

УДК: 519.6

Разностные схемы для уравнения переноса, удовлетворяющие обобщенному условию аппроксимации

А. И. Лобанов

Московский физико-технический институт (государственный университет),
141701, г. Долгопрудный, Московская обл., Институтский пер., д. 9

E-mail: alexey@crec.mipt.ru

Получено 28.01.2018, после доработки — 09.03.2018.

Принято к публикации 14.03.2018.

Строится семейство явных разностных схем на пятиточечном шаблоне для численного решения линейного уравнения переноса. Анализ свойств разностных схем проводится в пространстве неопределенных коэффициентов. Такие пространства впервые были введены в рассмотрение А. С. Холодовым. Для исследования свойств разностных схем ставилась задача линейного программирования. В качестве целевой функции обычно рассматривался коэффициент при главном члене невязки. Для построения монотонных разностных схем ставилась задача оптимизации с ограничениями типа неравенств. Ограниченность такого подхода становится ясной с учетом того, что аппроксимация разностной схемы определяется лишь на классических (гладких) решениях дифференциальной задачи.

В соответствие разностной схеме ставится некоторый функционал, определяющий свойства разностной схемы. Функционал должен быть линейным по коэффициентам схемы. Возможно, что функционал зависит от сеточной функции — решения разностной задачи или проекции на сетку решения дифференциальной задачи. Если первые члены разложения в ряд Тейлора этого функционала по сеточным параметрам совпадут с условиями классической аппроксимации, такой функционал будем называть обобщенным условием аппроксимации. В статье показано, что такие функционалы существуют. Для линейного уравнения с постоянными коэффициентами построение такого функционала возможно и для обобщенного (негладкого) решения дифференциальной задачи.

Построение разностной схемы с заданными свойствами тогда опирается на решение задачи поиска минимума функционала.

Построены семейства функционалов как для гладких решений исходной дифференциальной задачи, так и для обобщенных решений. Построены новые разностные схемы, основанные на анализе функционалов методами линейного программирования. При этом использован аппарат исследования пары двойственных задач линейного программирования. Найдена оптимальная монотонная разностная схема, обладающая первым порядком аппроксимации на гладком решении. Обсуждается возможность применения построенных новых схем для построения гибридных разностных схем повышенного порядка аппроксимации на гладких решениях.

Приводится пример численной реализации простейшей разностной схемы с обобщенной аппроксимацией.

Ключевые слова: разностная схема, уравнение переноса, классическое решение, обобщенное решение, монотонность, задача линейного программирования, двойственная задача, дополняющая нежесткость

UDC: 519.6

Finite difference schemes for linear advection equation solving under generalized approximation condition

A. I. Lobanov

Moscow Institute of Physics and Technology (state university)
9 Institutskii line, Dolgoprudnyi, Moscow region, 141701, Russia

E-mail: alexey@crec.mipt.ru

Received 28.01.2018, after completion — 09.03.2018.

Accepted for publication 14.03.2018.

A set of implicit difference schemes on the five-pointwise stencil is under construction. The analysis of properties of difference schemes is carried out in a space of undetermined coefficients. The spaces were introduced for the first time by A. S. Kholodov. Usually for properties of difference schemes investigation the problem of the linear programming was constructed. The coefficient at the main term of a discrepancy was considered as the target function. The optimization task with inequalities type restrictions was considered for construction of the monotonic difference schemes. The limitation of such an approach becomes clear taking into account that approximation of the difference scheme is defined only on the classical (smooth) solutions of partial differential equations.

The functional which minimum will be found put in compliance to the difference scheme. The functional must be the linear on the difference schemes coefficients. It is possible that the functional depends on net function – the solution of a difference task or a grid projection of the differential problem solution. If the initial terms of the functional expansion in a Taylor series on grid parameters are equal to conditions of classical approximation, we will call that the functional will be the generalized condition of approximation. It is shown that such functionals exist. For the simple linear partial differential equation with constant coefficients construction of the functional is possible also for the generalized (non-smooth) solution of a differential problem.

Families of functionals both for smooth solutions of an initial differential problem and for the generalized solution are constructed. The new difference schemes based on the analysis of the functionals by linear programming methods are constructed. At the same time the research of couple of self-dual problems of the linear programming is used. The optimum monotonic difference scheme possessing the first order of approximation on the smooth solution of differential problem is found. The possibility of application of the new schemes for creation of hybrid difference methods of the raised approximation order on smooth solutions is discussed.

The example of numerical implementation of the simplest difference scheme with the generalized approximation is given.

Keywords: the difference scheme, the transfer equation, the classical solution, the generalized solution, monotony, problem of the linear programming, the dual task, supplementing slackness

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2018, vol. 10, no. 2, pp. 181–193 (Russian).

1. Введение

Во многих прикладных задачах возникает необходимость численного решения уравнений или систем уравнений в частных производных гиперболического типа. Так как задачи характеризуются разнообразием постановок, а сами системы уравнений могут иметь не только гладкое (классическое) решение, но и решение обобщенное (слабое), то существует большое количество численных методов решения задач такого типа. Обзор некоторых численных методов приведен в книге [Куликовский и др., 2006].

Для линейных дифференциальных уравнений в частных производных, обладающим классическим решением, установлена теорема, по которой из того, что разностная задача является устойчивой и аппроксимирует дифференциальную на ее классическом решении, следует сходимость решения разностной задачи к решению дифференциальной [Рябенкий, Филиппов, 1956]. Практически одновременно была установлена аналогичная теорема [Lax, Richtmyer, 1956], где сходимость является следствием «хорошей согласованности» (корректности) разностной задачи и устойчивости. В этих теоремах для выполнения условий аппроксимации (корректности) требуется непрерывная дифференцируемость решения дифференциальной задачи.

При решении задач для уравнений гиперболического типа с негладкими решениями встает проблема построения разностных схем, обладающих высоким порядком аппроксимации на гладких решениях и не приводящих к появлению паразитных осцилляций на решении разрывном. Такие схемы принято называть монотонными. Известно [Годунов, 1959], что для модельного линейного уравнения переноса не существует линейных разностных схем, обладающих одновременно свойством монотонности и порядком аппроксимации выше первого.

