

О НЕЯВНЫХ СХЕМАХ ТИПА РУНГЕ — КУТТЫ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА АППРОКСИМАЦИИ*

В. И. Пинчуков

Институт вычислительных технологий СО РАН

Новосибирск, Россия

e-mail: Pinchvi@net.ict.nsc.ru

Implicit schemes of the third-order approximation with respect to time are suggested. Ordinary equations of the first order are considered as well as the multidimensional convection equations. The schemes are proved to be absolutely stable in the frozen coefficients approximation. The results of test calculations are presented.

В вычислительной практике широко распространены схемы первого и второго порядков аппроксимации по времени. Схемы более высокой точности по временной переменной также известны, хотя и не столь популярны. Это явные схемы третьего порядка типа Рунге — Кутты — Русанова [1], Бернстейна — Мирина [2], Кутлера — Ломекса [3]. Вследствие жесткого ограничения временного шага по условиям устойчивости они, как и конкурирующие с ними явные схемы второго порядка, могут использоваться лишь с небольшим временным шагом. При этом временная составляющая погрешности обоих типов схем невелика, и преимущество по точности схем третьего порядка не имеет большого значения, в то же время они значительно сложнее и дороже по количеству арифметических операций.

Поэтому представляет интерес построение неявных схем третьего порядка, которые могут использоваться при большом временном шаге. Временная погрешность при этом существенна, поэтому они могут иметь преимущество по сравнению со схемами первого — второго порядков. Создание неявных схем повышенной точности связано с преодолением определенных технических сложностей. Чтобы пояснить суть проблемы, укажем, что в классических неявных схемах стабилизирующий оператор при воздействии на временное приращение искомым переменных образует величину порядка $O(\tau)$, и, как правило, схема имеет такой же порядок $O(\tau)$. Если стабилизирующие слагаемые являются приближением второй производной по времени от искомым переменных, $R_{\text{stab}}(f^{n+1} - f^n) \approx [(\partial f / \partial t)^{n+1} - (\partial f / \partial t)^n] / 2 \approx (\tau / 2) \partial^2 f / \partial t^2$, то порядок аппроксимации по времени можно повысить на единицу и добиться второго порядка. При построении схем третьего порядка подобные подходы не работают.

Если при создании неявных схем повышенной точности отталкиваться от каких-либо явных схем, например, типа Рунге — Кутты, то приходится конструировать стабилизирующие операторы, с одной стороны гарантирующие устойчивость, с другой — удовлетворяющие ограничениям по точности, которые являются более жесткими, чем для схем

*Работа выполнена при финансовой поддержке Американского фонда гражданских исследований и развития для независимых государств, образованных на территории бывшего Советского Союза (CRDF), грант RM1-212, и Российского фонда фундаментальных исследований, грант №97-01-00711.

© В. И. Пинчуков, 1999.

второго порядка. Таким образом, построение неявных схем третьего порядка сопряжено с преодолением трудностей. В частности, в [4] построены компактные неявные схемы третьего порядка, однако эти схемы являются условно устойчивыми. В работе приведен пример построения неявных абсолютно устойчивых схем.

Упомянутые выше явные схемы Кутлера — Ломекса и Русанова могут рассматриваться как обобщение известных схем Рунге — Кутты третьего порядка для обыкновенных дифференциальных уравнений [5]. Предлагаемые схемы допускают также построение аналога для обыкновенных уравнений, с чего и будет начато их изложение. Отметим, что цель создания неявных методов может трактоваться как расширение их области устойчивости. Определенные возможности для этого имеются и в классе явных методов, примером чему могут служить явные методы с заданной областью устойчивости [5].

