

УДК 519.63

ФАКТОРИЗОВАННЫЕ SM-УСТОЙЧИВЫЕ ДВУХСЛОЙНЫЕ СХЕМЫ

© 2010 г. П. Н. Вабищевич

(125047 Москва, Миусская пл., 4А, ИММОделирования РАН)

e-mail: vabishchevich@gmail.com

Поступила в редакцию 29.12.2009 г.

Переработанный вариант 13.01.2010 г.

Анализ разностных схем повышенного порядка аппроксимации по времени при приближенном решении краевой задачи для параболического уравнения второго порядка позволил сформулировать дополнительные требования к безусловно устойчивым разностным схемам. Эти требования связаны с наследованием основных свойств дифференциальной задачи и ведут к понятию SM-устойчивой разностной схемы. Ранее выделены SM-устойчивые разностные схемы на основе различных аппроксимаций Паде. Отдельного внимания заслуживают проблемы вычислительной реализации таких схем повышенного порядка аппроксимации, которые связаны с необходимостью обращения на новом временном слое некоторого матричного полинома. В данной работе построены факторизованные SM-устойчивые разностные схемы, которые можно интерпретировать как некоторые диагонально-краевые методы Рунге–Кутты. Библ. 9. Фиг. 3.

Ключевые слова: задача Коши, эволюционное уравнение первого порядка, операторно-разностные схемы, устойчивость.

При переходе к дискретной задаче должны наследоваться основные свойства дифференциальной задачи (см. [1]). При рассмотрении нестационарных задач среди устойчивых разностных схем необходимо выделить схемы, которые являются более предпочтительными перед другими по тем или иным критериям. В теории разностных схем для задач математической физики выделяется класс асимптотически устойчивых разностных схем, которые (см. [2], [3]) обеспечивают правильное поведение приближенного решения при больших временах. В теории численных методов решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (см. [4], [5]) используется понятие L -устойчивых методов, в которых с несколько других позиций также отслеживается асимптотическое поведение приближенного решения при больших временах.

В [6] рассмотрены схемы повышенного порядка аппроксимации по времени для краевой задачи для параболического уравнения. Введено понятие SM-устойчивости (Spectral Mimetic Stability), которое связано с наследованием поведения приближенного решения на уровне отдельных точек действительного спектра соответствующего сеточного эллиптического оператора задачи. Проведенный анализ схем, построенных на основе паде-аппроксимаций, позволил выделить класс SM-устойчивых разностных схем.

Основной недостаток выделенных SM-устойчивых разностных схем на основе паде-аппроксимаций связан с вычислительной реализацией: для перехода на новый временной слой необходимо обращать матричный полином. Вычислительная сложность этой задачи по сравнению с простейшими схемами с весами существенно выше. В плане вычислительной реализации схем повышенного порядка для приближенного решения начально-краевых задач для параболических уравнений наиболее удобны факторизованные схемы. В этом случае при рассмотрении систем обыкновенных дифференциальных уравнений говорят о диагонально-неявных методах Рунге–Кутты (DIRK-методы, см. [4], [7]). Построению факторизованных SM-устойчивых схем и посвящена данная работа.

1. МОДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА

Пусть H – конечномерное действительное гильбертово пространство сеточных функций, в котором скалярное произведение и норма есть (\cdot, \cdot) и $\|\cdot\|$ соответственно. Пусть в H посто-

нный (не зависит от времени) сеточный оператор Λ самосопряжен и положительно определен:

$$\Lambda = \Lambda^* \geq \delta E, \quad \delta > 0,$$

где E – единичный оператор в H . Ищется решение задачи Коши

$$\frac{dy}{dt} + \Lambda y = 0, \quad x \in \omega, \quad 0 < t \leq T, \quad (1)$$

$$y(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \omega, \quad (2)$$

где ω – множество сеточных узлов.