В 1962 году была предложена разностная схема [Федоренко, 1962], названная гибридной. В зависимости от локальных свойств численного решения при решении гиперболического уравнения происходит переход со схемы высокого порядка аппроксимации для «гладких» участков на схему формально первого порядка в окрестности разрывов.

Высокая эффективность решения задач для уравнений гиперболического типа была достигнута при применении сеточно-характеристических численных методов [Магомедов, Холодов, 2017]. Одной из особенностей работы по построению и анализу сеточно-характеристических численных методов является анализ свойств методов в пространстве неопределенных коэффициентов. Это пространство впервые было введено в рассмотрение в [Холодов, 1978]. В работе были исследованы монотонные разностные схемы (или схемы с положительной аппроксимацией) для модельного линейного уравнения переноса. При построении границ области монотонности были использованы методы линейного программирования. В качестве целевого функционала в [Холодов, 1978] рассматривался коэффициент при главном члене невязки (коэффициент при производной второго порядка, входящей в выражение для невязки) на гладком решении.

Технику линейного программирования и поиска задач минимума линейного функционала можно использовать и для других функционалов, линейных относительно коэффициентов разностной схемы. Ниже мы покажем, что при разумных способах задания функционала можно отказаться от требования непрерывной дифференцируемости решения исходной (дифференциальной) задачи, а стало быть, возможно расширить технику анализа схем в пространстве неопределенных коэффициентов и на задачи со слабыми решениями.

2. Постановка задачи для модельного уравнения

Рассмотрим модельную задачу Коши для линейного однородного уравнения переноса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (1)$$

Начальное условие для задачи: $u(x,0) = g(x)$. Для определенности считаем, что $a = \text{const} > 0$. Для построения разностных схем решения задачи Коши используем метод сеток. Будем следовать [Магомедов, Холодов, 2017]. Рассмотрим множество разностных схем на явном двухслойном пятиточечном шаблоне, включающем в себя одну точку на расчетном слое по времени и четыре точки на предыдущем слое:

$$u_m^{n+1} = \sum_{\mu=-2}^1 \alpha_\mu u_{m+\mu}^n. \quad (2)$$

Считаем, что число Куранта $\sigma = \frac{a\tau}{h}$ — безразмерный параметр, связывающий шаги сетки и скорость распространения возмущений в дифференциальной задаче, — фиксированная величина. Необходимое условие первого порядка аппроксимации $\sum_{\mu=-2}^1 \alpha_\mu = 1$ играет роль условия нормировки.

В соответствие разностной схеме (2) будем ставить функционал

$$F = F(\alpha_\mu, \sigma, h, u_m^{n+1}, u_{m+\mu}^n). \quad (3)$$

Функционал (3) является линейным по коэффициентам разностной схемы α_μ .

Определение. Будем говорить, что функционал (3) является **обобщенным условием аппроксимации**, если при разложении в ряд Тейлора по сеточному параметру h в окрестности нуля коэффициенты при степенях h совпадают с условиями аппроксимации разностной задачи (2) на гладком (классическом) решении (1).

Здесь и далее мы считаем, что шаг сетки по времени может быть выражен через пространственный шаг и число Куранта. Таким образом, в записи функционала (3) присутствует только один сеточный параметр. В этом случае если разложение (3) по степеням h начинается со степени $p + 1$, то (2) аппроксимирует (1) на ее гладком решении с порядком p .

Рассматривается задача построения функционала обобщенной аппроксимации и построения разностных схем, удовлетворяющих условию обобщенной аппроксимации, в том числе и для обобщенных решений (1). На гладких (классических) решениях обобщенная аппроксимация переходит в обычные «классические» условия аппроксимации [Годунов, Рябенский, 1977; Магомедов, Холодов, 2017]. Но определение обобщенной аппроксимации имеет смысл на более широком классе решений. Действительно, в рассматриваемом ниже примере для существования обобщенной аппроксимации достаточно только существования преобразования Фурье сеточной проекции начальных условий (и сеточной проекции точного решения дифференциальной задачи). Существование преобразования Фурье накладывает существенно меньше требований на гладкость решения.

3. Пример условия обобщенной аппроксимации для гладких решений

Покажем, что кроме линейного по коэффициентам схемы функционала — множителя при производной в главном члене невязки — могут существовать и другие линейные по коэффициентам схемы функционалы. Решение оптимизационных задач для таких функционалов приведет к появлению новых классов разностных схем.

Пусть начальные условия задачи Коши для уравнения (1) есть $u(x,0) = \exp(x)$. Тогда точное решение задачи имеет вид $u(x,t) = \exp(x - at)$. Подставим сеточную проекцию этого решения в схему (2) и вычислим невязку сеточного представления:

$$R = u_m^{n+1} - \sum_{\mu} \alpha_\mu u_{m+\mu}^n = \exp((m - n\sigma)h) \left\{ e^{-\sigma h} - \sum_{\mu} \alpha_\mu e^{u_\mu h} \right\}. \quad (4)$$

Выражение в фигурных скобках в (4) характеризует невязку при численном воспроизведении гладких решениях типа экспоненты.

Покажем, что функционал $F = e^{-\sigma h} - \sum \alpha_\mu e^{\mu h}$ является обобщенным условием аппроксимации. Действительно, раскладывая F в ряд Тейлора, получим

$$F = e^{-\sigma h} - \sum \alpha_\mu e^{\mu h} = \left[1 - \sum \alpha_\mu\right] + h\left[-\sigma - \sum \mu \alpha_\mu\right] + \frac{h^2}{2}\left[\sigma^2 - \sum \mu^2 \alpha_\mu\right] + \frac{h^3}{6}\left[-\sigma^3 - \sum \mu^3 \alpha_\mu\right] + \dots$$

Величины в квадратных скобках представляют собой условия аппроксимации соответствующего порядка на классическом решении задачи Коши [Магомедов, Холодов, 2017]. Выбранный функционал позволяет минимизировать невязку при решении типа экспоненты.