1. Двухшаговые схемы

Пусть решается задача Коши для уравнения

$$du/dt = \varphi(u, t), \quad u(0) = u_0. \quad (1)$$

Рассмотрим схему

$$[3/2 - \tau\varphi_u^n/2 + \lambda(\tau^2\varphi_u^n)^2](u^{n+2/3} - u^n) = \tau\varphi(u^n, t), \quad (2)$$

$$\begin{aligned} [1 + \xi(\tau^2\varphi_u^n)^2](u^{n+1} - u^n) - \xi\tau^2(\tau^2\varphi_u^n)^2(u^{n+2/3} - u^n)3/2 = \\ = \tau[\varphi(u^n, t)/4 + \varphi(u^{n+2/3}, t + \tau 2/3)3/4], \end{aligned} \quad (3)$$

где $\xi > 0$, $\lambda > 0$ — числовые параметры, которые следует определить в анализе. Оказалось, что необходимым и достаточным условиям точности и устойчивости схемы можно удовлетворить, если положить

$$\xi = 2\lambda. \quad (4)$$

Чтобы не загромождать изложения, все выкладки далее проведем с учетом этого соотношения.

Для исследования устойчивости и точности этой схемы рассмотрим случай $\varphi(u, t) = -Au$, $A = \text{const} > 0$. Умножая уравнение (2) на $\lambda\tau^2\varphi_u^2 3 + \tau\varphi_u 3/4 = \lambda\tau^2 A^2 3 - \tau A 3/4$, уравнение (3) на $3/2 - \tau\varphi_u/2 + \lambda\tau^2\varphi_u^2 = 3/2 + \tau A/2 + \lambda\tau^2 A^2$ и складывая их, получаем соотношение $u^{n+1} = u^n \rho(\tau A)$, где

$$\rho(x) = 1 - x[1 - x/6 + x^2\lambda 8/3]/[1 + x/3 + \lambda x^2 2/3]/[1 + 2\lambda x^2]. \quad (5)$$

Абсолютная устойчивость схемы заключается в выполнении условия $|\rho(x)| \leq 1$ при $x > 0$, что эквивалентно двум неравенствам:

$$\rho(x) \leq 1, \quad \rho(x) \geq -1,$$

которые с учетом ограничения $x > 0$ переписываются в виде зависимостей

$$1 - x/6 + x^2\lambda 8/3 \geq 0,$$

$$x(1 - x/6 + x^2\lambda 8/3) \leq 2(1 + x/3 + \lambda x^2 2/3)(1 + 2\lambda x^2),$$

при этом первое эквивалентно ограничению $\lambda \geq 1/384$, второе — неравенству

$$2 - x/3 + (\lambda 16/3 + 1/6)x^2 - (\lambda 4/3)x^3 + \lambda^2 x^4 8/3 \geq 0,$$

которое можно преобразовать к виду

$$1 + (1 - x/6)^2 + x^2\{\lambda 16/3 + 5/36 - (\lambda 4/3)x + x^2\lambda^2 8/3\} \geq 0.$$

Условие неотрицательности квадратного трехчлена в фигурной скобке эквивалентно следующему соотношению на его коэффициенты:

$$(\lambda 16/3 + 5/36)\lambda^2 8/3 \geq (\lambda 2/3)^2,$$

которое выполняется при $\lambda \geq 1/192$. Итак, можно положить $\lambda = 1/192$ (условие $\lambda \geq 1/384$ при этом также выполняется), $\xi = 1/96$, при этом будем иметь абсолютно устойчивую схему.

Чтобы иметь третий порядок, необходимо выполнение условия $\rho(x) - \exp(-x) = O(x^4)$, $x \rightarrow 0$, что эквивалентно соотношению $\rho(x) - (1 - x + x^2/2 - x^3/6) = O(x^4)$. Подставляя $\rho(x)$, нетрудно получить

$$\begin{aligned} \rho(x) - (1 - x + x^2/2 - x^3/6) &= x^4[\lambda^2 x^3 2/9 + (-\lambda 2/3 + 1/9)\lambda x^2 + \\ &+ (\lambda/9 + \lambda^2 4/3)x - 2\lambda/3 + 1/18]/(1 + x/3 + \lambda x^2 2/3)/(1 + 2\lambda x^2) = O(x^4). \end{aligned}$$

Таким образом, данная схема имеет третий порядок аппроксимации, причем при любых значениях параметров ξ, λ . Это означает, что можно использовать упрощенные значения величины φ_u^2 . В частности, при решении систем обыкновенных уравнений на последнем шаге Якобиан φ_u^2 можно заменить на мажорирующую диагональную матрицу, обращение которой элементарно.

