

УДК 519.6:51-73:004.942

А.В. Павельчук

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА УСТАНОВЛЕНИЯ ДЛЯ ЧИСЛЕННОЙ РЕАЛИЗАЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОЛЯ

*В работе представлена конечно-разностная реализация модели расчета потенциала электрического поля, созданного заданным распределением электрических зарядов. Вычислительная схема решения уравнения Пуассона построена на основе метода установления и метода прогонки для решения полученной системы сеточных уравнений с учетом цилиндрической симметрии многомерной задачи. Проведен расчет параметров вычислительного процесса с использованием практической оценки сходимости схемы.*

*Ключевые слова: модель электростатического поля, распределение потенциала, уравнение Пуассона, вычислительная схема, метод установления, метод переменных направлений.*

## ESTABLISHING METHOD APPLICATION FOR NUMERICAL IMPLEMENTATION OF ELECTROSTATIC FIELD MATHEMATICAL MODEL

*The paper deals with a finite-difference implementation of calculation model for electric field potential generated by continuous charge distribution. A computational scheme of the Poisson's equation was based on the establishing method together with the sweep method for solving the obtained system of finite-difference equations subject to cylindrical symmetry of multidimensional problem. The calculation of control parameters was performed with the use of practical estimation of scheme convergence.*

*Key words: electrostatic field mathematical model, potential distribution, Poisson's equation, computational scheme, establishing method, alternating direction method.*

### Введение

Уравнение Пуассона лежит в основе линейной модели математической физики, описывающей пространственное распределение основных характеристик электростатического поля – напряженности и потенциала, создаваемых системой электрических зарядов [1]. Как известно, в случае произвольной геометрии среды, сложных граничных условий или специально заданной функции пространственной плотности распределения зарядов аналитические методы работают только для ограниченного класса задач. В практике инженерных и научных вычислений широкое распространение получили методы численного анализа [2-4]. Существует множество подходов для построения численного решения многомерных уравнений эллиптического типа, в числе которых можно выделить методы установления [3-4]. Основная идея методов этой группы заключается в преобразовании стационарной задачи в нестационарную, причем рассматривается релаксация системы к стационарному состоянию, с заменой шага по времени номером итерации. Конечно-разностная аппроксимация при этом проводится на базе уже разработанных для решения нестационарных задач методов расщепления [5-6].

Для осуществления итерационных процессов используются следующие разностные схемы: явная разностная схема, схема расщепления, схема переменных направлений, схема предиктор-корректор и др. [2]. Проводя сравнительный анализ методов, можно отметить, что при использовании явной разностной схемы имеем второй порядок аппроксимации по пространственным переменным и первый – по времени. При этом схема является условно устойчивой и требуемое количество итераций составляет величину порядка  $\frac{1}{h^2}$ . Схема расщепления будет абсолютно устойчивой, количество итераций составит  $\frac{1}{h}$ , схема имеет также второй порядок аппроксимации по пространственным переменным и первый – по времени. При использовании схемы переменных направлений и схемы предиктор-корректор достигается второй порядок аппроксимации не только по пространственным переменным, но и по времени; схемы абсолютно устойчивы и количество необходимых итераций – есть величина порядка  $\frac{1}{h}$ .

Задача решения уравнения Пуассона является важной составляющей более общей проблемы моделирования динамического процесса зарядки диэлектрических материалов при воздействии электронного облучения. В работах [7-8] представлены основные концепции этой модели и варианты численных схем ее реализации, в частности в работе [9] построен алгоритм решения нестационарной задачи для определения пространственного распределения объемной плотности зарядов на основе метода расщепления. В связи с чем цель данной работы – конструирование эффективной конечно-разностной вычислительной схемы, основанной на методе переменных направлений, для решения модельной многомерной задачи о расчете потенциала при заданном пространственном распределении объемной плотности системы зарядов.

