Лекция 18. Методы расщепления

Лекция знакомит с идеями построения экономичных разностных схем для уравнений математической физики, основанных на методах покомпонентного расщепления (локально-одномерные схемы) и на принципах расщепления по физическим процессам.

Ключевые слова: методы расщепления, схема Кранка—Никольсон, локально-одномерные схемы, расщепление по физическим процессам, расщепление с факторизацией оператора.

18.1. Понятие о методах расщепления

Рассмотрим дифференциальную задачу для уравнения в частных производных с постоянными коэффициентами:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{A}u = 0; x \in \Omega_x, \ t \in \Omega_t, \ u|_{\Gamma} = u_{\Gamma}, u(t_0) = u_0. \tag{18.1}$$

Здесь оператор $\mathbf{A}\geqslant 0$ — положительный дифференциальный оператор с постоянными коэффициентами. В запись оператора \mathbf{A} входят производные по пространственным переменным. Для любого ненулевого элемента выполнено $(\mathbf{A}\varphi,\varphi)\geqslant 0$. Γ — граница области интегрирования Ω_x ; Λ — разностный оператор, аппроксимирующий \mathbf{A} . Можно проверить, что разностное уравнение

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} + \Lambda \frac{u^{n+1} + u^n}{2} = 0, u^0 = u_0$$
 (18.2)

аппроксимирует (18.1) со вторым порядком по τ (схема Кранка-Никольсон). Заметим, что (18.2) можно трактовать как результат попеременного применения явной и неявной схем первого порядка аппроксимации, записанных на интервалах $[t^n, t^{n+1/2}], [t^{n+1/2}, t^{n+1}]$

$$\frac{u^{n+1/2}-u^n}{\tau/2}+\Lambda u^n=0,$$

$$\frac{u^{n+1}-u^{n+1/2}}{\tau/2}+\Lambda u^{n+1}=0. (18.3)$$

Исключая из уравнений (18.3) значения функции на промежуточном слое по времени (с полуцелым индексом), получим (18.2). Если $\mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$, то

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} + \Lambda^n \frac{u^{n+1} + u^n}{2} = 0 ag{18.4}$$

при этом разностный оператор также является положительным:

$$(\Lambda_n u, u) \geqslant 0,$$

а решение на следующем слое по времени может быть записано в операторном виде следующим образом:

$$u^{n+1} = (\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda^n)^{-1}(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda^n)u^n,$$

или

$$u^{n+1} = \mathbf{T}^n u^n,$$

где
$$\mathbf{T}^n = (\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda^n)^{-1}(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda^n).$$

Для доказательства устойчивости полученного разностного уравнения умножим скалярно (18.4) на $(u^n + u^{n+1})/2$, получим

$$\frac{(u^{n+1}, u^{n+1}) - (u^n, u^n)}{2\tau} + \left(\Lambda^n \frac{u^{n+1} + u^n}{2}, \frac{u^{n+1} + u^n}{2}\right) = 0$$
 (18.5)

Так как в силу положительности разностного оператора $(\Lambda^n u, u) \ge 0$, то из (18.5) следует, что $\|u^{n+1}\| \le \|u^n\|$, чем и обеспечена устойчивость схемы. Если разностный оператор Λ (пространственные разности) выбран в виде полусуммы разностных операторов на верхнем и нижнем слоях по времени $\frac{1}{2}(\Lambda^{n+1} + \Lambda^n) = \Lambda^{n+1/2}$, то схема имеет второй порядок аппроксимации по τ .

18.2. Метод расщепления первого и второго порядка точности по τ

18.2.1. Локально-одномерные схемы

Положим, что дифференциальный оператор A и соответствующий ему разностный оператор Λ можно представить в виде суммы операторов, каждый из которых включает производные лишь по одной пространственной переменной и разности лишь вдоль одного направления соответственно. Всего пространственных направлений N. Такие дифференциальные и разностные операторы будем называть локально-одномерными.

