КОМПАКТНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ДВУМЕРНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА С РАЗРЫВНЫМ КОЭФФИЦИЕНТОМ

© 2023 г. **В.А. Гордин^{1,2}, Д.А. Шадрин^{1,2}**

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» ²ФГБУ «Гидрометцентр России» vagordin@mail.ru; shadrin.dmitry2010@yandex.ru

Публикация подготовлена при частичной поддержке грантом (№ 20-04-021) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ) и при частичной поддержке Федеральной службы по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды Российской Федерации (тема AAAA-A20-120021490079-3).

DOI: 10.20948/mm-2023-04-05

Для эллиптического уравнения 2-го порядка с переменными разрывными коэффициентом и правой частью построена схема 4-го порядка точности. На линии скачка предполагаются выполненными условия стыковки (Кирхгофа). Применение экстраполяции Ричардсона, как показали численные эксперименты, увеличивает порядок точности примерно до 6-го. Показано, что релаксационные методы, в том числе многосеточный, применимы для решения таких систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), отвечающих компактной конечно-разностной аппроксимации задачи. По сравнению с классической аппроксимацией точность увеличивается примерно в 100 раз при той же трудоемкости. Рассмотрены различные варианты уравнения и граничных условий, а также задача на определение собственных чисел и функций для кусочно-постоянного коэффициента уравнения.

Ключевые слова: разрывный коэффициент, граничные условия, конечно-разностная аппроксимация, компактная неявная схема, шаблоны, тестовые функции, 4-й порядок точности, экстраполяция Ричардсона, метод релаксации, многосеточный метод.

COMPACT APPROXIMATION
OF A TWO-DIMENSIONAL BOUNDARY VALUE PROBLEM
FOR ELLIPTIC EQUATIONS
OF THE 2nd ORDER WITH A DISCONTINUOUS COEFFICIENT

V.A. Gordin^{1,2}, D.A. Shadrin^{1,2}

- ¹ National Research University Higher School of Economics
- ² Federal State Budgetary Institution "Hydrometeorological Center of Russia"

For an elliptic equation of the 2nd order with variable discontinuous coefficients and the right side, a scheme of the 4th order of accuracy is constructed. On the jump line, the conditions of docking (Kirchhoff) are assumed to be fulfilled. The use of Richardson extrapolation, as numerical experiments have shown, increases the order of accuracy to about the 6th. It is shown that relaxation methods, including multigrid methods, are applicable to solving such systems linear algebraic equations (SLAE) corresponding to a compact finite-difference approximation of the problem. In comparison with the classical approximation, the accuracy increases by about 100 times with the same labor intensity. Various variants of the equation and boundary conditions are considered, as well as the problem of determining eigenvalues and functions for a piecewise constant coefficient of the equation.

Keywords: finite-difference approximation, compact implicit scheme, stencil, test functions, accuracy order, Richardson extrapolation.

1. Введение

Эллиптические линейные уравнения с разрывными коэффициентами и правой частью описывают стационарные решения, например, при диффузии, теплопроводности, распределении электростатического потенциала в средах со скачком меняющимися свойствами. Такие модели встречаются и в физике (например, в геофизике), и в технике.

Рассмотрим уравнение второго порядка:

$$-\operatorname{div}[\vartheta(\mathbf{x})\operatorname{grad} u] = f, \quad \mathbf{x} = \langle x, y \rangle \in G. \tag{1}$$

Здесь область решения G — боковая поверхность цилиндра, разделенного на две половины линией Γ (см. рис.1). Предполагается, что решение u, правая часть f и коэффициент ϑ — кусочно-аналитические функции в области G, периодичные по независимой переменной y

$$\partial_{\nu}^{n} u(x,0) = \partial_{\nu}^{n} u(x,L_{\nu}), \quad n = 0,1,2,\dots$$
 (2)

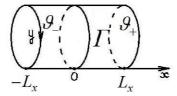


Рис.1. Вычислительная область задачи G — боковая поверхность цилиндра. Коэффициент $\vartheta(x)$ — кусочно-постоянная функция.

На границе G ставим граничные условия, например, условия Дирихле:

$$u(-L_{r}, y) = U_{-L}(y), \quad u(L_{r}, y) = U_{L}(y).$$
 (3)

Коэффициент $\vartheta(\mathbf{x})$ предполагаем не зависящим от y и кусочно-постоянным по x:

$$\vartheta(x) = \begin{cases} \vartheta_{-} & \Leftarrow & -L_{x} \le x < 0, \\ \vartheta_{+} & \Leftarrow & 0 < x \le L_{x}. \end{cases}$$

При x=0 значение коэффициента ϑ не определено. Однако существуют левый и правый пределы, равные ϑ_- и ϑ_+ , соответственно. Обозначим их отношение κ = ϑ_-/ϑ_+ . Размеры области для определенности выбраны следующие: L_x = π , L_y = 2π . Линейной заменой независимых переменных всегда можно перейти к такой области. Но тогда вместо коэффициентов ϑ_\pm нужно использовать матричные коэффициенты.

В точках линии Γ разрыва коэффициента ϑ : x=0, должны выполняться при всех y условия стыковки Кирхгофа:

$$u_{-}(0,y) = u_{+}(0,y), \quad \vartheta_{-}\partial_{x}u_{-}(0,y) = \vartheta_{+}\partial_{x}u_{+}(0,y).$$
 (4)

Физический смысл стыковочных условий (4), например, в случае уравнения теплопроводности: непрерывность температуры и непрерывность потока тепла на линии стыка, см., например, [1].

Замечание 1. В некоторых задачах (см., например, [2]) на линии стыковки Γ ставятся другие условия, однако они могут быть преобразованы к виду (4) посредством замены переменных.

Математическое обоснование этих условий: выполнение дифференциального уравнения (1) на всем цилиндре в смысле обобщенных функций. Если они нарушены, то при подстановке такой функции u в левую часть уравнения (1) получается сумма классической функции и обобщенной функции, пропорциональной δ -функции, в то время как в правой части функция $f(\mathbf{x})$ – классическая.

Теорема существования и единственности решения эллиптических уравнений с разрывными коэффициентами в соболевских пространствах рассмотрена в [3]. Однако из теоремы не следует оценка асимптотики решения в окрестности Г, полезная для физических, вычислительных и технических приложений.

Конечно-разностная аппроксимация дифференциальных уравнений с разрывными коэффициентами связана с трудностями. Обычно в узлах сетки на линии скачка коэффициента Г решение уравнения не является гладким, что приводит к потере точности разностной аппроксимации. А для практики часто бывает важным именно описание градиента решения. Для получения приемлемой точности решения обычно применяют сгущение узлов сет-

ки в окрестности линии разрыва. Порядок сходимости в таких задачах обычно низкий. Иногда нет уверенности в точности описания градиента численным решением в окрестности линии разрыва.

Для повышения точности расчетов предлагается использовать компактную разностную аппроксимацию. Данный метод известен довольно давно, первые его применения опубликованы в статьях [4-7]. Впоследствии этот метод неоднократно применялся для решения различных вычислительных задач. В частности, компактная аппроксимация 4-го порядка аналогичной одномерной задачи была построена ранее в [8]. Однако при переходе к двумерному, более важному с практической точки зрения случаю, возникают дополнительные трудности.

2. Компактные схемы

Пусть на цилиндре (вычислительной области G) задана регулярная квадратная сетка с координатами узлов:

$$x_i = ih_x$$
, $y_j = jh_y$, $h_x = 2L_x/N$, $h_y = L_y/N$; $i = 0,...,N$, $j = 1,...,N$.

При выбранных размерах цилиндра это означает, что $h_x = h_y = 2\pi/N$. Переход от квадратной сетки к прямоугольной, т.е. отказ от предположения $h_x = h_y$ приводит лишь к техническим усложнениям алгоритма.

В узлах на краях цилиндра заданы условия Дирихле (3). Сетка содержит M = (N-1)N внутренних узлов, где правая часть f известна, а значения приближенного решения \tilde{u} нужно определить. Далее знак тильды будем опускать. На линии Γ правая часть может испытывать скачок. В этих узлах для построения решения используются оба предела ($x \to \pm 0$) функции f.

Компактная разностная аппроксимация задачи (1)–(4) состоит в подборе для каждого узла \mathbf{x}_{μ} , μ = $\langle i,j \rangle$ пары разностных операторов A, P, которые имеют ненулевые коэффициенты лишь для нескольких (в количестве \mathbf{v}_A и \mathbf{v}_P , соответственно) узлов вокруг \mathbf{x}_{μ} :

$$Au = Pf$$
.

Эти два набора узлов (T_A и T_P , соответственно) будем называть шаблонами разностной схемы. Потребуем от этой пары операторов выполнение условий аппроксимации — для каждого узла сетки \mathbf{x}_{μ} должны выполняться равенства

$$A[u_k] = P[f_k], \quad k = 1,...,K,$$
 (5)

где число $K = \mathbf{v}_A + \mathbf{v}_P - 1$. Пары функций $\left\{u_k, f_k\right\}_{k=1}^K$ называются тестовыми.

