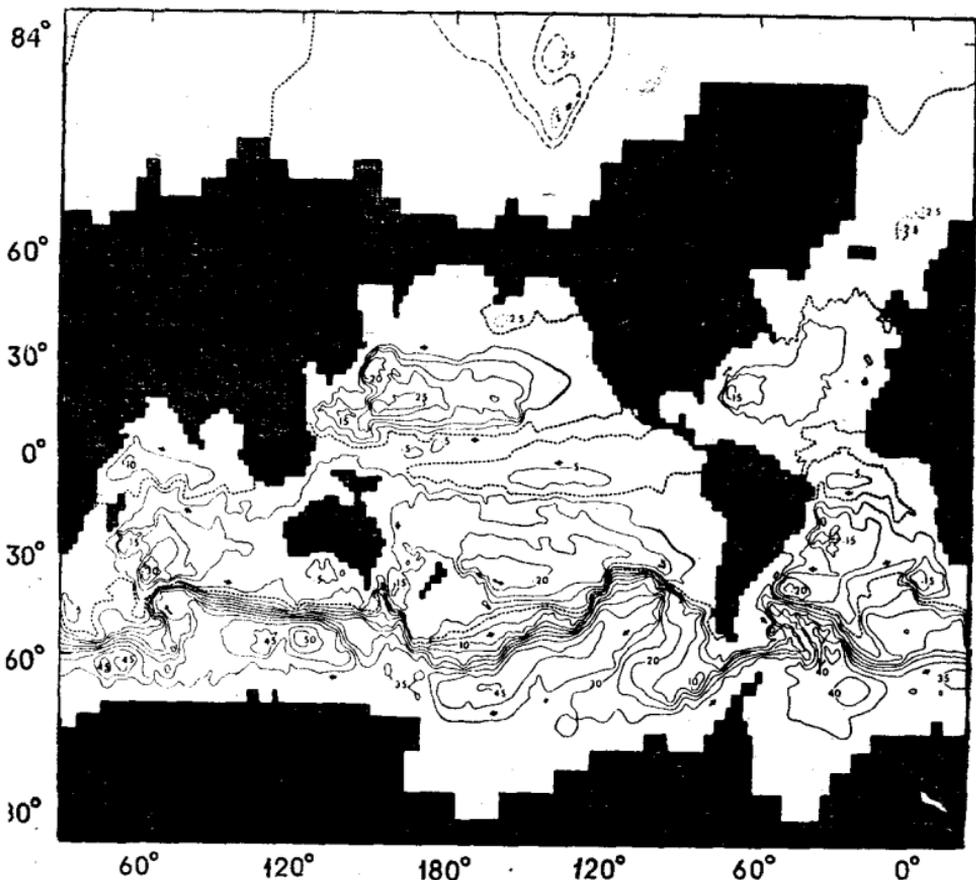
В этой модели гидростатическое соотношение (9.110) используется для исключения давления, но плотность может изменяться, и в простейшем случае эти изменения связаны с температурой посредством коэффициента теплового расширения  $\alpha$ :

$$\nabla \rho = -\alpha \nabla T. \quad (9.124)$$

Вертикальная скорость определяется для каждого вертикального столба из условия соленидальности потока:

$$\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = -\mathbf{V}\mathbf{v}'_h. \quad (9.125)$$

Решение разностной формы этого уравнения можно получить с помощью метода прогонки для трехдиагонального матричного уравнения (см. гл. 4, § 3). Для граничного условия по  $\omega$  на поверхности используется так



Фиг. 9.26. Течения на поверхности мирового океана (из работы [88]).

называемое приближение «твердой крышки»  $\omega_s = 0$ , что обеспечивает устранение высокочастотных поверхностных волн, а также приливно-отливных движений. К этой системе уравнений добавляются уравнения переноса локальной температуры и солености среды.

На фиг. 9.26 показаны поверхностные течения в мировом океане, рассчитанные с помощью такой модели [88].

## Гидродинамика с далекодействующими силами: звезды, плазма, магнитные среды

---

### § 1. Самосогласованные поля в сплошной среде

Классические среды, с которыми приходится иметь дело при изучении атмосферы или океанов, представляют собой системы атомов и молекул, взаимодействующих на коротких расстояниях. Если такие системы находятся в локальном термодинамическом равновесии, то их движение описывается гидродинамическими уравнениями как движение сплошной среды, а динамика такой системы определяется давлением среды, которое заменяет близкодействующие силы частиц (гл. 9).

Принципы описания системы частиц как сплошной среды в равной степени применимы и к системам частиц с далекодействием, при условии что такую систему можно считать термодинамически равновесной в каждой точке. Системы атомных ядер, образующих звезды, можно рассматривать как сплошную среду, причем динамику такой среды следует описывать гравитационными полями, создаваемыми объемной массой вещества, в дополнение к силам давления. Аналогично в плазме и в проводящих средах при описании движения среды следует учитывать как тепловое давление, так и самосогласованные электромагнитные поля среды.

Гравитационная гидродинамика применима для изучения структуры звезд и их эволюции во времени, для описания создания энергии в ядерных реакциях и потери ее путем излучения и конвекции, для описания звездной динамики в процессах пульсации звезд или катастрофического гравитационного коллапса старых холодных звезд. Магнитная гидродинамика (МГД) широко используется в астрофизике, геофизике и в лабораторной физике. Она применима к столь разным проблемам, как солнечные вспышки, структура магнитосферы, проблема

земного динамо и контролируемый термоядерный синтез. Эти задачи сильно нелинейны, так как среда создает поле. В свою очередь силовое поле действует на среду, и, за исключением простейших задач, решение можно найти только методами вычислительной физики.

Разнообразие явлений, описываемых гравитационной и магнитной гидродинамиками, чрезвычайно велико, и для успешного моделирования частной задачи модель должна содержать множество тонких эффектов и процессов. Например, во многих задачах необходимо детально учитывать процессы ионизации, ядерные реакции, механизмы излучения и сложные диффузионные эффекты. Кроме того, в отличие от классической гидродинамики теории гравитационной и магнитной гидродинамик менее наглядны, а поэтому уравнения часто бывают недоопределены. Ниже мы уделим особое внимание основным динамическим задачам взаимодействия в среде с самосогласованными далекодействующими силами и способу описания такого взаимодействия в вычислительной механике.

В гл. 9 мы рассмотрели гидродинамические уравнения для классической среды, движение которой определяется уравнениями для плотности (9.1), плотности импульса (9.2) и удельной внутренней энергии (9.3). Придерживаясь простейшей точки зрения, мы можем учесть эффект дальнего действия в среде, дополнив уравнение для импульса или для ускорения среды объемной силой  $\mathbf{F}$ :

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \mathbf{F}. \quad (10.1)$$

Для того чтобы учесть эффекты вязкости, давление здесь записано в виде тензора  $\mathbf{P}$  (с суммой диагональных элементов  $3p$ , где  $p$  — скалярное давление). Что касается силы  $\mathbf{F}$ , то как в гравитационной, так и в магнитной гидродинамике она определяется самосогласованным образом свойствами или состоянием исследуемой среды в пространстве и времени  $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ . В нерелятивистской среде самосогласованную объемную силу тяготения можно выразить с помощью скалярного гравитационного потенциала  $\Phi$ :

$$\mathbf{F} = \rho \mathbf{g} = -\rho \nabla \Phi; \quad (10.2)$$

этот потенциал определяется из уравнения Пуассона с распределением плотности среды в правой части:

$$\nabla^2\Phi = 4\pi G\rho, \quad (10.3)$$

где  $G$  — гравитационная постоянная.

В дополнение к переносу и звуковым волнам — основным процессам классической среды — учет самосогласованного гравитационного поля среды вносит эффект гравитационных колебаний. Если  $L$  — характерный для среды масштаб длин, то основные частоты, описываемые уравнениями гравитационной гидродинамики, — это частота переноса ( $\omega_v \sim |v|/L$ ), частота звуковых волн ( $\omega_s \sim L^{-1} \sqrt{\gamma p/\rho}$ , где  $\gamma$  — отношение удельных теплоемкостей) и частота гравитационных колебаний

$$\omega_g = \sqrt{4\pi G\rho}. \quad (10.4)$$

Все эти процессы могут давать совместный эффект: так, например, взаимодействие звуковых волн и гравитационных колебаний приводит к явлению пульсации звезд [89]. Именно эти характерные частоты следует принимать во внимание при использовании явных методов интегрирования уравнений.

При рассмотрении макроскопического движения плазмы или проводящей жидкости среду можно считать электростатически нейтральной, и тогда основной силой, действующей на среду, будет сила  $\mathbf{F}$  взаимодействия движущихся зарядов с магнитным полем,

$$\mathbf{F} = \frac{1}{c} [\mathbf{j}, \mathbf{B}], \quad (10.5)$$

где  $\mathbf{B}$  — пронизывающее среду магнитное поле, а  $\mathbf{j}$  — плотность тока в среде. Поля определяются уравнениями Максвелла. В нерелятивистских средах плотность токов определяется законом Ампера:

$$\mathbf{j} = \frac{c}{4\pi} [\nabla, \mathbf{B}], \quad (10.6)$$

что позволяет выразить силу, действующую на среду, только через магнитное поле:

$$\mathbf{F} = -\nabla \left( \frac{B^2}{8\pi} \right) + \frac{1}{4\pi} (\mathbf{B}\nabla) \mathbf{B}. \quad (10.7)$$

Форма первого слагаемого в этом выражении аналогична форме члена, описывающего давление в уравнениях (9.2) и (10.1), и эта компонента силы  $\mathbf{F}$  оказывает на среду воздействие, вполне аналогичное действию давления; второе слагаемое в выражении (10.7) связано с «натяжением» силовых линий поля. Отсюда следует, что влияние магнитного поля проявляется в основном в виде «магнитного давления», действующего на проводящую среду.

Действующее на среду магнитное поле нужно определить самосогласованным образом, т. е. как поле, создаваемое токами, связанными с движением среды. Такое самосогласованное магнитное поле определяется законом электромагнитной индукции Фарадея,

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + [\mathbf{V}, \mathbf{E}] = 0, \quad (10.8)$$

что выражает сохранение магнитного потока (гл. 3, § 1), причем поля подчинены условию

$$\nabla \mathbf{B} = 0. \quad (10.9)$$

Электрическое поле  $\mathbf{E}$ , входящее в уравнение сохранения магнитного потока (10.8), зависит от конкретных свойств описываемой проводящей среды. Для широкого круга магнитных сред электрическое поле в системе координат, движущейся со средой (электрическое поле Лоренца), связано с плотностью тока законом Ома

$$\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{B}] = \eta \mathbf{j}, \quad (10.10)$$

где  $\mathbf{v}$  — скорость среды, а  $\eta$  — сопротивление. Подставив это выражение для  $\mathbf{E}$  в закон Фарадея (10.8), получим нестационарное уравнение для магнитного поля среды:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - [\mathbf{V}, [\mathbf{v}, \mathbf{B}]] = - \left[ \mathbf{V}, \frac{\eta c^2}{4\pi} [\mathbf{V}, \mathbf{B}] \right]. \quad (10.11)$$

Это уравнение имеет ту же форму, что и уравнения для остальных параметров среды, а именно: плотности, внутренней энергии и импульса. Второй член в левой части уравнения (10.11) описывает перенос и сжатие, а правая часть уравнения — диффузию магнитного поля (гл. 10, § 2).

В магнитной гидродинамике вновь возникают характерные частоты переноса и звука ( $\omega_p \sim |\mathbf{v}|/L$ ,  $\omega_s \sim L^{-1} \times \sqrt{\gamma p/\rho}$ ). Но, кроме того, магнитное поле действует на среду как давление [уравнение (10.7)], что приводит к появлению альфвеновских или магнитозвуковых волн с характерной частотой  $\omega_A \sim V_A/L$ , где  $V_A$  — альфвеновская скорость, которая обусловлена магнитным давлением (по аналогии со звуковыми волнами),

$$V_A^2 = \frac{B^2}{4\pi\rho}. \quad (10.12)$$

И соответственно характерные частоты звуковых волн, переноса и альфвеновских волн нужно учитывать, решая уравнения магнитной гидродинамики по явным схемам.

В заключение подчеркнем, что в отличие от задач классической гидродинамики рассматриваемые в настоящей главе физические системы содержат эффекты, связанные с энергией поля. Для самогравитирующей среды плотность энергии равна

$$U = \frac{1}{2} \rho\Phi + \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho\varepsilon, \quad (10.13)$$

где сохранены прежние обозначения, и слагаемые описывают плотность энергии гравитационного поля, плотность кинетической энергии и плотность внутренней энергии соответственно. Аналогично плотность энергии в магнитогидродинамической среде равна

$$U = \frac{B^2}{8\pi} + \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho\varepsilon \quad (10.14)$$

и состоит из плотности энергии магнитного поля, плотности кинетической энергии и плотности внутренней энергии. В средах с дальнедействующими силами может происходить обмен между энергией поля и тепловой энергией, в результате чего возможны сильные изменения параметров среды. Это в свою очередь приводит к сильной нелинейности задач, а характерные частоты (гравитационная частота или альфвеновская частота) могут весьма значительно изменяться в рассматриваемой области. Например, в задаче о строении звезд значение плотности меняется от ядра к поверхности на много по-

рядков, так что гравитационная частота может быть очень большой в звездном ядре и иметь гораздо меньшее значение в атмосфере звезды. В расчетах по явной схеме столь большие изменения частот вызывают трудности, связанные со слишком жесткими ограничениями на величину шага по времени (§ 5).

Аналогично в магнитной гидродинамике плотность плазмы может изменяться на три порядка и более, и в разреженной плазме альфвеновская скорость становится очень большой ( $V_A = B / \sqrt{4\pi\rho}$ ). Поэтому для рассмотрения областей с низкими значениями плотности приходится использовать специальные модели, так как условие Куранта — Фридрихса — Леви для явного шага по времени в таких областях становится слишком ограничительным.

Этот фундаментальный эффект обмена энергией между полем и средой приводит к большому сходству явлений гравитационной и магнитной гидродинамик. В § 2, 3 и 4 настоящей главы мы рассмотрим задачи магнитной гидродинамики, а в § 5 — гравитационной гидродинамики.

