Е.Мосампилов

Пуассон неисчерпаем – как атом

(Из цикла «Чтиво на даче»)

Есть многое на свете, друг Горацио,
Что и не снилось нашим мудрецам.
(Гамлет)

Это надо же!

Один великий физик как-то сказал, что электрон так же неисчерпаем, как и атом. Они всегда чего-то говорят, а остальные люди ходят вокруг и записывают. Для истории. Меня никто не записывает, поэтому я сел и решил написать втихаря сам что-нибудь о моём самом любимом – уравнении Пуассона. С тех давно забытых пор, как я его узнал, оно постоянно потрясает моё воображение, как огонь потрясал душу неандертальца, как колесо колесницы – глаз фараона, как Пифагоровы штаны – студента средневековья, как любителя кино – вид обнажённой ББ, и как Анну Каренину мог бы потрясти психоанализ Фрейда, если б она его знала.

Всё, что я перечислил, прекрасно и просто в своей гениальности. Уравнение Пуассона – не хуже, для него даже придумали симпатичный математический иероглиф, посмотрите:

$$\Delta\varphi = f\ .$$

И звучит он тоже вполне по-китайски: «дельта-фи-равно-эф». То есть непонятно. И так же мало кому понятно, как его переводить на язык школьников. А среди нас, несомненно, есть школьники, но не только продвинутые и задвинутые, а и просто умные и любопытные. Так что попробую немного ввести в курс дела.

Если где-то чего-то (как говаривал Ломоносов) убудет, то туда начнётся течение (приток, или более общим словом поток) от большего (б) к меньшему (м) чему-то:

$p = -(\varphi_{м} - \varphi_{б})/s$. Здесь s – это расстояние между (б) и (м).

Его ещё называют отрицательным градиентом и записывают так: $p = -grad\,\varphi$.

А сейчас представьте себе, что это «убудет» организовал некий дядя Федя (f), который где-то стоит и постоянно это «что-то» кладёт себе в карман или теряет из кармана. К нему подходит поток, а от него уже уходит совсем другой поток. Получается в результате расходимость потока, физики ещё её называют дивергенцией.

Этот физический процесс записывается так: $div\ grad\ \varphi = -f$, – что, по-видимому, означает в переводе: «дивергенция (расходимость) градиента (минус потока) поля фи (величины фи) равна функции источников-стоков (не могу сообразить, кому какой знак) эф (дяди Феди)». Но вот на чей язык перевод, сказать затрудняюсь.

А математикам эта заумь для тёти Фени не нужна. Они просто заменяют всё частными производными в Декартовых (обычных наших) координатах и получают прелестнейшее по простоте уравнение:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} = f.$$

А потом заменяют левую часть на иероглиф и радуются своей хитрости. Это и есть наше уравнение Пуассона на плоскости (x, y) в переводе с китайского. В левой части два слагаемых по числу координат. Если же мы находимся в пространстве – то есть, в координатах (x, y, z), то добавляется ещё одно слагаемое. Но мы в пространство выходить не будем – не космонавты.

Да, не пугайтесь, частная производная – это обычная производная по одной (частной) переменной, независимая и свободная от других переменных, кроме своей частной – как от своей жены. Ничего интересного.

В этом месте, я предвижу, дамы обижаются, устав от ожидания комплиментов, и идут разогревать блинчики с мясом для себя и своих подруг. Оставим их за этим полезным занятием. Проблемы мужчин бывают утомительны для слабого женского организма. А я тем временем расскажу, как дошёл до такой странной любви к уравнению.

Дискретный мир

Детство моё, как сейчас принято говорить, было «трудным». Летом бегаешь за бабочками, играешь в прятки и другие азартные игры, а вот зимой не каждый день получается выйти покататься на санках. То пурга метёт, то мороз крепчает. Игрушек мало и только полезные: пистолет с присосками, грузовик с пружинным заводом да конструктор металлический. Одно только и спасало – карты, деньги и женщины. Но у сестры с матерью своих забот хватало – не со мной сидеть, а для карт нужен гость, который в пургу и мороз в гости не ходит. Оставались только деньги, точнее монеты. От одной копейки до двадцати. Полтинников и рублей тогда не было. Много их у меня иногда накапливалось. На сдачу. Можно было складывать в столбики по 10 и по 5, а столбики пересчитывать и переносить в группы по рублю и два, если хватало. Много чего с ними можно было делать, даже футбольные турниры устраивать. И вся моя жизнь протекала разделённой на эти копейки: эскимо – рубль и пять копеек, коробка спичек – шесть копеек, перо №11 для ручки – две копейки (если не подводит память), тетрадный лист – одна копейка, а меньше ничего нет. Нет в мире ничего меньше копейки – ни атомов, ни молекул. Они где-то там – в книгах для старшеклассников, а копейки здесь, в жизни. Стакан молока – всегда стакан молока, полстакана не бывает. Бутерброд с сахаром (без масла) – всегда один бутерброд, даже когда с сожалением отрываешь от него кусок приятелю. Дискретный мир.