И дифференциальный, и разностный операторы записываются в виде суммы локально-одномерных:

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{A}_{i}, \Lambda = \sum_{i}^{N} \Lambda_{i}.$$

Для однородной задачи можно выписать схему расщепления по направлениям:

$$\frac{u^{n+1/N} - u^n}{\tau} + \Lambda_1 u^{n+1/N} = 0,$$

$$\frac{u^{n+2/N} - u^{n+1/N}}{\tau} + \Lambda_2 u^{n+2/N} = 0,$$

$$\dots$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+(N-1)/N}}{\tau} + \Lambda_N u^{n+1} = 0.$$

Получена система разностных уравнений, каждое из которых не аппроксимирует исходное дифференциальное, но может быть легко решено (методом прогонки вдоль соответствующего направления, если разностные операторы содержат лишь первые и вторые разности). Тем не менее, последовательно примененные друг за другом, они дают на следующем слое по времени решение с разумной точностью. Говорят, что имеет место суммарная аппроксимация — результирующий оператор послойного перехода получился аппроксимирующим. Описанный выше способ называется иногда методом дробных шагов, и уже встречался при решении многомерного уравнения теплопроводности.

Для неоднородной задачи один из возможных вариантов схемы расщепления имеет вид

$$\frac{u^{n+1/N} - u^n}{\tau} + \Lambda_1 u^{n+1/N} = 0,$$

$$\frac{u^{n+2/N} - u^{n+1/N}}{\tau} + \Lambda_2 u^{n+2/N} = 0,$$

$$\dots$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+(N-1)/N}}{\tau} + \Lambda_N u^{n+1} = f^n.$$

Возможны и другие способы учета правой части, например, введение ее во все уравнения с весовыми множителями, которые подбираются из условий наилучшей суммарной аппроксимации (минимизации ошибки аппроксимации на следующем слое по времени).

Приведенные выше схемы расщепления по направлениям абсолютно устойчивы.

18.2.2. Схемы Кранка-Никольсон

Рассмотрим обобщение схемы Кранка—Никольсон на случай многомерных уравнений с локально-одномерными операторами. Положим, как и ранее, $\Lambda = \sum_{i}^{N} \Lambda_{i}$. Если коэффициенты разностного оператора явно зависят от времени, они берутся на промежуточном временном слое $\Lambda = \Lambda(t^{n+1/2})$. Для простоты изложения рассмотрим двумерный случай.

Схему расщепления по направлениям представим в виде

$$\frac{u^{n+1/2} - u^n}{\tau} + \Lambda_1 \frac{u^{n+1/2} + u^n}{2} = 0$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+1/2}}{\tau} + \Lambda_2 \frac{u^{n+1} + u^{n+1/2}}{2} = 0,$$

а решение на следующем слое по времени в операторной форме выписывается как $u^{n+1} = \mathbf{T}^n u^n$. Для оператора послойного перехода получается следующая формула:

$$\mathbf{T}^n = (\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_2)^{-1}(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_2)(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_1)^{-1}(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_1).$$

При выполнении условия

$$\frac{\tau}{2} \left\| \Lambda_i \right\| < 1$$

схема устойчива, обладает вторым порядком аппроксимации по времени, если операторы Λ_1 , Λ_2 коммутативны, и первым — если нет.

18.2.3. Общая формулировка методов расщепления

Заменим локально-одномерные дифференциальные операторы A_i разностными операторами на каждом шаге по времени $t_n \leqslant t \leqslant t_{n+1}$.

Представим схему расщепления в следующем общем виде:

$$\frac{u^{n+1/N}-u^n}{\tau} + \Lambda_{10}u^n + \Lambda_{11}u^{n+1/N} = 0,$$

$$\frac{u^{n+2/N}-u^{n+1/N}}{\tau} + \Lambda_{20}u^n + \Lambda_{21}u^{n+1/N} + \Lambda_{22}u^{n+2/N} = 0,$$
...
$$\frac{u^{n+1}-u^{n+\frac{N-1}{N}}}{\tau} + \Lambda_{N0}u^n + \Lambda_{N1}u^{n+1/2} + \ldots + \Lambda_{NN}u^{n+1} = 0.$$

Условие устойчивости такой схемы расщепления будет

$$||C_iC_{i-1}\dots C_1|| \leq 1+c\tau, \quad c=\text{const},$$

где
$$C_i = (\mathbf{E} + au \Lambda_{ii})^{-1} (\mathbf{E} + au \Lambda_{i,i-1}), i = 1,2,\ldots,N$$