Отметим, что построение разностных схем для решения линейного уравнения переноса можно строить двумя разными способами. Первый — построение «классической» аппроксимирующей схемы. Для этого все коэффициенты разложения в ряд Тейлора приравняем к нулю, тогда получаем известные выражения для условий аппроксимации:

$$\begin{aligned} 1 - \sum \alpha_\mu &= 0, \\ -\sigma - \sum \mu \alpha_\mu &= 0, \\ &\dots \end{aligned}$$

и так далее. Первое условие определяет, что у нас в дифференциальном приближении разностной задачи отсутствуют члены порядка $O(1)$. Второе условие обеспечивает первый порядок аппроксимации, третье условие — второй порядок и так далее. Именно этот случай рассмотрен в книге [Магомедов, Холодов, 2017].

Второй способ построения приведет нас к семейству разностных схем, не встречавшихся в литературе ранее. Пусть наша схема обладает по крайней мере первым порядком на классических решениях, то есть выполнены условия

$$\begin{aligned} 1 - \sum \alpha_\mu &= 0, \\ -\sigma - \sum \mu \alpha_\mu &= 0, \end{aligned}$$

и, кроме того, выполнено точно условие $e^{-\sigma h} - \sum \alpha_\mu e^{\mu h} = 0$, то есть имеет место обобщенная аппроксимация задачи (на гладких решениях). На решении $u(x, t) = \exp(x - at)$ невязка построенной схемы будет обращаться в ноль. В этом случае для определения коэффициентов схемы мы имеем систему трех линейных алгебраических уравнений с четырьмя неизвестными (коэффициентами схемы). Один из коэффициентов мы можем оставить свободным. Пусть это коэффициент α_{-2} , тогда коэффициенты схемы есть

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{1 - e^{-h}}{e^h + e^{-h} - 2} \left(\sigma - \frac{1 - e^{-\sigma h}}{1 - e^{-h}} - \alpha_{-2} (1 - e^{-h}) \right), \\ \alpha_0 &= 1 - \sigma + \alpha_{-2} - 2\alpha_1 = \frac{1 - e^{-h}}{1 - \operatorname{ch}(h)} (1 - \sigma) + \frac{e^{-h} - e^{-\sigma h}}{1 - \operatorname{ch}(h)} + \alpha_{-2} (1 + 2e^{-h}), \\ \alpha_{-1} &= 1 - \alpha_{-2} - \alpha_0 - \alpha_1. \end{aligned}$$

Таким образом, построено семейство схем, удовлетворяющих обобщенному условию аппроксимации и обладающих порядком не менее 1 на классическом решении.

Пусть теперь начальные условия задачи Коши для уравнения (1) есть $u(x, 0) = \exp(qx)$. Здесь q — действительное число. Тогда точное решение задачи имеет вид $u(x, t) = \exp(q \cdot (x - at))$. На основе этого решения можно построить другой функционал обобщенной аппроксимации. Как нетрудно убедиться, условия равенства нулю первых членов разложения у нового функционала совпадут с условиями, полученными в предыдущем примере. Поэтому множество схем с «клас-

сической» аппроксимацией, построенных на основе рассмотрения такого функционала с параметром, совпадет с множеством схем с «классической» аппроксимацией при $q = 1$. Схема же с обобщенной аппроксимацией будет зависеть от конкретного значения параметра.

4. Численный пример

Для (1) будем рассматривать смешанную начально-краевую задачу с начальным условием

$$g(x) = \begin{cases} 0, & |x - 0.5| > 1/6, \\ 1, & |x - 0.5| \leq 1/6, \end{cases}$$

с условием периодичности $u(0, t) = u(1, t)$. Данная задача обладает только обобщенным (слабым) решением.

Начальное условие можно приблизить с помощью «экспоненциальной склейки» гладкой функцией, но тогда в нее будут включены как быстро возрастающие, так и быстро убывающие экспоненты.

Для численной реализации было выбрано семейство схем, основанных на схеме Куранта–Изаксона–Риса с коэффициентами $\alpha_1 = \alpha_{-2} = 0$, $\alpha_0 = 1 - \sigma$, $\alpha_{-1} = \sigma$. Для функционала обобщенной аппроксимации, построенного для разных экспоненциальных функций, аналог этой схемы будет иметь следующий вид: $\alpha_1 = \alpha_{-2} = 0$, $\alpha_0 = 1 - \alpha_{-1}$, $\alpha_{-1} = \frac{1 - e^{\sigma q h}}{1 - e^{q h}}$.

На рис. 1 приведены результаты расчетов по данной разностной схеме с различными значениями q . Расчеты проводились на сетке, включающей 100 расчетных узлов на отрезке $[0, 1]$. Число Куранта $\sigma = 0.5$. Результаты приведены для 400 шага по времени.

Отметим, что высказанное выше предположение о сходстве разностной схемы с аппроксимирующей в «классическом» смысле подтверждается: диссипативная ошибка одинакова для всех схем, независимо от скорости роста или убывания экспоненты q .