Я бегал в магазин и покупал хлеб и молоко на эти рубли и копейки. Я запоминал номера машин и трамваев, очень бывали интересные. Я считал, сколько машин проезжает направо и сколько налево по шоссе. Я считал штакетины в заборе и доски в потолке. Столько всего можно было пересчитать. Если больше делать нечего.

В школе пришла пора учить таблицу умножения. Как я избежал таблицы сложения, не помню.

– Дети, к завтрашнему дню выучите наизусть таблицу умножения на один, на два и на три. Она у вас на задней обложке тетради. Первые три столбика.

– А зачем её учить наизусть? – спрашиваю.

– Чтобы уметь умножать.

– А я и так умею.

– Ой, ну хорошо, сколько будет трижды семь?

– Трижды семь чего?

– Ну, например, копеек.

– Копеек – двадцать одна.

– Всё равно выучи, буду спрашивать.

Конечно, я ничего не учил, потому что это был просто эпизод моей дискретной жизни, а зачем учить жизнь – достаточно было знать.

А многие честно учили. Мамаши приходили жаловаться учительнице Анне Петровне, как тяжело даётся эта проклятая таблица умножения. Может, прикрепить отличника (т.е. меня)? Но я не знал, как учить, потому что сам её не учил. С тех пор преподавать так и не научился.

В пятом классе я получил первую двойку – по геометрии. В доказательстве теоремы я помнил, что надо было повернуть чертёж вокруг точки, но у доски вдруг задался вопросом: а что это доказывает? Рисунок остаётся тем же, откуда на него ни смотри. Мир не меняется, так в чём же был смысл и секрет? Крутить можно по-разному – любители найдутся. Моё дискретное мироощущение не воспринимало уловки теоремы. В ней явно был какой-то обман: очевидное выдавали за неизвестное и требовали его доказать. С тех пор я не понимаю доказательств никаких теорем. Потому что они ничего не доказывают. Они наводят дикую тоску. Они просто говорят другими словами то, что уже есть в мире. Если наблюдать мир – его никому не надо доказывать.

Как-то я нашёл на улице старую монету в полкопейки! Так значит, когда-то люди меряли свою жизнь ещё и полкопейками? Это было открытие: мой мир сразу вырос в два раза. Раньше ещё и названия другие были: полушка, грош, алтын, гривенник, пятиалтынный, двугривенный, полтинник. «За морем телушка – полушка, да рубль перевоз». «Не было ни гроша, да вдруг алтын». «Ну, давай пятак!»

Наконец, подросший, поумневший и натренированный в решении задач, но в душе дискретный, в последнем классе я решил попробовать себя в изучении производных. Всё вроде бы понятно: разность делим на интервал, а потом начинаем его уменьшать. Но зачем всё это, и главное – до каких пор уменьшать? Как это «до нулевого предела»? Что там может быть нового около этого нулевого предела, чего нет около моей конечной величины, в полкопейки?

Это были вопросы. Интуитивно было ясно, что ничего нового там нет. Но авторы книг почему-то старались уверить, что только там всё то и начинается. Ничего не заметил, ничего не начиналось. Всё уже было заложено в ясные и понятные синусы, логарифмы и т.п. Так до сих пор я в это и не поверил. Хотя студентом все экзамены сдавал по мат анализу, и даже бывало на пятёрки. Как все.

Вы любите пить горячий кофе с молоком? Я люблю. А холодный терпеть не могу. Представьте, вы наливаете кипяток в кружку на ложку растворимого и две ложки сахару, и тут звонит телефон. Он всегда звонит в самый неподходящий момент. Вы человек вежливый, да и любопытный – не подойти не можете. Помнится, как-то по молодости я не подошёл на звонок тёщи. Через три минуты пришли соседи снизу, которые на какой-то сабантуй угощали нас татарскими сладостями, а я не догадался высказать неподдельный восторг… В общем, любопытство – это полезное качество.

