ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ НА АЛГОРИТМИЧЕСКОМ ЯЗЫКЕ ПРОГРАММИРОВАНИЯ PYTHON

В.Л. Мондрус¹, Д.К. Сизов²

¹ Национальный исследовательский Московский государственный строительный университет,
г. Москва, РОССИЯ

² ООО «ВИБРОСЕЙСМОЗАЩИТА», г. Москва, РОССИЯ

Аннотация: Решение большинства практических задач, возникающих при расчете конструкций, требует численного решения краевых задач. В статье на примерах решения конкретных краевых задач описываются возможности современного объектно-ориентированного языка программирования Python. Данный язык обладает удобным синтаксисом и возможностями гибкого использования существующих библиотек численных методов, позволяющих пользователю в максимально короткие сроки подготовить программный код и приступить к изучению задачи. Богатые возможности графической библиотеки Matplotlib позволяют получать графическое отображение результатов расчета. Используемая в статье библиотека Numpy является стандартной библиотекой для проведения любых матрично-векторных расчетов на языке Python, её применение превращает язык Python в среду для программирования численных расчетов, аналогичную таким широко известным программным продуктам, как Matlab и GNU Octave. В статье методом конечных разностей решена задача для уравнения Лапласа, описывающем поле распределения температуры на прямоугольной области; задача поиска минимума функционала Дирихле вариационно-разностным методом; динамическая задача колебания массы на вязко-упругом элементе при колебаниях основания и трехмерная задача теории упругости вариационно-разностным методом.

Ключевые слова: вариационно-разностный метод решения краевых задач,
язык программирования Python, трехмерная краевая задача теории упругости,
поиск минимума функционала Дирихле

FEATURES OF THE NUMERICAL SOLUTION OF BOUNDARY VALUE PROBLEMS WITH THE USE OF PYTHON ALGORITHMIC PROGRAMMING LANGUAGE

Vladimir L. Mondrus¹, Dmitry K. Sizov²

¹ National Research Moscow State University of Civil Engineering, Moscow, RUSSIA

² LLD «VIBROSEYSMOZASHCHITA», Moscow, RUSSIA

Abstract: The solution of the majority of the practical tasks arising at calculation of constructions demands a numerical solution of boundary value problems. In article on examples of a solution of specific boundary value problems possibilities of a modern object-oriented programming language of Python are described. This language possesses convenient syntax and opportunities of flexible use of the existing libraries of the numerical methods allowing the user to prepare a program code and to start studying of a task in the shortest terms. Rich opportunities of graphic library Matplotlib are allowed to have graphic display of results of calculation. The Numpy library used in article is standard library for carrying out any matrix and vector calculations in the Python language, its application turns the Python language on Wednesday for programming of numerical calculations, similar to such widely known software products as Matlab and GNU Octave. In article the method of finite differences has solved a task for Laplace's equation, the describing field distribution of temperature on rectangular area; problem of search of a minimum of functionality of Dirikhle by a variational-difference method; a dynamic problem of vibration of weight on a visco-elastic element at vibrations of the basis and a three-dimensional task of the theory of elasticity by a variational-difference method.

Keywords: variational-difference method of a solution of boundary value problems, Python programming language, three-dimensional boundary value problem of the theory of elasticity, search of a minimum of functionality of Dirikhle

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЯЗЫКА PYTHON

Язык Python является простым для изучения языком программирования, способствующем написанию высокоструктурированных программ. Одно из основных преимуществ данного языка, как средства для решения краевых задач – это, прежде всего, изобилие библиотек, позволяющих в максимально сжатые сроки использовать уже существующие библиотечные модули в своих собственных программах. Одной из привлекательных черт данного языка является открытость реализаций, существуют интерпретаторы языка для многих платформ. Наиболее известной эталонной реализацией языка является CPython, которая написана на языке C. Python основан на языке программирования Java, в процессе трансляции происходит трансляция исходного кода языка Python в язык Java, что способствует еще большей переносимости программ. Особого внимания заслуживает транслятор IronPython, предназначенный для интеграции программ Python с приложениями, созданными для платформы Microsoft.NET Framework. Также существует реализация языка Python на самом языке Python (интерпретатор PyPy, включающий в себя Jit компилятор). Описанное программное обеспечение находится в свободном доступе и может быть скачано с официальных сайтов.