### Постановка задачи

Сформулируем математическую постановку стационарной задачи численного решения нахождения потенциала и напряженности электрического поля, создаваемых заданным пространственным распределением электрических зарядов. Математическая модель формулируется в виде уравнения Пуассона и выражения для расчета напряженности поля:

$$\begin{cases} \Delta\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}, \\ \mathbf{E} = -\text{grad } \varphi, \end{cases} \quad (1)$$

где  $\rho$  – объемная плотность распределения зарядов, Кл/м<sup>3</sup>;  $\varphi$  – распределение потенциала, В;  $\mathbf{E}$  – напряженность поля, В/м;  $\varepsilon$  – удельная диэлектрическая проницаемость среды;  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая постоянная, Кл/(В·м).

Примем во внимание цилиндрическую симметрию пространственной задачи с соответствующей записью оператора Лапласа:

$$\Delta\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}.$$

Пусть для (1)  $(r, z) \in G$ ,  $\Gamma$  – граница области  $G$ ,  $\bar{G} = G + \Gamma = \{0 \leq r \leq R, 0 \leq z \leq Z\}$  – прямоугольник. Будем рассматривать смешанную краевую задачу, дополнив уравнение (1) граничными условиями на  $\Gamma$ :

$$\left. \frac{\partial\varphi}{\partial n} \right|_{\substack{r=0, \\ z=0}} = 0, \quad \varphi|_{z=Z} = 0. \quad (2)$$

**Конструирование вычислительной схемы для уравнения Пуассона**

Построение численных решений стационарных задач математической физики, описывающих равновесные состояния, основано на рассмотрении релаксации динамического процесса к установившемуся режиму. Применение такого подхода для целого класса прикладных задач дает эффективный инструмент, который позволяет проводить вычисления проще, чем прямой расчет равновесного состояния. Использование схемы переменных направлений в концепции метода установления для решений уравнений с частными производными эллиптического типа характеризуется быстрой сходимостью и абсолютной устойчивостью решения.

Метод установления заключается во введении в исходное уравнение фиктивной производной по времени:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \Delta \varphi + \frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0}, \tag{3}$$

при этом функция  $\varphi(r, z, t)$  становится функцией трех аргументов:  $\varphi(r, z, t)$ .

Уравнение вида (3) относится к уравнениям с частными производными параболического типа, в силу независимости от времени граничных условий с течением времени производная по времени будет стремиться к нулю, а решение нестационарной задачи  $\varphi(r, z, t)$  – к решению исходной стационарной задачи  $\varphi(r, z)$ .

Введем в рассмотрение сетку узлов с шагами  $h_1, h_2, \tau$  соответственно по переменным  $r, z, t$ :  $\omega_{h_1, h_2}^\tau = \{r_i = ih_1, i = \overline{0, I}, z_j = jh_2, j = \overline{0, J}, t^k = k\tau, k = 0, 1, 2, \dots\}$  и на этой сетке будем аппроксимировать уравнение Пуассона задачи (1) на верхнем временном слое  $t^{k+1} = (k+1)\tau$ :

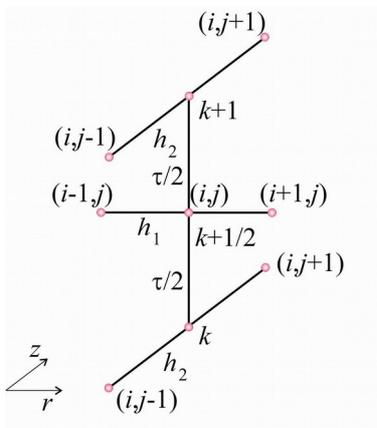


Рис. 1. Вычислительный шаблон для разностной схемы, построенной на основе метода переменных направлений.