И тут возникает проблема: влить молоко и пойти к телефону или сначала поговорить, а потом влить молоко. Понятно, что молоко холодное, а кофе надо, чтобы меньше остыл. Чтобы решить эту проблему, надо знать, что такое (опять же) поток тепла. Оно тепло, в сущности, пропорционально температуре. Чем выше разность температур в комнате и в кружке, тем больший будет поток. И тем быстрее кофе будет остывать. И вы поступите правильно, если сразу снизите температуру кофе, налив молоко. А потом уже пусть остывает себе медленно, пока вы разговариваете.

Эврика! Вот откуда появилась разность в определении производной. Это же просто другими словами вычисление потока. Но зачем делить на расстояние? А это уже просто: чем больше толщина стенки кружки, тем меньше поток сквозь неё. Чем толще кружка, тем медленнее остывает. Так что видим: процесс вычисления производной от температуры и вычисление потока тепла – очень похожи.

– «Как я рада, как я рад, что мы едем в Ленинград!»

Только вот зачем же уменьшать толщину стенки, да ещё до нулевого предела? Нулевой толщины не бывает!

Правильно, не бывает. И главное, нулевая она никого не интересует. Реально все имеют дело с конечной толщиной и со средним потоком. Это давно уже поняли вычислительные математики и стали заменять в своих вычислительных методах производные их определениями, но без стремления толщины к нулю, или же какими-нибудь другими конечными выражениями, так называемыми конечными разностями, в отличие от бесконечно малых разностей в производных.

Математика вычислений

Стоп! Что это ещё за вычислительные математики, чем они отличаются от обычных и с какой сырости появились? А они были всегда, но, строго говоря, их нет. Все математики изучают мир и находят подчас потрясающей красоты его свойства. Да хотя бы число π – с виду совсем не дискретное. И есть люди, которые применяют их открытия при решении практических задач и, опять же подчас, сталкиваются на этом пути с неожиданными и неприятными трудностями. Я намекну лишь на некоторые из них: 1) ошибки в измерении физических величин, 2) конечное число знаков вещественного числа в компьютере, 3) нехватка машинной памяти для вычислений, 4) малое быстродействие компьютера, 5) медлительность самих математических методов, которые не всегда следуют своей славе. Они придумывают всевозможные способы обхода, и даже изобретают новые методы. Если им удаётся математически обосновать свои способы, то их называют математиками, прикладными, вычислительными или численными. А если нет, то о них молчат. Что сказать о людях, которые видят пятна на солнце и наводят тень на плетень? Хотя, конечно, они всего лишь хотели хорошо сделать своё дело: решить физическую, химическую или геофизическую задачу. Но об этом чуть позже.

А сейчас мы, подражая вычислительным математикам, которым надоело брать интегралы и суммировать длинные ряды, заменим частную производную конечно-разностной производной в согласии с определением производной:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} \approx \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}},$$

где индекс i имеет значение номера дискретной точки на оси x. Все такие точки (узлы) нумеруются по порядку и образуют так называемую разностную сетку.

И вот тут возникает он – ответственный момент: все значения функции φ вне точек разностной сетки никого не интересуют. Их нет. Вот оно – торжество целочисленного мира: есть копейка, и меньше её ничего нет. Если кого-то интересует значение в другой точке – не на сетке, пусть поставит туда узел, всё перенумерует и получит новую сетку.

Да, «так во всём судьба плутует». Трудно бывает переварить факт, что наши желания ограничены условностями. Дамы, распахнувшие было дверь, с пониманием и непониманием на лице снова скрываются за нею. А мы, пока дамы за чашкой чая привыкают к этому новому повороту судьбы, поговорим о возможных задачах для уравнения Пуассона.

Краевые задачи

Дело в том, что φ, – наше «что-то» (назовём его «потенциал», хотя физики, бывает, называют и по-другому), – обычно распределено на какой-то ограниченной площади. Неограниченных площадей не бывает. Хотя, конечно, в теоретической модели может быть всякое. На площади (обычно говорят «внутри области») пусть распределение потенциала подчиняется уравнению Пуассона. А вот на границе области должны быть заданы для потенциала сдерживающие условия (говорят «граничные условия» или «краевые условия»). Типов условий может быть всего два: 1) задано значение потенциала (условие Дирихле) и 2) задано значение потока (условие Неймана). Понятно, что возможно и смешанное условие – из линейной комбинации этих двух условий, то есть из суммы с весами.