Важным свойством языка является наличие обширной литературы, затрагивающей как описание синтаксиса языка, так и конкретные пакеты, предназначенные для решения определенного круга задач. Наиболее известными сферами применения Python в области разработки научного софта является машинное обучение и анализ данных, в том числе обладающих разреженным и плохо структурированным составом. Своей спо-

собностью к обработке больших массивов данных данный язык обязан, прежде всего, нескольким библиотекам, специально созданных для быстрой обработки данных.

Основу, так называемого, "математического" Python составляет ряд наиболее известных в сообществе Python пакетов: NumPy, SciPy и Matplotlib, а также Pandas. Первоначально язык Python не задумывался как язык для численных расчетов, однако наличие данных пакетов позволяет использовать его как средство вычислений в некоторой степени аналогичное иным пакетам матричных вычислений MATLAB и GNUOctave, распространяющихся как на основе коммерческих, так и свободных лицензий.

Библиотека NumPy позволяет создавать массивы произвольной размерности и обладает множеством встроенных функций-операций для работы с ними. Так, например, для транспонирования матрицы, либо вычисления какой-либо функции от всех элементов массива не требуется написание кода, включающего в себя циклы, что приводит к значительному сокращению как самого программного кода, так и способствует большей векторизуемости вычислений.

Пакет SciPy включает в себя поддержку специальных функций, быстрое преобразование Фурье, операции линейной алгебры, подпрограммы решения дифференциальных уравнений и поисковой оптимизации, а также включает в себя функции интерполяции и сглаживания. Также поддерживается включение кода C внутрь кода Python программ.

Matplotlib позволяет получать качественное графическое представление данных, как в виде двумерных, так и трехмерных графиков. Далее в статье используются именно результаты, полученные с использованием данного пакета, помимо которого возможно применение библиотеки DISLIN, либо Chaco и Mayavi, Mayavi2.

В качестве примеров рассмотрим несколько решений краевых задач с использованием возможностей описанных библиотек.

2. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ЛАПЛАСА НА ПЛОСКОЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

Как известно, уравнение Лапласа описывает многие стационарные процессы (теплопроводности, диффузии, электростатики и т.д.). Рассмотрим двумерную прямоугольную область, на границах которой задано распределение температуры (рис. 1).

Рисунок 1. Рассматриваемая область с заданной на границах температурой.

Уравнение Лапласа и граничные условия для прямоугольной области имеют вид:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0, \quad (2.1)$$

$$\begin{cases} T(x, 0) = 0^\circ \text{C}, & T(x, Y_0) = 700^\circ \text{C} \\ T(0, y) = 0^\circ \text{C}, & T(X_0, y) = 700^\circ \text{C} \end{cases}$$

Для решения задачи применим метод конечных разностей, записав конечно-разностный аналог уравнения в виде:

$$\frac{T_{i+1,j}^{k+1} - 2T_{i,j}^{k+1} + T_{i-1,j}^{k+1}}{dx^2} + \frac{T_{i,j}^{k+1} - 2T_{i,j}^{k+1} + T_{i,j}^{k+1}}{dy^2} = 0, \quad (2.2)$$

где $T_{i,j}^{k+1}$ – значение искомой функции в $[i,j]$ точке на $k+1$ итерации, dx, dy – шаг по координате x и y . Укрупненная блок-схема решения задачи распределения температуры представлена на рис. 2.

Выполнив итерации метода Зейделя, на сетке размером 50×50 точек, получим поле распределения температур, которое можно представить средствами библиотеки Matplotlib в виде двух и трехмерных графиков, представленных в таблице 1. Как видно из рисунков, граничные условия задачи выполнены с высокой точностью. Библиотека Matplotlib позволяет производить настройку преобладающих цветов графического отображения в весьма широких пределах и предоставляет пользователю богатые возможности выбора цветовых форм оформления графиков из существующего набора.

При выполнении расчетов на языке Python следует избегать явной записи циклов по отдельным точкам области, максимально используя возможности индексных срезов библиотеки NumPy, что позволяет максимально ускорить процесс вычислений.

