ЛЕКЦИИ №12-13. МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ ДУЧП.
МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

При выбранном шаблоне разностные схемы могут быть составлены несколькими: методами: непосредственной разностной аппроксимации, неопределенных коэффициентов, интегро- интерполяционным. У этих методов есть свои особенности и области применения.

1. Метод разностной аппроксимации

Данный метод применяют для уравнений с гладкими коэффициентами в регулярных областях на прямоугольных сетках. При использовании этого метода дифференциальные операторы непосредственно заменяют разностными аналогами, как это было сделано выше при получении схем в предыдущих лекциях. Метод сложно использовать для уравнений с разрывными коэффициентами, на косоугольных сетках и т.д.

Этим методом можно получить схемы повышенной точности в крайних узлах при постановке граничных условий, содержащих производные решения.

Пусть для уравнения

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = a\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t)$$

при $x = 0$ поставлено краевое условие

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{0,t} = \alpha\, u(0,t). \qquad (1)$$

Если аппроксимировать производную односторонней разностью $\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{\hat{u}_1 - \hat{u}_0}{h}$, то граничное условие примет вид

$$\frac{\hat{y}_1 - \hat{y}_0}{h} = \alpha \hat{y}_0 .$$

В соответствии с формулой Тейлора

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_0 + h\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{0,t+\tau} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{0,t+\tau} + O(h^3) \tag{2}$$

Тогда невязка в начальном узле x_0 будет следующей

$$\psi_0 = \left.\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \alpha u\right)\right|_{0,t+\tau} - \left(\frac{\bar{u}_1 - \bar{u}_0}{h} - \alpha \bar{y}_0\right) = \left.\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \alpha u\right)\right|_{0,t+\tau} -$$
$$- \left(\frac{\bar{u}_0 + h\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(h^3) - \bar{u}_0}{h} - \alpha \bar{u}_0\right) = -\frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(h^2) = O(h) \quad , \tag{3}$$

т. е. невязка имеет первый порядок малости, который оказался более низким, чем порядок аппроксимации разностной схемы для рассматриваемого дифференциального уравнения.

Получим разностное краевое условие с порядком аппроксимации $O(h^2)$. Выразим в разложении (2) производную $\frac{\partial u}{\partial x}$ из (1), а производную $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$- из дифференциального уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \alpha \bar{u}_0 \, , \; \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{a}\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{f(x,t)}{a} \, .$$

Тогда из (2) имеем

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_0 + h\alpha\bar{u}_0 + \frac{h^2}{2!}\left(\frac{1}{a}\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{f_0}{a}\right) + O(h^3) = \bar{u}_0 + h\alpha\bar{u}_0 + \frac{h^2}{2!}\left(\frac{1}{a}\frac{\bar{u}_0 - u_0}{\tau} + O(\tau) - \frac{f_0}{a}\right) + \, .$$
$$+ O(h^3)$$

Таким образом, получаем краевое условие вида

$$\frac{\bar{u}_1 - \bar{u}_0}{h} = \alpha\bar{u}_0 + \frac{h}{2}\left(\frac{\bar{u}_0 - u_0}{a\tau} - \frac{f_0}{a}\right) + O(\tau + h^2) \, ,$$

и разностный аналог записывается следующим образом:

$$\frac{\bar{y}_1 - y_0}{h} = \alpha\bar{y}_0 + \frac{h}{2}\left(\frac{\bar{y}_0 - y_0}{a\tau} - \frac{f_0}{a}\right) \qquad (4).$$

Разностное уравнение (4) имеет второй порядок аппроксимации относительно шага h.