## § 2. Уравнения магнитной гидродинамики и их основные свойства

### 1. Эйлера форма уравнений и свойства сохранения

Запишем замкнутую систему магнитогидродинамических уравнений в соответствии со сказанным в § 1. Уравнения для плотности (9.1), плотности импульса (9.2) и удельной внутренней энергии классической среды (9.3) дополнены уравнением сохранения магнитного потока (10.11), и в эйлеровых координатах эта система принимает следующий вид:

$$\text{масса:} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v}; \quad (10.15)$$

*импульс:*

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left\{ \rho \mathbf{v} \mathbf{v} + \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) \mathbf{I} - \frac{\mathbf{B} \mathbf{B}}{4\pi} + \mathbf{V} \right\}; \quad (10.16)$$

магнитный поток:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \left[ \nabla, \left( [\mathbf{v}, \mathbf{B}] - \frac{\eta c^2}{4\pi} [\nabla, \mathbf{B}] \right) \right]; \quad (10.17)$$

внутренняя энергия:

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} = -\rho \nabla \mathbf{v} - \nabla (\rho \epsilon \mathbf{v} + \mathbf{q}) + \eta j^2 - \mathbf{V} : \nabla \mathbf{v}. \quad (10.18)$$

«Уравнение состояния» связывает давление с внутренней энергией и плотностью среды (см. гл. 9, § 1, п. 1);

$$p = p(\epsilon, \rho). \quad (10.19)$$

В простейших магнитных средах теплопроводность  $\mathbf{q}$  и тензор вязкости  $\mathbf{V}$  (если вязкость не равна нулю) можно характеризовать теми же выражениями, что и перенос потоков в классической среде (см. гл. 9, § 1, п. 2).

Сделаем несколько замечаний в связи с этой системой уравнений. В трехмерном случае эта система состоит из восьми нестационарных уравнений. Если вязкость, сопротивление и теплопроводность отсутствуют, то эти уравнения являются гиперболическими (гл. 3). Согласно сказанному в § 1, магнитное поле входит в уравнение для импульса под знаком оператора дивергенции, причем действие магнитного поля проявляется в виде натяжения силовых линий, а также в виде дополнительного давления. Основными процессами, описываемыми этими гиперболическими уравнениями, являются процессы переноса, звуковые и альфвеновские волны.

Учет вязкости, теплопроводности и сопротивления приводит к тому, что уравнения становятся параболическими. Для выяснения вида переносных членов уравнений выберем простую модель [91] столкновительной идеальной среды с постоянными коэффициентами вязкости  $\mu$ , теплопроводности  $k$  и сопротивления  $\eta$ . Тогда члены, описывающие вязкость в уравнении для импульса, теплопроводность в уравнении для внутренней энергии и

сопротивление в уравнении для магнитного потока, примут вид

$$\mu \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{1}{3} \mu \nabla (\nabla \mathbf{v}), \quad (10.20)$$

$$k \nabla^2 T, \quad (10.21)$$

$$\frac{\eta c^2}{4\pi} \nabla^2 \mathbf{B} \quad (10.22)$$

соответственно. Все эти члены описывают диффузию и приводят к диффузии импульса, внутренней энергии и магнитного потока. Соответственно эти диффузионные процессы, отражающие уменьшение энергии поля и течения, вызывают нагрев среды, что и описано уравнением для плотности внутренней энергии (10.18) в виде эффектов джоулева нагрева ( $\eta j^2$ ) и вязкостного нагрева ( $-\mathbf{V} : \nabla \mathbf{v}$ ).

Свойства решений рассматриваемой системы уравнений коренным образом зависят от относительной величины конкурирующих процессов: переноса, звуковых и альфвеновских волн (гиперболические процессы), с одной стороны, и вязкостной диффузии, сопротивления и теплопроводности, с другой стороны. Поэтому полезно установить относительную величину процессов переноса и диффузионных процессов. Это можно сделать с помощью безразмерных чисел (чисел Рейнольдса), которые служат мерой преобладания переноса над диффузией. Если  $v$  — характерная скорость среды с характерным масштабом изменения параметров  $L$ , то можно определить три числа Рейнольдса для вязкости  $R_v$ , теплопроводности  $R_k$  и сопротивления  $R_\eta$ :

$$R_v = \frac{vL\rho}{\mu}, \quad (10.23)$$

$$R_k = \frac{vL\rho}{k}, \quad (10.24)$$

$$R_\eta = \frac{4\pi vL}{\eta c^2}. \quad (10.25)$$

Если число Рейнольдса велико, то соответствующий диффузионный эффект мал.

И наконец отметим, что уравнения для массы (10.15), импульса (10.16) и магнитного потока (10.17) в

магнитной среде записаны в консервативной форме, что означает сохранение массы, импульса и магнитного потока в такой среде. В противоположность этому внутренняя энергия среды не сохраняется и соответствующее уравнение (10.18) имеет неконсервативную форму. Выведем другое консервативное уравнение, из которого можно найти внутреннюю энергию. Для этого заметим, что полная энергия среды равна

$$U = \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \varepsilon + \frac{B^2}{8\pi}.$$

Теперь, домножая уравнения (10.15)–(10.18) и складывая их так, чтобы в левой части получилась сумма

$$-\frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} + \frac{\mathbf{B}}{4\pi} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \rho \varepsilon,$$

получаем уравнение сохранения полной энергии

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\nabla \mathbf{g}. \quad (10.26)$$

Поток энергии  $\mathbf{g}$  равен

$$\mathbf{g} = \left( \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \varepsilon + \frac{B^2}{8\pi} + p \right) \mathbf{v} + (\mathbf{V}\mathbf{v}) + \frac{\eta c}{4\pi} [\mathbf{j}, \mathbf{B}] + \mathbf{q}. \quad (10.27)$$

Поток энергии состоит из семи слагаемых, описывающих перенос кинетической, внутренней и магнитной энергий, работу, выполняемую давлением среды и вязкостными силами, вектор Пойнтинга, связанный с резистивной диффузией, и теплопроводность. Уравнения (10.15)–(10.17) и (10.26) образуют замкнутую систему консервативных уравнений.

## 2. Перенос и лагранжева форма уравнений

Так же как и в классической гидродинамике (гл. 9), все свойства среды переносятся вместе с движением самой среды. Поэтому уравнения принимают особенно простую форму в системе координат, движущейся вместе со средой, т. е. при использовании лагранжевой производной по времени

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla.$$

Такая форма уравнений не только обладает преимуществом наглядности и содержательности, но и позволяет решать одномерные задачи с помощью лагранжевой разностной сетки (§ 3, п. 2).

Особое внимание мы уделим уравнению для магнитного поля (10.17), которое в предположении, что сопротивление постоянно, можно переписать в виде

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{B} - (\nabla \mathbf{B}) \mathbf{v} = \frac{\eta c^2}{4\pi} \nabla^2 \mathbf{B}. \quad (10.28)$$

Здесь использовано условие соленоидальности магнитного поля (10.9). Дифференцируя дивергентные члены, запишем эйлеровы уравнения (§ 2, п. 1) в лагранжевой форме:

масса: 
$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \mathbf{v}; \quad (10.29)$$

ускорение: 
$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right) + \nabla \left( \frac{\mathbf{B}\mathbf{B}}{4\pi} - \mathbf{v} \right); \quad (10.30)$$

магнитный поток: 
$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = -\mathbf{B} (\nabla \mathbf{v}) + (\mathbf{B}\nabla) \mathbf{v} + \frac{\eta c^2}{4\pi} \nabla^2 \mathbf{B}; \quad (10.31)$$

внутренняя энергия: 
$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = -p \nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{q} + \eta j^2 - \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v}. \quad (10.32)$$

Очевидно, что магнитное поле подвержено переносу, так же как и масса, и внутренняя энергия. Каждое из первых слагаемых в правой части уравнений связано со сжатием среды, что приводит к появлению звуковых волн, а также продольных альфвеновских волн или волн сжатия. Члены  $\nabla \mathbf{B}\mathbf{B}$  и  $(\mathbf{B}\nabla) \mathbf{v}$  связаны с натяжением силовых линий магнитного поля, которое обуславливает поперечные альфвеновские волны, а остальные члены описывают диффузионные процессы.

### 3. Энергия ионов и электронов в плазме

Макроскопическое описание плазмы служит наиболее важным примером проводящих сред, и его рассмотрению мы уделим особое внимание [25, 91]. Полностью

ионизованная плазма состоит из двух компонент: из электронов и ионов, причем в очень плотной плазме устанавливается равенство энергий электронов и ионов. В этом случае плазму можно рассматривать как однокомпонентную среду, подчиняющуюся уравнению состояния идеального газа, и для нее применимы системы уравнений, описанные в п. 1 и 2. Однако в более разреженной плазме электроны и ионы следует характеризовать различными значениями внутренней энергии и давления. Введем удельную внутреннюю энергию электронов  $\epsilon_e$  и ионов  $\epsilon_i$ . Каждая из этих величин связана с соответствующим давлением посредством уравнения состояния идеального газа:

$$\begin{aligned}\epsilon_e &= \frac{p_e}{\rho(\gamma - 1)}; \\ \epsilon_i &= \frac{p_i}{\rho(\gamma - 1)}.\end{aligned}\tag{10.33}$$

Дополним уравнения для плотности, импульса и магнитного потока двумя уравнениями для внутренней энергии электронов и ионов:

*электроны*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\epsilon_e) = -p_e \nabla \mathbf{v} - \nabla(\rho\epsilon_e \mathbf{v} - k_e \nabla T_e) + \eta j^2 + \frac{\rho(\epsilon_i - \epsilon_e)}{\tau_{\text{выр}}};\tag{10.34}$$

*ионы*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\epsilon_i) = -p_i \nabla \mathbf{v} - \nabla(\rho\epsilon_i \mathbf{v} - k_i \nabla T_i) - \mathbf{V} : \nabla \mathbf{v} + \frac{\rho(\epsilon_e - \epsilon_i)}{\tau_{\text{выр}}}.\tag{10.35}$$

Давление, входящее в уравнение для импульса, равно сумме давлений, создаваемых электронами и ионами в отдельности. Нужно отметить, что приходится использовать отдельные ионную и электронную теплопроводности  $k_i$  и  $k_e$ . Джоулево тепло, обусловленное диффузией магнитного поля, «греет» только электроны (так как отношение электронной и ионной масс мало), в то же время вязкость обычно связывают только с ионной ком-

понентой среды. Последние члены уравнений описывают выравнивание энергий, скорость которого зависит от времени выравнивания  $\tau_{\text{выр}}$ .

В плазме коэффициенты переноса, связанные с сопротивлением и электронной теплопроводностью, и время выравнивания зависят от частоты электрон-ионных столкновений. Эти коэффициенты сильно зависят от плотности и электронной температуры, в результате чего диффузионные члены становятся нелинейными. Аналогично ионная теплопроводность  $k_i$  и вязкость  $\mu$  зависят от частоты ион-ионных столкновений [92, 25]. Простые выражения для этих коэффициентов в водородной плазме приведены в табл. 10.1.

Таблица 10.1

**Коэффициенты переноса для водородной плазмы**

$n$ — плотность;	$k$ — постоянная Больцмана;
$m_e$ — масса электрона;	$\nu_{ii}$ — частота ион-ионных столкновений;
$m_i$ — масса иона;	$\nu_{ei}$ — частота электрон-ионных столкновений;
$T_e$ — электронная температура;	
$T_i$ — ионная температура	

Сопротивление	$\eta = \frac{m_e}{ne^2} \nu_{ei}$
Электронная теплопроводность	$k_e = \frac{5nk^2T_e}{m_e\nu_{ei}}$
Ионная теплопроводность	$k_i = \frac{5nk^2T_i}{m_i\nu_{ii}}$
Ионная вязкость	$\mu_i = \frac{5nk^2T_i}{m_i\nu_{ii}}$
Время выравнивания	$\tau_{\text{выр}} = \frac{m_i}{2m_e} \frac{1}{\nu_{ei}}$

где

$$\nu_{ei} = \frac{4\pi ne^4 \ln \Lambda_e}{\sqrt{2m_e} \epsilon_e^3}; \quad \nu_{ii} = \frac{4\pi ne^4 \ln \Lambda_i}{\sqrt{2m_i} \epsilon_i^3};$$

$$\Lambda_{ei} = \frac{1}{144\pi n} \left( \frac{4\pi ne^2}{kT_{ei}} \right)^{3/2}; \quad \epsilon_{ei} = \frac{3}{2} kT_{ei}.$$

### § 3. Методы одномерной магнитной гидродинамики

Как уже отмечалось в § 2, свойства магнитогидродинамических уравнений очень близки к свойствам уравнений гидродинамики сжимаемых сред (гл. 9, § 5). Это сходство особенно велико в случае одного пространственного измерения, когда не проявляются векторные свойства магнитного поля. Поэтому все методы решения задач гидродинамики применимы по крайней мере к одномерным магнитогидродинамическим задачам. В частности, можно использовать лагранжеву или эйлерову разностные сетки, а также явные схемы Лакса, Лакса — Вендроффа, схемы с перешагиванием и почти второго порядка точности (гл. 3, § 7). Как и в классической гидродинамике, для случая одного пространственного измерения больше подходит лагранжева сетка, так как на ней легко разрешимы трудности аппроксимации переносного члена и, кроме того, малы эффекты численной дисперсии и диффузии.

Но все-таки в магнитогидродинамических задачах существуют и дополнительные трудности. В частности, в задачах контролируемого термоядерного синтеза может иметь место баланс или приближенное равновесие между давлением среды  $p$  и магнитным давлением  $B^2/8\pi$ , и в результате при наличии быстрых процессов, таких, как звуковые и альфвеновские волны, приходится следить за решениями в течение длительного времени. При использовании явных методов условие Куранта — Фридрикса — Леви требует очень большого, возможно, недоступно большого числа шагов по времени. Поэтому в таких задачах рациональнее применять *неявные* методы, один из которых [93] и будет описан в § 3, п. 2.

В отличие от классической гидродинамики для задач магнитной гидродинамики (а также и гравитационной гидродинамики) характерна еще одна дополнительная трудность, связанная с очень большим диапазоном изменения локальных параметров одной и той же задачи. Так, например, специальные методы необходимы для рассмотрения области низкой плотности или «вакуумной» области (§ 3, п. 4). Коэффициенты переноса тоже могут изменяться на несколько порядков в одной задаче,

поэтому лучше всего было бы и диффузионные члены, которые в случае переменных коэффициентов нелинейны, аппроксимировать неявными методами (§ 3, п. 3).