На рис. 1 приведены результаты расчета по схеме с $q = 2$ (сплошная линия), $q = 15$ (пунктирная линия) и $q = -15$ (штрихпунктирная линия). Отметим, что для значений $q = 2$ и $q = 1$ разность значений решений, вычисленных по предлагаемой модификации схемы и по схеме

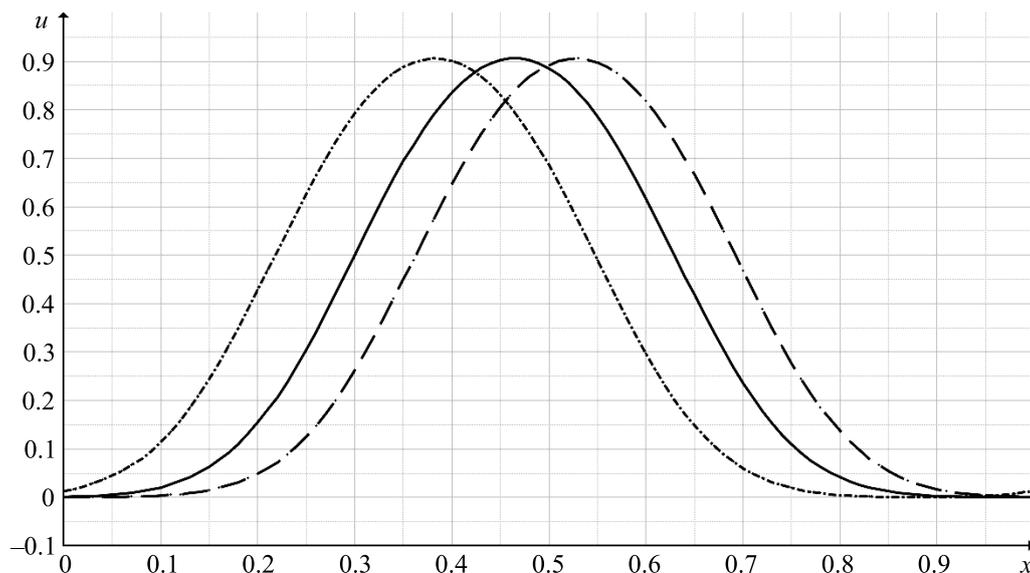


Рис. 1. Решение задачи о распространении прямоугольного импульса с периодическими граничными условиями. Рассматривался функционал со значениями $q = 2$ (сплошная линия), $q = 15$ (пунктирная линия) и $q = -15$ (штрихпунктирная линия)

Куранта–Изаксона–Риса, много меньше погрешности аппроксимации разностной схемы на гладком решении. Результаты расчетов с $|q| < 1$ практически не отличаются от результатов по «классической» схеме Куранта–Изаксона–Риса.

При увеличении q начинает проявляться дисперсионная составляющая ошибки. Численное решение по схеме с обобщенной аппроксимацией либо сильно обгоняет точное (и численное решение, полученное по аналогичной схеме с обычным условием аппроксимации) — пунктирная линия на рис. 1, соответствующая $q = 15$, либо сильно отстает — штрихпунктирная линия на рисунке для $q = -15$.

Такие свойства разностных схем можно использовать при построении схем TVD. В зависимости от локальных свойств численного решения можно использовать схему с обобщенной аппроксимацией с разными значениями q .

Более интересные результаты можно получить, конструируя функционал обобщенной аппроксимации на решениях типа комплексной экспоненты. Некоторые подходы к построению разностных схем, основанных на введении такого функционала, описаны ниже. Материал, связанный с такими схемами, является основой отдельной статьи.

5. Пример функционала обобщенной аппроксимации для негладких решений

Будем теперь рассматривать такие начальные условия, для которых определено преобразование Фурье, то есть существует интеграл

$$v(k, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) e^{ikx} dx.$$

К таким функциям относятся, например, все периодические функции или ограниченные функции, сосредоточенные на финитном носителе. Очевидно, что преобразование Фурье существует для задачи, рассмотренной выше в численном примере.

Будем рассматривать задачу Коши для (1) с условием периодичности $u(0, t) = u(X, t)$. В этом случае решение задачи есть периодическая функция (не обязательно непрерывная). Как следствие, она может быть представлена рядом Фурье по пространственной переменной.

Обозначим $v(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x, t) e^{ikx} dx$. Тогда, применив преобразование Фурье к правой и левой частям уравнения, получим обыкновенное дифференциальное уравнение для функции v (фурье-образа решения исходной задачи):

$$\frac{dv}{dt} - ikav = 0. \quad (5)$$

Его точное решение суть

$$v(k, t) = v(k, 0) e^{ikat}. \quad (6)$$

Точное решение задачи Коши для (1) получается применением к (6) обратного преобразования Фурье.

Рассмотрим теперь дискретный аналог исходной задачи. Правую часть (2) можно трактовать как линейную комбинацию функций, заданных с соответствующими сдвигами по пространственной переменной, и также применить к равенству (2) преобразование Фурье. Тогда

$$v^{n+1} = \sum_{\mu=-2}^1 \alpha_{\mu} v^n e^{-ik\mu h}. \quad (7)$$

Из (6) следует, что должно выполняться $v^{n+1} = v^n e^{ik\sigma\tau}$. В этом случае (7) можно переписать в виде

$$v^n \left[(\alpha_{-2} \cos(2kh) + \alpha_{-1} \cos(kh) + \alpha_0 + \alpha_1 \cos(kh) - \cos(k\sigma\tau)) + i \left((-\alpha_{-2} \sin(2kh) - \alpha_{-1} \sin(kh) + \alpha_1 \sin(kh) + \sin(k\sigma\tau)) \right) \right] = 0. \quad (8)$$

В силу произвольности функции v получим два условия:

$$\begin{aligned} \alpha_{-2} \cos(2kh) + \alpha_{-1} \cos(kh) + \alpha_0 + \alpha_1 \cos(kh) - \cos(k\sigma\tau) &= 0, \\ -\alpha_{-2} \sin(2kh) - \alpha_{-1} \sin(kh) + \alpha_1 \sin(kh) + \sin(k\sigma\tau) &= 0. \end{aligned}$$

Если коэффициенты линейной комбинации выбраны таким образом, что при любом значении k выполняются оба равенства и условие нормировки, то решение разностной задачи совпадает с решением дифференциальной задачи.

Такой набор коэффициентов всегда можно указать, причем не единственным способом. Но при получении расчетных формул при применении к (7) обратного преобразования Фурье в результате получаем линейную комбинацию разностных аппроксимаций сверток нашей сеточной функции на текущем слое с известными сеточными функциями. Шаблон разностной схемы при этом становится бесконечным. Формально процедура остается применимой для задачи Коши, но ее практически невозможно использовать для решения начально-краевой задачи.