Все эти пары (свои для каждой внутренней точки сетки $\mathbf{x}_{\pmb{\mu}}$) подбираем так, чтобы они

- 1) удовлетворяли исходному дифференциальному уравнению (1);
- 2) всякую гладкую функцию u можно было бы с высокой точностью асимптотически приблизить линейной комбинацией тестовых функций u_k , $k=1,\ldots,K$, а всякую правую часть f линейной комбинацией тестовых функций f_k , $k=1,\ldots,K$.

Замечание 2. В узлах на линии скачка Γ для обеспечения того же асимптотического порядка точности требуется большее число K пар тестовых функций, а значит, шаблоны с большим числом узлов.

При подстановке любой такой пары тестовых функций с номером k в равенство (5) получается линейное однородное алгебраическое уравнение относительно коэффициентов пары разностных операторов A, P. Множество всех решений линейной однородной системы K уравнений образуют одномерное подпространство в (K+1)-мерном пространстве коэффициентов пары операторов A, P. Чтобы выделить ненулевое единственное решение добавляем неоднородное линейное уравнение нормировки (например, один из коэффициентов одного из операторов равен 1).

Ситуация, когда матрица Ω этой СЛАУ вырождена, возможна. Пусть Ω имеет размерность K+1, а её ранг равен K+1-r, где r>0.

Если при исключении условия нормировки ранг матрицы Ω сохранится, то условие нормировки плохое. Действительно, мы какую-то комбинацию коэффициентов положили равной 1, а из однородных уравнений следует, что эта комбинация должна быть равна нулю. В таком случае выберем другое условие нормировки.

Если же после отбрасывания условия нормировки ранг матрицы Ω уменьшился на 1, то уравнение для нормировочного условия линейно независимо от остальных, и среди строк однородных уравнений имеются линейно выражающиеся через остальные. Будем по очереди отбрасывать по одному уравнению. Если при этом ранг матрицы не уменьшится, значит, эта строка была линейно зависима — однородное уравнение является линейным следствием остальных. Отбросим его. Таковых найтись должно r штук.

Теперь имеем систему из K+1-r линейных однородных уравнений с K+1 неизвестными (коэффициентами компактной схемы). Значит, решение системы (5) (коэффициенты матриц операторов A и P) имеет r степеней свободы. Будем их подбирать, оптимизируя что-то еще. Например, обусловленность «большой» матрицы.

После того как для каждого узла \mathbf{x}_{μ} коэффициенты найдены, составим из них две «большие» матрицы A, P порядка $M\gg K+1$. Решение СЛАУ с большой матрицей A и с правой частью Pf (если матрица A не вырождена и хорошо обусловлена) дает численное решение u в точках сетки.

Выбор шаблонов, определение коэффициентов операторов A, P для каждого узла, составление из них строк «больших» матриц A, P, а затем решение СЛАУ

$$Au = Pf (6)$$

для задачи (1)-(4) составляет основу подхода компактных схем.

Множество из M узлов разделим на 3 типа:

- А) граничные узлы, для которых индекс i по переменной x равен 0 или N.
- Б) внутренние узлы сетки. Для них 0 < i < N/2 или N/2 < i < N . Число N четное.
- В) узлы, лежащие на линии стыка Γ . Для них i=N/2.

В случае граничных условий Дирихле (3) значения решения u(i,j) в узлах типа A) известны. Случай задачи Неймана рассмотрен ниже в п. 11.

Разделение на типы связано с различием набора пар тестовых функций и шаблонов компактной схемы. Для обеспечения порядка точности для узлов сетки, лежащих на линии Γ , нужно больше тестовых функций в условиях (5), поскольку на Γ нарушается гладкость решения u. Выбор «хороших» шаблонов — важный пункт настоящей работы. При различных парах шаблонов различными получаются и наборы коэффициентов компактной схемы.

3. Узлы типа Б

Рассмотрим пару шаблонов: «квадрат» и для функции u, и для правой части f, см. рис.2, где $v_A = v_P = 9$. При r = 0 получим для f «крест» и $v_P = 5$.

На этой паре шаблонов степеней свободы (число свободных параметров) на два больше, чем число тестовых функций, необходимых для обеспечения 4-го порядка. Отметим, что использование шаблонов «крест – квадрат» приводит к неразрешимой СЛАУ на коэффициенты (см. Приложение).



Рис.2. Шаблоны типа «квадрат – квадрат» для компактной аппроксимации уравнения Пуассона для функции u и для правой части f. Ввиду симметрий задачи некоторые коэффициенты операторов A и P совпадают между собой. При c=0 получим схему типа «крест – квадрат», при r=0 – «квадрат – крест».

С учетом симметрии аппроксимируемого дифференциального оператора Лапласа и обоих шаблонов относительно обеих координатных осей выберем набор тестовых функций, также обладающий этими симметриями. При этих предположениях получаем

$$c[u(i-1,j-1)+u(i-1,j+1)+u(i+1,j-1)+u(i+1,j+1)]+$$

$$+b[u(i,j-1)+u(i-1,j)+u(i+1,j)+u(i,j+1)]+au(i,j) =$$

$$=q[f(i,j-1)+f(i-1,j)+f(i+1,j)+f(i,j+1)]+$$

$$+r[f(i-1,j-1)+f(i+1,j-1)+f(i-1,j+1)+f(i+1,j+1)]+pf(i,j).$$
(7)

Для определения коэффициентов a,b,c,p,q,r потребуем точного выполнения уравнения (7) на следующих парах тестовых функций:

$$N_{\odot}$$
 u f y равнения 0 1 0 $a+4(b+c)=0$ 1 x^2 -2 $(4c+2b)h^2=-2(4r+4q+p)$ 2 x^4 $-12x^2$ $(4c+2b)h^4=-12(2q+4r)h^2$ 3 x^2y^2 $-2(x^2+y^2)$ $4ch^4=-2(4q+8r)h^2$.

Из уравнений № 2, 3 следует, что b=4c, а из уравнений № 0, 1: a= -20c. Подставляя эти значения в систему, получаем q= $-ch^2/2$ –2r, p= $-4ch^2+4r$. Выберем нормировочное условие a = 1. Тогда схема имеет следующие коэффициенты: a = 1, b = -0.2, c = -0.05, p= $0.2h^2+4r$, q= $0.025h^2-2r$.

Выберем в качестве безразмерного параметра $\overline{r} = r / h^2$ и будем варьировать его, минимизируя погрешность схемы. Получаем

$$a=1, b=-0.2, c=-0.05, p=(0.2+4\overline{r})h^2, q=(0.025-2\overline{r})h^2.$$

Символ псевдодифференциального оператора $A^{-1}P$ задается формулой

$$\sigma_{kva-kre} = \frac{1 - 0.4[\cos(\xi h) + \cos(\eta h)] - 0.2\cos(\xi h)\cos(\eta h)}{0.2 + 4\overline{r} + (0.05 - 4\overline{r})[\cos(\xi h) + \cos(\eta h)] + 4\overline{r}[\cos(\xi h)\cos(\eta h)]} \approx \\ \approx -(\xi^2 + \eta^2)h^2.$$
(8)

На рис.3 показаны различные варианты невязки приближенного равенства (8), деленной на $(\xi^2 + \eta^2)^3 h^6$. Каждая картинка соответствует своему значению \overline{r} . При такой нормировке получается функция, хотя и разрывная, но ограниченная в начале координат. Таким образом, асимптотика невязки в приближенном равенстве (8) составляет $O((\xi^2 + \eta^2)^3 h^6)$.

При переходе через значение параметра $\overline{r}=0$ меняется топология изо-

линий невязки. При этом минимум модуля невязки достигается именно при \overline{r} =0. При отрицательных значениях \overline{r} возможно обращение в нуль знаменателя в символе оператора $A^{-1}P$. Численные эксперименты подтвердили: при \overline{r} =0 погрешность на проверочных точных решениях уравнения минимальна.

При положительных \overline{r} на рисунке видно сгущение изолиний вблизи корней знаменателя в (8).

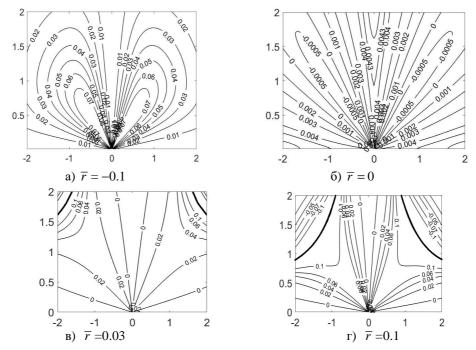
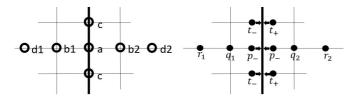


Рис.3. Отклонение символа компактного разностного оператора (8) при разных \overline{r} . Так как на картинках изображена функция от ξh и ηh , то в качестве нормировки выбрано h=1. На жирных линиях функция терпит разрыв второго рода.

4. Аппроксимация в узлах типа В

На линии Γ , согласно стыковочным условиям (4), решение u непрерывно и терпит излом. Правая часть f – кусочно-непрерывная функция с односторонними, в общем случае не равными друг другу пределами f_- и f_+ .