Приведем разностное уравнение (4) к виду, удобному для реализации метода прогонки.

$$\alpha_0\bar{y}_0 + \alpha_1\bar{y}_1 = \beta_0,$$

где

$$\alpha_0 = 1 + h\alpha + \frac{h^2}{2a\tau}, \alpha_1 = -1, \ \beta_0 = \frac{h^2}{2a\tau}(y_0 + f_0\,\tau).$$

Записывая формулу прогонки в виде

$$\bar{y}_0 = \xi_1\bar{y}_1 + \eta_1,$$

получим выражения для начальных прогоночных коэффициентов при вычислении массивов прогоночных коэффициентов по рекуррентным формулам

$$\xi_1 = -\frac{\alpha_1}{\alpha_0}, \ \ \eta_1 = \frac{\beta_0}{\alpha_0}.$$

2. Метод неопределенных коэффициентов

Суть метода состоит в том, что на выбранном шаблоне сетки составляют линейную комбинацию значений сеточной функции в узлах и получают выражение для соответствующей невязки, причем коэффициенты сформированной линейной комбинации находят из условия, чтобы невязка имела наиболее высокий порядок малости относительно шагов по координатам. В качестве примера получим методом неопределенных коэффициентов разностную схему для уравнения

$$\frac{\partial u(x,\,t)}{\partial t} = a\frac{\partial^2 u(x,\,t)}{\partial x^2} + f(x,\,t)$$

на неявном шаблоне I, положив для простоты $f(x,t) = 0$.

Составим линейную комбинацию значений разностного решения в узлах шаблона:

$$a_1\hat{y}_{n-1} + a_2\hat{y}_n + a_3\hat{y}_{n+1} + a_4 y_n - \varphi_n = 0\,.$$

Выполняя разложение решения в ряд Тейлора около узла (x_n, t_{m+1}), получаем

$$\hat{u}_{n\pm1} = \hat{u}_n \pm h u_x(x_n, t_{m+1}) + \frac{1}{2}h^2 u_{xx}(x_n, t_{m+1}) + \ldots$$

$$u_n = \hat{u}_n - \tau u_t(x_n, t_{m+1}) + \ldots$$

Невязку разностной схемы определяем следующим образом

$$\begin{aligned}
&\psi = (Au - f) - (A_h u - \varphi_h) = (u_t - a u_{xx})\big|_{x_n, t_{m=1}} - f(x_n, t_{m+1}) - \\
&- (a_1\hat{u}_{n-1} + a_2\hat{u}_n + a_3\hat{u}_{n+1} + a_4 u_n - \varphi_n) = (u_t - a u_{xx})\big|_{x_n, t_{m=1}} - f(x_n, t_{m+1}) - \\
&- (a_1 + a_2 + a_3 + a_4)\hat{u}_n + (a_1 - a_3)h u_x - \frac{1}{2}(a_1 + a_3)h^2 u_{xx} + a_4\tau u_t + O(\tau^2 + h^3) - \\
&- f(x_n, t_{m+1}) + \varphi_n
\end{aligned}$$

Чтобы минимизировать невязку, следует положить

$$a_1 + a_2 + a_3 + a_4 = 0\ ,\ a_1 - a_3 = 0,\ \frac{1}{2}(a_1 + a_3)h^2 = -a\,,$$

$$a_4\tau = -1,\ \varphi_n = f(x_n, t_{m+1})\,.$$

Выписанные соотношения приводят к следующим формулам для неизвестных коэффициентов схемы:

$$a_1 = a_3 = -\frac{a}{h^2}, \; a_2 = \frac{2a}{h^2} + \frac{1}{\tau}, \; a_4 = -\frac{1}{\tau}.$$

Разностная схема выглядит следующим образом:

$$A_n \hat{y}_{n-1} - B_n \hat{y}_n + C_n \hat{y}_{n+1} = -F_n,$$

где

$$A_n = C_n = -a_1 = \frac{a}{h^2}, \; B_n = a_2 = \frac{2a}{h^2} + \frac{1}{\tau}, F_n = -(a_4 y_n - \varphi_n) = \frac{1}{\tau} y_n + \varphi_n.$$

Полученная разностная схема совпадает со схемой из предыдущих лекций, составленной методом разностной аппроксимации.

Метод неопределенных коэффициентов достаточно универсален и весьма удобен при формировании разностных схем на косоугольных сетках.

3. Интегро- интерполяционный метод

Этот метод наиболее надежен и применим во всех случаях, даже для уравнений с разрывными коэффициентами.

Обсудим получение данным методом разностной схемы для квазилинейного уравнения параболического типа

$$c(u) \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - p(x) u + f(u). \tag{5}$$

Коэффициенты $k(u), c(u)$ и функция $f(u)$ уравнения могут быть кусочно-непрерывными функциями.