Аналогичное временное центрирование правой части и стабилизирующих слагаемых, совместимое с нужным нам третьим порядком по времени, можно использовать при построении схемы для m -мерного уравнения переноса

$$\partial f / \partial t + \sum_{l=1}^m a_l \partial f / \partial x_l = 0. \quad (6)$$

Введем разностный оператор конвективного переноса

$$R_1 f = \sum_{l=1}^m a_l \Delta_l^0 (1 - \delta_l^+ \delta_l^- / 6) f = \sum_{l=1}^m a_l \partial f / \partial x_l + O\left(\sum_{l=1}^m \Delta x_l^4\right) \quad (7)$$

и вспомогательные операторы, используемые при построении схемы,

$$R_2 = \sum_{l=1}^m a_l^2 \Delta_l^+ \Delta_l^-, \quad R_4 = \sum_{l=1}^m a_l^4 (\Delta_l^+ \Delta_l^-)^2. \quad (8)$$

Здесь и далее $\delta_l^\pm f = \pm(f(x_1, \dots, x_l \pm \Delta x_l, \dots, x_m) - f(x_1, \dots, x_m))$, $\Delta_l^\pm f = \delta_l^\pm f / \Delta x_l$. Рассмотрим двухшаговую схему

$$(1 + \tau R_1 / 3 + \xi \tau^4 R_4 - \lambda \tau^2 R_2)(f^* - f^n) 3 / (2\tau) + R_1 f^n = -\tau^3 \mu R_4 f^n, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} (1 + \varphi \tau^4 R_4 - \eta \tau^2 R_2)(f^{n+1} - f^n) / \tau + \eta \tau R_2 (f^* - f^n) 3 / 2 + \\ + R_1 (f^n / 4 + f^* 3 / 4) = -\tau^3 \mu R_4 f^n, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\xi, \lambda, \mu, \varphi, \eta$ — параметры, которые необходимо определить при анализе устойчивости схемы. Чтобы не загромождать изложения, воспользуемся некоторыми итогами такого анализа и ограничимся рассмотрением двухпараметрического семейства $\lambda = \eta, \xi = \varphi = \mu/2$. Для анализа аппроксимационных свойств схемы умножим уравнение (9) на оператор $-\lambda\tau^2 R_2 - R_1\tau/2$, (10) — на оператор $1 + \tau R_1/3 + \tau^4 R_4\mu/2 - \lambda\tau^2 R_2$ и сложим их, исключив тем самым промежуточную функцию f^* . В результате получим уравнение

$$(1 + \tau^4 R_4\mu/2 - \lambda\tau^2 R_2)(1 + \tau R_1/3 + \tau^4 R_4\mu/2 - \lambda\tau^2 R_2)(f^{n+1} - f^n)/\tau + \\ + [1 - \tau R_1/6 + \tau^4 R_4\mu/2 - 2\lambda\tau^2 R_2](R_1 - \tau^3 \mu R_4)f^n = 0,$$

которое может быть преобразовано к следующему виду:

$$f^{n+1} = f^n - (1 + \tau^4 R_4\mu/2 - \lambda\tau^2 R_2)^{-1}(1 + \tau R_1/3 + \tau^4 R_4\mu/2 - \lambda\tau^2 R_2)^{-1} \times \\ \times [1 - \tau R_1/6 + \tau^4 R_4\mu/2 - 2\lambda\tau^2 R_2](R_1 - \tau^3 \mu R_4)\tau f^n.$$

Разлагая правую часть в ряд по малому параметру τ , можно получить уравнение

$$f^{n+1} = f^n - (1 - \tau R_1/2 + \tau^2 R_1^2/6)\tau R_1 f^n + O(\tau^4).$$

Учитывая, что $R_1 f = -\partial f/\partial t + O(h^4)$, $h = \max_{l=1}^m(\Delta x_l)$ и соответственно $R_1^k f = (-1)^k \partial^k f/\partial t^k + O(h^4)$, имеем

$$f^{n+1} = (f + \tau \partial f/\partial t + \tau^2 \partial^2 f/\partial t^2/2 + \tau^3 \partial^3 f/\partial t^3/6) |_{t=n\tau} + O(\tau^4 + \tau h^4).$$

Поскольку это выражение совпадает с разложением в ряд Тэйлора до слагаемых третьего порядка, из него следует, что схема имеет третий порядок аппроксимации по времени. Она имеет четвертый порядок по пространственным переменным, так как разностный оператор конвективного переноса (7) имеет четвертый порядок.