Если на всей границе заданы только условия Дирихле, то такая задача называется краевой задачей Дирихле. Если же на всей границе заданы только условия Неймана, то это краевая задача Неймана. Для задачи Неймана есть маленькая, но существенная проблема. Её решение для уравнения Пуассона определяется с точностью до константы. То есть, оно не единственное. Поэтому, чтобы численно выделить одно решение, необходимо его как-то зафиксировать. Проще всего это сделать, задавая значение потенциала в точке на границе.

В этом месте некоторые сугубые физики возмущаются и кричат: «Как это в точке? Она же бесконечно малая!» Сам видел такого придурка. Пытаются всех запутать в своей бесконечной малости. Не смущайтесь и отвечайте: «А вот так! Это у Вас она бесконечно малая, а у нас в дискретном мире она конечная и не меньше шага сетки». Но всякие такие дискуссии смехотворны. Куда интереснее наше наблюдение, что чистая задача Неймана вычислительно нереальна. Для вычислителя имеет смысл только смешанная краевая задача, близкая к задаче Неймана, то есть, в которой на границе кроме краевых условий Неймана присутствует хотя бы одно условие Дирихле. Забегая вперёд, скажу, что это самые неприятные задачи для численных методов решения.

Отметим также, что наша область не обязана быть сплошной. Внутри неё вполне могут быть внутренние границы с заданными на них граничными условиями. Понятно и то, что чем сложнее область, тем труднее решать на ней задачу о нахождении распределения потенциала.

И если кто придумает метод решения, которому наплевать на сложность границы, а заодно и на близость к краевой задаче Неймана, то он может считать себя молодцом.

Вот вкратце о краевых задачах, то есть о задачах на ограниченной области. А сейчас продолжим выводить разностное уравнение Пуассона, или другими словами – разностную схему для уравнения Пуассона.

Выше мы получили разностную схему для левой производной. Предположим для простоты, что разностная сетка равномерная, то есть все шаги сетки равны: $x_i - x_{i-1}$=h_x. Тогда, комбинируя левую и правую производные (для симметрии), получим такое выражение для второй производной:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) \approx \frac{\varphi_{i-1} - 2\varphi_i + \varphi_{i+1}}{h_x^2}.$$

А для всего двумерного уравнения Пуассона – разностную схему на двумерной прямоугольной сетке (два индекса i и j):

$$(\varphi_{i-1,j} - 2\varphi_{ij} + \varphi_{i+1,j})/h_x^2 + (\varphi_{i,j-1} - 2\varphi_{ij} + \varphi_{i,j+1})/h_y^2 = f_{ij}.$$

И всё! Опять простота необыкновенная. И заметьте: в этой схеме задействованы только пять узлов, минимальное число, и образуют они между собой шаблон «крест».

Далее записываем уравнение разностной схемы в каждом узле разностной сетки, включая и узлы границы, и получаем систему линейных уравнений. Например, если область наша – прямоугольник, то есть, $i = 0 \ldots I; j = 0 \ldots J$, то узлов будет $(I + 1) \times (J + 1)$, столько же будет уравнений в системе, и столько же переменных, если условия Неймана на границе записывать только с помощью узлов, не выходящих за границу. Это легко осуществимо, если в разностной схеме на границе поток с узлами за границей заменить его значением из условия Неймана. Многовато, конечно, уравнений, но зато очень много нулей в матрице системы.

Сейчас можно передохнуть и послать гонца посмотреть, куда ушли дамы от всей этой скуки. Потому что без них всё равно никакая математика с физикой не укладываются.

Уравнение Лапласа и век ТФКП

А вот уравнение Лапласа ещё проще: это уравнение Пуассона с правой частью равной нулю. Это история науки 20-го века. Это ради его решения была создана Теория Функций Комплексного Переменного (ТФКП) и теория конформных отображений. И это им был нанесён сокрушительный удар персональными компьютерами и теорией разностных схем и итерационных методов. Я при этом присутствовал и могу отдаться воспоминаниям, пока ещё дамы не вернулись.