Поставим дополнительные условия.

Начальное условие

$$t = 0, \; u(x,0) = \mu(x).$$

Краевые условия достаточно общего вида : слева - II рода, справа - III рода

$$x = 0, \quad -k(u(0))\frac{\partial u}{\partial x} = F(t),$$

,

$$x = l, \quad -k(u(l))\frac{\partial u}{\partial x} = \alpha\,(u(l) - \beta)$$

где α, β - известные числа.

Для уравнения (5) непрерывными величинами являются функция $u(x,t)$ и поток

$$F = -k(u)\frac{\partial u}{\partial x}. \qquad (6)$$

Тогда уравнение (5) можно переписать в виде

$$c(u)\,\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} - p(x)u + f(u). \qquad (7)$$

Для составления разностной схемы выбираем шаблон и связанную с шаблоном ячейку (см. предыдущие лекции). Проводим интегрирование уравнения (7) по ячейке:

$$\int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} dx \int_{t_m}^{t_{m+1}} c(u)\,\frac{\partial u}{\partial t}dt = -\int_{t_m}^{t_{m+1}} dt \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \frac{\partial F}{\partial x}dx - \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} dx \int_{t_m}^{t_{m+1}} p(x)u\,dt + \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} dx \int_{t_m}^{t_{m+1}} f(u)\,dt, \qquad (8)$$

или

$$\int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \bar{c}\,(\hat{u} - u)dx = \int_{t_m}^{t_{m+1}} (F_{n-1/2} - F_{n+1/2})dt - \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} p\,\hat{u}\,\tau\,dx + \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \hat{f}\,\tau\,dx.$$

Здесь при вычислении внутренних интегралов по t справа в уравнении (8) применен метод правых прямоугольников, тем самым следует ожидать порядок точности $O(\tau)$ по переменной t.

Интегралы по x в вычислим методом средних, а первый интеграл в правой части (по времени) - по-прежнему, методом правых прямоугольников, получим

$$\hat{c}_n(\hat{y}_n - y_n)h = \tau(\hat{F}_{n-1/2} - \hat{F}_{n+1/2}) - p_n\,\hat{y}_n\,\tau h + \hat{f}_n\,\tau h, \tag{9}$$

Далее учтем, что согласно ранее полученным формулам

$$\hat{F}_{n+1/2} = \hat{\chi}_{n+1/2}\frac{\hat{y}_n - \hat{y}_{n+1}}{h},\ \hat{\chi}_{n+1/2} = \frac{h}{\int\limits_{x_n}^{x_{n+1}}\frac{dx}{k(x)}}$$

$$\hat{F}_{n-1/2} = \hat{\chi}_{n-1/2}\frac{\hat{y}_{n-1} - \hat{y}_n}{h},\ \hat{\chi}_{n-1/2} = \frac{h}{\int\limits_{x_{n-1}}^{x_n}\frac{dx}{k(x)}}.$$

Подставляя данные выражения для потоков в (9) приведем уравнение к каноническому виду систем с трехдиагональной матрицей

$$\hat{A}_n\,\hat{y}_{n-1} - \hat{B}_n\,\hat{y}_n + \hat{D}_n\,\hat{y}_{n+1} = -\hat{G}_n, \tag{10}$$

где

$$\hat{A}_n = \hat{\chi}_{n-1/2}\frac{\tau}{h},$$

$$\hat{D}_n = \hat{\chi}_{n+1/2}\frac{\tau}{h},$$

$$\hat{B}_n = \hat{A}_n + \hat{D}_n + \hat{c}_n\,h + p_n h\tau,$$

$$\hat{F}_n = f_n h\tau + \hat{c}_n\,y_n\,h.$$

Понятно, что при $c(u)$ =0 уравнение (5) переходит в ОДУ, а разностное уравнение (10) при $\hat{c}_n$ =0 со всеми своими коэффициентами - в соответствующее разностное уравнение (шаг τ сократится).

Обратим также внимание на то, что в выражение для $\hat{G}_n$ входит y_n с **предыдущего** шага по времени, т.е. без крышки.

Точность полученной разностной схемы $O(\tau + h^2)$.