Аппроксимацию в узлах на Γ производим с использованием пары шаблонов, показанных на рис.4. Здесь имеется симметрия задачи только относительно горизонтальной оси. Шаблон для правой части на Γ «двойной», поскольку функция f на линии Γ может быть двузначной. Обозначим эти различные коэффициенты компактной схемы слева от линии Γ : t_-, p_- , а справа — t_+, p_+ , значения правой части — f_- и f_+ , соответственно.



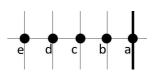


Рис.4. Шаблоны для компактной аппроксимации u и f в узлах на линии Γ (жирная линия).

Рис.5. Шаблон для аппроксимации нормальной производной от u слева от Γ .

Тестовая функция u — кусочно-аналитическая и имеет два различных разложения в ряд Тейлора — слева и справа от Γ :

$$u_{-} = \sum_{i+j \le 4} a_{ij} x^{i} y^{j} + o(h^{4}), \quad u_{+} = \sum_{i+j \le 4} b_{ij} x^{i} y^{j} + o(h^{4}).$$

Из условий Кирхгофа (4) получаем, что $a_{00}=b_{00}$, $\vartheta_-a_{1i}=\vartheta_+b_{1i}$. Следовательно, для 4-го порядка точности пара разностных операторов A и P должна быть точна на наборе из 13 тестовых функций. Неопределенных коэффициентов схемы для указанных шаблонов (степеней свободы) здесь 14. Выберем условие нормировки a=1.

Получаем коэффициенты

$$\begin{split} &a\!=\!1, \ c\!=\!-1/5, \ b_1\!=\!-2\vartheta_-/(3(\vartheta_++\vartheta_-)), \ b_2\!=\!-2\vartheta_+/(3(\vartheta_++\vartheta_-)), \\ &d_1\!=\!\vartheta_-/(15(\vartheta_++\vartheta_-)), \ d_2\!=\!\vartheta_+/(15(\vartheta_++\vartheta_-)), \ r_1\!=\!r_2\!=\!-h^2/(36(\vartheta_+\!+\!\vartheta_-)), \\ &q_1\!=\!q_2\!=\!7h^2/(90(\vartheta_+\!+\!\vartheta_-)), \ t_-\!=\!t_+\!=\!h^2/(60(\vartheta_+\!+\!\vartheta_-)), \ p_-\!=\!p_+\!=\!7h^2/(60(\vartheta_+\!+\!\vartheta_-)). \end{split}$$

Замечание 3. Для 4-го порядка точности вместо компактной аппроксимации можно использовать разностное уравнение баланса потоков. Тут нормальные производные решения u слева и справа от Γ приближают разностной схемой 4-го порядка на пятиточечном шаблоне, см. рис.5.

Получаем СЛАУ относительно коэффициентов

$N_{\underline{0}}$	и	$\partial_n(u)$	Уравнения
0	1	0	a+b+c+d+e=0
1	\boldsymbol{x}	1	-bh-2hc-3hd-4he=1
2	x^2	2x	$bh^2 + 4h^2c + 9h^2d + 16h^2e = 0$
3	x^3	$3x^2$	$b(-h)^3 + (-2h)^3 c + (-3h)^3 d + (-4h)^3 e = 0$
4	x^4	$4x^3$	$b(-h)^4 + (-2h)^4 c + (-3h)^4 d + (-4h)^4 e = 0$

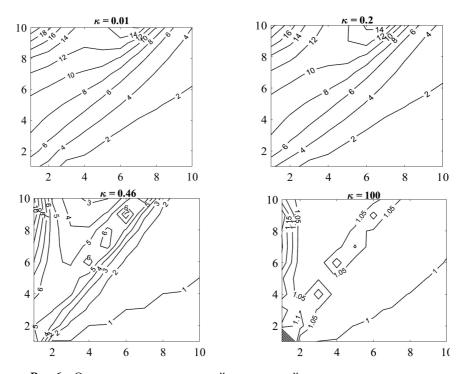


Рис.6. Отношение погрешностей компактной схемы для двух видов шаблонов на Γ при разных значениях κ .

Аппроксимируем баланс потоков: $\vartheta_{-}\tilde{\partial}u = \vartheta_{+}\tilde{\partial}u$, где $\tilde{\partial}$ – разностная аппроксимация производной. Шаблон включает 4 узла слева, 4 узла справа от Γ и один узел, расположенный на Γ (9-точечный шаблон). Этот шаблон также обеспечивает 4-й порядок точности, но численные эксперименты показывают, что шаблон представленный на рис.4, дает меньшую погрешность в L^2 -норме на всем семействе пробных решений $\tilde{u}_{nm} = \cos(n(x-0.2))\cos(my)$ и для всех κ , см. рис.6, где представлены изолинии отношения L^2 -нормы погрешности для шаблона на рис.5 κ погрешности нормы для шаблона на рис.4. Об оценке погрешности см. раздел 7.

5. Составление «глобальных» матриц и их обусловленность

Коэффициенты разностных операторов $A_{\bf i}$ и $P_{\bf i}$ определены для каждого внутреннего узла. Для определения решения сеточной функции u составим «большую» СЛАУ: Au=Pf. Матрица A — квадратная размера $M\times M$, её строки заполнены коэффициентами операторов $A_{\bf i}$ для внутренних узлов и левыми частями граничного условия для граничных узлов. Матрица P заполняется аналогично. Отличие состоит лишь в том, что для узлов на Γ значение f учитывается дважды (т.е. и f_- , и f_+), поэтому размеры этой матрицы $M\times (M+N)$.

«Большую» СЛАУ нужно решить прямым или итерационным способом. В любом случае при плохой обусловленности матрицы A точность ухудшается. Если при каких-то значениях физических и вычислительных параметров матрица A хорошо обусловлена, но ее спектр содержит собственные числа разных знаков, то при уменьшении шага h или небольшом изменении коэффициентов задачи из-за возмущения спектра может ухудшиться её обусловленность. Это, как минимум, приведет к потере точности решения \mathbf{u} СЛАУ. Поэтому для устойчивой работы алгоритма желательно обеспечить строгую положительность спектра A.

Для оценки спектра матрицы A воспользуемся теоремой Гершгорина «по строкам» (см., например, [9]): все собственные числа матрицы A лежат в объединении кругов на комплексной плоскости с центрами a_{ii} и радиусами $\sum_{j\neq i} |a_{ij}|$. Строки A, записанные для любого неграничного узла, соответствуют разностным операторам, точным, в частности, на тестовой функции $u_0 \equiv 1$. Поэтому выполняется равенство $\sum_{ii} a_{ij} = 0$.

Если выбрать нормировку по коэффициенту в центральной точке шаблона, т.е. $a_{ii} = 1 > 0$, а для остальных коэффициентов выполняется неравен-

ство $a_{ij} < 0$ при всех $j \neq i$ (выполнение этих неравенств в экспериментах контролировалось), то получим

$$\sum_{j \neq i} |a_{ij}| = a_{ii}. \tag{9}$$

В строках матрицы А, соответствующих узлам на границе, где заданы условия Дирихле, содержится единица на диагонали и нули вне ее. В точках линии Г условие (9) немного нарушается. Поэтому здесь нарушаются и достаточные условия, которые дает теорема Гершгорина. В численных экспериментах неотрицательность спектра матрицы задачи, как и условие хорошей обусловленности (зависящие, в том числе, и от типа граничных условий) контролировались в каждом конкретном случае.

6. Классическая дивергентная схема для уравнения Пуассона

В классической дивергентной схеме производная по x в точке между двумя узлами аппроксимируется как $(u_{i+1/2\ j})'_x = (u_{i+1\ j} - u_{ij})/h$, производная по y: $(u_{i\ j+1/2})'_y = (u_{i\ j+1} - u_{ij})/h$.

Аналогично для вторых частных производных:

$$(u_{ij})_{xx}'' = (u_{i+1\ j} - 2u_{ij} + u_{i-1\ j}) / h^2, \quad (u_{ij})_{yy}'' = (u_{i\ j+1} - 2u_{ij} + u_{i\ j-1}) / h^2.$$

Разностная аппроксимация оператора Лапласа в узле < i, j >:

$$(\overline{L}[u])_{ij} = \vartheta(x)(u_{(i+1)j} + u_{(i-1)j} + u_{i(j+1)} + u_{i(j-1)} - 4u_{ij}) / h^2.$$

В узлах сетки на линии Г аппроксимируем условия Кирхгофа (4):

$$\vartheta_{-}u_{(i-2)j} - 4\vartheta_{-}u_{(i-1)j} + 3(\vartheta_{-} + \vartheta_{+})u_{ij} - 4\vartheta_{+}u_{(i+1)j} + \vartheta_{+}u_{(i+2)j} = 0.$$
 (10)

Действительно, пусть решение u при произвольном y задано квадратными трех членами

$$u = \begin{cases} a_- x^2 + b_- x + c & \text{$x < 0$,} \\ a_+ x^2 + b_+ x + c & \text{$0 < x$.} \end{cases}$$

Выразим коэффициенты через значения этой функции в пяти точках: -2h, -h, 0, h, 2h. Получим СЛАУ для коэффициентов

$$u = \begin{cases} 4a_{-}h^{2} - 2b_{-}h + c = u_{i-2 \ j} \\ a_{-}h^{2} - b_{-}h + c = u_{i-1 \ j} \\ c = u_{ij} \end{cases}.$$

$$a_{+}h^{2} + b_{+}h + c = u_{i+1 \ j}$$

$$4a_{+}h^{2} + 2b_{+}h + c = u_{i+2 \ j}$$

Найдем из системы коэффициенты b_- , b_+ и подставим их в условия Кирхгофа: $\vartheta_-b_- = \vartheta_+b_+$. Приведя подобные, получим уравнение (10).