3. ПОИСК МИНИМУМА ФУНКЦИОНАЛА ДИРИХЛЕ ВАРИАЦИОННО-РАЗНОСТНЫМ МЕТОДОМ

Потенциальная энергия мембраны с точностью до множителя, выражающего её физические свойства, выражается кратным интегралом по области:

$$D[u] = \iint_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right] dx dy, \quad (3.1)$$

где Ω – область, занимаемая мембраной; u – искомая функция.

Рисунок 2. Укрупненная блок-схема программы для задачи теплообмена (блок с вычислением граничных условиях, зависящих от вычислительного процесса позволяет получить значения искомой функции на тех участках границы области, где граничные условия не заданы).

Таблица 1. Поле распределение температур.

Рисунок 3. Фрагмент конечно-разностной сетки (область $[i, j]$ точки).

Положение равновесия мембраны соответствует условие минимальности данного

функционала при заданных граничных условиях. Решение задачи будем производить вариационно-разностным методом с численным вычислением производной от функционала каждой точке области решения.

Конечно-разностный аналог функционала имеет вид:

$$D[u] = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \left[\left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h_x} \right)^2 + \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{h_y} \right)^2 \right] h_x h_y =$$

$$\left[\underbrace{\dots + \left(\frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h_x} \right)^2 + \left(\frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j}}{h_y} \right)^2}_{\text{Point}[i-1,j]} + \right.$$

$$\left. \underbrace{\left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h_x} \right)^2 + \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{h_y} \right)^2}_{\text{Point}[i,j]} + \right.$$

$$\left. \underbrace{\left(\frac{u_{i+1,j-1} - u_{i,j-1}}{h_x} \right)^2 + \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{h_y} \right)^2}_{\text{Point}[i,j-1]} + \dots \right] \quad (3.2)$$

На рис.3 показан фрагмент конечно-разностной сетки в окрестности точки с индексами i, j . Видно, что непосредственное участие в формировании уравнения в $[i, j]$ точке принимают лишь выражения для энергии в $[i-1, j]$, $[i, j]$ и $[i, j-1]$ точках, несмотря на то, что в каждом вариационно-разностном уравнении будет участвовать пять точек с индексами $[i-1, j]$, $[i, j]$, $[i, j-1]$, $[i+1, j]$, $[i, j+1]$. В процессе вычислений по методу Зейделя на точки с индексами $[i+1, j]$, $[i, j+1]$ будет распространяться влияние со стороны точек $[i-1, j]$, $[i, j]$ и $[i, j-1]$.

На рис. 4 приводится укрупненная блок-схема вариационно-разностного метода с учетом использования хеш-таблицы (особой формы именованного массива) языка Python. применение хэш-массива позволяет естественным образом учесть изменение вида уравнений на границах рассматриваемой прямоугольной области.

Рисунок 4. Укрупненная блок-схема вариационно-разностного метода.

На границах области число входящих в уравнение вариационно-разностного метода слагаемых меняется, использование хэш-массива позволяет хранить индексы тех компонентов энергии, которые вносят ненулевой вклад на границе.

В таблице 2 приводятся результаты решения двухмерной задачи минимизации функционала Дирихле при заданных условиях на границе.

Таблица 2. Результаты решения двухмерной задачи минимизации функционала Дирихле при заданных условиях на границе.

4. РЕШЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ КОЛЕБАНИЙ СОСРЕДОТОЧЕННОЙ МАССЫ НА ВЯЗКОУПРУГОМ ЭЛЕМЕНТЕ

Одной из важных технических задач является защита оборудования и зданий от вибрирующего основания. Для гашения вибрационного воздействия чаще всего используются системы виброизоляции, основанные на разделении защищаемого объекта и источника колебаний вязкоупругим элементом. Простейшая модельная схема системы виброзащиты сосредоточенной массы представлена на рис. 5.

Рисунок 5. Система виброзащиты объекта

Дифференциальное уравнение, описывающее поведение массы на вязкоупругом элементе имеет вид:

$$M \frac{d^2 u}{dt^2} + b \frac{du}{dt} + cu = M \frac{d^2 \xi}{dt^2}, \quad (4.1)$$

где M – масса объекта; u – искомое относительное перемещение, c – жесткость пружины, b – вязкость, а правая часть уравнения включает в себя заданное ускорение

$$\frac{d^2 \xi}{dt^2}$$

основания.