Получим **разностный аналог краевого условия** при x=0 аналогично тому, как это было сделано в предыдущей лекции. Проинтегрируем уравнение (7) на отрезке [0, $x_{1|2}$] и на временном интервале $[t_m, t_{m+1}]$

$$\int\limits_0^{x_{1/2}} dx \int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} c(u)\ \frac{\partial u}{\partial t} dt = -\int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} dt \int\limits_0^{x_{1/2}} \frac{\partial F}{\partial x} dx - \int\limits_0^{x_{1/2}} dx \int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} p(x) u\, dt + \int\limits_0^{x_{1/2}} dx \int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} f(u)\, dt\,.$$

Приближенно вычисляя интегралы по времени, как и выше, получим

$$\int\limits_0^{x_{1/2}} \hat{c}\,(\hat{u} - u) dx = -\int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} (F_{1/2} - F_0) dt - \int\limits_0^{x_{1/2}} p\,\hat{u}\,\tau\, dx + \int\limits_0^{x_{1/2}} \hat{f}\,\tau\, dx\,.$$

Вычисляем интегралы. Первый интеграл справа, как и ранее, находим методом правых прямоугольников, а остальные - методом трапеций

$$\frac{h}{4}\left[\hat{c}_{1/2}(\hat{y}_{1/2} - y_{1/2}) + \hat{c}_0(\hat{y}_0 - y_0)\right] = -\left(\hat{F}_{1/2} - \hat{F}_0\right)\tau - \left(p_{1/2}\ \hat{y}_{1/2} + p_0\,\hat{y}_0\right)\tau\frac{h}{4} + \left(\hat{f}_{1/2} + \hat{f}_0\right)\tau\frac{h}{4}\,.$$

Подставляя в данное уравнения выражение для потока $\hat{F}_{1/2}$, учитывая, что $\hat{F}_0 = F(t_{m+1}) = \hat{F}$, и заменяя $\hat{y}_{1/2} = \dfrac{\hat{y}_0 + \hat{y}_1}{2}, y_{1/2} = \dfrac{y_0 + y_1}{2}$, найдем разностный аналог краевого условия

$$\begin{gathered}\left(\frac{h}{8}\hat{c}_{1/2} + \frac{h}{4}\hat{c}_0 + \hat{\chi}_{1/2}\frac{\tau}{h} + \frac{\tau h}{8} p_{1/2} + \frac{\tau h}{4} p_0\right)\hat{y}_0 + \left(\frac{h}{8}\hat{c}_{1/2} - \hat{\chi}_{1/2}\frac{\tau}{h} + \frac{\tau h}{8} p_{1/2}\right)\hat{y}_1 = \\ = \frac{h}{8}\hat{c}_{1/2}\left(y_0 + y_1\right) + \frac{h}{4}\hat{c}_0\, y_0 + \hat{F}\tau + \frac{\tau h}{4}(\hat{f}_{1/2} + \hat{f}_0)\end{gathered}\,. \qquad (11)$$

Отсюда ищутся начальные значения прогоночных коэффициентов.

Легко видеть, что при $c(u) = 0$ формула (11) переходит в ранее полученную формулу при рассмотрении ОДУ.

Разностный аналог краевого условия при $x = l$ получается аналогичным образом, если проинтегрировать уравнение (7) на отрезке [$x_{N-1/2}$, x_N] и учесть, что поток $\hat{F}_N = \alpha(\hat{y}_N - \beta)$, а $\hat{F}_{N-1/2} = \hat{\chi}_{N-1/2}\dfrac{\hat{y}_{N-1} - \hat{y}_N}{h}$.