Двухслойная схема расщепления с весовыми коэффициентами представлена в виде

$$\frac{u^{n+1/N} - u^n}{\tau} + \Lambda_1 \left[(1 - \sigma)u^n + \sigma u^{n+1/N} \right] = 0,$$

$$\frac{u^{n+2/N} - u^{n+1/N}}{\tau} + \Lambda_2 \left[(1 - \sigma)u^{n+1/N} + \sigma u^{n+2/N} \right] = 0,$$
...
$$\frac{u^{n+1} - u^{n+\frac{N-1}{N}}}{\tau} + \Lambda_N \left[(1 - \sigma)u^{n+\frac{N-1}{N}} + \sigma u^{n+1} \right] = 0.$$

Если в этой схеме расщепления положить веса верхнего и нижнего слоев по времени равными, $\gamma=0,5$, то в случае коммутирующих операторов Λ_i (каждый такой разностный оператор аппроксимирует со вторым порядком соответствующий локально-одномерный дифференциальный оператор) схема будет иметь второй порядок аппроксимации и по времени. Если при этом каждый оператор $\Lambda_i \geqslant 0$, то схема будет абсолютно устойчивой.

18.2.4. Схемы расщепления для уравнения теплопроводности

Рассматриваем нестационарное уравнение теплопроводности

$$rac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0, t \in \Omega_t, \{x, y, z\} \in \Omega.$$

Здесь оператор Лапласа определен как $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$. Его также можно записать в виде суммы трех локально-одномерных операторов $\mathbf{A} = \mathbf{A}_x + \mathbf{A}_y + \mathbf{A}_z$. Соответствующие разностные операторы будут $\Lambda = \Lambda_{xx} + \Lambda_{yy} + \Lambda_{zz}$, где $\Lambda_{xx} = \frac{u_{m-1,jk} - 2u_{mjk} + u_{m+1,jk}}{h_x^2}$ аналогично определяются операторы вычисления второй разностной производной и по остальным направлениям Λ_{yy} , Λ_{zz}

Локально-одномерная схема для уравнения теплопроводности будет

$$\frac{u^{n+1/3} - u^n}{\tau} + \Lambda_{xx}u^{n+1/3} = 0,$$

$$\frac{u^{n+2/3} - u^{n+1/3}}{\tau} + \Lambda_{yy}u^{n+2/3} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+2/3}}{\tau} + \Lambda_{zz}u^{n+1} = 0.$$

Для повышения порядка аппроксимации можно использовать схему с весами

$$\frac{u^{n+1/3} - u^n}{\tau} + \Lambda_{xx} \left[(1 - \sigma)u^n + \sigma u^{n+1/3} \right] = 0,$$

$$\frac{u^{n+2/3} - u^{n+1/3}}{\tau} + \Lambda_{yy} \left[(1 - \sigma)u^{n+1/3} + \sigma u^{n+2/3} \right] = 0,$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+2/3}}{\tau} + \Lambda_{zz} \left[(1 - \sigma)u^{n+2/3} + \sigma u^{n+1} \right] = 0.$$

18.3. Методы двуциклического покомпонентного расщепления

Для этих методов отсутствует требование коммутативности операторов Λ_i .

Будем рассматривать численное решение (18.1) не на одном шаге по времени, отрезке $[t^n, t^{n+1}]$, а на двух последовательных шагах $[t^{n-1}, t^{n+1}]$. Пусть теперь разностные локально-одномерные операторы зависят явно от времени, тогда они определены в середине отрезка $\Lambda_i = \Lambda_i(t^n)$. Запишем схему расщепления:

$$\frac{u^{n-1/2} - u^{n-1}}{\tau} + \Lambda_1 \frac{u^{n-1/2} + u^{n-1}}{2} = 0,$$

$$\frac{u^n - u^{n-1/2}}{\tau} + \Lambda_2 \frac{u^n + u^{n-1/2}}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1/2} - u^n}{\tau} + \Lambda_2 \frac{u^{n+1/2} - u^n}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+1/2}}{\tau} + \Lambda_1 \frac{u^{n+1} - u^{n+1/2}}{2} = 0.$$
(18.6)