Сравним на численных экспериментах погрешности дивергентной схемы, компактной схемы и компактной схемы с экстраполяцией Ричардсона для различных правых частей f и граничных условий Дирихле или Неймана. Порядок точности этих схем: 2, 4 и 6-й, соответственно.

7. Задача Дирихле. Численные эксперименты

Для численных экспериментов использовались полученные аналитически «пробные» функции $\langle u,f \rangle$, отличные от тестовых. Выберем вспомогательную гладкую функцию \tilde{u} . Затем вычислим функцию u, удовлетворяющую условиям Кирхгофа на линии Γ :

$$u = g \tilde{u}$$
, где $g(x, y) = 1 + a(y)(x + |x|)$. (11)

Функция a(y) выбирается так, чтобы кусочно-аналитическая функция u удовлетворяла условиям Кирхгофа (4).

Левая и правая производные $\partial_x u$:

$$u'(+0, y) = g(0, y) \tilde{u}'(0, y) + 2a(y)\tilde{u}(0, y), \quad u'(-0, y) = g(0, y)\tilde{u}'(0, y).$$

Из условий Кирхгофа $\vartheta_{-}u'(-0, y) = \vartheta_{+}u'(+0, y)$ получаем

$$\vartheta_{+}g(0, y)(\tilde{u}'(0, y) + 2a\tilde{u}(0, y)) = \vartheta_{-}g(0, y)\tilde{u}'(0, y),$$

откуда
$$a(y) = \tilde{u}'(0, y)(\vartheta_{-} - \vartheta_{+}) / (2\vartheta_{+}\tilde{u}(0, y))$$
.

После определения u пробная функция f вычисляется по формуле (1).

Для разностной задачи с такой f должно получиться решение, близкое к u. Погрешность этого решения u_N в ${\bf C}$ -норме при N узлов на кольце определим как $\sup(|u-u_N|)$. На рис.7 представлены погрешности для различных пробных решений u, полученные по схемам: классической (2-й порядок точности), компактной (4-й порядок точности) и компактной с экстраполяцией Ричардсона (6-й порядок точности).

Так как наибольший практический интерес представляет порядок схемы при больших значениях κ , результаты представлены для $\kappa=10000$.

На рис.7(а) сравниваются ошибки схем для точного решения

$$u = \begin{cases} \sin(y)x/\vartheta_{-} & \Leftarrow -L_{x} \le x < 0, \\ \sin(y)x/\vartheta_{+} & \Leftarrow 0 < x \le L_{x}. \end{cases}$$
 (12)

Оценка точности схем на других пробных решениях подтверждает этот результат. Пробные решения строятся по формуле (11), вспомогательные функции \tilde{u} заданы формулами

$$\tilde{u}(x, y) = \sin(y)x^6, \tag{13}$$

$$\tilde{u}(x,y) = \sin(y+x) + 2,\tag{14}$$

$$\tilde{u}(x,y) = \sin(x). \tag{15}$$

Соответствующие графики представлены на рис.7(б,в,г).

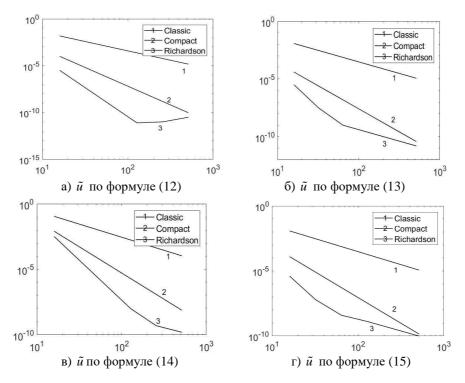


Рис.7. Погрешность в **С**-норме для задачи Дирихле при разных \tilde{u} .

Замечание 4. Максимальное собственное значение разностного оператора Лапласа (а следовательно, и матрицы h^{-2} A) растет пропорционально N^2 , а минимальное собственное число ограничено снизу. Получаем, что обусловленность матрицы A также растет как N^2 . При N=128 обусловленность матрицы A достигает 10^5 , при машинном нуле $10^{-15}-10^{-16}$. Поэтому гарантировать точность больше, чем 10^{-10} не получится. Как видно из рис.7, погрешность для метода Ричардсона убывает с 6-м порядком примерно до 10^{-9} , а при меньших h начинает влиять машинная точность.

8. Решение задачи Дирихле для однородной среды

Если использовать компактную аппроксимацию на скачке коэффициента ϑ , то погрешность по сравнению с постоянным ϑ меняется слабо. Для

сравнения на рис.8. показан пример с постоянным ϑ . Компактная схема дает 4-й порядок точности, а аппроксимация Ричардсона улучшает его примерно до 6-го при погрешности, не меньшей 10^{-9} – 10^{-10} .

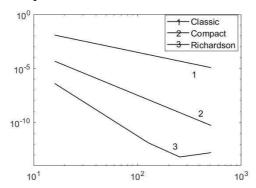


Рис.8. Погрешность решения задачи Дирихле для решения (13) при ϑ=const.

9. Решение сеточной системы релаксационными методами

Выше решалась «глобальная» СЛАУ Au = Pf с машинной точностью прямыми методами, которые требуют для решения многомерных задач большого числа арифметических операций. Например, для метода Гаусса оно пропорционально K^6 , где K – число узлов. Поэтому при больших K используют итерационные методы, допускающие эффективное распараллеливание [10].

Сравним метод релаксации (см. [11]) для классической и компактной аппроксимаций задачи Дирихле для уравнения с разрывным коэффициентом ϑ . Приближенное решение u^k на k-й итерации вычисляется по формуле

$$\begin{split} u_{lm}^k &= (1-\omega)u_{lm}^{k-1} + \\ &+ \omega \left(\sum_{i,j} d_{ij}^{lm} f_{ij} - \sum_{i < l,j} a_{ij}^{lm} u_{ij}^k - \sum_{i = l,j < m} a_{ij}^{lm} u_{ij}^k - \sum_{i > l,j} a_{ij}^{lm} u_{ij}^{k-1} - \sum_{i = l,j > m} a_{ij}^{lm} u_{ij}^{k-1} \right) / a_{lm}^{lm}, \end{split}$$

где ω — параметр релаксации, l, m — координаты центра шаблона, a_{ij}^{lm} — коэффициенты, соответствующие узлу $\langle i,j \rangle$ в шаблоне.

При разностной аппроксимации задачи как компактной, так и классической, спектр оператора A вещественный и положительный. Его максимальное собственное число ограничено константой, чуть большей 2, минимальное собственное число убывает при $N \to +\infty$ как $O(N^{-2})$.

Как для классической, так и для компактной схемы, разностный оператор A не самосопряжен в гильбертовой метрике на квадратной сетке со ска-

лярным произведением: $(u,v)=h^2\sum_{1\leq i,\,j\leq N+1}u_{ij}v_{ij}$. Самосопряженность A воз-

можна только, если во всей области использован общий шаблон, что затруднительно при аппроксимации с высоким порядком для эллиптического уравнения со скачком коэффициента, и поэтому нельзя гарантировать сходимость метода для всех $\omega \in (0,2)$. Эксперименты показали, что метод сходится только при $\omega \in (0,1.94]$.

Оптимальный параметр релаксации для самосопряженных операторов определяется (см. [11]) формулой

$$\omega = 2/\left(1 + \sqrt{\lambda_{min}(2 - \lambda_{min})}\right). \tag{16}$$

При больших N выполняется оценка $\lambda_{min} = O(N^{-2})$, и при $N \to \infty$, согласно (16), параметр релаксации ω будет стремиться к 2. Примерно при N=80 параметр ω из формулы (16) переходит критическое значение 1.94. При больших N мы рекомендуем отказаться от применения формулы (16) и использовать значение параметра релаксации 1.94.

При первых итерациях, как обычно в таких задачах, погрешность решения убывает с номером итерации k экспоненциально. Однако с ростом номера итерации M погрешность схемы на точном решении дифференциального уравнения будет стремиться не к 0, а к погрешности решения разностного уравнения для данного значения N.

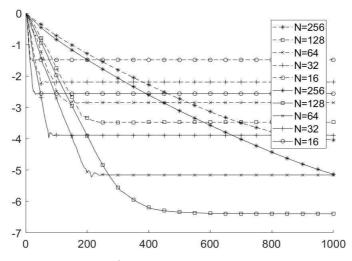
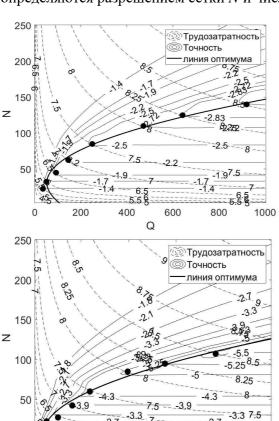


Рис.9. Графики десятичного логарифма погрешности компактной и классической схемы в С-норме в зависимости от числа итераций метода релаксации при разных значениях *N*. Графики, построенные для компактной схемы, показаны сплошными линиями, а для классической – пунктиром.