В итоге система квазилинейных разностных уравнений примет канонический вид

$$
\begin{cases}
\widehat{K}_0\, \widehat{y}_0 + \widehat{M}_0 \widehat{y}_1 = \widehat{P}_0, \\
\widehat{A}_n\, \widehat{y}_{n-1} - \widehat{B}_n\, \widehat{y}_n + \widehat{D}_n\, \widehat{y}_{n+1} = -\widehat{F}_n, \quad 1 \le n \le N-1, \\
\widehat{K}_N\, \widehat{y}_N + \widehat{M}_{N-1} \widehat{y}_{N-1} = \widehat{P}_N
\end{cases}
\qquad (12)
$$

Самый простой способ решения таких систем - это брать коэффициенты уравнений с предыдущего временного слоя (убираются крышки над коэффициентами). Система уравнений становится линейной и легко решается методом прогонки. Однако более выгоден нелинейный вариант разностной схемы, т.к. при использовании нелинейного варианта все вычисления можно проводить с большим шагом по времени, чем в линейном случае. Поэтому нелинейная схема оказывается предпочтительнее, несмотря на ее большую громоздкость и сложность.

Алгоритмы решения систем типа (12) в нелинейном случае описаны ранее. Все, что там сказано, применимо и здесь. Так, можно использовать расчет с использованием релаксации в ходе итерационной процедуры. Отметим основные особенности алгоритма применительно к рассматриваемым уравнениям в частных производных.

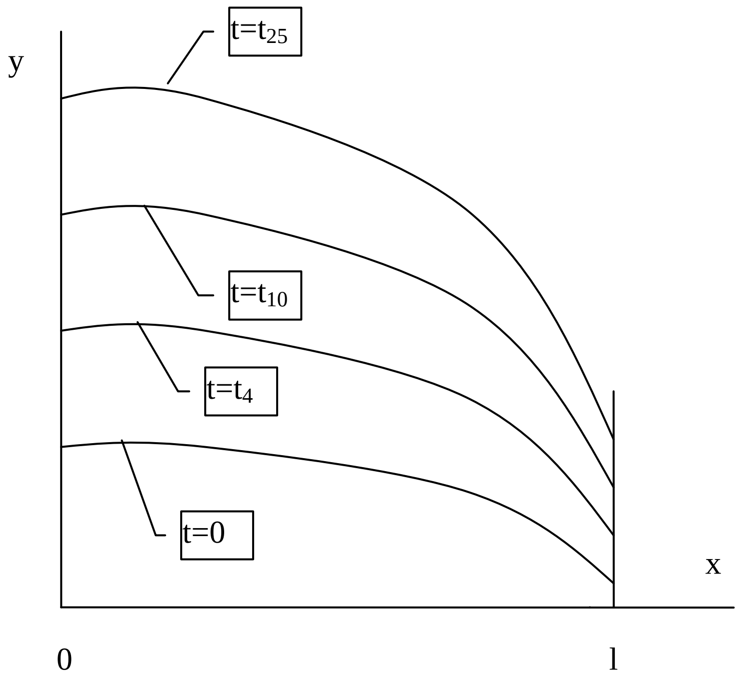
В методе простых итераций система (12) решается многократно на **каждом шаге** по времени, т.е. для получения решения $\widehat{y}_n$, $n = 0...N$ в момент времени $t = t_{m+1}$ итерационная процедура организуется по схеме

$$
\widehat{A}_n^{s-1}\, \widehat{y}_{n+1}^{s} - \widehat{B}_n^{s-1}\, \widehat{y}_n^{s} + \widehat{D}_n^{s-1}\, \widehat{y}_{n-1}^{s} = -\widehat{F}_n^{s-1},
$$

здесь s - номер итерации.

В качестве начального приближения $\widehat{y}_n^0$ задается сошедшееся решение $\widehat{y}_n$ с предыдущего шага $t = t_m$, т.е. $\widehat{y}_n^0 = \widehat{y}_n$.

В итоге для каждого момента времени $t = t_m, m = 1,2,...M$ получаем разностное решение $\widehat{y}_n$. Набор таких решений для всех $t_m, m = 1,2,...M$ соответствует функции двух переменных $u(x_n, t_m)$, являющейся решением исходного дифференциального уравнения (5).



Отметим также, что нелинейная система (12) может быть решена путем применения линеаризации методом Ньютона (лекция №8) .

На вышеприведенном рисунке схематично иллюстрируется одна из возможных форм визуализации результатов расчетов. Приведены разностные решения $\bar{y}_n$ системы (12) в разные моменты времени. Момент t=0 соответствует начальному условию, т.е $y_n = \mu(x_n)$. Далее приведены решения для $t=t_4=4\tau$, $t=t_{10}=10\tau$, $t=t_{25}=25\tau$ и т.д. до момента времени окончания счета. Здесь шаг по времени τ считается постоянным, т.е. τ = const. Постоянство шага не является обязательным, и в зависимости от скорости изменения функции во времени шаг может, как уменьшаться, так и увеличиваться.