$$\frac{\varphi_{i,j}^{k+1/2} - \varphi_{i,j}^k}{\tau} = \frac{1}{2} \frac{\varphi_{i+1,j}^{k+1/2} - \varphi_{i,j}^{k+1/2} + \varphi_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_1^2} + \tag{4}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\varphi_{i,j+1}^k - \varphi_{i,j}^k + \varphi_{i,j-1}^k}{h_2^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\varphi_{i+1,j}^{k+1/2} - \varphi_{i-1,j}^{k+1/2}}{4h_1} + \frac{\rho_{i,j}}{2\varepsilon\varepsilon_0},$$

$$\frac{\varphi_{i,j}^{k+1} - \varphi_{i,j}^{k+1/2}}{\tau} = \frac{1}{2} \frac{\varphi_{i+1,j}^{k+1/2} - \varphi_{i,j}^{k+1/2} + \varphi_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_1^2} + \tag{5}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\varphi_{i,j+1}^{k+1} - \varphi_{i,j}^{k+1} + \varphi_{i,j-1}^{k+1}}{h_2^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\varphi_{i+1,j}^{k+1/2} - \varphi_{i-1,j}^{k+1/2}}{4h_1} + \frac{\rho_{i,j}}{2\varepsilon\varepsilon_0}.$$

При организации итерационного процесса шаг по времени  $\tau$  играет роль шага итерации. Вычислительный шаблон для используемой схемы показан на рис. 1. На первом полушаге разностная схема запишется в виде (первая подсхема):

$$\varphi_{i+1,j}^{k+1/2} \left[ -\frac{\tau}{2h_1^2} - \frac{\tau}{4r_i h_1} \right] + \varphi_{i,j}^{k+1/2} \left[ 1 + \frac{\tau}{h_1^2} \right] + \tag{6}$$

$$+ \varphi_{i-1,j}^{k+1/2} \left[ \frac{\tau}{4h_1 r_i} - \frac{\tau}{2h_1^2} \right] = \varphi_{i,j}^k + \frac{\tau}{2h_2^2} \left[ \varphi_{i,j+1}^k - \varphi_{i,j}^k + \varphi_{i,j-1}^k \right] + \frac{\rho_{i,j} \tau}{2\varepsilon\varepsilon_0}.$$

На втором полушаге разностная задача представляется в виде (вторая подсхема):

$$\varphi_{i,j+1}^{k+1} \left[ -\frac{\tau}{2h_2^2} \right] + \varphi_{i,j}^{k+1} \left[ 1 + \frac{\tau}{h_2^2} \right] + \varphi_{i,j-1}^{k+1} \left[ -\frac{\tau}{2h_2^2} \right] = \varphi_{i,j}^{k+1/2} + \tag{7}$$

$$+ \frac{\tau}{2h_1^2} \left[ \varphi_{i+1,j}^{k+1/2} - \varphi_{i,j}^{k+1/2} + \varphi_{i-1,j}^{k+1/2} \right] + \frac{\rho_{i,j} \tau}{2\varepsilon\varepsilon_0} + \frac{1}{r_i} \frac{\tau}{4h_1} \left( \varphi_{i+1,j}^{k+1/2} - \varphi_{i-1,j}^{k+1/2} \right),$$

Для согласования порядка аппроксимации производной по координатным направлениям в исходном уравнении и граничных условиях по границам  $r=0, z=0$ , введем вдоль этих границ фиктивные узлы  $\varphi_{0,j}$  для  $j=\overline{1,M}$  и  $\varphi_{i,0}$  для  $i=\overline{1,N}$  и воспользуемся подходом, описанным еще в раннем обзоре [6]. Аппроксимируем граничные условия со вторым порядком точности по координатам:

$$\frac{\varphi_{2,j} - \varphi_{0,j}}{2h_1} = 0 \text{ для } j=\overline{1,M} \text{ и } \frac{\varphi_{i,2} - \varphi_{i,0}}{2h_2} = 0 \text{ для } i=\overline{1,N}. \quad (8)$$

Далее вычислительный процесс организуем по полученным формулам (6)-(7), исключая с помощью (8), значения потенциала в фиктивных узлах для первых уравнений полученных систем. Согласно [6], в такой концепции заложен глубокий смысл: если при решении задач математической физики разностными методами граничные условия исключены из рассмотрения, то для формирования вычислительного алгоритма уже не приходится специально заботиться об удовлетворении граничных условий, поскольку они автоматически учтены в модифицированных разностных уравнениях.

Кроме того, учтем граничные условия вдоль границ  $r=R, z=Z$  в последних уравнениях сформированных систем:  $\varphi_{N,j} = 0$  для  $j=\overline{1,M}$  и  $\varphi_{i,M} = 0$  для  $i=\overline{1,N}$ .