После того как график погрешности (а значит, и нормы поправок) «вышел на плато», дальнейшие итерации делать бессмысленно. На рис.9 приведены графики погрешности решения в **С**-норме для точного решения, определяемого формулой (14).

Эффективность метода характеризуется двумя параметрами: точностью и трудозатратностью. Точность показывает, во сколько раз уменьшится погрешность решения по сравнению с начальным приближением (т.е. отношение С-нормы погрешности на первой итерации к норме на последней). Здесь мы полагаем, что начальное приближение итерационного процесса — нулевое, поэтому начальная погрешность — просто максимум модуля точного решения. Трудозатратность — число арифметических операций (сложение, умножение, деление), которое совершается в ходе решения СЛАУ методом релаксации. Обе характеристики (при фиксированном точном решении, выбранных видах шаблонов, значений коэффициентов, параметре релаксации) определяются разрешением сетки *N* и числом итераций метода релаксации.



-2.7

400

0

800

1000

200

Рис.10. Изолинии десятичных логарифмов трудозатратности и точности классической схемы в зависимости от разрешения сетки N и числа итераций Q. Распределение условных экстремумов приближает парабола $Q(N)=p_2N^2+p_1N+p_0$, где $p_0=70.62$, $p_1=-2.35$, $p_2=0.05$ (жирная кривая).

Рис.11. Результаты для компактной схемы. Обозначения те же, что и для рис.10. Коэффициенты параболы: p_0 =41.51, p_1 = -0.8, p_2 =0.07.

На рис.10, 11 показаны изолинии трудоемкости и погрешности для решения уравнения с разрывным коэффициентом для классической и для компактной схем, соответственно. Решение задано формулой (14). Оптимальное соотношение трудозатрат и точности получаем там, где изолинии этих характеристик (они показаны пунктирными и сплошными линиями) касаются друг друга (это следует из теоремы об условном экстремуме функции двух переменных). На рис.10, 11 оптимальные значения параметров разностных схем показаны жирными точками. Разумеется, эти оценки являются приблизительными и зависят от выбора точного решения и параметров схемы, но общие соображения о выборе числа итераций эта последовательность точек дает. Сравнение результатов численных экспериментов на рис.10, 11 показывает: эффективность компактной схемы в рассматриваемом диапазоне параметров примерно в 100 раз выше, чем у классической.

До сих пор использовалась сетка с фиксированным разрешением N. Трудозатратность метода уменьшается, если использовать так называемый многосеточный метод («multigrid»), см. [12–14].

Идея метода состоит в последовательном использовании k вложенных друг в друга сеток с разрешениями $N_0, 2N_0, 4N_0, ..., 2^{k-1}N_0$, соответственно. Перевод решения с более грубой сетки на более мелкую осуществляется билинейной интерполяцией по пространственным координатам (x,y), обратный переход — ограничением решения с мелкой сетки на более грубую подсетку. В ходе итераций уменьшается норма невязки. Невязка может быть разложена в ряд по обобщенным собственным функциям задачи. На каждой из сеток быстро подавляется амплитуда разложения невязки обобщенных собственных функций с собственными числами (m,μ) из определенного диапазона. Используя несколько сеток, можно быстро гасить амплитуды невязки в широком диапазоне собственных чисел задачи.

Отметим применение многосеточного метода для трехмерной задачи с анизотропным разрывным коэффициентом, см., например, [1, 15]. В этих работах была использована трехмерная классическая разностная схема, где решение глобальной системы осуществлялось двухсеточным методом.

Возможны разные последовательности применения сеток. Чаще используемый на практике (см., например, [14]) алгоритм предлагает начать процесс с релаксации с самой мелкой сетки. На ней делается n_r итераций (предварительное сглаживание), затем вычисляется сеточная функция — невязка решения $r_0 = Au - Pf$. Потом эта невязка ограничивается на более грубую (с удвоенным шагом) сетку и для ее подавления решается СЛАУ, порядок которой вчетверо меньше. Для j-й грубой сетки (самую мелкую считаем как

нулевую) СЛАУ имеет вид: $A_{j,res}x_j = -r_{j-1,res}$, где $A_{j,res}$ и $r_{j-1,res}$ — ограничения матрицы A и вектора r_{j-1} на j-ю более грубую сетку. Для этой СЛАУ делается также n_r итераций. Далее снова вычисляется поправка $r_j = A_{j,res}x_j - r_{j-1,res}$, и процесс повторяется снова на еще более грубой сетке. На самой грубой k-й сетке СЛАУ $A_{k,res}x_k = -r_{k-1,res}$ точно решается прямым методом.

Затем начинается серия переходов от самой грубой сетки к самой мелкой с релаксацией на каждой. На каждом шаге к имеющемуся для j-й сетки решению x_j добавляется поправка $x_{j+1,prol}$ (интерполированный вектор x_{j+1}) и проводится n_p итераций (последующее сглаживание). Таким образом, алгоритм проходит вверх и вниз по всей иерархии сеток, выполнив $n_r + n_p$ итераций на каждой. Такая последовательность использования сеток для итераций называется V-циклом. Общий алгоритм multigrid — несколько одинаковых V-циклов. Трудозатратность одного V-цикла определяется так:

$$C_f(n_r + n_p)[1 + 1/4 + (1/4)^2 + ...] + C_c$$

где C_f — трудозатратность одной итерации на самой мелкой сетке, C_c — трудозатратность прямого метода на самой грубой сетке.

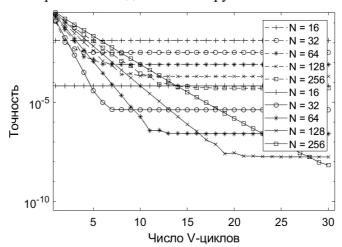


Рис.12. Десятичный логарифм погрешности классической и компактной схем в **С**-норме в зависимости от числа V-циклов метода «multigrid». Оценки для постоянного коэффициента ϑ ; n_r =4, n_p =4, N_0 =16. Пунктиром показана погрешность для классической схемы, сплошные линии (много ниже) — для компактной.

На рис. 12 представлены графики зависимости погрешности компактной и классической схемы от номера V-цикла многосеточного метода при аппроксимации дифференциального оператора в случае однородной среды

 $(\vartheta_- = \vartheta_+ = 1)$, при точном решении $u(x, y) = \sin(x)\cos(y)$. Погрешность стремительно падает за несколько V-циклов.

На рис.13, 14 представлены изолинии точности и трудоемкости при использовании метода multigrid для классической и компактной схем, соответственно, в случае уравнения с кусочно-постоянным коэффициентом. Данные приведены для точного решения (14), где κ =10000. Жирные точки показывают экстремумы точности на изолиниях трудозатратности. Во всех экспериментах для метода «multigrid» для перехода на мелкую сетку использовалась билинейная интерполяция — согласно [14] этот вариант является наиболее удачным. Число итераций на каждом уровне: $n_r = 3$, $n_p = 3$.

Рис.13. Изолинии десятичных логарифмов трудозатратности (---) и погрешности (—) классической схемы в зависимости от разрешения финальной сетки N_{fin} и количества V-циклов (W). Распределение условных экстремумов можно приблизить квадратным трехчленом: $N_{fin}(W) = p_2 W^2 + p_1 W + p_0$, $p_0 = 16.3$, $p_1 = 9.0$, $p_2 = 2.2$ (жирная кривая).

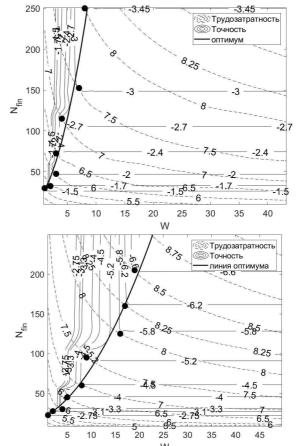


Рис.14. Те же показатели, но для компактной схемы; p_0 =19.4, p_1 = -3.3, p_2 =0.3.

Замечание 5. На рис.13, 14 изолинии погрешности не гладкие, поскольку при $N_{fin}=2^k$ меняется число сеток в методе multigrid.

Эксперименты с другими точными решениями показали, что оптимальные кривые для метода multigrid близки друг к другу, т.е. наш выбор оптимальных параметров довольно универсален. На рис.15 приведены оптималь-

ные параболы для классической и компактной схем при независимой оптимизации на трех точных решениях (13)—(15). Компактные для достижения нужной точности меньше нуждаются в увеличении N. На рис.16 представлены соотношения между погрешностью и трудозатратностью на оптимальных кривых для разных видов схем (классическая и компактная аппроксимации, с использованием multigrid и без него) для трех точных решений.

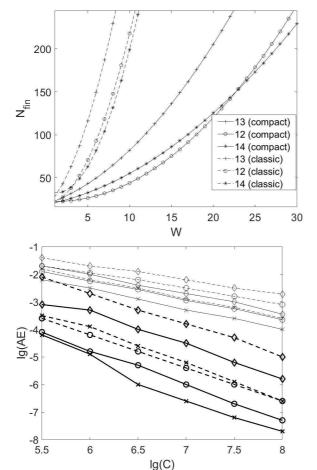


Рис.15. Оптимальное соотношение между разрешением финальной сетки N_{fin} и числом V-циклов многосеточного метода. --- классическая схема, — компактная схема.