Пусть $\mu_m, w_m(x), x \in \omega, m = 1, 2, \dots, M-1$, – собственные значения и собственные функции оператора Λ :

$$\Lambda w = \mu w, \quad x \in \omega, \quad (3)$$

причем

$$0 < \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_{M-1}.$$

С учетом (3) решение задачи (1), (2) представляется в виде

$$y(x, t) = \sum_{m=1}^{M-1} (u_0, w_m) e^{-\mu_m t} w_m(x). \quad (4)$$

Определим равномерную с шагом τ сетку по времени:

$$\bar{\omega}_\tau = \omega_\tau \cup \{T\} = \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, N, \tau N = T\},$$

и положим $y_n = y(t_n), t_n = n\tau$. При переходе с временного слоя t_n на новый временной слой t_{n+1} для решения задачи (1), (2) с учетом (4) имеем представление

$$y(x, t_{n+1}) = e^{-\Lambda \tau} y(x, t_n) = \sum_{m=1}^{M-1} (y(x, t_n), w_m) e^{-\mu_m \tau} w_m(x). \quad (5)$$

Будем использовать двухслойные разностные схемы, которые записываются в следующем каноническом (см. [1]) виде:

$$\frac{B y_{n+1} - y_n}{\tau} + A y_n = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (6)$$

с некоторыми операторами A и B . Разностную схему (6) будем записывать как

$$y_{n+1} = S y_n, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (7)$$

где

$$S = E - \tau B^{-1} A \quad (8)$$

есть оператор перехода разностной схемы с одного временного слоя на другой. Здесь мы ограничимся разностными аппроксимациями по времени для задачи (1), (2), для которых

$$S = s(\tau \Lambda), \quad (9)$$

где $s(z)$ – некоторая функция. С учетом (7)–(9) для приближенного решения имеет место представление

$$y(x, t_{n+1}) = \sum_{m=1}^{M-1} (y(x, t_n), w_m) s(\mu_m \tau) w_m(x). \quad (10)$$

На основе сопоставления (10) с представлением (5) формулируются SM-свойства разностных аппроксимаций по времени для рассматриваемой задачи (1), (2).

2. SM-УСТОЙЧИВОСТЬ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

Напомним, что разностная схема устойчива по начальным данным, если

$$\|y_{n+1}\| \leq \|y_n\|, \quad \|s(\tau\Lambda)\| \leq 1. \tag{11}$$

С учетом положительной определенности оператора Λ ($\Lambda \geq \delta E$) естественно требовать ρ -устойчивость разностной схемы (6), когда вместо (11) имеет место неравенство

$$\|y_{n+1}\| \leq \rho \|y_n\|, \quad \|s(\tau\Lambda)\| \leq \rho, \quad \rho = e^{-\delta\tau}. \tag{12}$$

При решении нестационарных задач необходимо отслеживать убывание решения до нуля при $t \rightarrow \infty$. Разностную схему (6) будем называть *асимптотически устойчивой*, если

$$\lim_{\theta \rightarrow \infty} s(\theta) = 0, \quad \theta = \mu_m \tau, \quad m = 1, 2, \dots, M-1. \tag{13}$$

Будем говорить, что разностная схема (6) *спектрально монотонна*, если

$$s(\theta + \Delta) \leq s(\theta), \quad \theta \geq 0, \quad \Delta > 0. \tag{14}$$

ρ -Устойчивая разностная схема (6) для задачи (1), (2) называется *SM-устойчивой*, если она асимптотически устойчива и спектрально монотонна (выполнены ограничения (12)–(14)).

Двухслойные разностные схемы повышенного порядка аппроксимации для нестационарных линейных задач удобно строить на основе паде-аппроксимаций операторной (матричной) экспоненты $e^{-\Lambda\tau}$. При решении задач для нелинейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений таким аппроксимациям соответствуют различные варианты методов Рунге–Кутты (см. [4], [7], [8]). Паде-аппроксимация функции e^{-z} при $|z| < 1$ есть

$$e^{-z} = R_{lm}(z) + O(z^{l+m+1}), \quad R_{lm}(z) \equiv \frac{P_{lm}(z)}{Q_{lm}(z)}, \tag{15}$$

