**КОМПАКТНАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ КВАЗИЛИНЕЙНЫХ И НЕЛИНЕЙНЫХ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ**

***В.А. Гордин, А.С. Романов.***

***Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», (ФЭН & ФКН) & Гидрометцентр РФ***

Рассматривается общий метод - компактные схемы - численного решения для следующих типов эволюционных дифференциальных уравнений в частных производных:

1. Уравнение в частных производных первого порядка – закон сохранения:

, (1)

*g* – заданная гладкая функция, .

1. Простейшая модель газо- и гидро-динамики – уравнение Бейтмана - Бюргерса:

, число Рейнольдса , *U*, *L* – характерные скорость и размер, (2)

 - скорость,  - коэффициент вязкости, , периодичность по *х*.

1. Уравнение Фишера – Колмогорова – Петровского – Пискунова:

, (3)

где  - относительная плотность распределения числа особей с доминантным геном,.

1. Уравнение Лейбензона:

, (4)

описывает эволюцию давления газа в пористой среде, .

Здесь граничные условия – периодичность или Дирихле.

1. Нелинейное уравнение Шредингера

, , *D = const* (5)

описывает огибающую волнового пакета в среде с дисперсией и кубической нелинейностью.

Метод компактной разностной аппроксимации применим к существенно более широкому классу задач.

Эти уравнения представляем в виде

 (6)

 линейные дифференциальные операторы, *f*=*f*(*u*) и аппроксимируем (6) парой разностных операторов: .

В данном случае всегда на пространственно временном шаблоне  точки. Получаем однослойную (двухуровневую) неявную по времени схему с 4-м порядком точности для вычисления значений на следующем шаге по времени :

. (7)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Рис 1. *Шаблоны для решения  и для правой части компактной схемы (6) и диаграмма Ньютона тестовых функций.*

Как выбрать эти 12 коэффициентов схемы? Потребуем точности схемы (7) на 11 парах тестовых функций - точных решениях (6). Функции  - мономы, показанные на Рис.1, а тестовые функции  получаются из тестовых решений  дифференцированием. Учитываем две пары тестовых функций с *u*=0, где функция *f* отлична от нуля, см. табл. 1.

Также берем нормировочное условие, поскольку все остальные линейные уравнения однородны, а нам нужен какой-то конкретный набор коэффициентов.

**Таблица 1**. Компактная схема для уравнения Эйлера - Хопфа. Пары тестовых функций и «локальная» СЛАУ для определения коэффициентов компактной схемы (7)

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № |  |  | Уравнение |
| 1 | 1 | 0 |  |
| 2 | 0 | 1 |  |
| 3 | 0 | *t* |  |
| 4 | *t* | *x* |  |
| 5 |  | *2tx* |  |
| 6 | *x* | 0 |  |
| 7 |  | t |  |
| 8 |  |  |  |
| 9 | t | /3 |  |
| 10 | x | t |  |
| 11 |  |  |  |
| 12 | Нормиров. условие | |  |

Решение «локальной» СЛАУ (из таблицы 1):



Поскольку уравнение (1) квазилинейное, и , получаем из (2) систему квадратных алгебраических уравнений порядка  относительно значений :

 (7)

Аппроксимируем дифференциальное уравнение (1) на отрезке  на сетке , где  - шаг по времени, ,  - шаг по пространству; с условием периодичности . Для приложений важна точность разностных решений: и гладкого, и со скачком.

Здесь разное время возникновения разрыва для разных начальных условий. Для начального условия  разрыв возникает при t ~ 1,05. Для начального условия  разрыв возникает при t ~ 0,3.

Решение на каждом шаге по времени нелинейной алгебраической системы (7) высокой размерности – трудная задача, имеющая много решений.

Задача эта существенно упрощается, если сначала сделать шаг по времени по какой-то явной разностной схеме и получить ``грубое’’ решение .

**Явные схемы Лакса – Вендроффа, Адамса - Бэшфорда, и Мак-Кормака, как первое приближение для неявной компактной схемы**

На каждом шаге для решения системы (7), используем явную схему Лакса – Вендроффа (2 порядок точности на гладких решениях), а затем применим компактную корректировку.