Рис.16. Погрешность (A) схем при оптимальном соотношении разрешения и числа итераций в зависимости от трудоемкости алгоритма (C). --- метод релаксации на постоянной сетке, — multigrid. Тонкие линии – классическая схема, толстые – компактная, ◊ – аналитическое решение (14), ° – (13), × – (15).

Разумеется, погрешность решения краевой задачи для эллиптического уравнения при заданной трудозатратности зависит от правой части этого уравнения — функции f. Но общий вывод: использование метода «multigrid» увеличивает эффективность как классической, так и компактной схемы в примерно в 7-10 раз. Компактная схема 4-го порядка во всех случаях по точности драматически превосходила классическую: примерно в 100 раз при разумном разрешении N.

10. Экстраполяция Ричардсона. Увеличение точности решения

Пусть задан алгоритм вычисления приближенного решения u_h какойто задачи, зависящий от параметра h, и алгоритм имеет порядок точности v, т.е. выполняется асимптотическое разложение решения при $h \to 0$:

$$u_h(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x}) \cdot h^{\mathsf{V}} + \mathbf{o}(h^{\mathsf{V}}), \tag{17}$$

где $u(\mathbf{x})$ — неизвестное точное решение, $C(\mathbf{x}) \cdot h^{\mathsf{V}}$ — главный член погрешности алгоритма, причем эта функция $C(\mathbf{x})$ также *a priori* неизвестна. Сравним формулы (17) при h и 2h:

$$u_{2h}(\mathbf{x}) - u_h(\mathbf{x}) = (2^{\mathsf{v}} - 1)C(\mathbf{x})h^{\mathsf{v}} + \mathbf{o}(h^{\mathsf{v}}) \Rightarrow C(\mathbf{x}) = \frac{u_{2h}(\mathbf{x}) - u_h(\mathbf{x})}{2^{\mathsf{v}} - 1}h^{-\mathsf{v}}$$

И

$$u(\mathbf{x}) = u_h(\mathbf{x}) - C(\mathbf{x})h^{\mathsf{V}} + \mathbf{o}(h^{\mathsf{V}}).$$

Вычитание решений u_h и u_{2h} производим только в узлах **х** грубой разностной сетки с шагом 2h. На ней же оценивалось и точное решение $u(\mathbf{x})$.

После применения метода Ричардсона погрешность новой формулы будет убывать как следующий член разложения u_h в степенной ряд. Таким образом, если u_h раскладывается в ряд Тейлора по h, то показатель ν — целое число, а после применения процедуры экстраполяции Ричардсона погрешность будет асимптотически убывать хотя бы как $h^{\nu+1}$.

Эксперименты в предыдущем разделе показали, что порядок сходимости решения компактной схемы 4-й, поэтому далее v=4. Численные эксперименты для задачи Дирихле с применением метода Ричардсона выше представлены на рис.7.

11. Компактная аппроксимация задачи Неймана

Пусть на левой границе задано граничное условие Дирихле: $u(-L_x,y)==U_{-L_x}(y)$, а на правой — однородное условие Неймана: $\partial_x u=0$. Интерпретация: термоизоляция или нулевой поток диффузанта через правую границу. Если поставить условие теплоизоляции на обоих концах цилиндра, то решение краевой задачи определено с точностью до аддитивной константы.

Для компактной аппроксимации граничного условия Неймана при $x=L_x$ выберем шаблоны и для решения, и для правой части, см. рис.17. Из числа тестовых функций для u — мономов $x^m y^n$ исключены функции с m=1, ибо они не удовлетворяют однородному граничному условию Неймана.

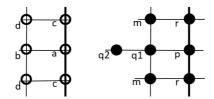


Рис.17. Шаблоны для u и f для граничного условия Неймана для уравнения (1).

Тестовые функции для определения коэффициентов A, P для указанных шаблонов и соответствующие линейные уравнения следующие:

$N_{\underline{0}}$	и	f	Уравнения
0	1	0	$a + 2c + 2d_2 + b_2 = 0$
1	x^2	-2	$h^{2}(2d+b) = -2(2r+p+2m+q_{1}+q_{2})$
2	x^3	− 6 <i>x</i>	$h^3(2d+b) = -6h(2m+q_1+2q_2)$
3	x^4	$-12x^{2}$	$h^4(2d+b) = -12h^2(2m+q_1+4q_2) .$
4	y^2	-2	$h^{2}(2c+2d) = -2(2r+p+2m+q_{1}+q_{2})$
5	y^2x^2	$-2(y^2+x^2)$	$h^4(2d) = -2h^2(2r + 4m + q_1 + 4q_2)$
6	y^4	$-12y^2$	$h^4(2c+2d) = -12h^2(2r+2m)$

Получено 7 линейных однородных алгебраических уравнений и условие нормировки: a=1. Для шаблонов с 13 точками на рис.17 после учета симметрии «верх-низ» остается 9 степеней свободы. Получаем незамкнутую СЛАУ с одномерным ядром. У вектора из ядра ненулевые коэффициенты: m, r, p, q_1 . Веса для решения u: a = 1, c = -0.2, d = -0.1, b = -0.4. Веса для правой части зависят от нормировки q_1 . Положим q_1 = \overline{q}_1h^2 , тогда веса для f выражаются через \overline{q}_1 :

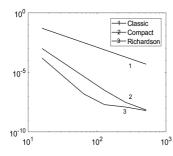
$$p = (0.275 - \overline{q_1})h^2$$
, $r = (-0.05 + \overline{q_1}/2)h^2$, $m = (0.075 - \overline{q_1}/2)h^2$, $q_2 = -0.025h^2$.

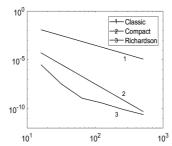
Для наименьшей погрешности рекомендуем \overline{q}_1 в диапазоне от 0.15 до 0.19.

На рис.18 представлены графики С-нормы погрешности схемы для краевой задачи Дирихле (левый край) — Неймана (правый край). Использовалось пробное решение u, удовлетворяющее условию: $\partial_x u(L, y) = 0$:

$$\tilde{u} = (x - L)^5 \sin(y). \tag{18}$$

Результаты: 2-й порядок для классической схемы, 4-й — для компактной и 6-й — после экстраполяции Ричардсона при N < 100.





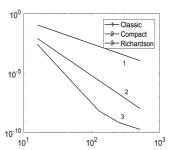


Рис.18. Погрешность решения для задачи Дирихле — Неймана для решения (18).

Рис.19. Погрешность разностных схем в **С**-норме для уравнения Γ ельмгольца в зависимости от N.

Рис.20. Погрешность схем в С-норме для уравнения Гельмгольца при условиях Дирихле в зависимости от *N*.

12. Компактная аппроксимация для уравнения Гельмгольца с разрывными коэффициентами

Рассмотрим обобщение уравнения (1) – уравнение Гельмгольца:

$$-\operatorname{div}\vartheta(\mathbf{x})\operatorname{grad}u + \rho(x,y)u = f,$$
(19)

где коэффициент ρ – заданная неотрицательная функция. Линейный дифференциальный оператор при однородных граничных условиях Дирихле или Неймана по переменной x самосопряжен и положительно определен.

Компактная аппроксимация уравнения Гельмгольца получается из компактной аппроксимации уравнения Пуассона (1) стандартным приемом. Положим $g=f-\rho(x,y)u$ и используем компактную схему: $A[u]=P[g] \Leftrightarrow B[u]=P[f]$, где $B[u]=A[u]+P[\rho(x,y)u]$. Коэффициенты оператора B уже известны, а порядок тот же, что и у исходной компактной схемы для уравнения Пуассона.

Эксперименты для задачи Дирихле подтвердили 4-й порядок компактной схемы (см. рис.19, 20) и 6-й порядок после экстраполяции Ричардсона. В примере на рис.19 функция \tilde{u} задана формулой (13),

$$\rho = \begin{cases}
1 & \Leftarrow -L_x \le x < 0, \\
10 & \Leftarrow 0 < x \le L_x,
\end{cases}$$
(20)

а на рис.20 – формулой (14).

$$\rho = \exp(20/(y(y-2\pi))). \tag{21}$$

Если коэффициент $\rho(x,y)$ принимает также и отрицательные значения, то спектр дифференциального оператора Гельмгольца не обязан быть положительным и, следовательно, нет гарантии хорошей обусловленности глобальной матрицы $A+\rho P$. Это в свою очередь приведет к ухудшению точно-

сти разностных схем и уграте порядка точности. Например, если взять $\rho \equiv -50$, а \tilde{u} определить формулой (14), то классическая схема при $N \to \infty$ не сходится, а компактная схема сходится плохо (см. рис.21).

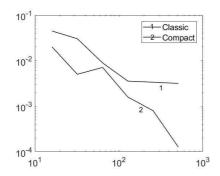


Рис.21. Графики погрешности в **С**-норме схем, аппроксимирующих уравнение Гельмгольца при отрицательном коэффициенте ρ , в зависимости от числа N.