Ещё каких-то 50 лет назад я учился на физфаке университета. Это был экспериментальный университет, и экспериментальный физфак. И поэтому руководство, академики и член-коры, решило, что будущим великим физикам не нужно черчение (инженеры нарисуют), теория вероятностей и методы вычислений. Зато нужна теория функций комплексного переменного, с помощью которой так хорошо писать научные статьи с картинками и выдвигаться в академики. В то время самым популярным персональным компьютером была логарифмическая линейка, хотя где-то там у них, да и у нас, появлялись отдельные вычислительные машины и книги про кибернетику. Если, скажем, надо было посчитать форму крыла нового самолёта, то брали лист бумаги формата А1 или больше, чертили на нём таблицу, – в левой колонке переменные, а в верхней строке – формулы для логарифмической линейки, – и клали на большой стол, и младший научный работник ползал по этой таблице с этой самой линейкой, вписывая в клетки значения.

Академикам и в голову не приходило, что им придётся изучать языки программирования, разностные схемы и итерационные методы. И очень скоро. Впрочем, они так и не научились. Уже через пять лет появилась, а потом хлынула бурным потоком вычислительная техника, и энтузиасты с жадностью и любовью набросились на новую область творчества – вычислительную математику. Но физики так и остались дилетантами в неосвоенной теории вероятностей и самоучками в методах вычислений.

Мне приятно, что я был и остаюсь среди этих первых самоучек, но немного стыдно, что мой сын, учившийся на экономике, в отличие от меня запросто щёлкает задачки по теории вероятностей, а другой сын знает все современные языки и системы программирования.

Но что же с ТФКП? А вы знаете, что почти вся советская теория движения грунтовых вод основана на решении уравнения Лапласа методами ТФКП? Написано множество толстенных монографий.

Почему толстых? Да потому, что каждая задача, отличающаяся от другой пустяком, например, положением дрены, решалась своим методом. Решения получались в виде красивых и сложных интегралов. Исследовались свойства этих решений в критических и околокритических режимах. И т.д., и т.п. Но за редкими исключениями никто не приводил результаты расчётов. Однажды я понял почему, после того, как сам разработал метод численного решения всех подобных задач, о котором ещё расскажу.

– «Да задолбал уже меня шеф своей задачей! – в сердцах сказал наш лаборант Коля, – часами считается, а решения всё нет». – «А что за задача?» – поинтересовался я. Оказалось, та самая краевая задача, близкая к задаче Неймана: два небольших участка границы с условиями Дирихле. Так называемое аналитическое решение в виде нескольких интегралов, которые заменяются потом рядами, чтобы получить численное решение и численный результат.

– «Так у вас же ряды медленно сходящиеся. Нужно очень много членов ряда, чтобы что-то получилось». – «А других рядов нет».

Всё правильно, потом я не раз встречался с этой проблемой – медленно сходящиеся ряды. Огромное количество членов ряда, чтобы получить хорошее приближение к сумме ряда.

В конце концов, шеф написал докторскую на 500 страниц и защитил её. Труд его многолетней научной жизни. Он с большой любовью рассказывал всем о своих задачах и был доволен собой. Я не стал говорить ему, что знаю метод, которым его задачи легко и единообразно решаются, не прикладая большого ума. И метод этот использует простенькую разностную схему и довольно экономичный и универсальный итерационный метод.

Итерационные методы

Итак, выше мы получили сеточную систему линейных разностных уравнений для краевой задачи в прямоугольнике для уравнения Пуассона. Как её решать, то есть, находить значения потенциала в узлах сетки?

Запишем её в матричном виде:

$$A\varphi = f,$$

где φ и f – вектора с $N = (I + 1) \times (J + 1)$ компонентами, а квадратная матрица A имеет N^2 элементов, из которых подавляющее большинство нулевые.

Решать эту систему можно методами линейной алгебры, например, приводя к треугольному виду. Это требует много компьютерной памяти и времени. Есть методы, которые учитывают специфику распределения нулей в матрице, например, метод матричной прогонки или метод редукции. Но у них проблемы устойчивости в случае краевой задачи близкой к задаче Неймана. Все эти методы называются прямыми методами решения. У них ещё и довольно сложные алгоритмы.

Альтернативу представляют итерационные методы, то есть с повторением вычислений. Рассмотрим такой итерационный процесс:

$$B(\varphi_{s+1} - \varphi_s) = -A\varphi_s + f,$$

где индекс итерации (повторения) $s = 0, 1, 2, \ldots$. На начальной (нулевой) итерации задаётся какое-то распределение искомого потенциала. Численное решение итерационной системы уравнений тогда даёт φ_1, следующая итерация даёт φ_2, и так дальше.