Для исследования устойчивости применим метод Фурье. Представив решение в виде $f^n = \rho^n \exp(\sum_{l=1}^m \alpha_l i_l j)$, $0 \leq \alpha_l \leq 2\pi$, $j = \sqrt{-1}$, получим множитель перехода для схемы

$$\rho = 1 - (D + \lambda P_2 - j P_1/6)(j P_1 + \mu P_4)/(D + j P_1/3)/D,$$

где

$$P_1 = \sum_{l=1}^m a_l \sin \alpha_l (1 + q_l/6)\tau/\Delta x_l, \quad P_2 = \sum_{l=1}^m (a_l \tau/\Delta x_l)^2 q_l, \\ P_4 = \sum_{l=1}^m (a_l \tau/\Delta x_l)^4 q_l^2, \quad q_l = 2 - 2 \cos \alpha_l, \quad D = 1 + P_4\mu/2 + P_2\lambda. \quad (11)$$

Отметим соотношения между величинами P_1, P_2, P_4 , которые потребуются при исследовании устойчивости:

$$P_1^2 \leq \beta P_2, \quad \beta = m(1 + 7/243), \quad P_2^2 \leq m P_4. \quad (12)$$

Докажем первое из неравенств (12) в одномерном случае. Перепишем его, опуская индекс l , поскольку он принимает единственное значение, равное единице:

$$(a \sin \alpha (1 + q/6)\tau/\Delta x)^2 \leq \beta (a\tau/\Delta x)^2 q.$$

Подставляя $(\sin \alpha)^2 = q(1 - q/4)$, сокращая одинаковые множители слева и справа, получим выражение

$$(1 - q/4)(1 + q/6)^2 \leq \beta.$$

Поскольку функция в левой части этого неравенства имеет экстремум в точке $q = 2/3$, где она примет максимальное значение на интервале изменения переменной $q : 0 \leq q \leq 4$, то, подставляя $q = 2/3$, получаем $(1 - 1/6)(1 + 1/9)^2 = 250/243 \leq \beta$. Таким образом, при $m = 1$ неравенство (12) доказано. При $m > 1$ квадрат суммы в левой части неравенства (12) порождает смешанные произведения слагаемых, оценивая которые по формуле $2ab \leq a^2 + b^2$, сводим нужное нам неравенство к сумме одномерных неравенств с одним отличием — слева оценка смешанных слагаемых породила множитель m , который учтен аналогичным множителем в определении параметра β .

Аналогично, второе из неравенств (12) достаточно рассмотреть в одномерном случае; параметр m учитывает отличие многомерного варианта от одномерного. Опуская в одномерном случае индекс l , имеем

$$[(a\tau/\Delta x)^2 q]^2 \leq (a\tau/\Delta x)^4 q^2.$$

Ясно, что левая и правая часть этого неравенства тождественно равны. Таким образом, неравенства (12) доказаны.

Исследование устойчивости рассматриваемой схемы сводится к доказательству условия $|\rho|^2 \leq 1$. Оно будет выполнено, если после приведения к общему знаменателю слагаемых коэффициента перехода квадрат модуля знаменателя будет больше квадрата модуля числителя, т. е.

$$P_1^2 D^2/9 + D^4 \geq [D^2 - (D + \lambda P_2)\mu P_4 - P_1^2/6]^2 + P_1^2(D2/3 + \lambda P_2 - \mu P_4/6)^2.$$