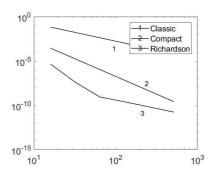


Рис.22. Погрешность в С-норме схем, аппроксимирующих задачу Дирихле для уравнения Гельмгольца при комплексном коэффициенте ρ, в зависимости от числа *N*.

13. Компактная аппроксимация для задачи с комплексными коэффипиентами

Компактная разностная схема позволяет численно решать краевую задачу Дирихле для уравнения (19) и в случае комплексных ρ, причем сохраняется 4-й порядок аппроксимации. Задачи с комплексным коэффициентом встречаются в электростатике, например, при определении поля потенциалов электрических и магнитных полей. Подобный пример описан в [2], однако, там вместо граничных условий Дирихле стоят асимптотические.

На рис.22 представлена погрешность для комплексной задачи: \tilde{u} определяется формулой (13), $\rho = \exp(i(x+y)) + 2$; его вещественная часть всегда больше 0, поэтому задача хорошо обусловлена.

14. Компактная аппроксимация для оценки собственных чисел и функций краевой задачи

В случае кусочно-постоянных коэффициентов можно «квазианалитически» найти решения задачи на обобщенные собственные числа и функции, которые затем можно использовать для оценки точности полученной схемы.

Решим задачу с однородными условиями Дирихле по переменной x и периодическими по переменной y для дифференциального уравнения

$$-\operatorname{div}\,\vartheta(\mathbf{x})\operatorname{grad}u = \vartheta(\mathbf{x})\mathsf{V}u. \tag{22}$$

Оператор в левой части уравнения (22) самосопряжен в смысле гильберто-

вой метрики с весом \mathbf{L}_{ϑ}^2 и строго положительно определен в подпространстве функций, удовлетворяющих граничным условиям. Следовательно, все его обобщенные собственные числа ν вещественные и положительные.

Коэффициент уравнения ϑ не зависит от y, а обобщенная собственная функция периодическая, переменные в уравнении (22) разделяются:

$$u(x, y) = \exp(imy)Y_{\lambda}(x)$$
, где $m \in \mathbb{Z}$,

а функция $Y_{\lambda}(x)$ удовлетворяет однородным граничным условиям Дирихле и обыкновенному дифференциальному уравнению

$$-d_x \vartheta(x) d_x Y_{\lambda}(x) = \vartheta(x) \lambda Y_{\lambda}(x). \tag{23}$$

Тогда $v = m^2 + \lambda$. Поскольку собственные числа краевой задачи Дирихле λ положительны, их можно представить как $\lambda = \mu^2 > 0$.

Обобщенная собственная функция должна удовлетворять условиям стыковки (4). Общее решение дифференциального уравнения (23) на каждом из двух отрезков задается формулой:

$$Y_+(x,\mu) = a_+ \sin \mu x + b_+ \cos \mu x$$
.

Положим $L_x = \pi$, однородные условия Дирихле: $u(-\pi, y) = 0$, $u(\pi, y) = 0$. По условию при $x = -\pi$ обобщенная собственная функция на левом получитервале с точностью до ненулевого множителя имеет вид:

$$Y_{-}(x,\mu) = \sin \mu(\pi + x).$$

Из условий стыковки (4) следуют формулы для коэффициентов решения и при x>0

$$b_{-}=b_{+}=\sin\mu\pi,$$

$$\mu \vartheta_{-} \cos \mu \pi = \vartheta_{+} [a_{+}\mu \cos(0) - b_{+}\mu \sin(0)] = \vartheta_{+}a_{+}\mu \Rightarrow a_{+} = (\vartheta_{-} / \vartheta_{+}) \cos \mu \pi.$$

Подставим эти коэффициенты в условия Дирихле при $x = \pi$ и получим уравнение относительно корня из собственного числа:

$$0 = Y_{+}(\pi, \mu) = a_{+} \sin \mu \pi + b_{+} \cos \mu \pi = (\vartheta_{-} / \vartheta_{+}) \cos \mu \pi \sin \mu \pi + \sin \mu \pi \cos \mu \pi =$$

$$= ((\vartheta_{-} / \vartheta_{+}) + 1) \cos \mu \pi \sin \mu \pi = \frac{1}{2} ((\vartheta_{-} / \vartheta_{+}) + 1) \sin(2\mu \pi). \tag{24}$$

Корни уравнения (24) суть $\mu_j = j/2$. Собственные числа функции, отвечающие обобщенной собственной функции Y, — квадраты этих корней: $\lambda_j = \mu_j^2$.

Затем вычисляются значения $a_{\pm,j}, b_{\pm,j}$ и собственная функция $Y_j(x)$. После того как получены аналитические решения $v_{m,j} = m^2 + \lambda_j, \ u_{m,j}(x,y) = m^2 + \lambda_j$

 $=\exp(imy)Y_j(x)$, их можно использовать для оценки погрешности решений, полученных с помощью компактных разностных схем, см. рис.23. Для нескольких значений $v_{m,j}$ вычислены точные обобщенные собственные функции $u_{m,j}$ в точках сетки и обобщенные собственные функции, полученные по компактной схеме u_{m,j,N_k}^* при разрешении N_k . Затем в стандартной евклидовой метрике вычислялся угол между N(N+1)-мерными векторами $u_{m,j}$ и u_{m,j,N_k}^* по формуле

$$\alpha = \arccos\left((u_{m,j}, u_{m,j,N_k}^*) \middle/ \sqrt{(u_{m,j}, u_{m,j})(u_{m,j,N_k}^*, u_{m,j,N_k}^*)}\right).$$

$$5.5 \boxed{\begin{array}{c} 5.5 \boxed{} \\ 4.5 \boxed{} \\ 3.5 \boxed{\phantom{0$$

Рис.23. Изолинии $\ln \alpha$ для угла между точными обобщенными собственными функциями $u_{1,j}$ и $u_{2,j}$ и их компактной аппроксимацией в зависимости от μ и $\ln N$.

На рис.23 показаны изолинии логарифма угла α в зависимости от N и спектрального параметра μ : (а) для m=1, (б) для m=2. Этот угол мал. Так как значения μ изменяются дискретно, изолинии на рисунках получаются угловатыми. В действительности значения α определены далеко не для каждого вещественного μ . Часть «массы» точной обобщенной собственной функции (интеграла от квадрата ее модуля $u_{m,j}(x,y)$) сосредоточена на левой половине цилиндра, а остальная часть — на правой,

$$E_l = \int_{-\pi}^0 \int_0^{2\pi} \sin^2 \left[(\mu(\pi+x)) \right] dy dx = 2\pi \int_0^\pi \sin^2 \left[(\mu(x+\pi)) \right] dx =$$

$$= 2\pi \int_0^\pi \left(1 - \cos[2\mu(x+\pi)] \right) / 2 \ dx = \pi^2 - \pi \int_0^\pi \cos[2\mu(x+\pi)] dx = \pi^2$$
(последний интеграл равен нулю, поскольку $\mu = j/2$, где $j \in \mathbb{Z}_+$) и

$$\begin{split} E_r &= \int_{-\pi}^0 \int_0^{2\pi} [a_+ \sin(\mu_j x) + b_+ \cos(\mu_j x)]^2 dy dx = \\ &= 2\pi \left[\frac{\pi}{2} a_+^2 + \frac{\pi}{2} b_+^2 + \frac{a_+ b_+}{2\mu_j} ((-1)^j - 1) \right] = \begin{cases} \pi^2 (\vartheta_-/\vartheta_+)^2 & \Leftarrow j - \text{ четное,} \\ \pi^2 & \Leftarrow j - \text{ нечетное.} \end{cases} \end{split}$$

Обе эти величины зависят от нормировки собственной функции, но зато не зависят от нормировки отношение этих двух частей массы:

$$\gamma = E_l / E_r. \tag{25}$$

Для стационарного уравнения Шрёдингера, например, величина γ имеет физический смысл: она показывает, какая часть энергии квантовой частицы сосредоточена в левой части отрезка по сравнению с правой. Эта величина (как и собственные числа) зависит и от амплитуды скачка коэффициента уравнения κ , и от номера собственного числа.

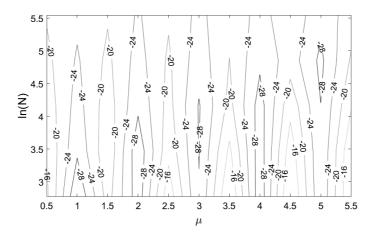


Рис.24. Изолинии логарифма погрешности $\Delta \gamma$ для обобщенных собственных функций $u_{0,j}$ в зависимости от μ_j и $\ln N$.

Чтобы понять, насколько хорошо аппроксимируется разностной схемой собственная функция с заданным номером, вычислим величину γ для разностной собственной функции и оценим ошибку $\Delta\gamma$ (по сравнению с (25)) в зависимости от третьего параметра — количества подотрезков сетки N, см. рис.24; для оценки интегралов использовалась квадратурная формула Симпсона. Использование квадратур меньшего порядка (например, метода трапеций) может ухудшить порядок и точность самого сравнения с аналитическим решением. Эта погрешность также весьма мала.