где $P_{lm}(z)$ и $Q_{lm}(z)$ – полиномы степени l и m соответственно. Для этих полиномов имеет место представление

$$P_{lm}(z) = \frac{l!}{(l+m)!} \sum_{k=0}^l \frac{(l+m-k)!}{k!(l-k)!} (-z)^k,$$

$$Q_{lm}(z) = \frac{m!}{(l+m)!} \sum_{k=0}^m \frac{(l+m-k)!}{k!(m-k)!} z^k.$$

Как показано в [6], только схемы с $l = 0$, т.е.

$$R_{0m}(z) \equiv \frac{1}{Q_{0m}(z)}, \quad P_{0m}(z) = 1,$$

относятся к классу SM-устойчивых. В этом случае разностная схема для задачи (1), (2) имеет вид

$$Q_{0m}(\tau\Lambda) \frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} + \frac{1}{\tau} (Q_{0m}(\tau\Lambda) - E) y_n = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \tag{16}$$

где функция

$$Q_{0m}(z) = \sum_{k=0}^m \frac{1}{k!} z^k \tag{17}$$

является частью разложения функции e^z в ряд Тейлора. Основной недостаток схемы (16), (17) связан с вычислительной реализацией. Для перехода на новый временной слой необходимо решать задачу

$$Q_{0m}(\tau\Lambda) y = f,$$

т.е. необходимо обращать матричный полином.

3. ФАКТОРИЗОВАННЫЕ SM-УСТОЙЧИВЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ

Естественно отталкиваться от аппроксимации функции e^{-z} в виде отношения полиномов в виде (15), но только в знаменателе стоит полином

$$Q_{lm}(z) = (1 + \sigma_{lm}z)^m, \quad (18)$$

где $\sigma_{lm} > 0$ – некоторая постоянная. Аппроксимация (15), (18) введена в работе [9] и носит название RD-пада аппроксимация (RD = Restricted Denominator). При $m = 1$ RD-пада-аппроксимация совпадает с обычной паде-аппроксимацией, и связана с использованием чисто неявной $l = 0$ и симметричной $l = 1$ схемами.

Принимая во внимание условие асимптотической устойчивости (13), ограничимся случаем $l = m - 1$ и используем обозначения $G_m(z) = R_{lm}(z)$. Проиллюстрируем построение RD-пада аппроксимаций на простейшем примере $m = 2$. В этом случае

$$G_2(z) = \frac{1 + \xi z}{(1 + \sigma z)^2},$$

где $\sigma = \sigma_{12}$. Необходимо найти коэффициенты ξ и σ из условия наилучшей аппроксимации функции e^{-z} . Имеем

$$(1 + \sigma z)^2 = (1 + \xi z) \left(1 + z + \frac{1}{2}z^2 + O(z^3) \right).$$

Из этого представления получим систему уравнений

$$2\sigma = \xi + 1,$$

$$\sigma^2 = \xi + \frac{1}{2}.$$

Решением этой системы являются два набора коэффициентов ξ и σ :

$$\sigma_1 = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad \xi_1 = 1 - \sqrt{2}, \quad (19)$$

$$\sigma_2 = 1 + \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad \xi_2 = 1 + \sqrt{2}. \quad (20)$$

RD-Паде аппроксимация

$$G_2(z) = \frac{1 + (1 - \sqrt{2})z}{[1 + (1 - \sqrt{2}/2)z]^2} = e^{-z} + O(z^3),$$

которая соответствует выбору (19), не приводит к безусловно SM-устойчивым схемам. Для нее не выполнено условие спектральной монотонности: при $z = z_0 = 1/(\sqrt{2} - 1)$ имеем $G_2(z_0) = 0$.