До каких пор? Заметьте, что если $max|\varphi_{s+1} - \varphi_s| \to 0$, то итерационное уравнение стремится к исходному разностному. Значит, критерием окончания итерационного процесса вполне резонно взять $max|-A\varphi_s + f|/max|-A\varphi_0 + f| < \varepsilon$, где ε – малое число.

Другой вопрос – будет ли это итерационное решение решением дифференциального уравнения, но решением разностного уравнения будет с точностью порядка ε. Иначе говоря, итерационный процесс будет сходиться.

Зачем эти выкрутасы, если есть прямые методы? Всё дело в матрице B. Её можно задать такой, чтобы система уравнений решалась просто и экономично. Её можно задать такой, чтобы число итераций было небольшим для достижения приемлемой точности сходимости. И это будет хорошо, лучше, чем прямые методы. Но можно задать и так, что число итераций будет удручающе большим. Или того хуже – что критерий сходимости не будет выполняться вообще, и процесс разойдётся.

Дамы уже сходили искупаться. И меня посетила зависть к этой прекрасной и практичной половине человечества, которая не испытывает мук любви к уравнениям и скучной себялюбивой болтовне.

Поэтому я опущу намеченный обзор всех этих великих итерационных методов: верхней релаксации, переменных направлений, попеременно-треугольного, Монте-Карло и Лас-Вегаса, а перейду сразу к методу, который придумал физик, а его ученики и последователи, тоже физики, довели до уровня. И это потому, что им всем, как полагается, надо было хорошо решать свои физические задачи. Всё же, мы не только у коллайдера сидим.

Метод неполной факторизации

Но сначала, чтобы видна была историческая преемственность, взглянем на обычный метод прогонки решения одномерного уравнения (язык не поворачивается сказать Пуассона):

$$-a_i\varphi_{i-1} + b_i\varphi_i - c_i\varphi_{i+1} = f_i.$$

Это уравнение вида $A\varphi = f$. На левой границе $a_0 = 0$, на правой – $c_I = 0$. Запишем левую часть в виде произведения: $UV\varphi = f$, где оператор U определяется так: $Uu \equiv u_i - \alpha_i u_{i-1} = f_i$, а оператор V так: $V\varphi \equiv \gamma_i\varphi_i - \beta_i\varphi_{i+1} = u_i$. Приравнивая $UV = A$, получаем выражения для $\alpha, \beta,$ и γ. Это стандартные рекуррентные формулы алгоритма прогонки. То есть, в них искомые значения выражаются через предшествующие значения. Есть только одно «но»: из-за того, что $b = a + c$ во всех узлах (если условия Неймана на обеих границах), то счёт приводит к делению на нуль. Чтобы этого избежать, практически надо поместить условие Дирихле на одной из границ.

А сейчас рассмотрим двумерный случай. Уравнение Пуассона на неравномерной сетке, к примеру:

$$-a_{ij}\varphi_{i-1,j} - b_{ij}\varphi_{i,j-1} + e_{ij}\varphi_{ij} - c_{ij}\varphi_{i+1,j} - d_{ij}\varphi_{i,j+1} = f_{ij}.$$

Опять задаём операторы U и V:

$$Uu \equiv u_{ij} - \alpha_{ij}u_{i-1,j} = f_{ij};$$

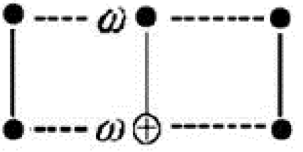
$$V\varphi \equiv \gamma_{ij}\varphi_{ij} - \beta_{ij}\varphi_{i,j-1} - \delta_{ij}\varphi_{i,j+1} - \epsilon_{ij}\varphi_{i+1,j} = u_{ij}.$$

Но вот неприятность: произведение $UV \neq A$. И не может быть равно, потому что в нём два лишних члена: при $(i-1, j-1)$ и при $(i-1, j+1)$. Что же делать?

Выход гениален. Во-первых, заменить произведением U на V ту самую матрицу B в уравнении итерационного процесса. Во-вторых, добавить к уравнению $UV = A$ два уравнения для лишних членов, которые написать по аналогии с формулой линейной интерполяции (ω – итерационный параметр):

$$\varphi_{i-1,j-1} + \omega\varphi_{ij} = \omega\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i,j-1};$$
$$\varphi_{i-1,j+1} + \omega\varphi_{ij} = \omega\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i,j+1}.$$

Что это даёт? Во-первых, простенькие рекуррентные формулы для алгоритма. Вы их можете вывести сами. Во-вторых, уникальный вид матрицы $H = B - A$, которая определяет так называемую матрицу перехода от одной итерации к другой $T = (A + H)^{-1}H$. Схема её узлов, то есть шаблон матрицы H – «ящик», который я не откажу себе в удовольствии привести.