Каждая из подсхем схемы переменных направлений решается с помощью метода матричной факторизации (прогонки).

Коэффициенты, соответствующие уравнению вида  $a_i \varphi_{i+1,j}^{k+1} + b_i \varphi_{i,j}^{k+1} + c_i \varphi_{i-1,j}^{k+1} = d_{i,j}^k$ , имеют вид:

1) для первой подсхемы

$$a_i = -\frac{\tau}{2h_1^2} - \frac{\tau}{4r_i h_1}, \quad b_i = 1 + \frac{\tau}{h_1^2}, \quad c_i = -\frac{\tau}{2h_1^2} + \frac{\tau}{4r_i h_1},$$

$$d_{i,j}^k = \varphi_{i,j}^k + \frac{\tau}{2} \frac{\varphi_{i,j+1}^k - \varphi_{i,j}^k + \varphi_{i,j-1}^k}{h_2^2} + \frac{\rho_{i,j}}{2\varepsilon\varepsilon_0} \tau.$$

2) для второй подсхемы

$$a_j = c_j = -\frac{\tau}{2h_2^2}, \quad b_j = 1 + \frac{\tau}{h_2^2}, \quad d_{i,j}^{k+1/2} = \varphi_{i,j}^{k+1/2} + \frac{\tau}{2} \frac{\varphi_{i+1,j}^{k+1/2} - \varphi_{i,j}^{k+1/2} + \varphi_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_1^2} + \frac{\tau}{4r_i} \frac{\varphi_{i+1,j}^{k+1/2} - \varphi_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_1}.$$

На каждом дробном шаге достигается частичная аппроксимация, полная аппроксимация достигается на последнем дробном шаге. Для обеих подсхем выполняется достаточное условие сходимости прогонки [3]:

$$|a_i| + |c_i| = \left| -\frac{\tau}{2h_1^2} - \frac{\tau}{4r_i h_1} \right| + \left| -\frac{\tau}{2h_1^2} + \frac{\tau}{4r_i h_1} \right| = \frac{\tau}{h_1^2} \leq \left| 1 + \frac{\tau}{h_1^2} \right| = |b_i|,$$

$$|a_j| + |c_j| = \left| -\frac{\tau}{2h_2^2} \right| + \left| -\frac{\tau}{2h_2^2} \right| = \frac{\tau}{h_2^2} \leq \left| 1 + \frac{\tau}{h_2^2} \right| = |b_j|.$$

Расчет итераций (переход од одного фиктивного временного слоя к другому) происходит по схеме (6)-(7), пока итерационный процесс не сойдется с заданной точностью  $\delta$ :

$$\|\varphi^{k+1} - \varphi^k\| \leq \delta.$$

### Исследование устойчивости схемы

Исследование устойчивости схемы переменных направлений, аппроксимирующей уравнение Пуассона (1), проведем с помощью метода гармонического анализа. Для этого отбросим член  $\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}$ , который не оказывает влияния на устойчивость разностной схемы, и представим решение в виде гармоника [2]:  $\varphi_{i,j}^k = \alpha_k \exp[i(\lambda_n r_1 + \lambda_m z_j)]$ . Тогда для первой подсхемы, получим:

$$\alpha_{k+1/2} - \alpha_k = \alpha_{k+1/2} \left[ \frac{\tau}{2h_1^2} (\exp(i\lambda_n h_1) - 2 + \exp(-i\lambda_n h_1)) + \frac{\tau}{4r_i h_1} (\exp(i\lambda_n h_1) + \exp(-i\lambda_n h_1)) \right] +$$

$$+ \alpha_k \left[ \frac{\tau}{2h_2^2} (\exp(i\lambda_m h_2) - 2 + \exp(-i\lambda_m h_2)) \right].$$