Результат шага по явной схеме обозначим . Будем искать решение системы (7) в виде малой поправки к решению, полученному по явной схеме. Введем малые поправки  к . Подставим  в нелинейную систему (7):



Используя предположение о малости поправок  по сравнению с решением , отбросим квадраты поправок. Решаем трехдиагональную «глобальную» (порядок = *N*) СЛАУ:





* Прибавляем полученные поправки  к решению  по явной схеме.
* Делаем следующий шаг по явной схеме.

При разностной аппросимации законов сохранения известна проблема потери гладкости и локальной монотонности решения, которая проявляется на графиках в виде «пилы»:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Рис 2. Решение уравнения Эйлера - Хопфа по схеме Лакса - Вендроффа для разных моментов времени. Явная схема.  Начальное условие . | Решение уравнения Эйлера - Хопфа по схеме Лакса - Вендроффа для разных моментов времени. Явная схема.  Начальное условие . |

При начальном условии  через время  в решении уравнения (1) возникает разрыв в точке . Поскольку перед этим производная по *x* решения неограниченно растет, такое явление называется градиентной катастрофой. Оценим порядок точности компактных схем до градиентной катастрофы.

Метод оценки точности: вычислялось эталонное решение  на мелкой сетке при *N = 400, M*=8192. Затем для грубых разрешений  вычислялись решения . Далее  и  ограничиваем на грубую сетку (*N = 50, M = 32*), и вычисляем погрешность 

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | | Рис 3. **С**-норма погрешности схем в зависимости от разрешения *N* в ln-системе до *T* = 1. Параметры для мелкой сетки *V = 0,1, h = 0,015,*   = 7,67e-04  Начальное условие .  **Результат**  **Порядки точности:**  **2,15 (Явная - МК)/2,14(Явная - АБ)/4,04 (компактная МК, компактная АБ - совпадают). Компактная много лучше!** | | |
|  | | Рис 4. Решение уравнения Эйлера -Хопфа по схеме (Лакса - Вендроффа & компактная схема) для разных моментов времени.  Начальное условие .  Численное решение начинает осциллировать по мере приближения к градиентной катастрофе - моменту возникновения скачка в решении дифференциальном уравнении |

В решении даже по компактной схеме при приближении к градиентной катастрофе возникает (хотя и позже) двухшаговая по *x* пила. Поэтому используем следующий специальный трехшаговый оператор сглаживания, чтобы подавить двухшаговую пилу в решении, минимально исказив длинные волны.

Пусть *Р* – оператор десглаживания (аналогичный второй разностной производной, действует по формуле: .

Замечание. Здесь все функции предполагаются периодическими. В противном случае на краях нужно использовать граничные условия на сглаживаемую функцию.

Пусть оператор . При применении *S* к функции выделяется коротковолновая составляющая, которую можно вычесть: 

Процедуру сглаживания применяем только в точках, где осциллирует решение. Сначала найдем те точки, для которых в решении выполнено неравенство:

. (4)

Далее для точек сетки, в которых выполнено (4), используем оператор сглаживания . Этот оператор подавляет вычислительные осцилляции в решении.

Отдельным алгоритмом обрабатываются точки на краю скачка. Здесь сглаживание совершенно неуместно. Для диагностики таких точек вычисляем значение . Если , то мы полагаем, что точка находится на правом берегу скачка и используем формулу . Если , то используем формулу экстраполяции: .

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Рис 5. Слева решение уравнения Эйлера - Хопфа по схеме Лакса - Вендроффа для компактной схемы с операторами сглаживания. Справа – без операторов сглаживания.

Начальное условие . Компактная схема & ЛВ c оператором сглаживания подавляетвычислительную пилу, которая возникает у компактной без сглаживания и у явной схемы.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Рис 6. Слева решение уравнения Эйлера - Хопфа по схеме Лакса - Вендроффа & компактной схемы с операторами сглаживания. Справа – без операторов сглаживания. Начальное условие .