Если перенести все слагаемые этого неравенства в левую часть, то получим квадратный трехчлен относительно величины P_1^2 . Поскольку коэффициент при второй степени аргумента отрицателен, то минимальное значение трехчлена достигается на границах отрезка определения аргумента, т. е. ввиду его неотрицательности и с учетом первого из соотношений (12) — в точках $P_1^2 = 0$ и $P_1^2 = \beta P_2$. Таким образом, надо проверить два неравенства:

$$D^4 - [D^2 - (D + \lambda P_2)\mu P_4]^2 \geq 0,$$

$$D^4 - [D^2 - (D + \lambda P_2)\mu P_4 - \beta P_2/6]^2 + \\ + \beta P_2[D^2/9 - (D2/3 + \lambda P_2 - \mu P_4/6)^2] \geq 0.$$

Учитывая, что $D^4 - [D^2 - (D + \lambda P_2)\mu P_4]^2 = [(1 + P_2\lambda)(2 + 2P_2\lambda) + \mu P_4](D + \lambda P_2)\mu P_4$, первое неравенство выполнено всегда. Аналогично, подставляя определение D и раскрывая разности квадратов, второе неравенство перепишем в следующем виде:

$$2[\mu P_4(1 + \mu P_4/2 + 2P_2\lambda) + \beta P_2/6][1 + \mu P_4/2 + 2\lambda P_2 + (\lambda P_2)^2 - \beta P_2/12] - \\ - (\beta P_2/3)(1 + 2\lambda P_2 + \mu P_4/3)(1 + 4P_2\lambda) \geq 0.$$

Собирая члены, содержащие одинаковые произведения переменных P_2, P_4 , можно получить неравенство

$$\{P_4^3\mu^3/2 + P_4^2P_2^2(\mu\lambda)^2\} + \{P_4^2P_2(4\mu^2\lambda - \beta\mu^2/12) + P_4P_2^3\mu\lambda^34\} + \\ + \{P_4^22\mu^2 + P_4P_2^2(10\mu\lambda^2 - \beta\mu\lambda7/9)\} + \{P_4P_2(\mu\lambda8 - \beta\mu/9) - P_2^3\beta\lambda^27/3\} + \\ + \{P_4(\mu2) - P_2^2(\beta\lambda4/3 + \beta^2/36)\} \geq 0. \quad (13)$$

В левой его части сгруппированы в фигурные скобки слагаемые, которые, ввиду неравенств (12), удобно рассматривать совместно. Отметим: во втором из неравенств (12) вместо параметра t будем использовать параметр β , что лишь усиливает это неравенство и позволяет упростить дальнейшие выкладки. Заменяем в третьей фигурной скобке неравенства (13) P_4^2 на $P_4P_2^2/\beta$, тем самым уменьшив, возможно, в силу неравенств (12), значение выражения в скобке. Потребовав, чтобы получившееся выражение было неотрицательным при любых неотрицательных значениях P_2, P_4 , получим неравенство $2\mu^2/\beta + 10\mu\lambda^2 - \beta\mu\lambda7/9 \geq 0$. В следующей скобке заменим P_2^3 на βP_2P_4 , также уменьшив при этом, в силу (12), значение выражения. Аналогичным образом сделаем однородными выражения в остальных скобках. В результате получим систему неравенств для коэффициентов схемы:

$$\mu^3/(2\beta) + (\mu\lambda)^2 \geq 0, \quad 4\mu^2\lambda - \beta\mu^2/12 + \beta\mu\lambda^34 \geq 0, \\ 2\mu^2/\beta + 10\mu\lambda^2 - \beta\mu\lambda7/9 \geq 0, \quad \mu\lambda8 - \beta\mu/9 - \beta^2\lambda^27/3 \geq 0, \\ \mu2/\beta - \beta\lambda4/3 - \beta^2/36 \geq 0.$$

Нетрудно проверить, что данным неравенствам удовлетворяют параметры $\lambda = \beta/48$, $\mu = \beta^3/36$. Таким образом, в одномерном случае это параметры $\lambda = c/48$, $\mu = c^3/36$, в двумерном — $\lambda = c/24$, $\mu = c^32/9$, в трехмерном — $\lambda = c/16$, $\mu = c^33/4$, $c = 250/243$. Следует отметить, что наложенные нами условия на коэффициенты полинома (13) имеют характер достаточных, но не необходимых для его положительности. Возможно, существуют и другие наборы параметров исходной схемы, удовлетворяющие условию устойчивости в приближении метода Фурье.