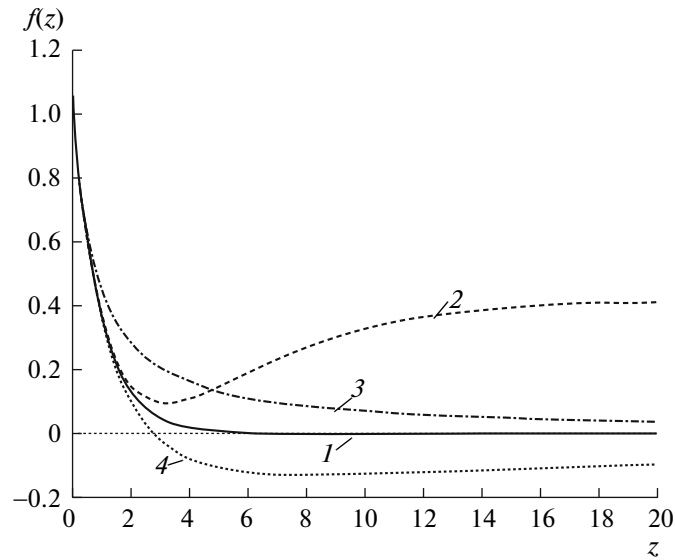
Для (20) получим

$$G_2(z) = \frac{1 + (1 + \sqrt{2})z}{[1 + (1 + \sqrt{2}/2)z]^2} = e^{-z} + O(z^3). \quad (21)$$

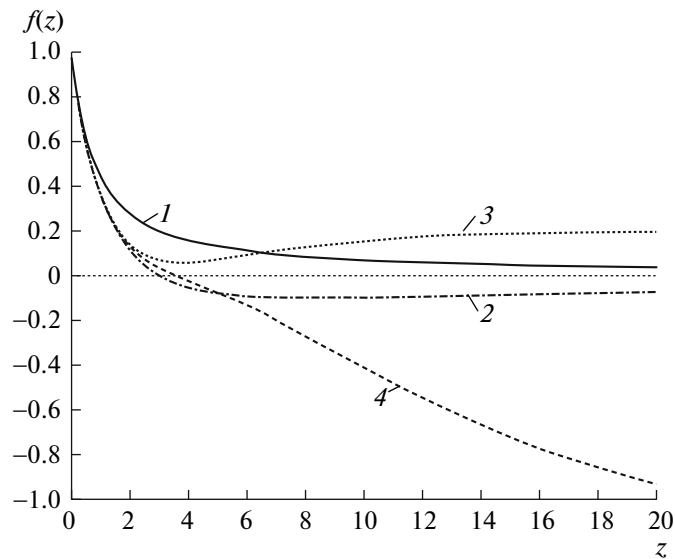
Такие аппроксимации приводят к безусловно SM-устойчивым схемам.

Аналогично (21) имеем

$$G_3(z) = \frac{1 + \xi_1 z + \xi_2 z^2}{(1 + \sigma z)^3}.$$



Фиг. 1. Линия 1 соответствует $G_3(z)$ для e^{-z} , линии 2 – для $\sigma = \sigma_1$, 3 – для $\sigma = \sigma_2$, 4 – для $\sigma = \sigma_3$.



Фиг. 2. Линия 1 соответствует $G_4(z)$ для $\sigma = \sigma_1$, 2 – для $\sigma = \sigma_2$, 3 – для $\sigma = \sigma_3$, 4 – для $\sigma = \sigma_4$.

Для σ получим кубическое уравнение

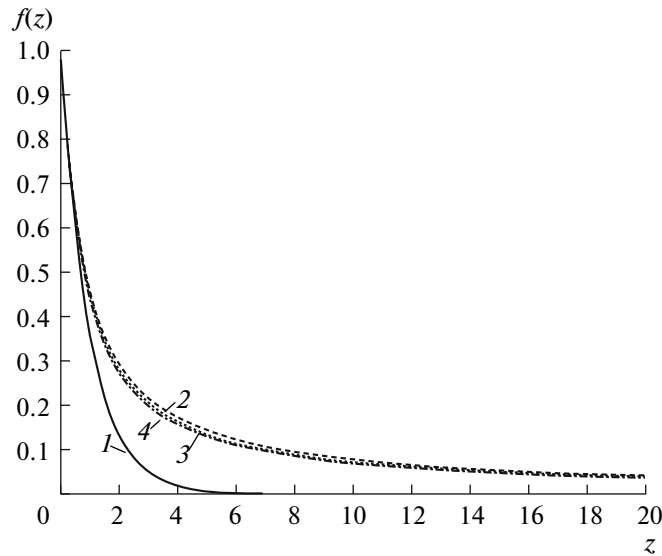
$$\sigma^3 - 3\sigma^2 + \frac{3}{2}\sigma - \frac{1}{6} = 0,$$