В операторной форме этот метод записывается как $u^{n+1} = \mathbf{T}^n u^{n-1}$, где введено обозначение

$$\mathbf{T}^{n} = \left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)^{-1} \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right) \left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right)^{-1} \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right) \times \left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right)^{-1} \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right) \left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)^{-1} \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right) = \mathbf{E} - 2\tau\Lambda + \frac{(2\tau)^{2}}{2}(\Lambda)^{2} + \dots$$

Если локально-одномерные операторы положительны $\mathbf{A}_i(t) > 0$, то при достаточной гладкости решения и элементов матриц $\mathbf{A}_i(t)$ схема (18.6) абсолютно устойчива и аппроксимирует (18.1) со вторым порядком.

Для неоднородного дифференциального уравнения $\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{A}u = f$ разностная аппроксимация метода расщепления может быть представлена в виде

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n-1/2} = \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n-1},$$

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right)(u^{n} - \tau f^{n}) = \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right)u^{n-1/2},$$

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right)u^{n+1/2} = \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right)(u^{n} + \tau f^{n}),$$

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n+1} = \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n+1/2},$$

где $f^n = f(t_n)$.

В операторной форме записи решение неоднородной задачи имеет вид: $u^{n+1} = \mathbf{T}^n u^{n-1} + 2\tau \mathbf{T}_1^n \mathbf{T}_2^n f^n$, где введены обозначения $\mathbf{T}^n = \mathbf{T}_1^n \mathbf{T}_2^n \mathbf{T}_1^n \mathbf{T}_1^n \mathbf{T}_1^n = \left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2} \Lambda_i^n\right)^{-1} \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2} \Lambda_i^n\right)$.

Представим разностную аппроксимацию неоднородного дифференциального уравнения с помощью последовательного применения операторов $\Lambda_1, \ldots, \Lambda_N, \Lambda_N, \ldots, \Lambda_1$:

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n-\frac{N-1}{N}} = \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n-1},$$

$$\dots$$

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{N}\right)(u^{n} - \tau f^{n}) = \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{N}\right)u^{n-1/N},$$

$$\dots$$

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{N}\right)u^{n+1/N} = \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{N}\right)(u^{n} + \tau f^{n}),$$

$$\dots$$

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n+1} = \left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n+\frac{N-1}{N}}.$$

Рассмотрим примеры использования метода двуциклического расщепления для некоторых задач математической физики.

Пример 1. Трехмерное нестационарное уравнение диффузии, область интегрирования — параллелепипед. Полагаем, что в вертикальном направлении (ось 0z) коэффициент диффузии в вертикальной плоскости γ зависит от координаты, что характерно для задач геофизики, μ — коэффициент диффузии в горизонтальной плоскости. Задача может быть представлена в виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \gamma \frac{\partial u}{\partial z} + \mu \Delta u + f.$$

Сведем решение рассматриваемой трехмерной задачи к последовательному решению трех одномерных задач. Первая задача имеет вид

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \gamma \frac{\partial u_1}{\partial z} + f,$$

она описывает диффузию в вертикальной плоскости. Вторую и третью задачи запишем

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}, \frac{\partial u_3}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2}.$$

Теперь рассмотрим разностную аппроксимацию исходного дифференциального уравнения

$$rac{\partial u}{\partial t} + (\Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3)u = f$$
, где
$$\Lambda_1 u = -rac{\mu}{h_x^2}(u_{m,j,k+1} - 2u_{mjk} + u_{m,j,k-1}),$$

$$\Lambda_2 u = -rac{\mu}{h_y^2}(u_{m,j-1,k} - 2u_{mjk} + u_{m,j+1,k}),$$

$$\Lambda_3 u = rac{1}{h_z} \left[-rac{\gamma_{m+1/2,jk}}{h_z}(u_{m+1,jk} - u_{mjk}) + rac{\gamma_{m-1/2}}{h_z}(u_{mjk} - u_{m-1,jk})
ight].$$