С учетом фиксированного значения числа Куранта (8) можно переписать в виде

$$v^n \left[(\alpha_{-2} \cos(2kh) + \alpha_{-1} \cos(kh) + \alpha_0 + \alpha_1 \cos(kh) - \cos(k\sigma h)) + i \left((-\alpha_{-2} \sin(2kh) - \alpha_{-1} \sin(kh) + \alpha_1 \sin(kh) + \sin(k\sigma h)) \right) \right] = 0. \quad (8')$$

Действительная часть (8') будет определять диссипативные свойства разностного уравнения, а мнимая — дисперсионные свойства. Так как для устойчивых монотонных разностных схем первого порядка аппроксимации на «классических» решениях погрешность носит диссипативный характер, то потребуем, чтобы действительная часть преобразования Фурье (8') была неположительна.

Отметим также, что при переходе к сеточному представлению функции появляется гармоника с минимальной длиной волны, воспроизводимая на данной сетке. Тогда существует максимальное для данной сетки волновое число, а безразмерное волновое число kh в этом случае ограничено сверху: $kh \leq \pi/2$.

6. Оптимальная схема с обобщенной аппроксимацией без дополнительных условий

Потребуем, чтобы при некотором значении параметра k (волнового числа гармоники) скорость переноса данной гармоники совпала бы со скоростью переноса в точном решении, а диссипативная часть была бы минимальна. Тогда мы приходим к задаче линейного программирования с ограничением в виде равенства

$$-\left[\alpha_{-2} \cos(2kh) + \alpha_{-1} \cos(kh) + \alpha_0 + \alpha_1 \cos(kh) - \cos(k\sigma h) \right] \rightarrow \min \quad (9)$$

при условии

$$-\alpha_{-2} \sin(2kh) - \alpha_{-1} \sin(kh) + \alpha_1 \sin(kh) + \sin(k\sigma h) = 0.$$

Один из коэффициентов можно исключить с использованием условия нормировки $\sum_{\mu=-2}^1 \alpha_{\mu} = 1$.

Пусть $\alpha_0 = 1 - \alpha_1 - \alpha_{-1} - \alpha_{-2}$. Тогда

$$-\left[\alpha_{-2} (\cos(2kh) - 1) + \alpha_{-1} (\cos(kh) - 1) + \alpha_1 (\cos(kh) - 1) + 1 - \cos(k\sigma h) \right] \rightarrow \min.$$

Функция Лагранжа данной задачи имеет вид

$$L = -\left[\alpha_{-2} (\cos(2kh) - 1) + \alpha_{-1} (\cos(kh) - 1) + \alpha_1 (\cos(kh) - 1) + 1 - \cos(ka\tau) \right] + w(-\alpha_{-2} \sin(2kh) - \alpha_{-1} \sin(kh) + \alpha_1 \sin(kh) + \sin(\sigma kh)). \quad (10)$$

Здесь w — множитель Лагранжа.

Проверим, что функция Лагранжа является условием обобщенной аппроксимации. Потребуем, чтобы на гладких решениях разностная схема имела бы порядок аппроксимации не ниже первого. Тогда, используя разложения (10) в ряд Тейлора, приходим к условию

$$-2\alpha_{-2} - \alpha_{-1} + \alpha_1 = -\sigma.$$

Если теперь, следуя [Магомедов, Холодов, 2017], выбрать два коэффициента следующим образом:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}(1 - \sigma + \alpha_{-2} - \alpha_0),$$

$$\alpha_{-1} = \frac{1}{2}(1 + \sigma - 3\alpha_{-2} - \alpha_0),$$

то в этом случае любая пара действительных чисел определяет разностную схему по меньшей мере первого порядка аппроксимации на гладких решениях.

Ранее автором был разработан метод исследования свойств разностных схем в пространстве неопределенных коэффициентов с использованием математического аппарата двойственных задач ЛП [Лобанов, 2017]. Применим для исследования эту технику. Выясним, для каких разностных схем функция Лагранжа (10) достигает минимального значения. Выписываем двойственную задачу линейного программирования (ЛП):

$$L = \cos(ka\tau) - 1 + w\sin(\sigma kh) + \alpha_{-2}(1 - \cos(2kh) - w\sin(2kh)) + \alpha_{-1}(1 - \cos(kh) - w\sin(kh)) + \alpha_1(1 - \cos(kh) + w\sin(kh)). \quad (10')$$

Для исследования пары самодвойственных задач выпишем систему равенств — условий дополняющей нежесткости для задач ЛП. Тогда для определения точек минимума функционала (10) следует рассмотреть решения системы уравнений

$$\alpha_{-2}(1 - \cos(2kh) - w\sin(2kh)) = 0,$$

$$\alpha_{-1}(1 - \cos(kh) - w\sin(kh)) = 0,$$

$$\alpha_1(1 - \cos(kh) + w\sin(kh)) = 0,$$

$$w(-\alpha_{-2} \sin(2kh) - \alpha_{-1} \sin(kh) + \alpha_1 \sin(kh) + \sin(\sigma kh)) = 0.$$

Множитель Лагранжа w связан с весом разностной схемы в методе параметрической коррекции разностных схем [Белоцерковский и др., 1984]. Так как ограничение имеет характер равенства, то знак множителя Лагранжа может быть любым. Точками, выделяемыми системой уравнений дополняющей нежесткости, будут следующие.

1. $\alpha_{-2} = 0$, $\alpha_{-1} = 0$, $\alpha_1 = 0$, $w = 0$. Тривиальное решение, которому не соответствует ни одна коррекция разностной схемы. Точное решение разностной задачи получается с помощью обратного преобразования Фурье.