### 1. Явные методы, эйлерова и лагранжева сетки

Запишем уравнения магнитной гидродинамики в разностной форме на декартовой эйлеровой сетке. Для этого мы отбросим диффузионные члены и предположим, что выполнено уравнение состояния идеального газа. В одномерном случае лишь одна компонента скорости отлична от нуля, и мы будем считать, что у магнитного поля тоже имеется только одна ненулевая компонента. Из уравнений (10.15) — (10.18), вычисляя явно производные всех членов, мы получаем простую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
 \text{плотность:} \quad & \frac{\partial \rho}{\partial t} = -v \frac{\partial \rho}{\partial x} - \rho \frac{\partial v}{\partial x}; \\
 \text{скорость:} \quad & \frac{\partial v}{\partial t} = -v \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{B}{4\pi\rho} \frac{\partial B}{\partial x}; \\
 \text{магнитное поле:} \quad & \frac{\partial B}{\partial t} = -v \frac{\partial B}{\partial x} - B \frac{\partial v}{\partial x}; \\
 \text{давление:} \quad & \frac{\partial p}{\partial t} = -v \frac{\partial p}{\partial x} - \gamma p \frac{\partial v}{\partial x}.
 \end{aligned} \tag{10.36}$$

Сходство этой системы с системой уравнений гидродинамики сжимаемых сред (гл. 9, § 5, п. 2) позволяет рассмотреть основной явный эйлеров метод на примере неконсервативной схемы Лакса (см. гл. 3, § 7, п. 1). Новые значения переменных в момент времени  $n + 1$  на пространственной сетке  $1 \leq j \leq J$  вычисляются по формулам:

плотность:

$$\begin{aligned}
 \rho_j^{n+1} = & \frac{1}{2} (\rho_{j+1}^n + \rho_{j-1}^n) - v_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (\rho_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n) - \\
 & - \rho_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n);
 \end{aligned}$$

скорость:

$$v_j^{n+1} = \frac{1}{2} (v_{j+1}^n + v_{j-1}^n) - v_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) - \\ - \frac{1}{\rho_j^n} \frac{\Delta t}{2\Delta} (p_{j+1}^n - p_{j-1}^n) - \frac{B_j^n}{4\pi\rho_j^n} \frac{\Delta t}{2\Delta} (B_{j+1}^n - B_{j-1}^n);$$

магнитное поле:

$$B_j^{n+1} = \frac{1}{2} (B_{j+1}^n + B_{j-1}^n) - v_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (B_{j+1}^n - B_{j-1}^n) - \\ - B_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n);$$

давление:

$$p_j^{n+1} = \frac{1}{2} (p_{j+1}^n + p_{j-1}^n) - v_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (p_{j+1}^n - p_{j-1}^n) - \\ - \gamma p_j^n \frac{\Delta t}{2\Delta} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n). \quad (10.37)$$

Для исследования устойчивости проведем линеаризацию системы уравнений (10.37), считая, что коэффициенты при пространственных производных постоянны в некоторой локальной области. Такое предположение естественно при исследовании возрастания малой ошибки. Матрица перехода для пространственной гармоник Фурье с волновым числом  $k$  имеет вид

$$\mathbf{G}(\Delta t, k) = \begin{pmatrix} \beta - i\alpha v_j^n & -i\alpha\rho_j^n & 0 & 0 \\ 0 & \beta - i\alpha v_j^n & \frac{-i\alpha B_j^n}{4\pi\rho_j^n} & -i\alpha \frac{1}{\rho_j^n} \\ 0 & -i\alpha B_j^n & \beta - i\alpha v_j^n & 0 \\ 0 & -i\alpha\gamma\rho_j^n & 0 & \beta - i\alpha v_j^n \end{pmatrix}, \quad (10.38)$$

где  $\beta = \cos(k\Delta)$  и  $\alpha = [\Delta t \sin(k\Delta)]/\Delta$ .

Матрица перехода  $\mathbf{G}$  имеет четыре собственных значения

$$g_{1,2} = \beta - i\alpha v_j^n,$$

$$g_{3,4} = \beta - i\alpha \left\{ v_j^n \pm \sqrt{\frac{\gamma p_j^n}{\rho_j^n} + \frac{(B_j^n)^2}{4\pi\rho_j^n}} \right\}. \quad (10.39)$$

В зависимости от знака скорости переноса  $v_j^2$  наибольшим по модулю будет собственное значение  $g_3$  или  $g_4$  и для выполнения условия устойчивости Неймана (3.47) шаг по времени должен быть подчинен неравенству (условие Куранта — Фридрихса — Леви)

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v_j^2| + \sqrt{\frac{\gamma p_j^2}{\rho_j^n} + \frac{(B_j^1)^2}{4\pi \rho_j^n}}}. \quad (10.40)$$

Это условие очень похоже на аналогичное условие, полученное для задач гидродинамики сжимаемых сред (гл. 9, § 5, п. 2), но скорость в знаменателе выражения (10.40) состоит из суммы модулей скорости центра масс и «магнитозвуковой» скорости  $v_m = \sqrt{v_s^2 + v_A^2}$ , где  $v_s$  — это скорость звука, а  $v_A = B/\sqrt{4\pi\rho}$  — альфвеновская скорость, обусловленная магнитным давлением. Вновь условие устойчивости означает, что сеточная скорость  $\Delta/\Delta t$  должна быть больше, чем доплеровски смещенная магнитозвуковая скорость в знаменателе дроби (10.40), которая является наибольшей скоростью на разностной сетке. Таким образом, последнее условие устойчивости накладывает более жесткие ограничения на шаг по времени, чем в гидродинамических расчетах. В то же время, как и в гидродинамике, система уравнений нелинейна, поэтому условие устойчивости должно быть выполнено во всех узлах сетки, а шаг по времени ограничен наибольшим значением магнитозвуковой скорости на сетке. При этом ограничение шага по времени, обусловленное большой альфвеновской скоростью, связано с существом задачи и не должно быть нарушено, а в отличие от обычной гидродинамики плотность МГД-среды в некоторой области может оказаться очень малой. В то время как скорость звука  $v_s = \sqrt{\gamma p/\rho} = \sqrt{\gamma kT/m}$  ( $k$  — постоянная Больцмана,  $m$  — масса частицы) зависит только от температуры среды, альфвеновская скорость обратно пропорциональна квадратному корню из плотности. Поэтому во избежание чрезмерно мелкого шага по времени приходится использовать специальные методы (§ 3, п. 4) рассмотрения «вакуумной» области.

Следует отметить, что мы рассмотрели простейшую разностную реализацию явного эйлера метода. Если разностные уравнения (10.37) переписать в консервативной форме, то их линейные свойства и, в частности, условие устойчивости (10.40) не изменятся. Но с точки зрения нелинейных явлений, таких, как ударные волны, и интегральных физических законов следует предпочесть консервативную разностную аппроксимацию.

Кроме того, для уменьшения эффектов дисперсии и диффузии на разностной сетке обычно приходится использовать консервативные методы второго порядка точности, такие, как методы Лакса — Вендроффа, метод «с перешагиванием» или почти второго порядка точности (гл. 3). В каждом методе должно быть выполнено соответствующее условие Куранта — Фридрихса — Леви, использующее доплеровски смещенную магнитозвуковую скорость как наибольшую скорость на сетке.

В одномерном случае по аналогии с гидродинамикой эффекты численной дисперсии и диффузии можно устранить, используя лагранжеву разностную сетку. В этом случае применяемый алгоритм остается точно таким же, как и в гидродинамических задачах (см. гл. 9, § 5), в которых используется разностная сетка, движущаяся вместе со средой. Границы ячеек (узлы сетки  $j$ ) мы определим в целые моменты времени с помощью соотношения

$$x_j^{n+1} = x_j^n + v_j^{n+1/2} \Delta t, \quad (10.41)$$

и соответственно границы ячеек определяют ширину каждой из них:

$$\Delta_i = x_{j+1}^n - x_j^n. \quad (10.42)$$

На такой разностной сетке основная система магнито-гидродинамических уравнений (10.36) принимает особенно простой вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\rho \Delta) &= 0; \\ \frac{d}{dt} (\beta \Delta) &= 0; \\ \frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho v} \right) &= 0; \\ \frac{dv}{dt} &= - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \left( p + \frac{B^2}{8\pi} \right). \end{aligned} \quad (1043)$$

Первые три уравнения этой системы в отсутствие диффузии выражают сохранение вещества, магнитного потока, а также точное выполнение закона адиабаты в каждой ячейке сетки  $\Delta$ . Скорости заданы в полущелые моменты времени на границах ячеек  $j$  аналогично методу, описанному в гл. 9, § 5.

Далее, в полной аналогии с гидродинамикой и в магнитогидродинамических задачах можно ожидать появления ударных волн и разрывов. Ударные волны действительно возникают, причем они связаны как с давлением среды, так и с магнитным давлением. Поэтому обычно приходится вводить искусственную вязкость для уширения разрывов на разностной сетке. И здесь тоже в точности сохраняется алгоритм, используемый в гидродинамических задачах (гл. 9, § 6).

## 2. Нелинейные диффузионные члены

Выше было отмечено, что ввиду возможности обмена энергий между магнитным полем, тепловым движением и упорядоченным течением среды параметры данной магнитогидродинамической задачи могут изменяться в пространстве и во времени на несколько порядков. Кроме того, коэффициенты диффузии, т. е. сопротивление, теплопроводность и вязкость, в общем случае сильно зависят от параметров (табл. 10.1), и поэтому диффузионные члены в магнитной гидродинамике нелинейны, что затрудняет их рассмотрение. Далее, соответствующие числа Рейнольдса (§ 2) в некоторых областях могут стать малыми по сравнению с единицей. Поэтому часто возникает необходимость в неявной разностной аппроксимации диффузионного члена.

Вне зависимости от того, используется эйлера или лагранжева разностная сетка, различие между которыми состоит в методах описания членов сжатия и переноса, нам необходимо аппроксимировать нелинейный диффузионный член:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} k \frac{\partial u}{\partial x} = S, \quad (10.44)$$

где  $S$  — остальные члены, связанные с гиперболическими процессами, и  $k = k(u)$ . Например, в уравнении для внутренней энергии ( $u = \varepsilon$ ) (температуры)

$$k \sim \varepsilon^{5/2}.$$

Для аппроксимации этого члена вне зависимости от условий устойчивости мы применим безусловно устойчивый неявный метод Кранка — Никольсона (см. гл. 3, § 9, п. 2). Нелинейность диффузионного коэффициента  $k$  потребует проведения итераций на каждом шаге по времени. Обозначив верхним индексом  $p$  итерационный шаг номера  $p$ , относящийся к интервалу времени  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ , мы получим для последовательности улучшающихся значений функции  $u$  соотношение

$$u^{p+1} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\bar{k} \Delta t}{2} \frac{\partial u^{p+1}}{\partial x} = u^n + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\bar{k} \Delta t}{2} \frac{\partial u^n}{\partial x} + \int dt S. \quad (10.45)$$

Значения переменной  $u$  на предыдущем итерационном шаге  $p$  принимаются для определения среднего по времени значения коэффициента диффузии:

$$\bar{k} = \frac{1}{2} k(u^p) + \frac{1}{2} k(u^n). \quad (10.46)$$

Правая часть уравнения (10.45) всегда задана явно, и это означает, что значения  $u^{p+1}$  на разностной сетке определяются путем решения системы алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей (см. гл. 4, § 3). Полученные таким способом новые значения функции  $u$  служат для вычисления улучшенных значений коэффициентов диффузии (10.46). Если после множества итераций достигнута сходимость,

$$\lim_{p \rightarrow \infty} u^{p+1} = u^p,$$

то величина  $u^{p+1}$  дает искомое решение на  $n + 1$  шаге по времени,

$$u^{n+1} = \lim_{p \rightarrow \infty} u^{p+1}, \quad (10.47)$$

так как при этом соотношение (10.45) совпадает с алгоритмом Кранка — Никольсона для диффузионного члена.

Для многих задач достаточно всего двух или трех итераций. Этот неявный метод дает особенно хорошие результаты ввиду простоты решения трехдиагональных матричных уравнений.

### 3. Неявный метод Хейна

Во многих задачах магнитной гидродинамики альфвеновская скорость очень велика, и условие Куранта — Фридрихса — Леви (10.40) накладывает очень жесткие ограничения на шаг по времени. Например, в плазменных установках для исследования проблемы управляемого термоядерного синтеза возможен такой случай, когда магнитное давление почти уравнивает давление плазмы, и хотя плазма перемещается незначительно, в ней распространяются магнитозвуковые волны высокой частоты.

Для описания членов, связанных со звуковыми и альфвеновскими волнами, используется неявный метод Хейна [93]. Он аналогичен неявному методу второго порядка точности для обыкновенных дифференциальных уравнений (гл. 2, § 4 и § 6, п. 4). Рассмотрим сначала систему двух уравнений первого порядка в частных производных:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\beta \frac{\partial B}{\partial x}, \quad (10.48)$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} = -\beta \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (10.49)$$

которые описывают распространение волн со скоростью  $\beta$ . Если применить неявную разностную аппроксимацию производных во времени со вторым порядком точности, то для  $n + 1$  шага мы получим

$$v^{n+1} = v^n - \frac{\Delta t \beta}{2} \left( \frac{\partial B^n}{\partial x} + \frac{\partial B^{n+1}}{\partial x} \right), \quad (10.50)$$

$$B^{n+1} = B^n - \frac{\Delta t \beta}{2} \left( \frac{\partial v^n}{\partial x} + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial x} \right). \quad (10.51)$$

Теперь нужно найти пространственные зависимости величин  $B^{n+1}$  и  $v^{n+1}$ , для чего можно, пользуясь уравнением

(10.51), исключить  $B^{n+1}$  из уравнения (10.50):

$$\begin{aligned} v^{n+1} - \frac{\Delta t \beta}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\Delta t \beta}{2} \frac{\partial v^{n+1}}{\partial x} \right) = \\ = v^n - \Delta t \beta \frac{\partial B^n}{\partial x} + \frac{\Delta t \beta}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\Delta t \beta}{2} \frac{\partial v^n}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (10.52)$$

Правая часть этого уравнения содержит функции, вычисленные на предыдущем шаге, но второй член в левой части уравнения содержит частную производную второго порядка по пространству от неизвестной функции  $v^{n+1}$  и аналогичен диффузионному члену. Если уравнение (10.52) аппроксимировать на эйлеровой или лагранжевой пространственной сетке, то левая часть примет вид трехдиагональной матрицы, умноженной на заданный во всех узлах сетки вектор  $v^{n+1}$ . Решая систему алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей (см. гл. 4, § 3), получаем искомые значения  $v^{n+1}$  во всех узлах пространственной сетки. Другую функцию  $B^{n+1}$  теперь легко определить с помощью уравнения (10.51).