Результат расчета может быть представлен также в виде кривых зависимости решения уравнений от времени t для фиксированных значениях переменной *x*.

В заключение лекции рассмотрим вариант записи уравнений в **криволинейных** координатах: цилиндрических или сферических. В простом случае линейного уравнения имеем

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{r^p}\frac{\partial}{\partial r}(r^p F) + f(r,t),$$

$$F = -k(r,t)\frac{\partial u}{\partial r}.$$

Здесь p=0, 1, 2 для плоской, цилиндрической и сферической геометрии, соответственно.

Применим интегро - интерполяционный метод. Для этого проинтегрируем заданное уравнение по ячейке, аналогично тому, как это было сделано ранее

$$\int\limits_{r_{n-1/2}}^{r_{n+1/2}} r^p dr \int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} \frac{\partial u}{\partial t} dt = -\int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} dt \int\limits_{r_{n-1/2}}^{r_{n+1/2}} \frac{1}{r^p} \frac{\partial}{\partial r}(r^p F) r^p dr + \int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} dt \int\limits_{r_{n-1/2}}^{r_{n+1/2}} f(r,t) r^p dr \,,$$

или

$$\int\limits_{r_{n-1/2}}^{r_{n+1/2}} (\hat{u} - u) r^p dr = \int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} (r_{n-1/2}^p F_{n-1/2} - r_{n+1/2}^p F_{n+1/2}) dt + \int\limits_{t_m}^{t_{m+1}} dt \int\limits_{r_{n-1/2}}^{r_{n+1/2}} f(r,t) r^p dr \,.$$

Выполняя те же вычисления, которые мы проводили выше и вводя параметр σ на шеститочечном шаблоне получим

$$(\hat{y}_n - y_n)V_n = \tau\left[\sigma(r_{n-1/2}^p \hat{F}_{n-1/2} - r_{n+1/2}^p \hat{F}_{n+1/2}) + (1-\sigma)(r_{n-1/2}^p F_{n-1/2} - r_{n+1/2}^p F_{n+1/2})\right] + \varphi_n \,, \quad (13)$$

где

$$V_n = \frac{1}{p+1}(r_{n+1/2}^{p+1} - r_{n-1/2}^{p+1}) \,.$$

Потоки $\hat{F}_{n-1/2}, \hat{F}_{n+1/2}, F_{n-1/2}, F_{n+1/2}$ выписаны выше.

Подставляя в (13) выражения для потоков, получаем разностную схему

$$\begin{aligned}
&(\hat{y}_n - y_n)V_n = \\
&= \tau\Bigg[\sigma(r_{n-1/2}^p \chi_{n-1/2} \frac{\hat{y}_{n-1} - \hat{y}_n}{h} - r_{n+1/2}^p \chi_{n+1/2} \frac{\hat{y}_n - \hat{y}_{n+1}}{h}) + \\
&+ (1-\sigma)(r_{n-1/2}^p \chi_{n-1/2} \frac{y_{n-1} - y_n}{h} - r_{n+1/2}^p \chi_{n+1/2} \frac{y_n - y_{n+1}}{h})\Bigg] + \varphi_n
\end{aligned}$$

Приведем результаты по сходимости разностного решения к точному.

Будем считать, что функции $k(r,t)$ и $f(r,t)$, а также их первые и вторые производные кусочно-непрерывны, причем точки разрыва неподвижны. Выберем неравномерную сетку, такую, чтобы узлы попадали на точки разрыва. Тогда выписанная схема при выполнении условия устойчивости $\sigma \geq \frac{1}{2} - \frac{1}{4\tau}\mathbf{min}\,\frac{h^2}{k}$ равномерно сходится на указанной сетке с точностью $O(\tau^p + h^2)$, причем p =2 при весе $\sigma = \frac{1}{2}$ и p =1 при $\sigma \neq \frac{1}{2}$.