Разностная схема двуциклического покомпонентного расщепления приобретает вид

$$\frac{u^{n+1/6} - u^n}{\tau} + \Lambda_1 \frac{u^{n+1/6} + u^n}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+2/6} - u^{n+1/6}}{\tau} + \Lambda_2 \frac{u^{n+2/6} + u^{n+1/6}}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+3/6} - u^{n+2/6}}{\tau} + \Lambda_3 \frac{u^{n+3/6} + u^{n+2/6}}{2} = \frac{f^{n+1/2}}{2},$$

$$\frac{u^{n+4/6} - u^{n+3/6}}{\tau} + \Lambda_3 \frac{u^{n+4/6} + u^{n+3/6}}{2} = \frac{f^{n+1/2}}{2},$$

$$\frac{u^{n+5/6} - u^{n+4/6}}{\tau} + \Lambda_2 \frac{u^{n+5/6} + u^{n+4/6}}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+5/6}}{\tau} + \Lambda_1 \frac{u^{n+1} + u^{n+5/6}}{2} = 0.$$

Пример 2. Сопряженное нестационарное уравнение переноса и диффузии

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2 + \mathbf{A}_3)u = f,$$

где операторы определены как

$$\mathbf{A}_1 = \frac{\partial(v_1 u)}{\partial x} - \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad \mathbf{A}_2 = \frac{\partial(v_2 u)}{\partial y} - \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad \mathbf{A}_3 = \frac{\partial(v_3 u)}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \gamma \frac{\partial u}{\partial z} + \sigma u.$$

Здесь v_1, v_2, v_3 — компоненты вектора скорости, u — концентрация субстанции, σ — коэффициент поглощения субстанции внешней средой, $\sigma > 0$.

Соответствующую схему расщепления представим в виде

$$\frac{u^{n+1/6} - u^n}{\tau} + \Lambda_1 \frac{u^{n+1/6} + u^n}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+2/6} - u^{n+1/6}}{\tau} + \Lambda_2 \frac{u^{n+2/6} + u^{n+1/6}}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+3/6} - u^{n+2/6}}{\tau} + \Lambda_3 \frac{u^{n+3/6} + u^{n+2/6}}{2} = \frac{f^{n+1/2}}{2},$$

$$\frac{u^{n+4/6} - u^{n+3/6}}{\tau} + \Lambda_3 \frac{u^{n+4/6} + u^{n+3/6}}{2} = \frac{f^{n+1/2}}{2},$$

$$\frac{u^{n+5/6} - u^{n+4/6}}{\tau} + \Lambda_2 \frac{u^{n+5/6} + u^{n+4/6}}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+5/6}}{\tau} + \Lambda_1 \frac{u^{n+1} + u^{n+5/6}}{2} = 0,$$

где разностные операторы аппроксимируют соответствующие локальноодномерные дифференциальные операторы. Так для рассматриваемой задачи

$$\begin{split} \Lambda_1 u &= -\frac{\mu}{h_x^2} (u_{m+1,jk} - 2u_{mjk} + u_{m-1j,k}) + \frac{(v_1 u)_{m+1,jk} - (v_1 u)_{m-1,jk}}{2h_x}, \\ \Lambda_2 u &= -\frac{\mu}{h_y^2} (u_{m,j+1,k} - 2u_{mjk} + u_{m,j-1,k}) + \frac{(v_2 u)_{m,j+1,k} - (v_2 u)_{m,j-1,k}}{2h_y}, \\ \Lambda_3 u &= \frac{1}{h_z} \left[-\frac{\gamma_{m+1/2,jk}}{h_z} (u_{m+1,jk} - u_{mjk}) + \frac{\gamma_{m-1/2}}{h} (u_{mjk} - u_{m-1,jk}) \right] + \\ &+ \frac{(v_3 u)_{m,j,k+1} - (v_3 u)_{m,j,k-1}}{2h_z} + \sigma u_{mjk}. \end{split}$$

Отметим, что в рассматриваемой задаче на каждом этапе может быть проведено расщепление и по физическим процессам. Для простоты рассмотрим двухмерное уравнение конвекции-диффузии

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial (v_1, u)}{\partial x} + \frac{\partial (v_2, u)}{\partial y} - \mu \Delta u - \sigma u = f,$$