Откуда, учитывая, что

$$\exp(i\lambda_n h_1) - \exp(-i\lambda_n h_1) = \cos(\lambda_n h_1) - \cos(-\lambda_n h_1) = 0 \text{ и } \exp(i\lambda_m h_2) - \exp(-i\lambda_m h_2) =$$

$$= \cos(\lambda_m h_2) - \cos(-\lambda_m h_2) = 0, \text{ получим } \left| \frac{\alpha_{k+1/2}}{\alpha_k} \right| = \left| \frac{1 - G_2 P_2}{1 + G_1 P_1} \right|.$$

$$\text{В последнем выражении: } \exp(i\lambda_n h_1) - 2 + \exp(-i\lambda_n h_1) = -4 \sin^2 \left( \frac{\lambda_n h_1}{2} \right) = -P_1.$$

$$\text{Аналогично } P_2 = 4 \sin^2 \left( \frac{\lambda_m h_2}{2} \right). \text{ Параметры: } G_1 = \frac{\tau}{2h_1^2}, \quad G_2 = \frac{\tau}{2h_2^2}.$$

Проводя аналогичные рассуждения для второй подсхемы, получим:

$$\alpha_{k+1} - \alpha_{k+1/2} = \alpha_{k+1/2} \left[ \frac{\tau}{2h_1^2} (\exp(i\lambda_n h_1) - 2 + \exp(-i\lambda_n h_1)) + \frac{\tau}{4r_i h_1} (\exp(i\lambda_n h_1) + \exp(-i\lambda_n h_1)) \right] +$$

$$+ \alpha_{k+1} \left[ \frac{\tau}{2h_2^2} (\exp(i\lambda_m h_2) - 2 + \exp(-i\lambda_m h_2)) \right],$$

$$\text{откуда } \left| \frac{\alpha_{k+1}}{\alpha_{k+1/2}} \right| = \left| \frac{1 - G_1 P_1}{1 + G_2 P_2} \right|. \text{ Составляем отношение амплитуд гармоник:}$$

$$\left| \frac{\alpha_{k+1}}{\alpha_k} \right| = \left| \frac{\alpha_{k+1}}{\alpha_{k+1/2}} \right| \left| \frac{\alpha_{k+1/2}}{\alpha_k} \right| = \left| \frac{1 - G_1 P_1}{1 + G_2 P_2} \cdot \frac{1 - G_2 P_2}{1 + G_1 P_1} \right| < 1.$$

Последнее неравенство означает, что разностная схема переменных направлений (6)-(7) абсолютно устойчива, что обеспечивает возможность произвольного выбора значения шага итерации. При этом порядок точности аппроксимации по  $\tau$  более высокий (второй), что позволяет использовать при решении более грубый шаг итерации, ускоряя сходимость итерационного процесса и уменьшение количества итераций.

### Численный пример

Продемонстрируем решение задачи (1)-(2) на модельном примере, для которого инициализируем следующий набор параметров:  $R = 5$  усл.ед.,  $Z = 5$  усл.ед.,  $h_1 = h_2 = 0.1$ ;  $\tau = 0.5$ ;  $\rho = -1$  усл.ед.,  $\varepsilon \varepsilon_0 = 1$  усл.ед. Ввиду того, что независимо от используемого критерия окончания вычислений, во избежание закливания следует поставить ограничение на количество выполняемых итераций. Выберем максимальное число итераций  $k_{\max} = 100$ , с учетом скорости сходимости метода.

Представим практическую оценку сходимости вычислительной схемы (6)-(7). Используем указания по выбору оптимального значения параметра  $\tau$ , предложенные в [4]:  $\tau_{opt} \approx \frac{2h^2}{\sin(\pi h)}$ . Однако

рекомендации являются ориентировочными и требуется проверка скорости сходимости при варьирования шага итерации. Приведем значение погрешности  $\delta$  для последнего приближения, зафиксировав максимальное значение числа итераций на значении  $k_{\max} = 100$ . Примем также, что для каждой под-

схемы шаги по координатам совпадают  $h_1=h_2$ , параметры (за исключением координатных шагов и шага по времени установим такими же, как и в примере). Будем варьировать значения шага по времени  $\tau$  в окрестности рекомендуемого оптимального значения  $\tau_{opt}$  (при  $h_1=h_2=0.1$   $\tau_{opt} \approx 0.06$ ).

