1 Тайны вычислительной математики. Общая теория сходимости уравнений в частных производных

Переходим к решению уравнений и систем уравнений в частных производных.
Некоторые примеры таких уравнений в одномерном случае:

- уравнение теплопроводности (диффузии)

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \tag{1}$$

- уравнение переноса (адвекции)

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + a\frac{\partial \psi}{\partial x} = 0 \tag{2}$$

- волновое уравнение

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \tag{3}$$

- Линейные уравнения мелкой воды

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -g\frac{\partial h}{\partial x} \tag{4}$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\bar{h}\frac{\partial u}{\partial x} \tag{5}$$

Зададимся вопросом построения алгоритма для численного решения уравнений в частных производных. Ранее мы занимались решением задач (задача Коши для ОДУ, краевая задача) с одной размерностью – время или пространство, теперь же у нас присутствует обе размерности. То есть, грубо говоря, мы одновременно решаем и задачу Коши, и краевую задачу.

1.1 Пример. Численное решение уравнения теплопроводности

1.1.1 Постановка задачи

Начнем с простого примера – построим алгоритм численного решения следующей задачи:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, x \in [0,1],\ t \in [0,T]. \tag{6}$$

$$\psi(x,0) = \varphi(x), \tag{7}$$

$$\psi(0,t) = a, \psi(1,t) = b \tag{8}$$

1.1.2 Дикретизация уравнения

Для численного решения нам требуется ввести сетку по пространству и по времени. Для простоты будем пользоваться равномерными сетками:

$$\Delta t = \frac{T}{N_t}, t_n = \Delta t(n-1), n = 0..N_t. \tag{9}$$

$$\Delta x = \frac{1}{N_x}, x_i = \Delta x(i-1), i = 0..N_x. \tag{10}$$

Здесь N_t, N_x – количество узлов сетки по времени и по пространству, $\Delta t, \Delta x$ – шаги сетки, t_n, x_i – координаты узлов сетки.
Значения сеточных функции в узлах сетки будем обозначать ψ_i^n, где нижний индекс – номер узла сетки по пространству, верхний индекс – номер узла сетки по времени.

Запишем теперь простейшую дискретизацию уравнения (6), для этого для аппроксимации частной производной по времени воспользуемся формулой направленной разности первого порядка, а для аппроксимации второй производной по пространству стандартной формулой второго порядка аппроксимации. Получаем схему:

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} = \frac{\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n}{\Delta x^2}, n = 1..N_t, i = 2..N_x - 2. \tag{11}$$

Для приграничных узлов сетки x_1, x_{N_x-1} нужно будет учесть граничные условия (в данном случае условия типа Дирихле) (8) и подставить $\psi_0^n = a, \psi_{N_x}^n = b$. В целом способы аппроксимации граничных условий для уравнений в частных производных не сильно отличаются от способов, которые были разобраны в теме про краевые задачи.
Таким образом мы только что построили простейшую **явную** схему. Аналогичным образом мы могли построить неявную схему:

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} = \frac{\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}, n = 1..N_t, i = 2..N_x - 2. \tag{12}$$

При использовании такой схемы на каждом шаге по времени придется решать систему линейных уравнений с трехдиагональной матрицей.
В целом можно рассматривать отдельно аппроксимацию по времени и пространству, то есть сначала перейти к системе обыкновенных дифференциальных уравнений относительно неизвестных $\psi_i(t)$:

$$\frac{d\psi_i(t)}{dt} = \frac{\psi_{i+1}(t) - 2\psi_i(t) + \psi_{i-1}(t)}{\Delta x^2}, \tag{13}$$

после чего применить любой известный нам алгоритм численного интегрирования ОДУ (методы Рунге-Кутты, методы Адамса, ...). В частности, применение явного или неявного метода Эйлера для системы (13) приводит к схемам (11), (12). Такой подход к решению уравнений в частных производных принято называть **методом прямых** (method of lines).

1.1.3 Исследование аппроксимации

Вернемся к явной схеме:

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} = \frac{\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n}{\Delta x^2}. \tag{14}$$

Теперь нам надо понять насколько решение, полученное при помощи такой схемы, будет похоже на настоящее аналитическое решения исходного уравнения. Для этого нам нужно показать, что есть сходимость разностного решения к аналитическому (определение сходимости можно посмотреть в задачнике, оно слабо отличается от определения, которое мы использовали для ОДУ). Как и раньше доказывать сходимости напрямую сложно, поэтому будем доказывать аппроксимацию и устойчивость.