**II. Простейшая модель газо- и гидро-динамики – уравнение Бейтмана - Бюргерса:**

, число Рейнольдса ,

где  - скорость,  - коэффициент вязкости, , периодичность по *х*.

Для компактной аппроксимации перепишем в виде:

,  .

С помощью замены Форсайта – Флорина – Коула – Хопфа получаем из решения  для обычного уравнения диффузии точное решение уравнения (2):

 .

На нем оценим погрешности различных разностных схем. Компактная поправка (при очень маленьких *D* - со сглаживанием) и тут подавляет осцилляции. Аппроксимируем дифференциальное уравнение (2) с условием периодичности на сетке, где  - шаг по времени, ,  - шаг по пространству; .

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |

**Рис 7**. Решение компактной схемы после АБ для  = 0.006, *h* = 0.03, D = 0,4, в разные моменты времени. 8а) начальное условие для аналитического решения (2) уравнения Б-Б: ; 8б) ; 8в) решение по явной схеме для начального условия 8а); 8г) решение по явной схеме для начального условия 8б)

Результаты (погрешности разностного решения) при использовании различных явных схем для вычисления первого приближения довольно близки. В окрестности градиентной катастрофы осцилляции эффективно подавляются а) несколькими последовательными линеаризациями; б) использованием сглаживающих операторов (иногда односторонних) в окрестности скачка решения.

**Уравнение Фишера – Колмогорова – Петровского - Пискунова**

, (3)

где  - относительная плотность распределения числа особей с доминантным геном,.

Тестовые функции схемы - мономы .

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Рис 8. Шаблоны для решения  и правой части компактной схемы и диаграмма Ньютона тестовых функций 

Таблица 2. Пары тестовых функций и «локальная» СЛАУ для определения коэффициентов компактной схемы (5)

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № | *u* | *f* | Уравнение |
| 1 | 1 | 0 |  |
| 2 | t | 1 |  |
| 3 |  |  |  |
| 4 |  | -2V |  |
| 5 |  |  |  |
| 6 |  |  |  |
| 7 |  |  |  |
|  |  | нормировочное |  |

Решение «локальной» СЛАУ: ,, ,

,, .

На каждом шаге для решения системы (4), будем использовать явные схемы: Адамса – Бэшфорда или Эйлера, а затем применять компактную корректировку.

Явная схема АБ (второй порядок точности) здесь имеет вид:

* Предиктор .
* Корректор .

Явная схема Эйлера (первый порядок точности) состоит из одного шага:

 .

|  |  |
| --- | --- |
|  | Рис. 9 График точного решения (3) уравнения ФКПП, *D = 1, T* = 10    График ведет себя как “бегущая волна”. |

|  |  |
| --- | --- |
|  | **Рис 10. С**-норма погрешности схем в зависимости от разрешения *N* в log-системе до *T* = 2. Параметры для мелкой сетки D *= 0,004,h =* */(2\*400),*  = 2/4096  Начальное условие.  Результат  Порядки точности:  1,8 (Явная АБ)/3,02(Компактная &АБ)/ 3,02(Компактная & Эйлер) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | **Рис 11. С**-норма погрешности схем в зависимости от разрешения *N* в **ln**-системе до *T* = 2. Параметры для мелкой сетки *D = 0,002,h = 2**/400,*  = 2/4096  Начальное условие.  Результат  Порядки точности:  1,05(Явная АБ)/ 3,4(АБ & компактная) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | **Рис 12.** Оценка скорости бегущей волны по серединной точке профиля от времени до *T* = 40. Параметры D *= 1, h = 400/400,*  = 40/1024  Начальное условие.  Результат  Серединная координата (как и нужно) двигается со скоростью 2. |

Важный критерий точности аппроксимации – точность, с которой воспроизводится известная из теории (см., например, [КПП]) скорость перемещения волны. Будем оценивать ее по скорости перемещения со временем точки, в которой решение *u* принимает значение ½. Пусть *J=J(t)* – индекс, такой что  . Определим  формулой .