корни которого суть

$$\sigma_1 = 0.158983899988677, \quad \sigma_2 = 0.435866521508459, \quad \sigma_3 = 2.405149578502866.$$

Аппроксимирующие функции для трех наборов корней приведены на фиг. 1. SM-устойчивые схемы мы получим только при $\sigma = \sigma_3$, когда

$$G_3(z) = \frac{1 + 6.215448735508597z + 10.638784749408941z^2}{(1 + 2.405149578502866z)^3}.$$



Фиг. 3. Линии 1 – для e^{-z} , 2 – для $G_2(z)$, 3 – для $G_3(z)$, 4 – для $G_4(z)$.

Подобное исследование для случая $m = 4$ приводит нас к уравнению четвертой степени

$$\sigma^4 - 4\sigma^3 + 3\sigma^2 - \frac{2}{3}\sigma + \frac{1}{24} = 0.$$

Оно имеет четыре вещественных корня

$$\sigma_1 = 0.106438792142663, \quad \sigma_2 = 0.220428410259214,$$

$$\sigma_3 = 0.572816062482134, \quad \sigma_4 = 3.100316735115990.$$

Графики функции $G_4(z)$ для этих корней представлены на фиг. 2.

При $\sigma = \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ функция $G_4(z)$ немонотонна. Безусловно SM-устойчивой схеме соответствует функция $G_4(z)$ при $\sigma = \sigma_4$:

$$G_4(z) = \frac{1 + 11.401266940463961z + 45.770516207777675z^2 + 67.562713280972929z^3}{(1 + 3.100316735115990z)^4},$$

которая аппроксимирует функцию e^{-z} с точностью $O(z^5)$.

На фиг. 3 представлены функции устойчивости для безусловно SM-устойчивых схем, построенных на основе RD-паде аппроксимаций. Увеличение порядка аппроксимации приводит лишь к незначительному повышению точности при $z > 1$. Такие схемы сильно уступают SM-устойчивым схемам на основе паде-аппроксимаций (ср. фиг. 3 с фиг. 4 в [6]). Формальным показателем качественных различий может служить также величина главного коэффициента погрешности аппроксимации. Положим

$$R_{0m}(z) = e^{-z} + C_R z^{m+1} + O(z^{m+2}),$$

$$G_m(z) = e^{-z} + C_G z^{m+1} + O(z^{m+2}).$$

Значения постоянных C_R и C_G приведены в таблице.

Таблица

m	C_R	C_G
2	0.166666666666667	1.373773447853214
3	-0.041666666666667	6.396967163955937
4	0.008333333333333	41.876495464301705

Эти данные демонстрируют катастрофическую потерю точности (существенное превышение $|C_G|$ над $|C_R|$) в RD-паде аппроксимациях. Это обстоятельство при формальном сохранении порядка аппроксимации во многом нивелирует их потенциальные преимущества перед паде-аппроксимациями, которые связаны с вычислительной реализацией.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
2. Самарский А.А., Гулин А.В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973.
3. Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. Computational heat transfer. Vol. 1. Mathematical Modelling. Chichester: Wiley, 1995.
4. Butcher J.C. Numerical methods for ordinary differential equations. Hoboken, NJ: Wiley, 2008.
5. Gear C.W. Numerical initial value problems in ordinary differential equations. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1971.
6. Вабищевич П.Н. Двухслойные схемы повышенного порядка аппроксимации для нестационарных задач математической физики // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2010. Т. 50. № 1. С. 118–130.
7. Dekker K., Verwer J. Stability of Runge–Kutta methods for stiff nonlinear differential equations. Amsterdam: North-Holland, 1984.
8. Hairer E., Wanner G. Solving ordinary differential equations. II: Stiff and differential-algebraic problems. Berlin: Springer, 1996.
9. Nørsett S.P. Restricted Padé approximations to the exponential function // SIAM J. Numer. Anal. 1978. V. 15. P. 1008–1029.