Результаты оценки погрешности (с учетом различных способов вычисления нормы) представлены в таблице.

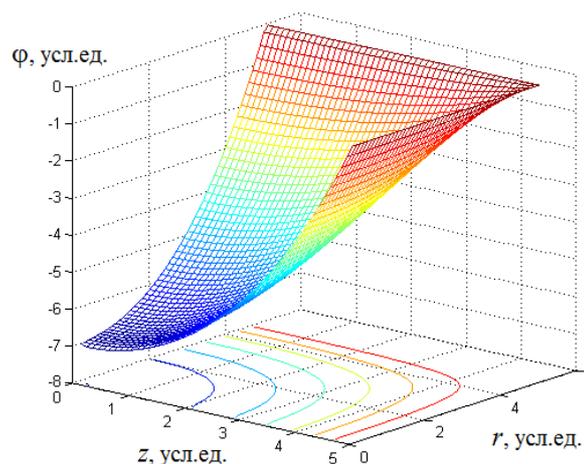


Рис. 2. Пространственное распределение потенциала для модельной задачи.

#### Оценка погрешности решения на последней итерации

$h_1=h_2$	$\tau$	$\ \varphi^{k+1} - \varphi^k\ $ (норма-максимум)	$\ \varphi^{k+1} - \varphi^k\ $ (Евклидова норма)
0.1	0.06	0.0531	0.5533
0.1	0.1	0.0382	0.3985
0.1	0.3	0.0017	0.0179
0.1	0.5	2.6075e-004	0.0030
0.1	0.6	1.6901e-004	0.0020
0.1	0.7	4.6917e-004	0.5154

Анализируя полученные данные, можно заключить, что наиболее оптимальным представляется выбор шага итерации  $\tau_{opt} \approx 0.6$ .

#### Заключение

Таким образом, построена вычислительная схема для решения смешанной краевой задачи для уравнения Пуассона с учетом цилиндрической симметрии многомерной задачи на основе метода переменных направлений. Для сконструированной схемы (6)-(7) были исследованы устойчивость и сходимость. Показано, что схема является абсолютно устойчивой, имеет второй порядок точности аппроксимации по  $\tau$ , позволяющий использовать при решении более грубый шаг итерации, что способствует ускорению сходимости итерационного процесса и уменьшению количества итераций. Введенную в рассмотрение вычислительную схему можно использовать для реализации математических моделей сложных процессов, описывающих пространственное распределение основных характеристик электростатического поля – напряженности и потенциала. В частности, для решения прикладной задачи о моделировании динамической зарядки диэлектриков, индуцированной электронным облучением.

1. Мартинсон, Л.К., Малов, Ю.И. Дифференциальные уравнения математической физики – М.: Изд-во МГУ, 1996. - 185 с.

2. Формалев, В.Ф., Ревизников Д.Л. Численные методы. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 400 с.

3. Петров, И.Б., Лобанов, А.И. Лекции по вычислительной математике: Учебное пособие // Интернет-университет информационных технологий; Бином. Лаборатория знаний, 2006. – 523 с.

4. Самарский, А.А. Теория разностных схем. - М.: Наука, 1989. – 479 с.

5. Марчук, Г.И. Методы расщепления для решения нестационарных задач // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1995. – Т. 35, № 6. – С. 843-849.
6. Марчук, Г.И. Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1977. – 456 с.
7. Maslovskaya, A., Pavelchuk, A. Simulation of dynamic charging processes in ferroelectrics irradiated with SEM // *Ferroelectrics*. – 2015. – V. 476. – P. 157-167.
8. Maslovskaya, A., Pavelchuk, A. Simulation of heat conductivity and charging processes in polar dielectrics induced by electron beam exposure // In: IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering, 2015. – V. 81. – P. 012119 (doi:10.1088/1757-899X/81/1/012119).
9. Павельчук, А.В., Масловская, А.Г. Неявная схема расщепления для некоторого класса дифференциальных уравнений параболического типа с возмущением // Вестник АмГУ. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2015. – Вып. 71. – С. 60-69.