Для исследования аппроксимации нужно показать, что норма вектора невязки стремится к нулю при стремлении к нулю Δx и Δt. Выпишем выражение для компоненты вектора невязки r_i^n:

$$r_i^n = \frac{[\psi]_i^{n+1} - [\psi]_i^n}{\Delta t} - \frac{[\psi]_{i+1}^n - 2[\psi]_i^n + [\psi]_{i-1}^n}{\Delta x^2}. \tag{15}$$

Здесь $[\psi]_i^n \equiv \psi(t_n, x_i)$ – проекция точного решения уравнения (6) на сетку. Воспользуемся разложением в ряд Тейлора:

$$[\psi]_i^{n+1} = [\psi]_i^n + \Delta t[\psi_t']_i^n + \underbrace{\frac{\Delta t^2}{2}\psi_{tt}''(\theta_1)}_{\substack{\text{Остаточный член}\\ \text{в форме Лагранжа}}} \tag{16}$$

$$[\psi]_{i\pm1}^n = [\psi]_i^n \pm \Delta x[\psi_x']_i^n + \frac{\Delta x^2}{2}[\psi_{xx}'']_i^n \pm \frac{\Delta x^3}{6}[\psi_{xxx}''']_i^n + \frac{\Delta x^4}{24}\psi_{xxxx}''''(\theta_{2/3}). \tag{17}$$

Подставляя все в (19) получаем:

$$r_i^n = [\psi_t']_i^n + \frac{\Delta t}{2}\psi_{tt}''(\theta_1) - [\psi_{xx}'']_i^n - \frac{\Delta x^2}{24}(\psi_{xxxx}''''(\theta_2) + \psi_{xxxx}''''(\theta_3)). \tag{18}$$

$[\psi_t]_i^n$ – проекция точного решения на сетку $\Rightarrow$ $[\psi_t']_i^n = [\psi_{xx}'']_i^n$.

$$|r_i^n| = \left|\frac{\Delta t}{2}\psi_{tt}''(\theta_1) - \frac{\Delta x^2}{24}(\psi_{xxxx}''''(\theta_2) + \psi_{xxxx}''''(\theta_3))\right| \leq \tag{19}$$

$$\frac{\Delta t}{2}\max_{t\in[0,T]}|\psi_{tt}''(t)| + \frac{\Delta x^2}{12}\max_{x\in[0,1]}|\psi_{xxxx}''''(x)| \equiv C_1\Delta t + C_2\Delta x^2. \tag{20}$$

То есть схема аппроксимирует исходное уравнение с первым порядком по времени и вторым порядком по пространству.

1.1.4 Исследование устойчивости

Перейдем теперь к исследованию устойчивости разностной схемы (14). Проводить исследование устойчивости по определению достаточно сложно, поэтому воспользуемся так называемым **спектральным признаком** устойчивости (признак Неймана). Для этого подставим в разностную схему выделенную Фурье-гармонику $\psi_k^n = \lambda^n e^{i\alpha k}$ (далее индекс i заменим на k, чтобы не путать с мнимой единицей) и потребуем, чтобы такие решения были не возрастающими, то есть чтобы $|\lambda| \leq 1$. Получаем следующее выражение:

$$\frac{\lambda^{n+1}e^{i\alpha k} - \lambda^n e^{i\alpha k}}{\Delta t} = \frac{\lambda^n e^{i\alpha(k+1)} - 2\lambda^n e^{i\alpha k} + \lambda^n e^{i\alpha(k-1)}}{\Delta x^2} \tag{21}$$

Можем сократить обе части на λ^n и на $e^{i\alpha k}$:

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} = \frac{e^{i\alpha} - 2 + e^{-i\alpha}}{\Delta x^2}. \tag{22}$$

Отсюда можем получить выражение для λ:

$$\lambda = 1 + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}(\cos\alpha - 1) = 1 - \frac{4\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2\frac{\alpha}{2}. \tag{23}$$

Условие устойчивости:

$$|\lambda| \leq 1 \Rightarrow \left|1 - \frac{4\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2\frac{\alpha}{2}\right| \leq 1 \Rightarrow \tag{24}$$

$$\Rightarrow 0 \leq \frac{4\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2\frac{\alpha}{2} \leq 2. \tag{25}$$

Учитывая, что $\sin^2\frac{\alpha}{2}$ меньше или равен единицы, получаем условие на Δt и Δx при которых $|\lambda| \leq 1$:

$$0 \leq \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}. \tag{26}$$

1.2 Метод неопределенных коэффициентов

Рассмотрим еще один подход к построению аппроксимаций для уравнений в частных производных – метод неопределенных коэффициентов. Идея метода состоит в том, чтобы сначала выбрать шаблон аппроксимации, то есть набор узлов сетки, которые вы будете использовать для построения схемы, и записать вашу схему как сумму значений сеточной функции в этих узлах с неопределенными коэффициентами. Давайте разберем этот подход на конкретном примере.