Решение задачи произведем методом Эйлера-Коши, результаты приводятся в таблице 3 (при различных заданных акселерограммах).

Таблица 3. Результаты решения задачи методом Эйлера-Коши.

Акселерограмма, м/с ²	Перемещения массы, м

5. РЕШЕНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕДА

Решение задачи для трехмерного тела представляет определенные трудности, связанные, прежде всего с объемом вычислительной работы, а также с подготовкой и вводом исходных данных. Рассмотрим трехмерное упругое тело в виде параллелепипеда, сжатого на определенную заданную величину (одинаковую для всех точек верхней грани). Боковые поверхности параллелепипеда свободны от усилий, а нижняя грань жестко закреплена, точки верхней грани имеют только перемещение вниз, перемещение в плоскости верхней грани исключено. Как известно, выражение для потенциальной энергии упругого тела, выраженное через перемещение имеет вид:

$$A[u, v, w] = \frac{E\nu}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + G \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \frac{G}{2} \left[\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (5.1)$$

где E – модуль упругости, ν – коэффициент Пуассона, G – модуль сдвига, а u, v, w – компоненты вектора перемещений.

Согласно принципу минимума потенциальной энергии, действительное распределение вектора перемещений сообщает полной потенциальной энергии системы Π абсолютный минимум. Выражение потенциальной энергии упругого тела имеет вид:

$$\Pi = \iiint_V A[u, v, w] dV - \iiint_V (X_u + Y_v + Z_w) dV - \iint_{S_1} (X_v u + Y_v v + Z_v w) dS, \quad (5.2)$$

где $\bar{X}, \bar{Y}, \bar{Z}$ – компоненты вектора объемных сил; X_v, Y_v, Z_v – компоненты вектора поверхностных сил, заданных на поверхности S_1 .

При рассматриваемых граничных условиях (сжатие прямоугольного параллелепипеда) компоненты объемных сил и компоненты вектора поверхностных сил на свободных гранях параллелепипеда равны нулю. В этом случае выражение потенциальной энергии упрощается – остается лишь член, включающий в себя трехмерный интеграл от потенциальной энергии.

Дискретизация трехмерной области сеткой показана на рис. 6, а локальная связь входящих в каждое уравнение вариационно-разностного метода компонент функционала энергии приводится на рис. 7 для внутренних точек области. Для решения задачи производная функционала в $[i, j, k]$ точке вычисляется аналитически. Решение задачи осуществляется итерационным методом Зейделя. С целью учета свободной границы парал-

лелепипеда вводится расширенная область, размеры которой позволяют выполнять итерации внутри параллелепипеда единообразно как для внутренних точек расширенной области, так и для точек границы расчетной области трехмерного тела.

Рисунок 6. Дискретизация трехмерной области

Рисунок 7. Фрагмент сетки вариационно-разностной аппроксимации в окрестности $[i,j,k]$ точки.

Граничные условия задачи принимаются следующие: нижняя грань закреплена, а верхняя имеет одинаковое для всех точек вертикальное смещение.

Результаты численного решения вариационно-разностным методом трехмерной задачи сжатия трехмерного параллелепипеда представлены в таблице 4. В качестве сечения трехмерного тела рассматривается плоскость перпендикулярная основанию параллелепипеда и проходящая через середину стороны, расположенной вдоль оси X.

Таблица 4. Результаты численного решения вариационно-разностным методом трехмерной задачи сжатия трехмерного параллелепипеда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Васидзу К. Вариационные методы в теории упругости и пластичности. – М.: Мир, 1987. – 542 с.
2. Годунов С.К. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1979. – 392 с.