Компактная схема имеет порядок точности много больший чем у явной схемы.

Явная схема условноустойчива. При  устойчива, при  неустойчива.

Таблица 3. Погрешность явных/компактных схем в зависимости от параметров уравнения ФКПП для

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Схема явная перед компактной | Норма | Параметры | Порядок |
| АБ | C | *D = 0,0002, T =2,* | 1,67/1,91 |
| АБ | C | *D = 0,005, T = 2**,* | 1/3,4 |
| Эйлер | C | *D = 0,002, T* = 2, | 1,9/3,02 |

Граница устойчивости компактной схемы: при интегрировании до .

Граница устойчивости схемы АБ: .

**Уравнение Лейбензона**

, (4)

описывает давления газа в пористой среде, .

Поскольку уравнение и шаблоны симметричны по , коэффициенты схемы

 (7)

также симметричны, и любые нечетные по  тестовые функции всегда удовлетворяют локальной СЛАУ.

Поэтому тестовые функции  схемы - мономы .

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Рис 13. Шаблоны для решения  и правой части компактной схемы и диаграмма Ньютона тестовых функций 

Таблица 4. Пары тестовых функций и соответствующие уравнения «локальной» СЛАУ для определения коэффициентов компактной схемы (7). Две тестовые функции *f* отвечают нулевой функции *u*.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № | *p* | *f* | Уравнение |
| 1 | 0 | 1 |  |
| 2 | 0 | t |  |
| 3 | 1 | 0 |  |
| 4 |  | 0 |  |
| 5 | t |  |  |
| 6 |  |  |  |
| 7 |  |  |  |
|  |  | нормировочное |  |

Коэффициенты схемы (7) равны 

Поскольку здесь, получаем из (7) систему квадратных алгебраических уравнений порядка  относительно значений :

 (8)

Следовательно, чтобы сделать шаг по времени в неявной схеме (7): , требуется решить систему нелинейных уравнений (8) относительно неизвестных значений . Это трудная вычислительная задача, которая может иметь много решений. Применим идею линеаризации . Члены второго порядка малости по  отбросим.

Линеаризованное уравнение имеет вид

 где



На каждом шаге по времени для решения системы (7), будем сначала использовать явную схему, а затем применять компактную корректировку.

Известны эталонные (аналитические) решения для уравнения (4):

1. эталонное решение постоянно.
2. Эталонное решение линейно растет со временем
3. Эталонное решение за конечное время утрачивает непрерывность
4. Решения, которые существуют только при положительных *t*

|  |  |
| --- | --- |
|  | **Рис 14.** А) Решение уравнения Лейбензона для компактной схемы с явным шагом по схеме Эйлера до *T* = 1. Параметры для сетки C *= 0,025,h =* 1*/(50),*  = 1/1024  Эталонное условие ,  Начальное условие .  Б) График разности аналитического решения и решения по компактной схеме. Величина разности ~. |

|  |  |
| --- | --- |
|  | **Рис 15.** Решение уравнения Лейбензона для компактной схемы с линеаризацией по схеме Л-В до *T* = 1. Параметры для сетки C *= 0,025, h =* 1*/(50),*  = 1/1024 Эталонное стационарное решение ,  Б) График разности аналитического решения и решения по компактной схеме. Для всех времен одинаковая погрешность.  Явные схемы ЛВ и Эйлера для данных параметров неустойчивы. А с компактной устойчивы и дают отличные результаты |

|  |  |
| --- | --- |
|  | **Рис 16. С**-норма погрешности схем в зависимости от разрешения *N* в ln-системе до *T* = 1. Параметры для мелкой сетки C *= 0,025,h = 1/(400),*  = 1/4096  Эталонное стационарное решение ,  Результат  Порядки точности:  4,2 (Компактная при Л-В), Компактная при Эйлере вообще имеет машинную точность  Явные схемы ЛВ и Эйлера для данных параметров неустойчивы. |

|  |  |
| --- | --- |
|  | **Рис 17. С**-норма погрешности схем в зависимости от разрешения *N* в ln-системе при *T* = 1. Параметры для мелкой сетки C *= 0,025,h = 1/(400),*  = 1/4096  Эталонное стационарное решение ,  Порядки точности: 6,4 (Компактная после Л-В), Компактная при Эйлере имеет машинную точность |

**Нелинейное уравнение Шредингера**

, , *D* = const (5)

описывает огибающую волнового пакета в среде с дисперсией и кубической нелинейностью.