в котором компоненты скорости движения среды v_1, v_2 удовлетворяют уравнению неразрывности:

$$\frac{\partial v_1}{\partial x} + \frac{\partial v_2}{\partial y} = 0.$$

Первый этап расщепления задачи по физическим процессам связан с переносом, на нем решается разностный аналог уравнения

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{\partial (v_1, u)}{\partial x} + \frac{\partial (v_2, u)}{\partial y} = 0.$$

Второй этап расщепления описывает процессы диффузии и поглощения субстанций

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} - \mu \Delta u + \sigma u_2 = f.$$

Пример 3. *Расщепление по физическим процессам* системы уравнений газовой динамики (метод крупных частиц).

Система

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho u_1)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} u_1) + \frac{\partial P}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho u_2)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} u_2) + \frac{\partial P}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho e \mathbf{v}) + \operatorname{div}(P \mathbf{v}) = 0,$$

$$P = P(\rho, \varepsilon), e = \varepsilon + \frac{u_1^2 + u_2^2}{2},$$

 u_1, u_2 — компоненты вектора скорости v, P — давление газа, ρ — плотность, ε — внутренняя энергия.

Первый (Эйлеров) этап. Измеряются лишь величины, относящиеся к ячейке в целом, а жидкость внутри каждой ячейки сетки считается моментально замороженной. Расчет производится по формулам, аппроксимирующим уравнения

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0,$$

$$\rho \frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \rho \frac{\partial u_2}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial y} = 0,$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(Pv) = 0.$$

На втором (Лагранжевом) этапе происходит движение газа массы через границы эйлеровых ячеек и перераспределение массы, импульса, энергии по пространству; определяются поля параметров течения газа. Аппроксимируется система уравнений

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho u_1)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u_1 \mathbf{v}) = 0, \frac{\partial (\rho u_2)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u_2 \mathbf{v}) = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho e \mathbf{v}) = 0.$$

18.4. Методы расщепления с факторизацией оператора

18.4.1. Факторизованная схема расщепления

Пусть для решения дифференциальной задачи

$$\mathbf{B}\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{A}u = f, u(t_0) = u_0$$

используется разностная схема $\mathbf{B}u^{n+1}=F^n$, где $F^n=(\mathbf{B}-\tau\mathbf{A})u^n+\tau f^n$, $n=0,1,\ldots$

Пусть для вычисления F^n затрачивается O(N) действий, число арифметических операций пропорционально числу узлов сетки N. Такие разностные операторы называются экономичными.

Пусть $\mathbf{B_i}$ $(i=1,2,\ldots,N)$ — экономичные разностные операторы, такие, что $\mathbf{B_i}v=F$.

Назовем схему *разностной схемой с факторизованным оператором* В, если возможно его представление в виде

$$\mathbf{B}=\mathbf{B}_1\mathbf{B}_2\ldots\mathbf{B}_N.$$

Эта схема будет также экономичной, так как для решения разностного уравнения по-прежнему потребуется O(N) действий. В самом деле, решение уравнения

$$\mathbf{B}_1\mathbf{B}_2\dots\mathbf{B}_Nu^{n+1}=F^n$$

может быть найдено в результате последовательного решения р уравнений

$$\mathbf{B}_1 u_1 = F^n,$$

$$\mathbf{B}_2 u_2 = u_1,$$

$$\mathbf{B}_3 u_3 = u_2,$$

٠ . .

$$\mathbf{B}_i u_i = u_{i-1},$$

здесь $i=2,3,\ldots,N$. Тогда $u^{n+1}=u_N$. В записи задачи введены обозначения $u_1=u^{n+1/N},\ldots,u_i=u^{n+i/N},\ldots,u_{N-1}=u^{n+\frac{N-1}{N}}$ — промежуточные значения.

Схемы с факторизованным оператором иногда называются также факторизованными схемами. Устойчивая схема с факторизованным оператором \mathbf{B} , которая представляет собой произведение конечного числа операторов $\mathbf{B}_1, \ldots, \mathbf{B}_N$, является экономичной схемой.