Вид ящика говорит, что собственные значения матрицы H представляются произведением, примерно так: $\mu_i(2\lambda_j - 1 + \omega)$, где λ_j – собственное значение трёхточечного разностного одномерного уравнения Пуассона (см. выше). Один сомножитель зависит только от i, другой – только от j. Глядя в то же время на матрицу перехода, при небольшой фантазии, можно заметить, что она отдалённо напоминает матрицу перехода для популярного метода переменных направлений, а отсюда можно уже выписать формулу для итерационного параметра. Конечно, эти значения параметра будут не оптимальны, но на практике оказываются очень даже неплохими. Впрочем, при желании можно найти и оптимальные параметры с помощью довольно громоздкой вычислительной процедуры, но это уже совсем не для милых дам.

Да, прошу прощения: я не рассказал, что такое собственные значения матрицы. Это очень хорошая вещь. Можно, конечно, привести точное определение, но в нашем житейском рассказе достаточно обойтись примитивным описанием. У каждой матрицы есть собственные значения. Они, конечно, не в ней самой записаны, но их можно с ней сопоставить. Если они действительные, то лежат в интервале от минимального значения до максимального. Отношение минимального собственного значения к максимальному называется числом обусловленности матрицы. Это потому такое название, что матрица, соответствующая краевой задаче Дирихле, имеет наибольшее число обусловленности (говорят, что она хорошо обусловлена), а матрица для краевой задачи Неймана имеет наименьшее число обусловленности, равное нулю (или близкое к нулю в случае фиксации решения – плохо обусловлена).

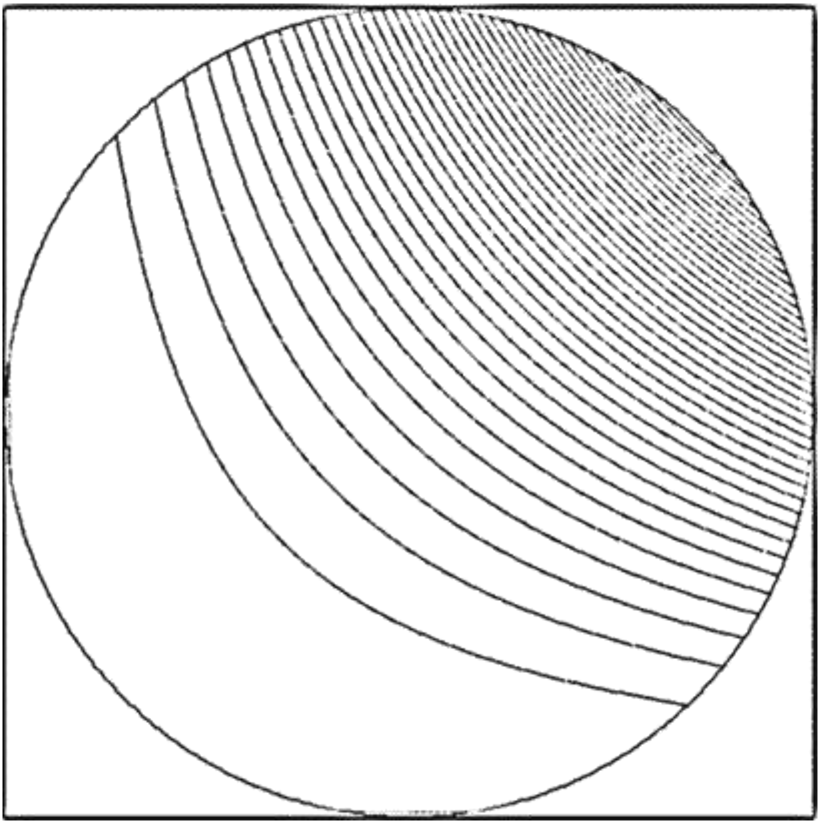
Однако, наша матрица перехода T лучше матрицы перехода метода переменных направлений, собственные значения которой представляются примерно в таком виде $(\omega - \lambda)/(\omega + \lambda)$. Матрица T подавляет значение $\lambda = 0$ за одну итерацию при $\omega = 1$ (потому что собственное значение A это $\lambda_i + \lambda_j$, и величина $\mu \sim \lambda_i$), а матрица для переменных направлений вообще его не подавляет. Это как раз то нулевое собственное значение, которое присутствует в краевой задаче Неймана, в отличие от других краевых задач.