Соответствующая матрица перехода имеет собственные значения, равные по модулю единице, и поэтому ограничения на шаг по времени отсутствуют.

Для приложений к задачам магнитной гидродинамики достаточно рассмотреть упрощенную систему уравнений в лагранжевой форме (10.36), причем особое внимание нужно уделить нелинейному члену, описывающему магнитное давление:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= -\bar{\rho} \frac{\partial v}{\partial x}; \\ \frac{dB}{dt} &= -\bar{B} \frac{\partial v}{\partial x}; \\ \bar{\rho} \frac{dv}{dt} &= -\frac{\bar{B}}{4\pi} \frac{\partial B}{\partial x}. \end{aligned} \quad (10.53)$$

Мы будем решать эту нелинейную систему итерационным методом, полностью аналогичным методу решения нелинейного уравнения диффузии. Чертой в системе уравнений (10.53) отмечены те сомножители, которые не меняются при переходе от итерационного шага  $p$  к шагу  $p+1$ . Следуя изложенному выше неяв-

ному методу, нужно определять скорость среды на каждой итерации из псевдодиффузионного уравнения

$$\bar{\rho} \frac{dv}{dt} - \frac{\Delta t \bar{B}}{8\pi} \frac{\partial}{\partial x} \bar{B} \frac{\partial v}{\partial x} = - \frac{\bar{B}}{4\pi} \frac{\partial B^n}{\partial x}, \quad (10.54)$$

которое решается методом Кранка — Никольсона в соответствии с алгоритмом (10.52). После этого магнитное поле и плотность можно найти из соотношений

$$\alpha = \frac{\Delta t}{4} \left( \frac{\partial v^n}{\partial x} + \frac{\partial v^{p+1}}{\partial x} \right),$$

$$B^{p+1} = \frac{1-\alpha}{1+\alpha} B^n, \quad \rho^{p+1} = \left( \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \right) \rho^n. \quad (10.55)$$

Обычно достаточно двух или трех итераций.

Аналогично рассматриваются звуковые волны и соответствующий им член с давлением в уравнении для скорости. С другой стороны, так как в общем случае переносные члены аппроксимируются явно, то соответствующее скорости переноса условие устойчивости сохраняется:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|_{\max}}. \quad (10.56)$$

Это условие обеспечивает малость параметра  $\alpha$  в уравнении (10.55).

Рассмотренный метод был использован [93] для решения уравнений магнитной гидродинамики в цилиндрической геометрии.

#### 4. «Вакуумная» область

Существенное отличие задач магнитной гидродинамики от гидродинамических задач состоит в обмене энергией между средой и магнитным полем. Часто движущаяся среда оказывается в той части рассматриваемой области, где энергия магнитного поля велика, и плотность среды становится чрезвычайно малой. Такая ситуация возможна в астрофизике (примером может служить солнечная вспышка) и в лабораторном эксперименте по контролируемому термоядерному синтезу.

В этой области альфвеновская скорость может стать очень большой, что при явном методе решения приводит к неприемлемо жесткому ограничению на шаг по времени. Поэтому обычно необходимо устранять такое ограничение с помощью какого-нибудь приближения.

Простейшее приближение состоит в предположении, что такая вакуумная область не может переносить ток, т. е., что этот «вакуум» действует как изолятор. Тогда электромагнитные уравнения отделяются от уравнений среды, другими словами, в той области, где плотность падает ниже некоторого произвольно выбранного малого значения  $\rho_{\text{мин}}$ , среда рассматривается как простая гидродинамическая среда. Поле в вакуумной области определяется законом Ампера, например в декартовых координатах поле равно постоянной, т. е.

$$j = \frac{c}{4\pi} \frac{\partial B}{\partial x} = 0,$$

откуда

$$B = B_0. \quad (10.57)$$

Постоянная  $B_0$  определяется граничными условиями, которые могут быть связаны с внешней электрической цепью. В этом случае уравнения цепи решаются совместно с уравнениями магнитной гидродинамики [91]. Такой подход позволяет ограничить сверху значения альфвеновской скорости и сохранить величину шага по времени  $\Delta t$  на приемлемом уровне.

С другой стороны, если магнитное поле в вакуумной области меняет направление, то параллельно магнитному полю могут протекать сильные токи, не взаимодействующие с полем, и тогда вакуумную область нельзя считать изолятором. В этом случае можно использовать другую модель [93], в которой вакуумные области отсутствуют, а плотность среды во всем объеме и у границ поддерживается на уровне, превышающем некоторое минимальное значение  $\rho_{\text{мин}}$ . Очевидно, что такой способ не удовлетворяет закону сохранения вещества, но если минимальное значение плотности выбрано достаточно малым, то нарушение закона сохранения будет незначительным.

#### § 4. Многомерная магнитная гидродинамика

Особенно большой интерес представляет изучение двух- и трехмерной магнитной гидродинамики. Это связано с тем, что векторные и топологические свойства магнитного поля могут проявиться полностью только в случае нескольких пространственных измерений, а топологические свойства магнитного поля имеют первостепенное значение как в задачах астрофизики, так и в физике лабораторной плазмы. Подтверждением этого служат вспышки на Солнце и применение тороидальных магнитных конфигураций для удержания термоядерной плазмы.

При разработке конкретных численных многомерных МГД-моделей особое значение имеют три безразмерных параметра, которые характеризуют гиперболические свойства уравнений

$$\beta = \frac{\rho}{B^2/8\pi}, \quad (10.58)$$

$$M_s^2 = \frac{\rho v^2}{\gamma p}, \quad (10.59)$$

$$M_A^2 = \frac{\rho v^2/2}{B^2/8\pi}. \quad (10.60)$$

Здесь  $M_s$  и  $M_A$  — числа Маха для звуковых и альфвеновских волн соответственно. Порядок величины этих чисел по сравнению с единицей определяет относительную важность тепловой энергии и энергии магнитного поля по сравнению с энергией течения (кинетической энергией). Если число Маха для звуковых волн невелико, то среду можно считать несжимаемой в трех измерениях, и на задачи магнитной гидродинамики можно распространить изложенные в гл. 9 методы описания несжимаемых сред. Если мало число Маха для альфвеновских (но не для звуковых) волн или мал параметр  $\beta$ , то течение среды удовлетворяет условию несжимаемости только в двух измерениях, а именно в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Этот случай — с малым, но конечным значением параметра  $\beta$  — особенно

важен при исследовании проблемы управляемого термоядерного синтеза.

Для общего случая сильного взаимного влияния энергий среды и магнитного поля (параметр  $\beta$  порядка единицы) наиболее подходящими оказываются консервативные явные методы (§ 3, п. 1). В то же время эти методы непригодны для задач с низким значением  $\beta$ , так как при этом высокие альфвеновские скорости требуют чрезвычайно мелкого шага по времени, а эффекты численной дисперсии и диффузии при явном расчете магнитного поля служат причиной грубых и нежелательных ошибок. Кроме того, векторные свойства магнитного поля приводят к таким анизотропным явлениям, как крутильные волны, которые распространяются вдоль силовых линий магнитного поля, и диффузионные процессы, которые могут быть значительными вдоль силовых линий и небольшими в поперечном направлении [92]. Если эти эффекты существенны, то эйлерова аппроксимация неэффективна и приходится применять специальную методику, например использовать силовые линии магнитного поля в качестве координатных линий.

### 1. Явные консервативные методы

В декартовых координатах уравнения трехмерной магнитной гидродинамики однокомпонентной сжимаемой среды можно записать в консервативной форме:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = 0. \quad (10.61)$$

Эти уравнения содержат восемь неизвестных функций,

$$\mathbf{u} = \left\{ \rho, \rho v_x, \rho v_y, \rho v_z, B_x, B_y, B_z, \left( \frac{1}{2} \rho v^2 + \frac{B^2}{8\pi} + \rho \epsilon \right) \right\}, \quad (10.62)$$

которые описывают плотность среды, три компоненты плотности импульса, три компоненты магнитного поля и плотность полной энергии. Для гиперболических уравнений (числа Рейнольдса велики) потоки определяются

вектор-столбцами  $\mathbf{F}_x$ ,  $\mathbf{F}_y$  и  $\mathbf{F}_z$ . Достаточно задать компоненту  $\mathbf{F}_x$ ,

$$\mathbf{F}_x = \begin{pmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x v_x + p + \frac{B_y^2}{8\pi} + \frac{B_z^2}{8\pi} \\ \rho v_x v_y - \frac{B_x B_y}{4\pi} \\ \rho v_x v_z - \frac{B_x B_z}{4\pi} \\ 0 \\ v_x B_y - B_x v_y \\ v_x B_z - v_z B_x \\ \left( \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \varepsilon + p + \frac{B^2}{8\pi} \right) v_x \end{pmatrix}, \quad (10.63)$$

а компоненты  $\mathbf{F}_y$  и  $\mathbf{F}_z$  имеют аналогичную форму. Уравнение состояния связывает удельную внутреннюю энергию с давлением и плотностью среды.

Магнитогидродинамические уравнения такого вида можно разрешить на эйлеровой разностной сетке с помощью явных консервативных методов, изложенных в гл. 3, § 7 и 8. Для уменьшения численной диффузии желательно использовать методы второго порядка точности, например метод Лакса — Вендроффа, метод с перешагиванием и метод почти второго порядка точности Адамса — Башфорта. Кроме того, если числа Рейнольдса больше единицы, то на этой же разностной сетке можно явно аппроксимировать диффузионные члены (гл. 3, § 9). Как и в задачах гидродинамики, в модель следует ввести дополнительные члены искусственной вязкости, что позволит правильно описать возможные разрывы и ударные волны (гл. 9, § 6).

Здесь изложены основные принципы явного консервативного метода решения уравнений магнитной гидродинамики, но следует ясно понимать, что в частных задачах возникают частные трудности. Мы укажем несколько особенностей рассматриваемого метода решения, которые могут оказаться существенными в некоторых задачах. Во-первых, нам нужно определить три

компоненты магнитного поля, которые, однако, не являются независимыми, так как

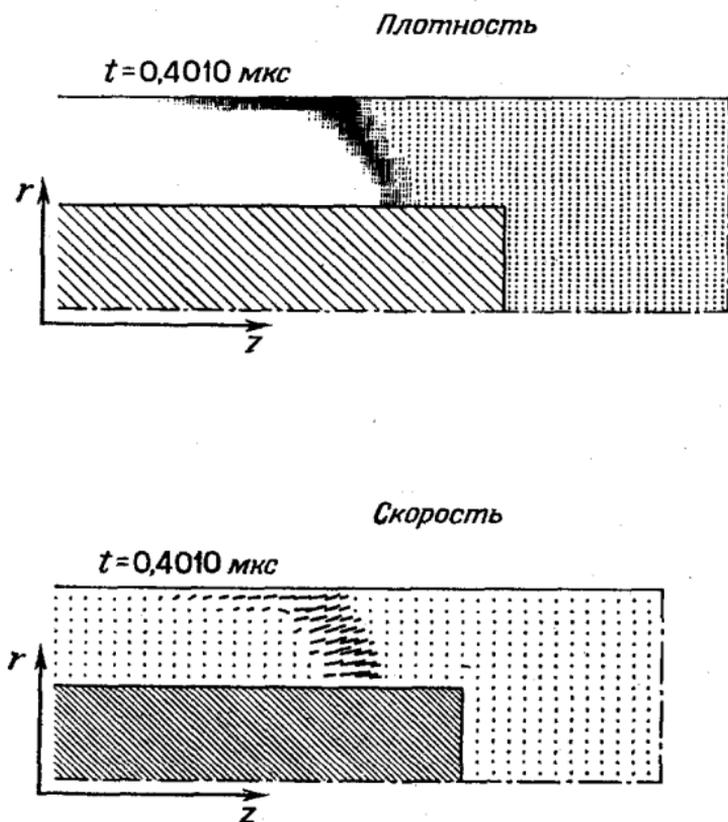
$$\nabla \mathbf{B} = 0. \quad (10.64)$$

Если начальными условиями задано соленоидальное магнитное поле, то дифференциальные уравнения обеспечивают его соленоидальность во все последующие моменты времени. Разностные же уравнения такого свойства не имеют. Возникающие ошибки приводят к тому, что магнитное поле приобретает отличную от нуля и растущую дивергенцию. Этот эффект можно устранить, либо используя соответствующим образом геометрию задачи, либо вводя векторный потенциал магнитного поля (§ 4, п. 2).

Второй источник ошибок может возникнуть при определении температуры или внутренней энергии  $\epsilon$  среды из уравнения для плотности полной энергии  $U$ . Хотя это уравнение консервативно, очевидно, что в областях с большими значениями магнитного поля любые ошибки во всех прочих параметрах среды автоматически переходят в ошибки функции, описывающей внутреннюю энергию. Поэтому непосредственное решение уравнения для удельной внутренней энергии (10.18) часто оказывается более предпочтительным. Этот подход особенно целесообразен в тех моделях плазмы, в которых используются отдельные уравнения для электронной и ионной внутренних энергий. Эти уравнения можно аппроксимировать на той же эйлеровой разностной сетке, что и консервативные уравнения.

И, наконец, отметим, что, как и в одномерном случае, могут образоваться области с низкой плотностью или вакуумные области, и во избежание появления больших альфвеновских скоростей нужно использовать вакуумное приближение (§ 4, п. 2). Для этого следует либо рассматривать вакуумную область как изолятор, либо, произвольно добавляя вещество, поддерживать плотность среды выше некоторого минимального значения. Однако теперь эта задача более трудна, чем одномерная, так как вакуумная область становится двух- или трехмерной и имеет неправильную изменяющуюся границу.