Пример. Метод переменных направлений (продольно-поперечная схема). Приведем запись схемы для решения линейного двумерного уравнения теплопроводности. Расчетные формулы есть

$$\frac{u^{n+1/2}-u^n}{\frac{1}{2}\tau}-(\Lambda_1 u^{n+1/2}+\Lambda_2 u^n)=f^n,$$

$$\frac{u^{n+1}-u^{n+1/2}}{\frac{1}{2}\tau}-(\Lambda_1 u^{n+1/2}+\Lambda_2 u^{n+1})=f^n.$$

Тогда, исключая $u^{n+1/2}$, получим в операторной форме записи

$$\left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_1\right)\left(\mathbf{E} - \frac{\tau}{2}\Lambda_2\right)u^{n+1} = \left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_1\right)\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_2\right)u^n,$$

или $\mathbf{B}_1\mathbf{B}_2u^{n+1}=F^n$, где $\mathbf{B}_1=\mathbf{E}-\frac{\tau}{2}\Lambda_1$, $\mathbf{B}_2=\mathbf{E}-\frac{\tau}{2}\Lambda_2$, $F^n=(\mathbf{E}+\frac{\tau}{2}\Lambda_1)\left(\mathbf{E}+\frac{\tau}{2}\Lambda_2\right)u^n$.

Разностная схема может быть представлена в виде факторизованный схемы расщепления:

$$\mathbf{B}_1 u_1 = F^n, \mathbf{B}_2 u^{n+1} = u_1.$$

18.4.2. Неявная схема расщепления с приближенной факторизацией

Рассмотрим неявную разностную схему

$$\frac{u^{n+1}-u^n}{\tau} + \Lambda u^{n+1} = 0, n = 0, 1, \dots, \Lambda = \sum_{i=1}^{N} \Lambda_i, \Lambda_i > 0.$$
 (18.7)

Представим разностную схему (18.7) в виде

$$(\mathbf{E} + \tau \Lambda)u^{n+1} = u^n. \tag{18.8}$$

или

Факторизуем разностную схему (18.8) приближенно с точностью до членов порядка $O(\tau^2)$. Для этого заменим в (18.8) оператор ${\bf E} + \tau \Lambda$ на факторизованный

$$(\mathbf{E} + \tau \Lambda_1)(\mathbf{E} + \tau \Lambda_2) \dots (\mathbf{E} + \tau \Lambda_N) = \mathbf{E} + \tau \Lambda + \tau^2 \mathbf{R},$$

где введено обозначение

$$\mathbf{R} = \sum_{i < j} \Lambda_i \Lambda_j + \tau \sum_{i < j < k} \Lambda_i \Lambda_j \Lambda_k + \ldots + \tau^{n-2} \Lambda_1 \ldots \Lambda_n.$$

Врезультате приходим к неявной схеме с приближенной факторизацией

$$\mathbf{B}u^{n+1} = u^n, \mathbf{B} = \prod_{i=1}^n \mathbf{B}_i, \mathbf{B}_i = \mathbf{E} + \tau \Lambda_i,$$
 $(\mathbf{E} + \tau \Lambda_1)u^{n+1/N} = u^n,$
 $(\mathbf{E} + \tau \Lambda_2)u^{n+2/N} = u^{n+1/N},$
 \dots
 $(\mathbf{E} + \tau \Lambda_N)u^{n+1} = u^{n+\frac{N-1}{N}}.$

Эта схема абсолютно устойчива, имеет первый порядок аппроксимации.

18.4.3. Метод «предиктор-корректор»

Основная идея методов типа «предиктор-корректор» заключается в следующем. На каждом отрезке $[t^n, t^{n+1}]$ задача решается в два приема: сначала по схеме первого порядка аппроксимации и со значительным запасом устойчивости находится решение в момент времени $t^{n+1/2} = t^n + \tau/2 - npedukmop$. После этого на втором этапе расписывается исходное уравнение по схеме более высокого порядка аппроксимации (чаще всего, второго) — корректор. Основная идея семейств таких методов близка к идее построения методов типа Рунге-Кутты для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Представим эту схему как следующую схему расщепления:

$$\frac{u^{n+1/4} - u^n}{\tau/2} + \Lambda_1 u^{n+1/4} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1/2} - u^{n+1/4}}{\tau/2} + \Lambda_2 u^{n+1/2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1/2} - u^n}{\tau} + \Lambda u^{n+1/2} = 0.$$