1.2.1 Пример. Численное решение уравнения переноса

Требуется построить численную схему для решения уравнения переноса:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + s\frac{\partial\psi}{\partial x} = 0 \tag{27}$$

методом неопределенных коэффициентов. Качестве шаблона аппроксимации будем использовать узлы сетки (x_k, t_n), (x_k, t_{n+1}),(x_{k-1}, t_{n+1}),(x_{k+1}, t_{n+1}). Иногда шаблоны аппроксимации изображают схематично в виде линий, соединящих узлы сетки в пространстве (x, t).
Запишем общий вид нашей схемы:

$$a\psi_k^n + b\psi_k^{n+1} + c\psi_{k+1}^{n+1} + d\psi_{k-1}^{n+1} = 0. \tag{28}$$

Здесь a, b, c, d – неопределенные коэффициенты, которые нам надо определить из условий на порядок аппроксимации схемы. Для этого подставим вместо сеточной функции проекцию точного решения на сетку и разложим все в ряд Тейлора, раскладывать будет удобно относительно точки (x_k, t_{n+1}).

$$a[\psi]_k^n + b[\psi]_k^{n+1} + c[\psi]_{k+1}^{n+1} + d[\psi]_{k-1}^{n+1} = 0. \tag{29}$$

$$[\psi]_{k\pm1}^{n+1} = [\psi]_k^{n+1} \pm \frac{\Delta x}{1}[\psi_x']_k^{n+1} + \frac{\Delta x^2}{2}[\psi_{xx}'']_k^{n+1} \pm \frac{\Delta x^3}{6}[\psi_{xxx}'''] + \frac{\Delta x^4}{24}[\psi_{xxxx}'''']_k^{n+1} \tag{30}$$

$$[\psi]_k^n = [\psi]_k^{n+1} - \frac{\Delta t}{1}[\psi_t']_k^{n+1} + \frac{\Delta t^2}{2}[\psi_{tt}'']_k^{n+1} - \frac{\Delta t^3}{6}[\psi_{ttt}'''] + \frac{\Delta t^4}{24}[\psi_{tttt}'''']_k^{n+1} \tag{31}$$

Подставив эти разложения в (29) потребуем сначала, чтобы коэффициент перед $[\psi]_k^{n+1}$ был равен нулю (такого члена нет в исходном уравнении), коэффициент перед $[\psi_t']_k^{n+1}$ был равен 1, коэффициент перед $[\psi_x']_k^{n+1}$ был равен s. Получаем три условия на коэффициенты:

$$a + b + c + d = 0, \tag{32}$$

$$-a\Delta t = 1, \tag{33}$$

$$(c - d)\Delta x = s. \tag{34}$$

Далее для возможности получить схему максимального порядка аппроксимации выразим производные по времени через производные по пространству, воспользовавшись дифференциальными следствиями исходного уравнения:

$$\psi_t' + s\psi_x' = 0 \Rightarrow \tag{35}$$

$$\psi_{tt}'' + s\psi_{tx}'' = \psi_{tt}'' + s(\psi_t')_x' = \psi_{tt}'' + s(-s\psi_x')_x' = 0 \Rightarrow \tag{36}$$

$$\psi_{tt}'' = s^2\psi_{xx}'' \tag{37}$$

Теперь можем потребовать, чтобы коэффициент перед $[\psi_{xx}'']_k^{n+1}$ был равен нулю:

$$\frac{\Delta x^2}{2}(c + d) + as^2\frac{\Delta t^2}{2} = 0. \tag{38}$$

Таким образом мы получили 4 уравнения для четырех неизвестных. Решение этой системы:

$$a = -\frac{1}{\Delta t}, b = \frac{1}{\Delta t} - \frac{s^2 \Delta t}{\Delta x^2}, c = \frac{1}{2\Delta x} + \frac{s^2 \Delta t}{2\Delta x^2}, d = -\frac{1}{2\Delta x} + \frac{s^2 \Delta t}{2\Delta x^2}. \tag{39}$$

Если подставить значения коэффициентов в (29), получим схему:

$$\frac{\psi_k^{n+1} - \psi_k^n}{\Delta t} + s\frac{\psi_{k+1}^{n+1} - \psi_{k-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{s^2 \Delta t}{2\Delta x^2}(\psi_{k+1}^{n+1} - 2\psi_k^{n+1} + \psi_{k-1}^{n+1}) = 0. \tag{40}$$

Такая схема для уравнения переноса называется неявной схемой Лакса-Вендроффа. По построению эта схема второго порядка аппроксимации по времени и по пространству.