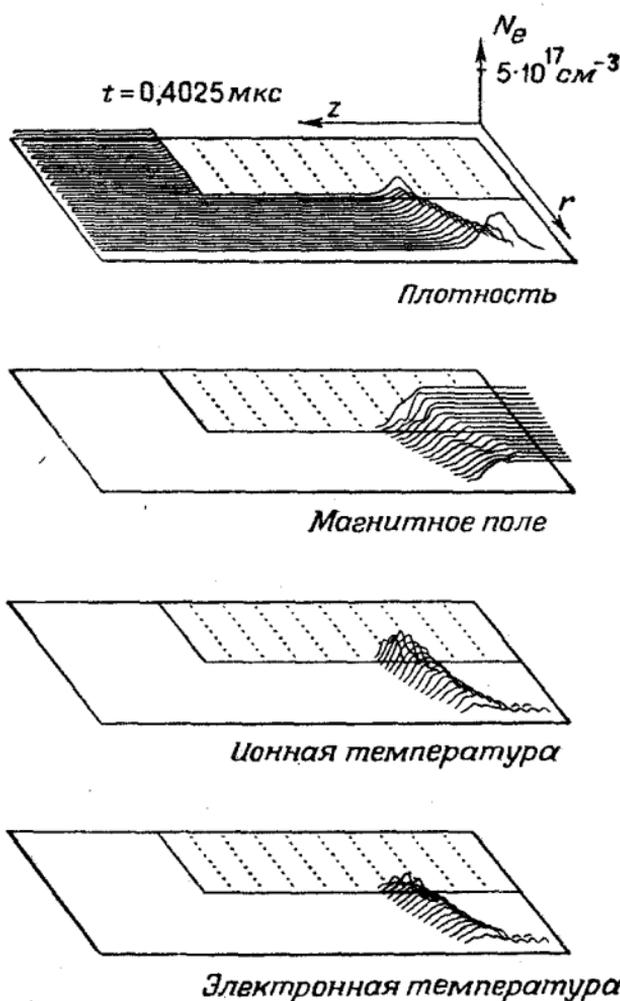
Пример такой двумерной модели в цилиндрических координатах показан на фиг. 10.1 и 10.2. Эта модель [91, 94] описывает лабораторную установку по плазменному пинчу, в которой создается плазма с термоядер-



Фиг. 10.1. «Сгребание» магнетогидродинамической среды давлением азимутального магнитного поля между коаксиальными электродами.

Термоядерная плазма создается на оси у конца центрального электрода (из работы [91]).

ными плотностью ( $10^{19}$  частиц в  $\text{см}^3$ ) и температурой (1,5 кэВ). Моделирование этой задачи существенно упрощается благодаря одной характерной особенности, которая состоит в том, что магнитное поле имеет только азимутальную компоненту  $\mathbf{V} = \{0, V_\theta, 0\}$ , и поэтому оно всегда перпендикулярно плоскости расчета. Таким образом магнитное поле можно считать псевдоскаляром, и



Фиг. 10.2. Плотность, азимутальное магнитное поле и температура ионов и электронов в двумерной магнитогидродинамической модели плазменного фокуса (из работы [91]).

условие соленоидальности поля выполняется автоматически. На фигурах хорошо видны «вакуумные» области с большим магнитным полем и низкой плотностью.

## 2. Векторный потенциал магнитного поля

В предыдущих параграфах этой главы магнитное поле рассматривалось с точки зрения закона сохранения

магнитного потока. В этом случае магнитное поле описывается уравнением, вполне аналогичным уравнениям для плотности среды, импульса и плотности полной энергии.

Однако компоненты магнитного поля не являются независимыми и должны удовлетворять условию солености:

$$\nabla \mathbf{B} = 0.$$

В одномерных задачах это условие не создает дополнительных трудностей, но в случае двух или трех пространственных измерений непосредственная аппроксимация закона Фарадея (10.17) приведет к разностным ошибкам, которые вызовут нарушение условия солености.

Поэтому во многих случаях целесообразно определять магнитное поле путем решения нестационарного уравнения для векторного потенциала  $\mathbf{A}$ . Из уравнения (10.64) вытекает, что

$$\mathbf{B} = [\nabla, \mathbf{A}], \quad (10.65)$$

и аналогично закон Фарадея можно записать в виде нестационарного уравнения для векторного потенциала магнитного поля:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{E} = -\nabla \Phi, \quad (10.66)$$

где  $\Phi$  — скалярный потенциал. Из уравнения (10.66) и закона Ома (10.10) найдем связь векторного потенциала с движением среды:

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - [\mathbf{v} [\nabla, \mathbf{A}]] = -c \eta \mathbf{j} - c \nabla \Phi. \quad (10.67)$$

Плотность тока в свою очередь определяется законом Ампера (10.6) и поэтому связана с векторным потенциалом уравнением Пуассона:

$$\begin{aligned} [\nabla, [\nabla, \mathbf{A}]] &= \frac{4\pi \mathbf{j}}{c}, \\ \nabla^2 \mathbf{A} &= -\frac{4\pi \mathbf{j}}{c}, \end{aligned} \quad (10.68)$$

где использована калибровка Кулона  $\nabla \mathbf{A} = 0$ .

Целесообразность такого подхода зависит от геометрии рассматриваемой задачи. Рассмотрим использование векторного потенциала на примере двумерной задачи в декартовой системе координат  $(x, y)$ . Магнитное поле в плоскости  $(x, y)$  можно определить с помощью перпендикулярной к плоскости компоненты векторного потенциала  $A_z$ , которую можно рассматривать как псевдоскаляр. Скалярный потенциал вдоль оси  $z$  не меняется, поэтому уравнение для векторного потенциала (10.67) принимает простой вид:

$$\frac{\partial A_z}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla A_z = \frac{\eta c^2}{4\pi} \nabla^2 A_z. \quad (10.69)$$

Очевидно, что в отсутствие диффузии, связанной с ненулевым сопротивлением, изменение векторного потенциала магнитного поля обусловлено лишь переносом вместе с движением среды, что позволяет решать это уравнение обычным способом с помощью явных методов второго порядка точности (см. гл. 3, § 7). Компоненты магнитного поля определяются дифференцированием:

$$B_x = \frac{\partial A_z}{\partial y}, \quad B_y = -\frac{\partial A_z}{\partial x}, \quad (10.70)$$

и это обеспечивает *точное* выполнение условия соленоидальности.

Если в такой двумерной задаче все три компоненты магнитного поля отличны от нуля, то третья компонента магнитного поля  $B_z$  определяется из закона Фарадея, описанным выше способом:

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} + \nabla (\mathbf{v} B_z - \mathbf{B} v_z) = \nabla \frac{\eta c^2}{4\pi} \nabla B_z. \quad (10.71)$$

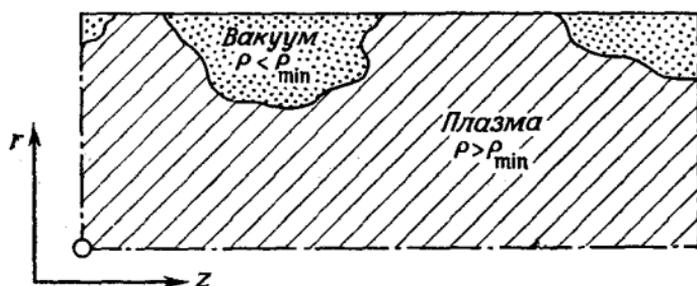
В этом случае три компоненты магнитного поля заданы двумя функциями  $B_z, A_z$ .

При рассмотрении двумерной задачи следует вновь вернуться к способам описания областей с низкой плотностью и большой альфвеновской скоростью (§ 3, п. 4). Для того чтобы избежать чрезвычайно жестких ограничений на величину шага по времени, накладываемых условием Куранта — Фридрихса — Леви при высоких «вакуумных» значениях альфвеновской скорости, мы ис-

пользуем приближенное рассмотрение, в котором вакуумная область считается изолятором, исключая таким образом слишком быстрые альфвеновские волны. Это означает, что в вакуумной области компонента поля  $B_z$  равна постоянной и определяется граничными условиями. В плоскости цилиндрических координат  $(r, z)$  вакуумное значение азимутальной компоненты магнитного поля определяется выражением

$$B_0 = \frac{2I}{rc},$$

где  $I$  — полный ток, протекающий во внешней цепи.



Фиг. 10.3. Вакуумная область в магнитогидродинамической модели. В этой области энергия среды равна нулю и вся энергия заключена в магнитном поле. Для определения поля в вакуумной области нужно решать уравнение Лапласа.

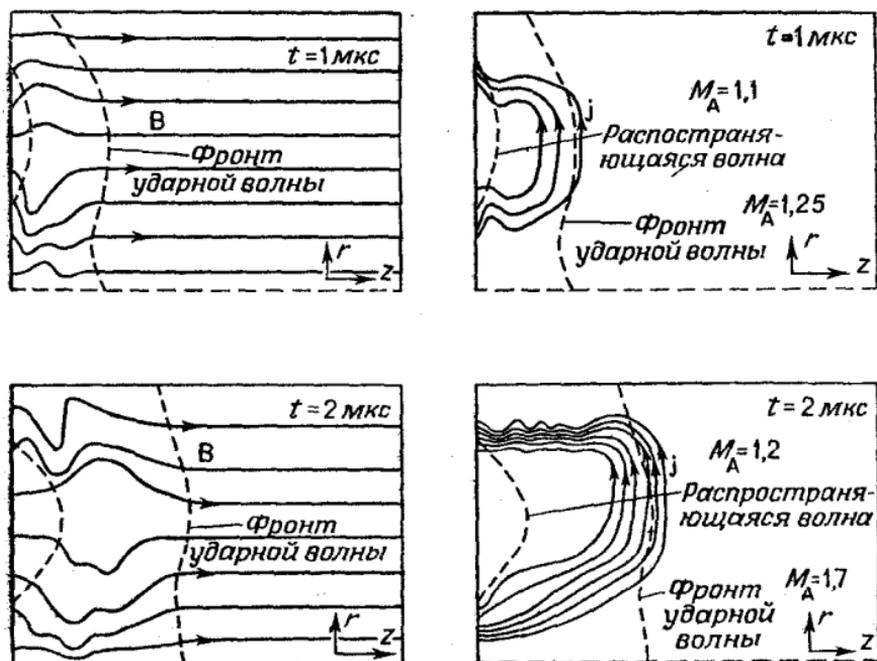
В то же время две другие компоненты магнитного поля, лежащие в плоскости задачи, должны быть найдены с помощью векторного потенциала (10.70), который в вакуумной области в плоскости  $(x, y)$  удовлетворяет уравнению Лапласа:

$$\nabla^2 A_z = 0. \quad (10.72)$$

Это уравнение приходится решать на каждом шаге по времени в области неправильной формы с движущейся границей (фиг. 10.3). Для области такой формы точные методы решения неприменимы, поэтому следует использовать метод последовательной верхней релаксации или метод итераций Чебышева (гл. 4).

Изложенный подход к решению двумерных задач магнитной гидродинамики был предложен Фриманом и

Лэйном [95], а также Уоткинсом [96]. Пример такой модели, иллюстрирующей сложную эволюцию во времени трехмерного магнитного поля, показан на фиг. 10.4. На этой фигуре показано «включение» ударной волны, параллельной начальному направлению магнитного поля,



Фиг. 10.4. Моделирование «включения» двумерной ударной волны с помощью явного консервативного метода.

Слева показаны магнитные поля в  $(r, z)$ -плоскости; справа — токи в той же плоскости, которые образуют ударную волну и создают третью компоненту магнитного поля (из работы [96]).

при этом ударная волна создает третью компоненту магнитного поля. По-видимому, обратные процессы «выключения» ударной волны играют существенную роль в диссипации магнитной энергии при вспышках на Солнце.

### 3. Заключительные замечания о специальных методах магнитной гидродинамики

Сложность уравнений магнитной гидродинамики и многогранность описываемых ими явлений не оставляют надежд на существование универсального метода реше-

ния всех задач. И хотя уже разработаны некоторые специальные методы изучения частных случаев, проблема моделирования в многомерной магнитной гидродинамике решена еще не полностью.

Кроме разностных методов решения уравнений магнитной гидродинамики, для случая сверхзвуковых движений можно использовать столкновительный метод частиц в ячейке (гл. 6, § 5), который применяется точно так же, как и в гидродинамических задачах [97]. Этот метод применим, если диффузионные процессы пренебрежимо малы и параметр  $\beta$  (10.58) для среды имеет значение порядка единицы.

Особое значение в магнитной гидродинамике имеет случай среды с низким значением  $\beta$ . Этот случай представляет огромный интерес для физики управляемого термоядерного синтеза, но он же по множеству причин является и наиболее трудным для изучения [91]. Если значение  $\beta$  в среде мало, то альфвеновские волны распространяются с очень высокими скоростями, и во избежание слишком мелкого шага по времени приходится применять неявные методы. Это нетрудно сделать в одномерном случае благодаря простоте обращения трехдиагональной матрицы, и гораздо сложнее обстоит дело в двух- и трехмерном случаях, так как для них можно использовать только значительно более медленные итерационные методы (гл. 4). Некоторые возможности ускорения процедуры решения многомерной задачи дает неявный метод переменных направлений (гл. 4, § 6, п. 6) [98].

В многомерной плазме существует также эффект анизотропии, обусловленный векторными свойствами магнитного поля. Дело в том, что в плазме низкой плотности распространение волн и диффузионные процессы происходят преимущественно вдоль магнитного поля [92, 99], поэтому возникают неизбежные трудности моделирования анизотропной среды на анизотропной эйлеровой сетке. Если поля не претерпевают слишком сильных искажений или возмущений, то очевидно, что можно разработать такую разностную схему, в которой силовые линии магнитного поля будут играть роль координатных линий. В работе [100] этот метод был использован для

решения уравнений гидродинамики при заданной и неизменной конфигурации магнитного поля (предельный случай  $\beta \rightarrow 0$ ).

## § 5. Гравитационная гидродинамика

Основное приложение гравитационной гидродинамики состоит в изучении структуры и свойств звезд [101]. Существует множество проблем, связанных с макроскопическим изучением звезд, но мы назовем только три важнейших: эволюция звезд, как процесс рождения энергии в ядерных реакциях и ее потери через излучение; структура атмосферы звезд, которая может быть описана стационарной моделью в плоской геометрии [102]; и, наконец, динамические свойства звезд, такие, как пульсация звезд [89] или гравитационный коллапс старых холодных звезд, описание динамики которого может потребовать применения специальной или общей теории относительности [103].

Ниже мы ограничимся рассмотрением только классической (нерелятивистской) формулировки задач гравитационной динамики и, в частности, исследованием нелинейной взаимосвязи между полем и давлением среды в задачах динамики звезд. Тип рассматриваемых задач очень близок к задачам магнитной гидродинамики. И хотя, с одной стороны, многие задачи проще, так как их можно рассматривать в одномерном приближении, предполагая сферическую симметрию звезды, с другой стороны, в конкретных приложениях может возникнуть необходимость описания многих локальных процессов, происходящих при ионизационных явлениях, в ядерных реакциях и при эффектах неравновесного излучения.