Разобьём это комплексное уравнение на систему двух вещественных уравнений:





Составим схему для системы:



(6)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  |  |  |

Рис 18. Шаблоны для решения  и правой части, компактной схемы и

Таблица 5. Пары тестовых функций и соответствующие уравнения «локальной» СЛАУ для определения коэффициентов компактной схемы (6).

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| u | v | f | g | Уравнение |
| t-tau/2 | 0 | 1 | 0 |  |
| x^2(t-tau/2) | 0 | x^2 | -2(t-tau/2) |  |
| 1 | 0 | 0 | 0 | (4A+2B)=0 |
| X^2 | 0 | 0 | -2 |  |
| (t-tau/2)^2 | 0 | 2(t-tau/2) | 0 |  |
| 0 | t-tau/2 | 0 | 1 |  |
| 0 | x^2(t-tau/2) | 2(t-tau/2) | X^2 |  |
| 0 | 1 | 0 | 0 |  |
| 0 | X^2 | 2 | 0 |  |
| 0 | (t-tau/2)^2 | 0 | 2(t-tau/2) |  |

Будем пробовать разные значения параметров.

В первом уравнении b=1, a – параметр,



Во втором уравнении E=1, С – параметр, 

Результат явной схемы всегда обозначаем. Будем искать решение системы (6) в виде малой поправки к решению, полученному по явной схеме: к. Подставим  в нелинейную систему (6) и оставим только линейные по  слагаемые:





Построим графики первых интегралов в зависимости от разных параметров a для коэффициентов компактной схемы.

|  |  |
| --- | --- |
|  | **Рис 19.** А) График первого интеграла для явной схемы и компактной в зависимости от разных значений параметра, a = c. Явная схема МК.  N = 100, L = 2\*pi  Б) Аналогично 19А), но с другими параметрами |

Компактные методы а) позволяют получать существенно более точные решения при тех же вычислительных затратах, б) позволяют расширить область устойчивости разностной схемы, в) позволяют эффективно бороться с нарушениями монотонности типа «вычислительной пилы».

Применимы к широкому классу эволюционных уравнения в частных производных.

Работа подготовлена в ходе проведения исследования (№ 20-04-021) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета „Высшая школа экономики“ (НИУ ВШЭ)» в 2020 — 2022 гг. и в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации «5-100».

**Литература**

Уизем Дж. Линейные и нелинейные волны. «Мир».: 1973.

С.К. Годунов, В. С. Рябенький. Разностные схемы. “Наука”, 1977.

В.А.Гордин. Математика, компьютер, прогноз погоды и другие сценарии математической физики. М., ФИЗМАТЛИТ, 1-е изд. 2010, 2-е изд. 2012-2013.

В.А.Гордин. *Дифференциальные и разностные уравнения. Какие явления они описывают и как их решать*. «Издательский дом ВШЭ», М., 2016.

[V.A. Gordin](https://www.hse.ru/org/persons/414958), [E.A. Tsymbalov](https://www.hse.ru/staff/etsymbalov). Compact difference scheme for parabolic and Schrodinger-type equations with variable coefficients. J. Comp. Phys. V.375, pp.1451-1468, 2018.

В.А.Гордин. Компактные разностные схемы для аппроксимации дифференциальных соотношений. «Математическое моделирование» 2019, 31(7), стр.58-74.

В.А.Гордин. Компактные разностные схемы для слабо нелинейных задач и граничные условия, имитирующие задачу Коши. Океанологические исследования, 2019, Т. 47, №1, СС. 32–37.