3. Годунов С.К., Рябенский В.С. Разностные схемы. – М.: Наука, 1977. – 440 с.
4. Гейтвуд Б.Е. Температурные напряжения применительно к самолетам, снарядам, турбинам и ядерным реакторам. – М.: Издательство иностранной литературы, 1959. – 349 с.
5. Маккинли У. Python и анализ данных. – М.: ДМК Пресс, 2015. – 482 с.
6. Панюкова Т.А. Численные методы. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. – 224 с.
7. Прохоренко Н.А. Python 3 и PyQt5. Разработка приложений. – СПб.: БХВ-Петербург, 2016. – 832 с.
8. Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости. – М.: Наука, 1975. – 576 с.
9. Тимошенко С.П., Гере Дж. Механика материалов. – М.: Мир, 1976. – 669 с.
10. Рамальо Л. Python. К вершинам мастерства. – М.: ДМК Пресс, 2016. – 768 с.
11. Седжвик Р., Уэйн К., Дондеро Р. Программирование на языке Python. – М.: Вильямс, 2017. – 736 с.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vaidzu K. Variatsionnye Metody v Teorii Uprugosti i Plastichnosti [Variational methods in the theory of elasticity and plasticity]. Moscow, Mir, 1987, 542 pages.
2. Godunov S.K. Uravneniya Matematicheskoy Fiziki [Equations of Mathematical Physics]. Moscow, Nauka, 1979, 392 pages.
3. Godunov S.K., Riaben'kii V.S. Raznostnye Skhemy [Difference Schemes]. Moscow, Nauka, 1977, 440 pages.
4. Geitvud B.E. Temperaturnye Napriazheniia Primenitel'no k Samoletam, Snariadam, Turbinam i Yadernym Reaktoram [Temperature Stresses Applied to Aircraft, Projectiles, Turbines and Nuclear Reactors]. Moscow, Izdatelstvo Inostrannoi literatury, 1959, 349 pages.

5. **Makkinli U.** Python i Analiz Danykh [Python and Data Analysis]. Moscow, DMK Press, 2015, 482 pages.
6. **Paniukova T.A.** Chislennyye Metody [Numerical Methods]. Moscow, Librokom, 2010, 224 pages.
7. **Prokhorenok N.A.** Python 3 i PyQt5. Razrabotka Prilozhenii [Python 3 and PyQt5. Application Development]. Saint-Petersburg, BKhV-Peterburg, 2016, 832 pages.
8. **Timoshenko S.P., Gud'er Dzh.** Teoriia Uprugosti [Theory of Elasticity]. Moscow, Nauka, 1975, 576 pages.
9. **Timoshenko S.P., Gere Dzh.** Mekhanika materialov [Mechanics of Materials]. Moscow, Mir, 1976, 669 pages.
10. **Ramal'o L.** Python. K vershinam masterstva [Python. To the heights of skill]. Moscow, DMK Press, 2016, 768 pages.
11. **Sedzhvik R., Uein K., Dondero R.** Programirovanie na iazyke Python [Programming in Python]. Moscow, Williams, 2017, 736 pages.

Dmitry K. Sizov, Ph.D., Head of Department LLD «VIBROSEYMOZASHCHITA»; 26, Yaroslavskoe shosse, Moscow, 129337, Russia; phone/fax: 8 (499) 784-78-91; E-mail: vibroprotect@mail.ru.

Мондрус Владимир Львович, член-корреспондент Российской академии архитектуры и строительных наук (РААСН), профессор, доктор технических наук; заведующий кафедрой строительной и теоретической механики ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Московский государственный строительный университет»; Россия, 129337, г. Москва, Ярославское шоссе, д. 26; тел: +7 (495) 781-80-07, факс: +7 (499) 183-44-38; e-mail: mondrus@mail.ru.

Сизов Дмитрий Константинович, кандидат технических наук, начальник отдела ООО «ВИБРОСЕЙСМОЗАЩИТА»; Россия, 129337, г. Москва, Ярославское шоссе, д. 26; тел./факс: 8 (499) 784-78-91; E-mail: vibroprotect@mail.ru.

Vladimir L. Mondrus, Corresponding Member of Russian Academy of Architecture and Construction Sciences (RAACS), Professor, Dr.Sc.; Head of Structural and Theoretical Mechanics Department of National Research Moscow State University of Civil Engineering; 26, Yaroslavskoe shosse, Moscow, 129337, Russia; phone: +7 (495) 781-80-07, fax: +7 (499) 183-44-38; E-mail: mondrus@mail.ru.