2. $\alpha_{-2} = \frac{\sin(\sigma kh)}{\sin(2kh)}$, $\alpha_{-1} = 0$, $\alpha_1 = 0$, $w = \operatorname{tg}(kh)$. Трехточечная схема с неотрицательными коэффициентами.

$$3. \alpha_{-2} = 0, \alpha_{-1} = \frac{\sin(\sigma kh)}{\sin(kh)}, \alpha_1 = 0, w = \frac{1}{2} \sin\left(\frac{kh}{2}\right). \text{ Обобщенный аналог схемы Куранта–}$$

Изаксона–Риса.

$$4. \alpha_{-2} = 0, \alpha_{-1} = 0, \alpha_1 = -\frac{\sin(\sigma kh)}{\sin(kh)}, w = -\frac{1}{2} \sin\left(\frac{kh}{2}\right). \text{ Неустойчивый явный правый угол.}$$

Эта точка не рассматривается, так как для нее нарушено условие неотрицательности коэффициентов схемы.

Непосредственной проверкой убеждаемся, что минимальное значение функционала (10) достигается в первом случае. Без каких-либо дополнительных ограничений лучше всего рассматриваемая модельная задача будет решаться при помощи преобразования Фурье.

Отметим, что в силу перехода к сетке мы представим решение в виде конечной суммы ряда Фурье. При этом возникает явление Гиббса (или эффект Гиббса), приводящий к появлению осцилляций на разрывных решениях [Жуков, 1992].

Монотонные трехточечные схемы, выделяемые случаями 2 и 3, будут допустимыми решениями, предпочтительное использование той или иной схемы определяется значением числа Куранта.

7. Оптимальная монотонная схема

Рассмотрим теперь такие разностные схемы, в которых все коэффициенты в (2) неотрицательные. Это схемы с положительной аппроксимацией [Холодов, 1978; Магомедов, Холодов, 2017]. Такие схемы обеспечивают отсутствие нефизических осцилляций в численном решении, но они обладают значительной диссипативной ошибкой. Для краткости схемы с положительной аппроксимацией будем далее называть монотонными схемами.

Пусть выполнено условие нормировки $\alpha_{-2} + \alpha_{-1} + \alpha_0 + \alpha_1 = 1$ и, кроме того, мнимая часть преобразования Фурье дискретной задачи равна мнимой части преобразования дифференциальной задачи

$$-\alpha_{-2} \sin(2kh) + (\alpha_1 - \alpha_{-1}) \sin(kh) - \sin(\sigma kh) = 0.$$

Тогда из последнего равенства

$$-2\alpha_{-2} \cos(kh) + (\alpha_1 - \alpha_{-1}) - \sin(\sigma kh) / \sin(kh) = 0.$$

Имеется два линейных по коэффициентам схемы условия, связывающие четыре коэффициента. Тогда можно выразить два коэффициента разностной схемы, оставив еще два коэффициента свободными. По аналогии с [Холодов, 1978; Магомедов, Холодов, 2017] оставим свободными коэффициенты α_0, α_{-2} :

$$\alpha_1 = 0.5(1 + \sin(\sigma kh) / \sin(kh) - \alpha_0 - \alpha_{-2}(1 - 2\cos(kh))),$$

$$\alpha_{-1} = 0.5(1 - \sin(\sigma kh) / \sin(kh) - \alpha_0 - \alpha_{-2}(1 + 2\cos(kh))).$$

В пределе при $h \rightarrow 0$ или при $k \rightarrow 0$ эти выражения для коэффициентов переходят в известные условия аппроксимации на классических решениях [Магомедов, Холодов, 2017].

Для монотонности схемы потребуем, чтобы все коэффициенты разностной схемы были неотрицательными. При минимизации функционала получим дополнительные ограничения типа неравенств. Тогда требуется найти минимум следующего функционала:

$$\begin{aligned} L = & -[\alpha_{-2} \cos(2kh) + (1 - \alpha_0 - \alpha_{-2})(\cos(kh) - 1) - \cos(\sigma kh)] - \\ & - w_1 (1 + \sin(\sigma kh) / \sin(kh) - \alpha_0 - \alpha_{-2}(1 - 2\cos(kh))) - \\ & - w_{-1} (1 - \sin(\sigma kh) / \sin(kh) - \alpha_0 - \alpha_{-2}(1 + 2\cos(kh))). \end{aligned} \quad (11)$$

При этом оба множителя Лагранжа также должны быть неотрицательными. Заметим, что (11) является четной функцией волнового числа k .

Двойственная задача к рассматриваемой будет иметь вид

$$L = \alpha_{-2} (\cos(kh) - 1 - \cos(2kh) + w_1(1 - 2\cos(kh)) + w_{-1}(1 + 2\cos(kh))) + \alpha_0 (\cos(kh) - 1 + w_1 + w_{-1}) - w_1 (1 + \sin(\sigma kh) / \sin(kh)) - w_{-1} (1 - \sin(\sigma kh) / \sin(kh)) + \cos(\sigma kh) - \cos(kh) + 1 \rightarrow \max.$$

Система уравнений дополняющей нежесткости теперь следующая:

$$\begin{aligned} w_1 (1 + \sin(\sigma kh) / \sin(kh) - \alpha_0 - \alpha_{-2}(1 - 2\cos(kh))) &= 0, \\ w_{-1} (1 - \sin(\sigma kh) / \sin(kh) - \alpha_0 - \alpha_{-2}(1 + 2\cos(kh))) &= 0, \\ \alpha_{-2} (\cos(kh) - 1 - \cos(2kh) + w_1(1 - 2\cos(kh)) + w_{-1}(1 + 2\cos(kh))) &= 0, \\ \alpha_0 (\cos(kh) - 1 + w_1 + w_{-1}) &= 0. \end{aligned}$$

Рассмотрим точки в пространстве неопределенных коэффициентов, выделенные системой дополняющей нежесткости.

1. Обобщенная схема П. Лакса: $\alpha_0 = 0$, $\alpha_{-2} = 0$, $\alpha_1 = 0.5(1 - \sin(\sigma kh) / \sin(kh))$, $\alpha_{-1} = 0.5(1 + \sin(\sigma kh) / \sin(kh))$, $w_{-1} = 0$, $w_1 = 0$.