### 1. Динамические уравнения с учетом излучения

Как уже отмечалось в § 1, в нерелятивистском случае действие поля собственного тяготения звезды можно описать путем добавления объемной силы в гидродинамическое уравнение для ускорения или импульса среды (10.1), (10.2). В трехмерном случае гидродинамические уравнения для плотности, плотности импульса и удель-

ной внутренней энергии (9.1) — (9.3) самогравитирующей среды можно записать в эйлеровой форме:

$$\text{масса:} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \nabla \rho \mathbf{v}; \quad (10.73)$$

$$\text{импульс:} \quad \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = - \nabla (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla p - \rho \nabla \Phi; \quad (10.74)$$

$$\text{внутренняя энергия:} \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho \varepsilon = - \rho \nabla \mathbf{v} - \nabla (\rho \varepsilon \mathbf{v} + \mathbf{q}) + S; \quad (10.75)$$

потенциал гравитационного поля определяется уравнением Пуассона

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho. \quad (10.76)$$

Величина  $\mathbf{q}$  описывает диффузию энергии, а  $S$  — функция распределения источников энергии, обусловленных химическими или ионизационными процессами, а также процессами ядерного синтеза и деления.

Выше мы уже выделили основные явления, связанные с гиперболическими уравнениями, а именно: перенос, звуковые волны и гравитационные колебания (§ 1). Но, кроме этих эффектов, существует еще одно важнейшее свойство, которое следует описать в системе уравнений гравитационной гидродинамики, — это излучение. Поле излучения можно описать несколькими способами. Наиболее полный подход состоит в том, чтобы считать любой малый элемент звезды электрически нейтральной системой электронов, ядер (или ионов) и фотонов, причем для удельной внутренней энергии каждого сорта частиц можно записать отдельное уравнение. Но, так как общая плотность частиц чрезвычайно велика, мы будем считать, что каждый сорт частиц находится в локальном термодинамическом равновесии со всеми остальными сортами частиц. В этом приближении удельная внутренняя энергия  $\varepsilon$  (10.75) равна полной удельной внутренней энергии, т. е. сумме по всем сортам частиц. Она связана с плотностью и давлением среды весьма сложным уравнением состояния<sup>1)</sup>:

$$\varepsilon = \varepsilon(\rho, p). \quad (10.77)$$

<sup>1)</sup> См., например, работу [104].

Предположение о локальном термодинамическом равновесии между сортами частиц позволяет особенно простым способом учесть поле излучения непосредственно в уравнениях (10.74) и (10.75). Полное давление среды равно сумме парциальных давлений излучения  $p_r$ , электронов  $p_e$  и ионов  $p_i$ :

$$p = p_r + p_e + p_i. \quad (10.78)$$

Согласно статистической механике, мощность излучения черного тела равна

$$W = \sigma T^4, \quad (10.79)$$

где  $T$  — равновесная температура. Равенство (10.79) выражает закон Стефана — Больцмана, где  $\sigma$  — постоянная Стефана. Соответственно давление излучения равно [105]

$$p_r = \frac{4}{3} \frac{\sigma T^4}{c}, \quad (10.80)$$

где  $c$  — скорость света.

Аналогично влияние энергии излучения следует учесть в уравнении для внутренней энергии (10.75). В предположении о термодинамическом равновесии между полем излучения и средой перенос энергии излучения можно ввести в диффузионный член  $\mathbf{q}$ , так как поток энергии излучения равен

$$\mathbf{q} = \frac{\partial}{\partial \tau} (p_r c), \quad (10.81)$$

где  $\partial \tau$  — оптическая толщина,

$$\partial \tau = -k\rho dr, \quad (10.82)$$

а  $k$  — коэффициент непрозрачности вещества. С помощью уравнений (10.80) — (10.82) выразим поток энергии излучения в виде диффузионного члена уравнения для внутренней энергии

$$\mathbf{q} = -\alpha \nabla T$$

с коэффициентом диффузии

$$\alpha = \frac{16}{3} \frac{\sigma T^3}{k\rho}. \quad (10.83)$$

Уравнения (10.73)—(10.76) с учетом давления излучения и диффузии излучения образуют систему дифференциальных уравнений в частных производных для исследования динамики звезд. Ядерные и химические реакции рассматриваются как локальные процессы, поэтому их можно описать системой обыкновенных дифференциальных уравнений для каждой точки среды. Эти процессы воздействуют на динамические свойства через распределение источников  $S$  в уравнении для внутренней энергии. Кроме того, это воздействие проявляется в зависимости коэффициента прозрачности и уравнения состояния среды от локальных процессов [106]. Скорости ядерных реакций в свою очередь зависят от плотности, температуры и относительной распространенности каждого типа ядер [107].

## 2. Лагранжевы массовые координаты

Одномерные модели применимы к решению многих вопросов о структуре и внутренней динамике звезд. Одномерность задачи предполагает сферическую симметрию и исключает возможность учета конвективных процессов, которые могут играть роль в турбулентном перемешивании среды. И все же упрощение, достигаемое за счет перехода только к одной радиальной пространственной переменной, весьма значительно, так как это позволяет использовать лагранжеву сетку, а неявные схемы легко разрешимы в одномерном случае.

Определим функцию  $r$  как переменную, описывающую сферическую оболочку звезды:

$$\frac{dr}{dt} = v, \quad (10.84)$$

где  $v$  — радиальная скорость центра масс. В качестве независимой переменной удобно выбрать массу, заключенную внутри сферы радиусом  $r$ :

$$M(r) = \int_0^r 4\pi s^2 \rho(s) ds. \quad (10.85)$$

Уравнение непрерывности (10.73) в лагранжевой форме принимает вид

$$\frac{dM}{dt} = 0. \quad (10.86)$$

Очевидно, что масса вещества, заключенного внутри сферической лагранжевой оболочки, равна постоянной.

Отсюда следует, что в такой простой геометрии уравнение Пуассона (10.76) можно проинтегрировать и найти локальное гравитационное ускорение  $g$ :

$$g = -\frac{\partial\Phi}{\partial r} = -\frac{GM}{r^2}. \quad (10.87)$$

Перепишем уравнение для импульса (10.74) в виде уравнения для ускорения в лагранжевых координатах, что с учетом выражения (10.87) для силы тяжести дает

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{GM}{r^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r}. \quad (10.88)$$

Переходя к независимой пространственной переменной  $M$ , запишем уравнение для ускорения в виде

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{GM}{r^2} - 4\pi r^2 \frac{\partial p}{\partial M}. \quad (10.89)$$

Дифференциальное уравнение для удельной внутренней энергии (10.75) в лагранжевой форме имеет вид

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} = -p \nabla v - \nabla q + S.$$

Вновь предполагая сферическую симметрию и заменяя пространственную координату переменной  $M$ , получаем

$$\frac{d\epsilon}{dt} = -p \frac{\partial}{\partial M} (4\pi r^2 v) - \frac{\partial}{\partial M} (4\pi r^2 q) + \frac{S}{\rho}. \quad (10.90)$$

Отметим, что вместо уравнения для удельной внутренней энергии можно использовать другое уравнение (не учитывающее ядерные реакции). Удельная энергия среды равна

$$u = \frac{1}{2} v^2 - \frac{GM}{r} + \epsilon. \quad (10.91)$$

Домножая уравнение (10.89) и складывая результат с уравнением (10.90), получим консервативное уравне-

ние для величины  $u$ . Однако в звездах возможны большие различия между значениями гравитационной и тепловой энергий в разных областях, в частности, у поверхности звезды в областях низкой плотности вклад тепловой энергии в величину  $u$  мал, поэтому вычисление температуры из уравнения для полной энергии приведет к большой ошибке. Следовательно, наиболее целесообразно непосредственно использовать уравнение для внутренней энергии.

Таким образом, задача сведена к трем одномерным (по «пространственной» переменной  $M$ ) уравнениям первого порядка (по времени) для радиуса  $r(M, t)$  (10.84), скорости  $v(M, t)$  (10.89) и внутренней энергии  $\varepsilon(M, t)$  (10.90). Уравнения принадлежат к гиперболическому типу и описывают перенос, звуковые волны и гравитационные колебания, хотя учет радиационной диффузии делает уравнение для энергии параболическим со скоростью релаксации

$$\omega_R = \frac{\Delta^2}{4\sigma T^3/3k\rho}. \quad (10.92)$$

В задачах эволюции звезд интерес представляют процессы, протекающие за очень длительное время, поэтому инерцией среды можно пренебречь и использовать приближение гидростатического равновесия. Тогда уравнение для ускорения (10.89) примет вид

$$\frac{GM}{r^2} + 4\pi r^2 \frac{\partial p}{\partial M} = 0. \quad (10.93)$$

Сделанное предположение приводит к исключению из уравнений быстрых процессов, связанных со звуковыми волнами и гравитационными колебаниями.

### 3. Явные разностные методы решения задачи о пульсации звезд

Формулировка одномерной задачи гравитационной гидродинамики очень близка к формулировке аналогичных магнитогидродинамических задач, поэтому все методы решения последних (§ 3) в равной степени применимы и к гравитационному случаю. Для интегрирования

этих уравнений во времени можно использовать как явные, так и неявные методы.

Рассмотрим явный лагранжевый метод решения полученных уравнений, который аналогичен методу, использованному в соответствующей гидродинамической задаче (гл. 9, § 5, п. 1). Введем на оси лагранжевой независимой переменной  $M$  дискретную сетку  $j$  (фиг. 9.17), ячейки  $j - 1/2$  которой имеют смысл сферических слоев:

$$M_j = M_{j-1} + \Delta M_{j-1/2}. \quad (10.94)$$

Функция  $r$  — радиус, отвечающий данному значению массы, и скорость  $v$  определены в узлах сетки  $r_j^n$  и  $v_j^{n-1/2}$ , причем скорости заданы в полуцелые моменты времени  $t^{n-1/2}$ . Все остальные переменные (существенные переменные) можно задать их значениями в ячейках  $j - 1/2$  в целые моменты времени. Получив, таким образом, значение радиуса и давления (давление найдем из уравнения состояния) в целые моменты времени в ячейках  $j - 1/2$ , запишем центрированную по времени и по пространству разностную схему

$$v_j^{n+1/2} = v_j^{n-1/2} - \Delta t \frac{GM_j}{(r_j^n)^2} - \frac{\Delta t 4\pi (r_j^n)^2}{1/2 (\Delta M_{j+1/2} + \Delta M_{j-1/2})} (p_{j+1/2}^n - p_{j-1/2}^n). \quad (10.95)$$

Отсюда следует, что радиальные координаты границ ячеек в целые моменты времени можно найти по формулам

$$r_j^{n+1} = r_j^n + v_j^{n+1/2} \Delta t. \quad (10.96)$$

Локальная плотность в каждой ячейке равна

$$\rho_{j-1/2}^{n+1} = \frac{M_j - M_{j-1}}{4/3\pi [(r_j^{n+1})^3 - (r_{j-1}^{n+1})^3]}. \quad (10.97)$$

Остается решить уравнение для удельной внутренней энергии (10.90). Основная трудность отыскания этого решения связана с нелинейностью члена радиационной диффузии  $q$  (10.83). Так как коэффициент радиационной диффузии  $\alpha$  сильно зависит от температуры и плотности, то уравнение диффузии необходимо решать неяв-

ным методом так, чтобы шаг по времени  $\Delta t$  не был ограничен временем спадания диффузии. Уравнение для внутренней энергии можно записать в виде

$$\frac{d}{dt}(\bar{\epsilon}T) + \bar{p}T \frac{\partial}{\partial M}(4\pi r^2 v) - \frac{\partial}{\partial M}(4\pi r^2 \bar{\alpha} \frac{\partial T}{\partial M}) = \frac{S}{\rho}, \quad (10.98)$$

где удельная внутренняя энергия связана с температурой и давлением с помощью уравнения состояния, и

$$\epsilon = \bar{\epsilon}T,$$

$$p = \bar{p}T.$$

Второй член в уравнении (10.98) описывает адиабатическое сжатие, причем скорость сжатия каждого элементарного объема связана с изменением плотности (10.97)

$$\frac{\partial}{\partial M}(4\pi r^2 v) = -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt}.$$

Таким образом, задача решения уравнения (10.98) неявным методом полностью аналогична соответствующей задаче для нелинейного уравнения диффузии в магнитной гидродинамике (§ 3, п. 2), что и позволяет вновь воспользоваться тем же методом, основанным на схеме Кранка — Никольсона. Чертой в уравнении (10.98) обозначены те переменные, которые не зависят от температуры на итерационном шаге (§ 3, п. 2). На каждом итерационном шаге приходится решать систему алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей для определения температуры во всех ячейках. Шаг по времени завершается, когда ошибка итерационного процесса будет достаточно мала.

Так как гравитационная частота возрастает с возрастанием плотности, а шаг по времени должен быть меньше, чем период гравитационных колебаний, то внутренняя граница выбирается не при  $r = 0$ , а на жесткой излучающей сфере, расположенной в центре звезды. Такая модель была использована [89] при изучении пульсации звезд. С помощью этой модели было установлено, что в широкой области параметров звезды существуют нелинейные стационарные колебания, характерная амплитуда которых составляет около 10% от значения в равновесном состоянии. Эти результаты в основном совпадают с результатами наблюдений.