15. Заключение

Представлена компактная разностная схема, аппроксимирующая с 4-м порядком точности эллиптическое уравнение с разрывным коэффициентом. Такие уравнения описывают стационарные решения в различных моделях: диффузии, теплопроводности, волновые и т.д. Схема проверена для различных вариантов граничных условий и поведения младших членов уравнения; вычисляются собственные числа и функции краевой задачи. Порядок точности подтвержден на численных экспериментах. Реализация компактной схемы практически не отличается по сложности и трудоемкости от классической дивергентной схемы, но превосходит ее по порядку точности и поэтому драматически (в рассматриваемом диапазоне параметров примерно в 100 раз) превосходит ее по точности. Экстраполяция Ричардсона позволяет еще повысить порядок точности алгоритма до 6-го. Релаксационные методы, включая ускоритель сходимости multigrid (а также распараллеливание алгоритма) применимы к компактной схеме. В работе также экспериментально определены оптимальные соотношения между параметрами этого вычислительного алгоритма.

В следующей работе мы предполагаем рассмотреть задачи, в которых линия Γ скачка коэффициента θ (граница двух сред) имеет более сложную геометрию.

Пользуясь случаем, благодарим рецензента за полезные замечания.

16. Приложение. Неудачные шаблоны для компактной аппроксимации

В основном тексте статьи предъявлены «удачные» шаблоны и коэффициенты компактной аппроксимации задачи. Однако при других (иногда более «естественных») шаблонах могут возникнуть препятствия к реализации:

- **і.** При определении коэффициентов операторов A и P соответствующая СЛАУ порядка N оказывается вырожденной.
- **іі.** «Большая» матрица А оказывается плохо обусловленной. Обычно это проявляется в нарушении ее свойства отрицательной определенности.

Приведем примеры таких пар шаблонов и укажем, какой из двух типов «проблемы» наблюдается.

і. Выберем следующие шаблоны (см. рис.2, 25): крест для функции u, квадрат — для правой части f, т.е. $v_A = 5$, $v_P = 9$.

С учетом симметрии задачи получаем для произвольного внутреннего узла двумерной сетки с номерами i,j линейное алгебраическое уравнение с неопределенными пока коэффициентами p,q,r:

$$u(i, j-1) + u(i-1, j) + u(i+1, j) + u(i, j+1) - 4u(i, j) =$$

$$= r [f(i-1, j-1) + f(i-1, j+1) + f(i+1, j-1) + f(i+1, j+1)] +$$

$$+ q [f(i, j-1) + f(i-1, j) + f(i+1, j) + f(i, j+1)] + pf(i, j).$$
(II1)

Для определения этих коэффициентов потребуем точного выполнения уравнения (П1) на следующих парах тестовых функций:

$$N_{\odot}$$
 и f Уравнение $1 \quad 1 \quad 0$ выполнено $2 \quad x^2 \quad 2 \quad 2h^2 = 2[4r + 4q + p]$. $3 \quad x^4 \quad 12x^2 \quad 2h^4 = 12h^2[4r + 2q]$ $4 \quad x^2y^2 \quad 2(x^2 + y^2) \quad 0 = 2[8r + 4q]$

Уравнения № 3 и № 4 противоречат друг другу. Следовательно, на указанном шаблоне схема 4-го порядка точности невозможна.

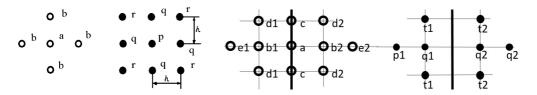


Рис.25. Шаблон типа «крест – квадрат» для компактной аппроксимации на квадратной сетке для функции *и* и *f*, соответственно.

Рис.26. «Неудачные» шаблоны для точек типа B - для решения u и правой части f. Жирная линия $-\Gamma$.

іі. Случай вырождения или плохой обусловленности глобальной матрицы A. Если отказаться от использования левых и правых пределов правой части f_+ , f_- на линии Γ и считать, что там функция f не определена (коэффициенты шаблона для правой части при аппроксимации уравнения там равны 0), то не удается подобрать шаблон для точек на линии Γ такой, что и обеспечивался бы и четвертый порядок аппроксимации, и выполнялось условие (9). Это обстоятельство часто приводило к плохой обусловленности глобальной матрицы A. Пример «плохого» шаблона для точек типа B приведен на рис.26. Тестовые функции для этого шаблона такие же, как в №4, нормировочное условие: a=1. Решая СЛАУ получаем коэффициенты схемы, причем e1, e2, e4, e7, e8. Поэтому условие (9) не выполняется. Численные эксперименты действительно показывают плохую обусловленность глобальной матрицы e8.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *В.Т. Жуков, Н.Д. Новикова, О.Б. Феодоритова*. Многосеточный метод для эллиптических уравнений с анизотропными разрывными коэффициентами // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2015, т. 55, № 7, с.1168–1182.
 - *V.T. Zhukov, N.D. Novikova, O.B. Feodoritova*. Multigrid method for elliptic equations with anisotropic discontinuous coefficients // Comput. Math. & Math. Phys., 2015, v.55, p.1150-1163.
- В.М. Бабич. Скин-эффект в случае провода произвольного поперечного сечения / Зап. научн. сем. ЛОМИ, 1983, т.128, с.13–20.
 V.M. Babich. Skin-effect v sluchae provoda proizvolnogo poperechnogo sechenia / Zap. Nauchn. Sem. LOMI, 1982, t.128, s.13-20.
- 3. О.А. Ладыженская, Н.Н. Уральцева. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа. М.: Наука, 1967.

 О. Ladyzhenskaya, N. Uraltseva. Linear and Quasilinear Elliptic Equations. New York-London: Academic Press, 1968.
- 4. *Ш.Е. Микеладзе.* О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов // Изв. АН СССР. Сер. матем., 1941, т.5, № 1, с.57–74. *Sh.E. Mikeladze.* O chislennom integrirovanii uravnenii ellipticheskogo i parapolicheskogo tipov // Izv. AN SSSR. Ser. Matem. 1941, t.5, N1, s. 57-74.
- 5. *P.H. Cowell, A.C.D. Crommelin.* Investigation of the motion of Halley's comet from 1759 to 1910. Appendix to Greenwich Observations for 1909. Edinburgh, 1910, 1-84.
- 6. *B.V. Noumerov*. A Method of Extrapolation of Perturbations // Monthly Notices Royal Astronomical Society, 1924, v.84, p. 592-601.
- 7. Э. Хайрер, С. Нёрсетт, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990, 512 с. E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner. Solving ordinary differential equations. I. Nonstiff problems. New York: Springer Verlag, 1987, 1993, 480p.
- 8. *В.А. Гордин, Е.А. Цымбалов*. Компактная разностная схема для дифференциального уравнения с кусочно-постоянным коэффициентом // Матем. моделирование, 2017, т.29, №12, с.16–28.
 - V.A. Gordin, E.A. Tsymbalov. Kompaktnaia raznostnaia skhema dlia differentsialnogo uravneniia s kusochno-postoiannym koeffitsientom // Matematicheskoe modelirovanie. 2017, t.29, №12, s.16-28.
- 9. *В.А. Гордин*. Как это посчитать? Обработка метеорологической информации на компьютере. М.: МЦНМО, 2005, 280 с.
 - V.A. Gordin. Kak eto poschitat? M.: MTsNMO, 2005, 280 s.
- 10. *М.М. Краснов*. Параллельный алгоритм вычисления точек гиперплоскости фронта вычислений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2015, т. 55, № 1, с.145–152. *М.М. Krasnov*. Parallel algorithm for computing points on a computation front hyperplane // Comput. Math. and Math. Phys., 2015, v.55, p.140-147.
- 11. *A.A. Самарский, Е.С.Николаев*. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. *A.A. Samarskii, E.S. Nikolaev*. Numerical Methods for Grid Equations. V.II. Iterative Methods. - Birkhauser Verlag, Basel-Boston-Berlin, 1989.

- 12. *Р.П. Федоренко*. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1961, т.1, № 5, с.922–927. *R.P. Fedorenko*. A relaxation method for solving elliptic difference equations // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1962, v.1:4, p.1092-1096.
- 13. *Р.П. Федоренко*. Введение в вычислительную физику. Уч. пос. для вузов. М.: Долгопрудный: Издат. дом «Интеллект», 2008, 2 изд.
 - R.P. Fedorenko. Vvedenie v vychislitelnuiu fiziku. M.; Dolgoprudnyi: Intellekt, 2008.
- 14. A. Iserles. A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations. Cambridge University Press, 2009.
- 15. *В.Т. Жуков, О.Б. Феодоритова.* О развитии параллельных алгоритмов решения параболических и эллиптических уравнений // Итоги науки и техн. Сер. соврем. мат. и ее прил. Темат. обзор, 2018, т.155, с.20-37.
 - *V.T. Zhukov, O.B. Feodoritova*. O razvitii parallelnyh algorithmov reshenia parabolicheskih i ellipticheskih uravnenii // Itogi nauki i techniki. Seria sovremennaia matematika i ee prilojenia. Tematicheskii obzor, 2018, t.155, s.20-37.

Поступила в редакцию 07.07.2022 После доработки 24.01.2023 Принята к публикации 30.01.2023