В случае собственных значений близких к нулю, то есть для плохой обусловленности, матрица T имеет собственное значение меньше единицы при $\omega = 1$, которое практически не зависит от λ_j. В результате это позволяет эффективно решать смешанную краевую задачу близкую к задаче Неймана. А метод переменных направлений, даже с оптимальным набором итерационных параметров, даёт медленную сходимость при плохой обусловленности, тем худшую, чем меньше λ. Другие итерационные методы страдают тем же недостатком: снижают свою скорость сходимости при ухудшении обусловленности. Вот преимущество странного «ящика».

И ещё штрих: для устойчивости счёта по формулам алгоритма достаточно присутствие условия Дирихле только в одной какой-нибудь точке на границе $i = I$. А это как раз краевая задача Неймана с фиксированным значением на границе.

Всё сошлось, и мы молодцы. Осталось только проверить чувствительность метода к форме границы. Вот, посмотрите на этот симпатичный круг.

Внутри круга – изолинии функции $\varphi = x^2 y^2$. Они получены, как решение уравнения Пуассона с правой частью и граничными условиями Неймана такими, чтобы получалось именно это решение. Но граница области, если присмотреться, вовсе не окружность, а многоугольник ближайший к окружности, проведённый по сеточным линиям. Эта псевдокруговая область вписана в квадрат размера 501×501 узлов. Относительная точность $\varepsilon = 0.00001$ была получена за 25 итераций. Для сравнения, та же задача, но в квадрате сходилась за 23 итерации.



И в связи с этим возникает философский вопрос. Люди стараются сгладить границы – придумывают всякие методы конечных элементов, чтобы точнее учесть криволинейность границы в вычислениях. При этом вынуждены бывают использовать для решения медленно сходящиеся итерационные методы. А зачем всё это? Возьмите мелкую сетку и замените кривую границу прямоугольным многоугольником – дискретной областью. Зато в награду можете применить быстро сходящийся итерационный метод. Почему я не прав?

Дамы накрошили салатику из помидор, полили его сметанкой и зовут нас тоже отобедать. А сами поспешили к экрану смотреть сериал. То ли она полюбила, да он бросил, то ли он увлёкся честным бизнесом, да его кинули. Чего только не бывает в жизни! Так что я перехожу к заключению.

Заключение

Уравнения типа Пуассона, то есть вида $div(K\,grad\,\varphi) = f$, повсеместно применяются для описания различных явлений, от течения нефти и воды под землёй до распределения электрического поля в пламени реактивного двигателя. Желание иметь для их решения экономичный и универсальный метод – это не прихоть. Описанный здесь вкратце метод применим не только к постоянному коэффициенту K (к уравнению Пуассона), но также эффективен и в случаях переменного $K = K(x, y)$, и даже нелинейного коэффициента $K = K(x, y, \varphi)$. В деталях он известен с 1980 года на русском языке и с 2005 года – на английском. Но мне не известно ни одного его применения, кроме моих собственных.

Я мог бы с восторгом написать, как знание новых численных методов решения уравнения Пуассона помогает "космическим кораблям бороздить просторы Вселенной", да совесть не позволяет. Даже личные контакты не помогали. Легче уговорить девушку, чем научного сотрудника, попробовать новое. Люди предпочитают доказанные теоремами рекомендации больших математиков, а не скромных физиков. Хотя мир один, и он дискретен как для математиков, так и для физиков. Он один, и не надо думать о нём привычными домыслами, а надо его изучать.

Кстати о домыслах. Многие верят, что в областях со слабым изменением решения можно применять грубую сетку для экономии, а вот в областях, где решение меняется быстро, надо применять мелкую. Очень смешно: они ещё придумали и красивое китайское название для этой идеи – метод доменной декомпозиции. А вот когда грубая разностная ошибка в решении поплывёт с грубой сетки на мелкую, по принципу Ломоносова «ежели где чего убудет», то как они отбрешутся?

Этот философский вопрос я оставляю вам для обдумывания перед сном. Вместо того, чтобы считать верблюдов. А сам пойду посижу возле дам, ибо без них никакой любви не бывает к уравнениям. Но рассказывать им ничего такого – ничего подобного, не буду.