# Литература

1. *Richtmyer R. D., Morton K. W.*, *Difference Methods for Initial-Value Problems*, New York—London, Interscience, 1967. (Имеется перевод: *Р. Д. Рихтмайер, К. В. Мортон*, Разностные методы решения краевых задач, изд-во «Мир», 1972.)
2. *Duhem P.*, *The Aim and Structure of Physical Theory*, Princeton, New Jersey, Princeton University Press, 1954.
3. *Philips G. M., Taylor P. J.*, *Computers*, London, Methuen, 1969.
4. *Courant R., Hilbert D.*, *Methods of Mathematical Physics, Vol. I*, New York, Interscience, 1953. (Имеется перевод: *Р. Курант, Д. Гильберт*, Методы математической физики, т. 1, Гостехиздат, М., 1951.)
5. *Fox L., Mayers D. F.*, *Computing Methods for Scientists and Engineers*, Oxford, Clarendon Press, 1968.
6. *Lax P. D.*, *Comm. Pure Appl. Math.*, 7, 135 (1954).
7. *Courant R., Friedrichs K. O., Lewy H.*, *Math. Ann.*, 100, 32 (1928). [Имеется перевод: *Р. Курант, К. Фридрихс, Г. Леви*, УМН, 8, 125 (1940).]
8. *Lax P. D., Wendroff B.*, *Comm. Pure Appl. Math.*, 13, 217 (1960).
9. *Richtmyer R. D.*, *A Survey of Difference Methods for Non-Steady Fluid Dynamics*, Report NCAR-TN 63-2, Colorado, Natl. Center for Atmos. Res., 1962.
10. *Roberts K. V., Weiss N. O.*, *Math. Comp.*, 20, 272 (1966).
11. *Crank J., Nicholson P.*, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 43, 50 (1947).
12. *Dufort E. C., Frankel S. P.*, *Math. Tables and Other Aids to Comp.*, 7, 135 (1953).
13. *Birkhoff G., Mac Lane S.*, *A Survey of Modern Algebra*, New York, Macmillan, 1965.
14. *Fox L.*, *An Introduction to Numerical Linear Algebra*, Oxford, Clarendon Press, 1964.
15. *Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н.*, *Вычислительные методы линейной алгебры*, Физматгиз, М., 1963.
16. *Varga R. S.*, *Matrix Iterative Analysis*, New Jersey, Prentice-Hall, 1962.
17. *Wilkinson J. H.*, *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford, Clarendon Press, 1964.
18. *Boris J., Roberts K. V.*, *Journ. Comp. Phys.*, 4, 552 (1969).
19. *Hockney R. W.*, *The potential calculation and some applications*, в книге «Methods in Computational Physics», Vol. 9, Plasma

- Physics, New York — London, Academ. Press, p. 135, 1970. (Имеется перевод в книге «Вычислительные методы в физике плазмы», изд-во «Мир», 1974.)
20. *Buneman O.*, Report SUIPR 294, California, Inst. for Plasma Res., Stanford Univ., 1969.
  21. *Cooley J. W., Tukey J. W.*, Math. Comp., **19**, 297 (1965).
  22. *Young D. M.*, The numerical solution of elliptic and parabolic differential equations, в книге A Survey of Numerical Analysis, New York, McGraw-Hill, 1962.
  23. *Golub G. S., Varga R. S.*, Numerische Math., **3**, 157 (1961).
  24. *Peaceman D. W., Rachford H. H., Jr.*, Journ. Soc. Indus. Appl. Math., **3**, 28 (1955).
  25. *Spitzer L.*, Physics of Fully Ionized Gases, New York, Wiley, 1962. (Имеется перевод: *Л. Спитцер*, Физика полностью ионизованного газа, изд-во «Мир», 1965.)
  26. *Alder B. J., Wainwright T. E.*, Journ. Chem. Phys., **31**, 459 (1959).
  27. *Alder B. J., Wainwright T. E.*, Journ. Chem. Phys., **33**, 1439 (1960).
  28. *Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E.*, Journ. Chem. Phys., **21**(6), 1087 (1953).
  29. *Alder B. J., Wainwright T. E.*, Phys. Rev., **127**(2), 359 (1962).
  30. *Tolman R.-C.*, The Principles of Statistical Mechanics, London, Oxford Univ. Press, 1967.
  31. *Jackson J. D.*, Classical Electrodynamics, New York — London, Wiley, 1963.
  32. *Hockney R. W.*, Journ. Comp. Phys., **8**, 19 (1971).
  33. *Birdsall C. K., Langdon A. B., Okuda H.*, Finite-size particle physics applied to plasma simulations, в книге «Methods in Computational Physics», Vol. 9, Plasma Physics, New York — London, Academ. Press., p. 241, 1970. (Имеется перевод в книге «Вычислительные методы в физике плазмы», изд-во «Мир», 1974.)
  34. *Birdsall C. K., Fuss D.*, Journ. Comp. Phys., **3**, 494 (1969).
  35. *Buneman O.*, Phys. Rev., **115**, 503 (1959).
  36. *Dawson J.*, Phys. Fluids, **5**, 445 (1962).
  37. *Dawson J.*, The electrostatic sheet model for a plasma and its modification to finite-size particles, в книге «Methods in Computational Physics», Vol. 9, Plasma Physics, New York — London, Academ. Press, p. 1, 1970. (Имеется перевод в книге «Вычислительные методы в физике плазмы», изд-во «Мир», 1974.)
  38. *Morse R. L., Nielson C. W.*, Phys. Fluids, **12**, 2418 (1969).
  39. *Morse R. L.*, Multidimensional plasma simulation by the particle-in-cell method, в книге «Methods in Computational Physics», Vol. 9, Plasma Physics, New York — London, Academ. Press, p. 213, 1970. (Имеется перевод в книге «Вычислительные методы в физике плазмы», изд-во «Мир», 1974.)
  40. *Hockney R. W.*, Self-consistent electron motion through the triode substrate, неопубликовано.
  41. *Oort J. H.*, Stellar dynamics, в книге «Galactic Structure», Illinois, Univers. of Chicago Press, p. 455, 1965.

42. *Hohl F.*, Dynamical Evolution of Disk Galaxies (Report NASA-TR, R-343), Springfield, Virginia, National Tech. Inform. Service, 1970.
43. *Hockney R. W., Hohl F.*, *Astron. Journ.*, **74**, 1102 (1969).
44. *Hohl F.*, Computer Experiments on the Structure and Dynamics of Spiral Galaxies, Report NASA-TN D-6630, Springfield, Virginia, National Tech. Inform. Service, 1971.
45. *Harlow F. H.*, The particle-in-cell computing method for fluid dynamics, в книге «Methods in Computational Physics», Vol. 3, Fundamental Methods in Hydrodynamics, New York—London, Academ. Press, p. 319, 1964. (Имеется перевод в книге «Вычислительные методы в гидродинамике», изд-во «Мир», 1967.)
46. *Amsden A. A.*, The Particle-in-Cell Method for the Calculation of the Dynamics of Compressible Fluids, Report LA-3466, New Mexico, Los Alamos Sci. Lab., 1966.
47. *Harlow F. H., Shannon J. P.*, *Journ. Appl. Phys.*, **38**, 3855 (1967).
48. *Dicke R. H., Wittke J. P.*, Introduction to Quantum Mechanics, Reading, Massach.—London, Addison—Wesley, 1960.
49. *Matthews P. T.*, Introduction to Quantum Mechanics, New York—London, McGraw-Hill, 1968.
50. *Bohm D., Pines D.*, *Phys. Rev.*, **80**, 903 (1950).
51. *Bohm D., Pines D.*, *Phys. Rev.*, **92**, 609 (1953).
52. *Slater J. C.*, *Phys. Rev.*, **91**, 528 (1953).
53. *Slater J. C.*, *Phys. Rev.*, **165**, 658 (1968).
54. *Hartree D. R.*, The Calculation of Atomic Structures, New York, Wiley—London, Chapman and Hall, 1957.
55. *Slater J. C.*, Quantum Theory of Molecules and Solids, Vol. 1, Electronic Structure of Molecules, New York—London, McGraw-Hill, 1963.
56. *Roothan C. C. J.*, *Revs. Modern Phys.*, **23**, 69 (1951).
57. *Roothan C. C. J., Bagus P. S.*, Atomic self-consistent field calculations by the expansion method, Methods in Computational Physics, Vol. 2, Quantum Mechanics, New York—London, Academ. Press, p. 47, 1963.
58. *Dekker A. J.*, Solid state Physics, London, Macmillan, 1957.
59. *Slater J. C.*, Quantum Theory of Molecules and Solids, Vol. II, Symmetry and Energy Bands in Crystals, New York—London, McGraw-Hill, 1965.
60. *Herring C.*, *Phys. Rev.*, **57**, 1169 (1940).
61. *Cohen M. H., Heine V.*, *Phys. Rev.*, **122**, 1821 (1961).
62. *Brust D.*, The pseudopotential method and the single-particle electronic excitation spectrum of crystals, в книге «Methods of Computational Physics», Vol. 8, Energy Bands of Solids, New York—London, Academ. Press. p. 33, 1968.
63. *Chapman S., Cowling T. G.*, The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases, London—New York, Cambridge Univers. Press, 1953. (Имеется перевод: С. Чепмен, Т. Каулинг, Математическая теория неоднородных газов, ИЛ, 1960.)
64. *Goldstein H.*, Classical Mechanics, Reading, Massach.—London, Addison—Wesley, 1962. (Имеется перевод: Г. Голдстейн, Классическая механика, Л., 1957.)

65. Berk H. L., Roberts K. V., The waterbag model, в книге *Methods in Computational Physics*, Vol. 9, Plasma Physics, New York — London, Academ. Press, p. 87, 1970. (Имеется перевод в книге «Вычислительные методы в физике плазмы», изд-во «Мир», 1974.)
66. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., *Механика сплошной среды*, Гостехиздат, 1954.
67. Arakawa A., *Journ. of Comp. Phys.*, **1**, 119 (1966).
68. Harlow F. H., Welch J. E., *Phys. Fluids*, **8**, 2182 (1965).
69. Dutton J. A., Deaven D. G., Some observed properties of atmospheric turbulence, в книге «Statistical Models and Turbulence», Berlin — New York, Springer — Verlag, 1972.
70. Onsager L., *Nuovo Cimento, Suppl.*, **6**, 279 (1949).
71. Christiansen J., Vortex: A 2-Dimensional Hydrodynamics Simulation Code, Report CLM-R 106, Abingdon, UKAEA, Culham Labor., 1971.
72. Edgerton H. E., Killian J. R., в книге «Flash», Boston, Massach. Charles, T. Branford, 1954.
73. Harlow F. H., Shannon J. P., *Science*, **157**, 547, 1967.
74. Harlow F. H., et al., *Science*, **149**, 1092, (1965).
75. Butler T. D., *Phys. Fluids*, **10**, 1205 (1967).
76. Courant R., Friedrichs K. O., *Supersonic Flow and Shock Waves*, New York, Interscience, 1948. (Имеется перевод: Р. Курант, К. Фридрихс, Сверхзвуковое течение и ударные волны, ИЛ, 1950.)
77. Von Neumann J., Richtmyer R. D., *Journ. Appl. Phys.*, **21**, 232, 1950.
78. Lapidus A., *Journ. Comp. Phys.*, **2**, 154 (1967).
79. Richardson L. F., *Weather Prediction by Numerical Process*, London, Cambridge Univers. Press, 1922.
80. Bryan K., *Journ. Comp. Phys.*, **4**, 347 (1969).
81. Kasahara A., Washington W. M., *Monthly Weather Rev.*, **95**(7), 389 (1967).
82. Leith C. E., Numerical simulation of the Earth's atmosphere, в книге «Methods in Computational Physics», Vol. 4, Applications in Hydrodynamics, New York — London, Academ. Press, p. 1, 1965.
83. Haurwitz B., *Dynamic Meteorology*, New York, McGraw-Hill, 1941.
84. Corby G. A., Gilchrist A., Newson R. L., *Quar. Journ. of the Meteorological Soc.*, **98**, 809 (1972).
85. Lilly D. K., The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments, *Proceedings of the IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences (IBM Form No. 320-1951)*, 1967.
86. Deardorff J. W., *Journ. Comp. Phys.*, **7**, 120 (1971).
87. Lundgren T. S., *Phys. Fluids*, **10**, 969 (1967).
88. Bryan K., Cox M. D., *Journ. Physical Oceanography*, **2**, 319 (1972).
89. Christy R. F., *Astrophys. Journ.*, **144**, 108 (1966).
90. Jeffrey A., *Magnetohydrodynamics*, New York, Wiley, 1966.

91. *Roberts K. V., Potter D. E.*, Magnetohydrodynamic calculations, в книге «Methods in computational Physics», Vol. 9, Plasma Physics, New York—London, Academ. Press, p. 339, 1970. (Имеется перевод в книге «Вычислительные методы в физике плазмы», изд-во «Мир», 1974.)
92. *Robinson B. B., Bernstein I. B.*, Ann. Phys., 18, 110 (1963).
93. *Hain K., Hain G., Roberts K. V., Roberts S. J., Koppendorfer W.*, Zs. Naturforsch., 15a, 1039 (1960).
94. *Potter D. E.*, Phys. Fluids, 14, 1911 (1971).
95. *Freeman J. R., Lane F. O.*, Initial Results from a Two-Dimensional Lax-Wendroff Hydrodynamic Code, Report LA-3990, Los Alamos Scientific Laboratory, New Mexico, paper C7, 1968.
96. *Watkins M. L.*, Magnetohydrodynamic simulation of the switch-on shock in two-dimensions, неопубликовано.
97. *Butler T. D., Henins I., Jahoda F., Marshall J., Morse R. L.*, Phys. Fluids, 12, 1904 (1969).
98. *Lindemuth I. R.*, The Alternating-Direction-Implicit Numerical Solution of Time-Dependent, Two-Dimensional Two-Fluid Magnetohydrodynamic Equations, Report TID-4500, UC.34, Livermore, Univ. of Calif., Lawrence Rad. Lab., 1971.
99. *Kaufman A. N.*, Phys. Fluids, 3, 610 (1960).
100. *Winsor N. K., Johnson J. L., Dawson J. M.*, Journ. Comp. Phys., 6, 430 (1970).
101. *Schwarzschild M.*, Structure and Evolution of the Stars, Princeton, New Jersey, Princeton Univers. Press, 1958.
102. *Mihalas D.*, The calculation of model stellar atmospheres, в книге «Methods in Computational Physics», Vol. 7, Astrophysics, New York—London, Academ. Press, p. 1, 1967.
103. *May M. M., White R. H.*, Stellar dynamics and gravitational collapse, в книге «Methods in computational Physics», Vol. 7, Astrophysics, New York—London, Academ. Press, p. 219, 1967.
104. *Kippenhahn R., Weigert A., Hofmeister E.*, Methods for calculating stellar evolution, в книге «Methods in computational Physics», Vol. 7, Astrophysics, New York—London, Academ. Press, p. 129, 1967.
105. *Eyring H., Henderson D., Stover B. J., Eyring E. M.*, Statistical Mechanics and Dynamics, New York—London, Wiley, 1964.
106. *Cox A. N., Stewart J. N.*, Astrophys. Journ. Suppl., 11, 22 (1965).
107. *Reeves H.*, Stellar energy sources, в книге «Stellar Structure», Chicago—London, Univers. of Chicago Press, p. 113, 1965.

## ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Адамса — Башфорта метод 59, 99, 283, 319  
альфвеновские волны 355, 363, 371  
Ампера закон 342  
анизотропия среды 364, 373  
ансамбль канонический 179  
аппроксимация непрерывной функции 24  
— оператора Лапласа 120  
— производной по времени 35  
— — по пространству 29
- Безразмерная форма уравнений 197  
Блоха теорема 246  
— функция 247  
Бриллюэна зоны 247  
Буссинеска приближение 337
- «Вакуумная» область в МГД 355, 362, 366, 371  
вариационный принцип 223  
вектор ошибки 41, 143  
— решетки 244  
Власова уравнение 256  
«водяного мешка» метод 262  
волновая функция 221  
— — антисимметричная 228  
— — кристалла 244, 250  
— — радиальная 240  
вязкости коэффициент 276, 346, 351  
— тензор 275, 328, 346  
вязкость искусственная 324, 335, 365  
— кинематическая 278
- Гамильтониан 222, 234, 248, 293  
Гаусса метод 137, 139  
Гаусса — Зайделя метод 149, 156  
гидродинамики уравнения 212, 271, 299  
— — в консервативной форме 274, 311, 318  
— — в лагранжевой форме 273, 310, 312  
— — в эйлеровой форме 272, 311, 315  
гравитационная система многих тел 61, 184, 210  
гравитационной гидродинамики уравнения 341, 375  
граничные условия 118, 131, 240, 303, 320, 335  
— — периодические 132, 197
- Давление 272, 284, 341, 361, 376  
— излучения 376  
— магнитное 343  
движения уравнения 163, 166, 170, 183, 195, 265  
двухслойная схема 51  
дебаевская длина 189  
— сфера 189, 200  
динамика атмосферы 329  
дисперсионное соотношение 70, 76, 86  
дисперсия разностная 84, 103, 320, 356  
диффузия искусственная 106, 321, 326  
— нелинейная 357, 380  
— радиационная 380  
— разностная 84, 103, 262, 356, 365  
Доплера эффект 317, 355  
дрейф в скрещенных полях 169  
Дюфора — Франкеля метод 110
- Завихренность 278, 293, 337  
задача с начальными условиями 33, 122
- Интерполирование 24, 302  
источника функция 74, 125, 375  
итерационный метод 141, 156, 241, 358, 361, 381
- Калибровка 279, 369  
Кармана вихревая дорожка 296  
квантовое число 237  
коллапс гравитационный 374  
коллективные свойства системы частиц 190  
консервативная схема 90  
консервативное уравнение 65, 69, 214, 274, 291, 300, 311, 318, 364  
консервативные силы 256  
кориолисова сила 284, 331  
краевая задача 118  
Кранка — Никольсона метод 108, 122, 358, 381

- Куранта — Фридрихса — Леви  
 условие 84, 96, 103, 106, 215,  
 283, 290, 317, 326, 355
- Лагранжа множитель 225, 243  
 лагранжева производная по вре-  
 мени 72, 212, 273, 312, 333  
 — сетка 313, 356, 380  
 — форма уравнений 212, 264,  
 273, 310, 312, 334
- Лакса метод 83, 101, 104, 260,  
 316, 353  
 — — консервативный 92, 288
- Лакса — Вендроффа метод 262,  
 319  
 — — — двушаговый 97, 101, 281  
 — — — одношаговый 102
- Лежандра уравнение 235  
 — функции 236
- Лелеве метод 101
- Ленарда — Джонса потенциал 174
- Лоренца сила 166
- Магнитной гидродинамики урав-  
 нения 341  
 — — — в лагранжевой форме  
 349, 356, 360  
 — — — в консервативной фор-  
 ме 348, 364  
 — — — в эйлеровой форме 345  
 — — — одномерные 353
- магнитный звук 355, 359
- Максвелла уравнения 342
- «маркеров на сетке» метод 302
- Маркова процесс 179
- матричное уравнение 114
- матрица итерационная 142  
 — обратная 114  
 — разреженная 118  
 — трехдиагональная 116, 118,  
 127, 135, 154, 240, 334, 360
- Маха числа 363
- мелкой воды уравнения 300
- моделирование галактик 204
- Монте-Карло метод 178
- Навье — Стокса тензор 275  
 — — уравнение 285, 300, 338  
 нагрев вязкостный 323, 347  
 — джоулев 347, 358
- натяжение силовых линий 343, 349
- Неймана условие 78, 81, 84, 94,  
 99, 106, 317, 355
- неразличимость частиц 227
- несжимаемость 277, 287  
 — фазовой среды 262
- неустойчивость безусловная 82,  
 110  
 — двухпучковая 202, 269  
 — Кельвина — Гельмгольца 296  
 — разностного решения 48, 53,  
 167
- неявный метод 37, 352  
 — — второго порядка точности  
 55, 108  
 — — Хейна 359
- нормировки условие 240
- «Облако в ячейке» 201
- обратимость времени 164
- океана модель 329, 336
- Ома закон 343
- Паули принцип 228
- переменных направлений метод  
 153, 157, 373
- переноса коэффициенты 351
- перехода матрица 42, 77, 93, 316,  
 354, 360  
 — множитель 41, 46, 50, 53, 57,  
 80, 82, 96, 100  
 — оператор 37, 76
- пинч 367
- плазма бесстолкновительная 202,  
 259
- плазменный фокус 368
- подоболочка электронная 237
- последовательной верхней релак-  
 сации метод 150, 157, 371  
 — — — циклический 152
- потенциал векторный 366, 369  
 — обменный 230  
 — — усредненный 232  
 — поля частиц 184, 194  
 — — — самосогласованный 195,  
 226, 231  
 — ядер в кристалле 244  
 — ядра атома 233
- «почти второго порядка» метод  
 99, 102, 319
- прогноз погоды 335
- прогонки метод 123
- псевдопотенциал 252

- Пуассона уравнение 74, 117, 185, 230, 261  
 — — в интегральной форме 226  
 — — двумерное 120, 199, 282  
 — — для давления 285, 290  
 пульсация звезд 342, 374
- Распределение заряда частицы на сетке 186, 195, 201  
 Рейнольдса число 326, 347, 365
- «С перешагиванием» метод 51, 102, 104, 164, 167, 171, 195, 262, 266, 295, 319  
 — — — консервативный 94  
 сетка разностная по времени 35  
 — — по пространству 23  
 система частиц 170  
 — — бесстолкновительная 192, 257  
 — — в квантовой механике 220  
 — — термодинамическая 173, 181  
 скорость звука 277, 317, 355  
 — сходимости итерационного процесса 148, 154, 156  
 Слэтера определитель 228  
 согласованность разностной аппроксимации 38  
 соленоидальность магнитного поля 343, 366, 369  
 — поля скоростей 277, 331  
 состояния уравнение 213, 273, 315, 333, 346, 375  
 сохранения законы 63, 66, 89, 164, 169, 200, 212, 255, 291, 343  
 спектральная норма матрицы 144  
 спектральный радиус матрицы 145, 158  
 Стефана — Больцмана закон 376  
 столкновения 191, 193, 271, 351
- Теплопроводность 275, 311, 346, 351  
 точность разностной аппроксимации 30, 39, 61  
 трехслойная схема 95, 100  
 турбулентность 309, 335
- Ударная волна 310, 323, 357, 372  
 усреднение по ансамблю 178  
 — по времени 176  
 устойчивости условие 78, 81, 85, 199, 261, 277, 283, 290, 300, 317
- устойчивость разностного решения 49  
 — разностной схемы 40  
 — — — безусловная 59, 109, 110
- Фазовое пространство 166, 172, 178, 203, 253  
 фазовые переходы 177  
 Фарадея закон 343, 369  
 флуктуации поля частиц 187, 192, 199, 214  
 функция распределения 253  
 — — «горб на хвосте»  
 — — двухпучковая 202  
 — — тока 279, 293, 337  
 фурье-анализ 25, 73, 86, 98, 248  
 — — двумерный 104  
 фурье-преобразование 129  
 — — быстрое 132
- Хартри уравнения 225  
 Хартри — Фока уравнения 230, 244  
 Хейна метод 359
- Центробежная сила 284, 331  
 циклическая редукция 135  
 — — двойная 136
- «Частицы в ячейке» 187, 193, 210, 214, 219, 293  
 частота альфвеновская 344  
 — гравитационная 192, 342  
 — звука 342  
 — плазменная 191  
 — столкновений 351  
 — циклотронная 167  
 Чебышева метод 152, 157, 371
- Шредингера уравнение 221  
 Эйлера метод 45, 55, 305  
 эйлерова сетка 214, 259, 281, 299, 311, 316, 333  
 энтропия системы 165, 213, 257, 262  
 эффективность алгоритма 113  
 — разностной схемы 43, 61
- Явный метод 37, 45, 79, 82, 101, 107  
 — — двухшаговый 55  
 Якоби матрица блочная 146  
 — метод 148, 156

# Оглавление

Предисловие редактора перевода . . . . .	5
Предисловие к английскому изданию . . . . .	7
<b>Глава 1. Введение . . . . .</b>	<b>9</b>
§ 1. Природа вычислительной физики . . . . .	9
§ 2. Вычислительные машины в физической теории . . . . .	11
§ 3. Ограниченность математического аппарата . . . . .	13
§ 4. Дискретная природа вычислительной машины . . . . .	15
§ 5. Краткое изложение содержания . . . . .	18
<b>Глава 2. Элементы метода конечных разностей . . . . .</b>	<b>22</b>
§ 1. Введение: конечные элементы в физике . . . . .	22
§ 2. Дискретное представление непрерывной переменной . . . . .	23
§ 3. Разностные производные по пространству . . . . .	28
§ 4. Общая постановка задачи с начальными условиями . . . . .	32
§ 5. Требования к разностному решению задачи с начальными условиями . . . . .	37
§ 6. Интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений . . . . .	44
§ 7. Обыкновенные дифференциальные уравнения высших порядков . . . . .	60
<b>Глава 3. Уравнения в частных производных для сплошных сред . . . . .</b>	<b>63</b>
§ 1. Происхождение и некоторые свойства уравнений математической физики . . . . .	63
§ 2. Устойчивость разностных схем для уравнений в частных производных . . . . .	75
§ 3. Уравнение диффузии: явная схема интегрирования первого порядка точности . . . . .	79
§ 4. Уравнение переноса: явная схема интегрирования первого порядка точности . . . . .	82
§ 5. Дисперсия и диффузия на разностной сетке . . . . .	84
§ 6. Консервативность на разностной сетке . . . . .	88
§ 7. Консервативные методы для гиперболических уравнений . . . . .	91
§ 8. Многомерные явные методы . . . . .	103
§ 9. Обзор методов для параболических уравнений . . . . .	107
<b>Глава 4. Численные методы матричной алгебры . . . . .</b>	<b>113</b>
§ 1. Введение . . . . .	113
§ 2. Матричные уравнения в конечно-разностном исчислении . . . . .	116

§ 3. Матрицы специального вида: метод прогонки для уравнения с трехдиагональной матрицей . . . . .	123
§ 4. Матрицы специального вида: «точное» решение уравнения Пуассона . . . . .	128
§ 5. Точное решение общего матричного уравнения . . . . .	138
§ 6. «Неточные», или итерационные, методы решения матричных уравнений . . . . .	141
§ 7. Два приближенных метода определения собственных векторов и собственных значений . . . . .	159
<b>Глава 5. Частицы: дальное действие в проблеме <math>N</math> тел . . . . .</b>	<b>162</b>
§ 1. Частицы и системы частиц . . . . .	162
§ 2. Движение отдельной частицы в потенциальном поле . . . . .	163
§ 3. Движение отдельной частицы в плоскости, перпендикулярной магнитному полю . . . . .	166
§ 4. Прямое моделирование дальнего действия в системе $N$ тел . . . . .	170
§ 5. Равновесные статистические свойства в моделях с двухчастичным взаимодействием . . . . .	172
<b>Глава 6. Расчет поля частиц . . . . .</b>	<b>183</b>
§ 1. Среднее поле системы частиц . . . . .	183
§ 2. Бесстолкновительная модель частиц в ячейке . . . . .	193
§ 3. Применение бесстолкновительной модели частиц в ячейке к моделированию плазмы . . . . .	201
§ 4. Применение бесстолкновительной модели частиц в ячейке к моделированию галактик . . . . .	204
§ 5. Столкновительная PIC-модель в гидродинамике . . . . .	211
<b>Глава 7. Частицы в самосогласованном поле: атомы и твердые тела . . . . .</b>	<b>220</b>
§ 1. Самосогласованные поля в квантовой теории систем частиц . . . . .	220
§ 2. Тождественность частиц и обменный потенциал . . . . .	227
§ 3. Атом как система нескольких частиц . . . . .	232
§ 4. Твердое тело как пример системы многих электронов . . . . .	243
§ 5. Разложение уравнений Хартри — Фока для волн Блоха . . . . .	247
<b>Глава 8. Фазовые среды . . . . .</b>	<b>253</b>
§ 1. Плотность частиц в фазовом пространстве и уравнение Власова . . . . .	253
§ 2. Некоторые замечания и примеры применения уравнения Власова . . . . .	256
§ 3. Разностное решение уравнения Власова . . . . .	259

§ 4. Несжимаемость фазовой среды . . . . .	262
§ 5. Метод «водяного мешка» . . . . .	264
<b>Глава 9. Классическая гидродинамика . . . . .</b>	<b>271</b>
§ 1. Вводные замечания об уравнениях гидродинамики . . . . .	271
§ 2. Разностное решение уравнений несжимаемой среды . . . . .	278
§ 3. Несжимаемое течение как система вихревых частиц . . . . .	290
§ 4. Метод маркеров на сетке для описания поверхностей и тяжелых сред: всплески, водопады, опрокидывание волн . . . . .	298
§ 5. Разностное решение уравнений гидродинамики сжимаемых сред . . . . .	309
§ 6. Расчет ударных волн и разрывов . . . . .	323
§ 7. Гидростатическое равновесие в моделях атмосферы и мирового океана . . . . .	328
<b>Глава 10. Гидродинамика с дальнедействующими силами: звезды, плазма, магнитные среды . . . . .</b>	<b>340</b>
§ 1. Самосогласованные поля в сплошной среде . . . . .	340
§ 2. Уравнения магнитной гидродинамики и их основные свойства . . . . .	345
§ 3. Методы одномерной магнитной гидродинамики . . . . .	352
§ 4. Многомерная магнитная гидродинамика . . . . .	363
§ 5. Гравитационная гидродинамика . . . . .	374
Литература . . . . .	382
Предметный указатель . . . . .	387