2. Аналог схемы Куранта–Изаксона–Риса при $\alpha_{-2} = 0$, $w_1 = 0$. Для этой схемы $w_{-1} = 1 - \cos(kh)$, $\alpha_0 = 1 - \sin(\sigma kh) / \sin(kh)$, $\alpha_1 = 0$, $\alpha_{-1} = \sin(\sigma kh) / \sin(kh)$.

3. Схема «правый уголок»: $\alpha_{-2} = 0$, $w_{-1} = 0$, $w_1 = -1$, $\alpha_0 = 1 + \sin(\sigma kh) / \sin(kh)$, $\alpha_{-1} = -\sin(\sigma kh) / \sin(kh)$. Коэффициент α_{-1} отрицательный, в пределе при $k \rightarrow 0$ $\alpha_{-1} = -\sigma$. Эта точка не удовлетворяет системе ограничений задачи.

4. Трехточечная схема $\alpha_{-2} = \frac{1 - \sin(\sigma kh) / \sin(kh)}{1 + 2\cos(kh)}$, $w_1 = 0$, $w_{-1} = 1 - \frac{\cos(kh)}{1 + 2\cos(kh)} \neq 0$, $\alpha_0 = 0$, $\alpha_1 = 0$, $\alpha_{-1} = \frac{\sin(\sigma kh) / \sin(kh)}{1 + 2\cos(kh)}$.

5. Трехточечная схема $\alpha_{-2} = \frac{1 + \sin(\sigma kh) / \sin(kh)}{1 - 2\cos(kh)}$, $w_1 = 1 - \cos(kh) \neq 0$, $w_{-1} = 0$, $\alpha_0 = 0$, $\alpha_{-1} = 0$, $\alpha_1 = -\frac{2\cos(kh) + \sin(\sigma kh) / \sin(kh)}{1 - 2\cos(kh)}$.

6. Трехточечная схема $\alpha_{-2} = \frac{\sin(\sigma kh)}{\sin(2kh)}$, $\alpha_0 = 1 - \frac{\sin(\sigma kh)}{\sin(2kh)}$, $w_{-1} = \frac{2\cos(kh) - 1}{4\cos(kh)} \neq 0$, $w_1 = \frac{1 + 2\cos(kh) - 4\cos^2(kh)}{4\cos(kh)} \neq 0$.

Аналог безусловно неустойчивой схемы «правый уголок» (случай 3) не удовлетворяет ограничениям на знак множителя Лагранжа. Для схемы, выделяемой в случае 5, один из коэффициентов схемы также становится отрицательным. Для «классической» аппроксимации схема в случае 6 монотонная. В отличие «классической» аппроксимации множители Лагранжа будут неотрицательными лишь для значений безразмерного волнового числа $\cos(kh) < \frac{\sqrt{5}-1}{4}$. Это

соответствует высокочастотным гармоникам на сетке, которые будут эффективно сглаживаться схемой из-за большой диссипативной погрешности. Таким образом, для решения оптимизационной задачи необходимо проверить значение функционала в трех точках, выделяемых условиями дополняющей нежесткости. Непосредственной проверкой убеждаемся, что, как и для аппроксимирующих в классическом смысле, при значении $0 < \sigma \leq 1$ решением оптимизационной задачи является аналог схемы Куранта–Изаксона–Риса.

При рассмотрении выше мы считали волновое число k неким фиксированным параметром. Рассмотренные схемы, удовлетворяющие обобщенному условию аппроксимации, переходят в известные «классические» аппроксимирующие схемы в двух предельных случаях. Во-первых, это $h \rightarrow 0$, то есть при использовании для расчетов сколь угодно мелких сеток. Во-вторых, «классическим» пределом будет $k \rightarrow 0$, то есть при расчете гладких медленно меняющихся по пространству решений. Во всех остальных случаях возникает вопрос о том, как именно оценивать значение волнового числа при реализации схемы.

Предлагается оценивать реальную величину kh по локальным свойствам разностного решения. Ввиду того что (11) является четной функцией волнового числа, нам достаточно оценить только его абсолютную величину. Простейшим способом может быть выбран следующий. Вычислим вторую разность $d_m^2 = u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n$ и первую центральную разность $d_m^1 = u_{m+1}^n - u_{m-1}^n$. Будем считать, что на отрезке $[(m-1)h, (m+1)h]$ в фурье-представлении функции доминирует одна гармоника $u_m^n \sim \tilde{u} \exp(ikmh)$, тогда модуль безразмерного волнового числа этой гармоники можно оценить как

$$\left| \frac{d_m^2}{d_m^1} \right| = \frac{2\tilde{u} |\cos(kh) - 1|}{2\tilde{u} |\sin(kh)|} = \operatorname{tg} \left(\frac{|kh|}{2} \right)$$

или

$$kh = 2 \operatorname{arctg} \left| \frac{d_m^2}{d_m^1} \right|.$$

В этом случае коэффициенты построенной схемы становятся зависящими от локальных свойств решения. Вычислительный процесс даже для решения линейной дифференциальной задачи становится нелинейным. Выбор доминирующего волнового числа открывает возможность построения гибридных разностных схем, удовлетворяющих обобщенному условию аппроксимации.

Такие схемы будут подробно рассмотрены в готовящейся публикации.

8. Заключение

Как видно из рассмотрения, исследование свойств разностных схем в пространстве неопределенных коэффициентов позволяет строить новые классы разностных схем, не встречавшиеся ранее в публикациях по численному решению уравнений в частных производных гиперболического типа. В данной публикации рассмотрены разностные схемы, удовлетворяющие «обобщенному условию аппроксимации», то есть такие, которые должны переходить в классические разностные схемы на очень мелких сетках или при построении медленно меняющихся по пространственной переменной решений.