Если в этой схеме расщепления исключить $u^{n+1/4}$, то получим последовательность расчетных формул

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_1\right) \left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_2\right) u^{n+1/2} = \varphi^n,$$

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} + \Lambda u^{n+1/2} = 0,$$

далее, исключив, $\Lambda u^{n+1/2}$, получим

$$\frac{u^{n+1}-u^n}{\tau}+\Lambda\left(\mathbf{E}+\frac{\tau}{2}\Lambda_2\right)^{-1}\left(\mathbf{E}+\frac{\tau}{2}\Lambda_1\right)^{-1}u^n=0.$$

Если для разностных операторов выполнены условия $\frac{\tau}{2} \| \Lambda_i \| < 1$, $\Lambda_1 \geqslant 0$, $\Lambda_2 \geqslant 0$, а коэффициенты разностной схемы явно не зависят от времени, то при достаточной гладкости решения дифференциальной задачи разностная схема абсолютно устойчива и аппроксимирует исходную задачу со вторым порядком.

Далее рассмотрим случай, когда оператор Λ представляется в виде суммы операторов Λ_i : $\Lambda = \sum_i \Lambda_i$. Пусть все эти разностные операторы положительны. Метод «предиктор-корректор» можно записать в виде последовательности расчетных формул

$$\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{1}\right)u^{n+1/2N} = u^{n} + \frac{\tau}{2}f^{n+1/2},$$
 $\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{2}\right)u^{n+2/2N} = u^{n+1/2N},$
 \dots
 $\left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2}\Lambda_{N}\right)u^{n+1/2} = u^{n+\frac{N}{2N}},$
 $\frac{u^{n+1} - u^{n}}{\tau} + \Lambda u^{n+1/2} = f^{n+1/2}.$

Эта последовательность после исключения промежуточных этапов сводится к одному разностному уравнению

$$\frac{u^{n+1}-u^n}{\tau} + \Lambda \prod_{i=N}^{1} \left(\mathbf{E} + \frac{\tau}{2} \Lambda_i \right)^{-1} (u^n + \frac{\tau}{2} f^{n+1/2}) = f^{n+1/2}.$$

Приведем пример построения такой схемы. Для нестационарного трехмерного уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} = 0$$

получим следующую разностную схему типа «предиктор-корректор»

$$\frac{u^{n+1/6} - u^n}{\tau/2} + \Lambda_1 u^{n+1/6} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1/3} - u^{n+1/6}}{\tau/2} + \Lambda_2 u^{n+1/3} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1/2} - u^{n+1/3}}{\tau/2} + \Lambda_3 u^{n+1/2} = 0,$$

$$\frac{u^{n+1/2} - u^n}{\tau} + \Lambda u^{n+1/2} = 0.$$

Далее, исключая промежуточные слои, получим схему, записанную в каноническом виде

$$\begin{split} \frac{u^{n+1}-u^n}{\tau} + \Lambda \frac{u^{n+1}+u^n}{2} + \frac{\tau^2}{4} (\Lambda_1 \Lambda_2 + \Lambda_1 \Lambda_3 + \Lambda_2 \Lambda_3) \frac{u^{n+1}-u^n}{\tau} + \\ + \frac{\tau^3}{8} \Lambda_1 \Lambda_2 \Lambda_3 \frac{u^{n+1}-u^n}{\tau} = 0. \end{split}$$

Схема абсолютно устойчива (для коммугирующих операторов), имеет второй порядок аппроксимации по τ и h_i . Конечно, при практическом решении задач на компьютере используется именно последовательность разностных операторов. Канонический вид схемы удобен для ее теоретического исследования.

Литература

- [1] Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М.: Физико-математическая литература, 1994. 442 с.
- [2] Марчук Г.И. Методы расщепления. М.: Наука, 1988. 263 с.
- [3] Ковеня В.М., Яненко Н.Н. Методы расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука, 1981. 263 с.