Определенный в работе функционал обобщенной аппроксимации в некотором смысле близок к рассмотренным ранее условиям аппроксимации на гладких решениях. Как уже отмечено, обычные («классические») условия аппроксимации получаются из обобщенного приравнением нулю первых членов разложения функционала в ряд Тейлора по сеточному параметру. В связи с этим коэффициенты разностной схемы получаются близкими к коэффициентам известных схем, отличаясь от них лишь членами более высоких степеней в разложении по сеточным параметрам по сравнению с главным членом невязки. Можно ожидать, что для линейной задачи численное решение по схеме с «обобщенной аппроксимацией» будет близко к решению с использованием известных разностных схем.

Тем не менее появление в разностной схеме новых свободных параметров открывает новые возможности для конструирования переключателей в гибридных разностных схемах, в том числе и таких, которые ранее оставались за рамками исследований.

Список литературы (References)

- Белоцерковский О. М., Панарин А. И., Щенников В. В.* Метод параметрической коррекции разностных схем // ЖВМиМФ. — 1984. — Т. 24, № 1. — С. 65–74
Belotserkovskii O. M., Panarin A. I., Schennikov V. V. A method of parametric correction of difference schemes // U.S.S.R. Comput. Math. Math. Phys. — 1984 — Vol. 24, No. 1. — P. 40–46. (Original Russian article: *Belotserkovskii O. M., Panarin A. I., Schennikov V. V.* Metod psrsmetricheskoi korrektsii raznostnyh skhem // Comput. Math. Math. Phys. — 1984. — Vol. 24, No. 1. — P. 65–74.)
- Годунов С. К.* Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Матем. сб. — 1959. — Т. 47 (89), вып. 3. — С. 271–306.
Godunov S. K. Raznostnyi metod chislennoogo rascheta razryvnyh reshenii uravnenii gidrodinamiki [A difference scheme for numerical solution of discontinuous solution of hydrodynamic equations] // Math. Sbornik. — 1959. — Vol. 47 (89), No. 3. — P. 271–306 (in Russian).
- Годунов С. К., Рябенкий В. С.* Разностные схемы. Введение в теорию. — М.: Наука, 1977. — 440 с.
Godunov S. K., Ryaben'kii V. S. Raznostnyie shemy. Vvedenie v teoriyu [Difference schemes. Introduction into the theory]. — Moscow: Nauka, 1977. — 440 p. (in Russian).
- Жуков А. И.* Метод Фурье в вычислительной математике. — М.: Наука, 1992. — 128 с.
Zhukov A. I. Metod Fourier v vychislitel'noi matematike [Fourier's method in computational mathematics]. — Moscow: Nauka, 1992. — 128 p. (in Russian).
- Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. — М.: Физматлит, 2012. — 656 с.
Kulikovskii A. G., Pogorelov N. V., Semenov A. Yu. Matematicheskie voprosy chislennoogo resheniya giperbolicheskikh system uravnenii [Mathematical aspects of numerical solution of hyperbolic systems]. — Moscow: Fizmatlit, 2012. — 656 p. (in Russian).
- Лобанов А. И.* Разностные схемы в пространстве неопределенных коэффициентов и двойственные задачи линейного программирования // Математика, компьютер, образование: тезисы 24 Международной конференции. Пушчино, 2017. — Ижевск: РХД, 2017. — С. 176.
Lobanov A. I. Raznostnyie skhemy v prostranstve neopredelennykh koeffitsientov i dvoistvennyie zadachi lineinogo programmirovaniia [Difference schemes in insufficient coefficients space and the linear programming dual problem] // Tezisy 24 Mezhdunarodnoi konferencii "Matematika. Komputer. Obrazovanie" [Abstracts of 24 International Conference "Mathematics. Computer. Education"]. Puschino, 2017. — Izhevsk: RHD, 2017. — P. 176 (in Russian).
- Магомедов К. М., Холодов А. С.* Сеточно-характеристические численные методы. 2-е изд. — М.: Юрайт, 2017. — 313 с.
Magomedov K. M., Kholodov A. S. Setochno-harakteristicheskie chislennyye metody [Grid-and-characteristics numerical methods]. 2nd edition. — Moscow: Yurait. — 313 p.
- Рябенкий В. С., Филиппов А. Ф.* Об устойчивости разностных уравнений. — М.: Гостехиздат, 1956. — 172 с.
Ryaben'kii V. S., Filippov A. F. Ob ustoichivosti raznostnyh uravnenii [On stability of difference equations]. — Moscow: Gostehizdat, 1956. — 172 p. (in Russian).
- Федоренко Р. П.* Применение разностных схем высокой точности для численного решения гиперболических уравнений // ЖВМиМФ. — 1962. — Т. 2, № 6. — С. 1122–1128.
Fedorenko R. P. The application of difference schemes of high accuracy to the numerical solution of hyperbolic equations // U.S.S.R. Comput. Math. Math. Phys. — 1963. — Vol. 2, No. 6. — P. 1355–1365. (Original Russian paper: *Fedorenko R. P.* Primenenie raznostnyh schem vysokoi tochnosti dlya chislennoogo resheniya giperbolicheskikh uravnenii // Comput. Math. Math. Phys. — 1962. — Vol. 2, No. 6. — P. 1122–1128.)
- Холодов А. С.* О построении разностных схем с положительной аппроксимацией для уравнений гиперболического типа // ЖВМиМФ. — 1978. — Т. 18, № 6. — С. 1476–1492.
Kholodov A. S. Construction of difference schemes with positive approximation for hyperbolic equations // U.S.S.R. Comput. Math. Math. Phys. — 1978. — Vol. 18, No. 6. — P. 116–132. (Original Russian paper: *Kholodov A. S.* O postroenii raznostnyh schem s pologitel'noi approksimatsiey dlya uravnenii giperbolicheskogo tipa // Comput. Math. Math. Phys. — 1978. — Vol. 18, No. 6. — P. 1355–1365.)
- Lax P. D., Richtmyer R. D.* Survey of the stability of linear finite difference equations // Comm. Pure Appl. Math. — 1956. — Vol. 9. — P. 267–293.