2. Трехшаговые схемы

Выше были рассмотрены неявные схемы третьего порядка аппроксимации по времени для решения обыкновенных уравнений или уравнения переноса. Далее будут построены другие схемы третьего порядка, по некоторым качествам обладающие преимуществами по сравнению с приведенными выше.

Как и ранее, начнем со случая обыкновенных уравнений.

Итак, рассмотрим снова задачу Коши для уравнения (1). Рассмотрим трехшаговую схему

$$(u^* - u^n)3/2 = \tau\varphi(u^n, t), \quad (14)$$

$$(u^{**} - u^n)3/2 = \tau[\varphi(u^*, t + \tau2/3) + \varphi(u^n, t)]/2, \quad (15)$$

$$(1 + \xi\tau^4\varphi_u^4)(u^{n+1} - u^n) = \tau[\varphi(u^n, t)/4 + \varphi(u^{**}, t + \tau 2/3)3/4], \quad (16)$$

где $\xi > 0$ — числовой параметр, который следует определить в анализе устойчивости.

Для исследования устойчивости и точности этой схемы рассмотрим случай $\varphi(u, t) = -Au$, $A = \text{const} > 0$. Введя параметр $x = \tau A$, умножая уравнение (14) на выражение $-\tau A/3 = -x/3$ и складывая с (15), имеем

$$(u^{**} - u^n) = -xu^n 2/3 + 2u^n(x/3)^2.$$

Уравнение (16) в результате подстановки $\varphi(u, t) = -Au$ принимает вид

$$(1 + \xi x^4)(u^{n+1} - u^n) = -x(u^{**} 3/4 + u^n/4).$$

Умножая предпоследнее уравнение на выражение $-x3/4$ и складывая с последним, получаем

$$(1 + \xi x^4)(u^{n+1} - u^n) = (-x + x^2/2 - x^3/6)u^n.$$

Таким образом, коэффициент перехода для схемы имеет вид

$$\rho(x) = 1 - x(1 - x/2 + x^2/6)/(1 + \xi x^4). \quad (17)$$

Абсолютная устойчивость схемы заключается в выполнении условия $|\rho(x)| \leq 1$ при $x > 0$, что эквивалентно двум неравенствам:

$$\rho(x) \leq 1, \quad \rho(x) \geq -1,$$

которые с учетом ограничения $x > 0$ переписываются в виде соотношений

$$1 - x/2 + x^2/6 \geq 0,$$

$$x(1 - x/2 + x^2/6) \leq 2(1 + \xi x^4).$$

Первое из них выполнено всегда, второе эквивалентно неравенству

$$0 \leq (1 - x/4)^2 + x^2(3/4 - x/6)^2/3 + (\xi - 1/108)x^4,$$

которое выполнено, если $\xi \geq 1/108$. Итак, положив $\xi = 1/108$, будем иметь абсолютно устойчивую схему.

Чтобы иметь третий порядок, необходимо выполнение условия $\rho(x) - \exp(-x) = O(x^4)$, $x \rightarrow 0$, что эквивалентно соотношению $\rho(x) - (1 - x + x^2/2 - x^3/6) = O(x^4)$. Учитывая, что в (17) в числителе выражение совпадает с разложением экспоненты до нужной степени, а в знаменателе первое отличное от единицы слагаемое имеет порядок (x^4) , аппроксимационное условие выполнено, и схема имеет третий порядок по времени.

Отметим, что данная схема имеет третий порядок аппроксимации при любых значениях параметра ξ , причем можно использовать упрощенные значения величины φ_u^2 . Это позволяет облегчить реализацию схемы при решении систем большого количества обыкновенных уравнений.

Аналогичная схема со стабилизирующим оператором, содержащим четные степени шага по времени, может быть сконструирована для m -мерного уравнения переноса (6).

Рассмотрим трехшаговую схему

$$(f^* - f^n)3/(2\tau) + R_1 f^n = 0, \quad (18)$$

$$(f^{**} - f^n)3/(2\tau) + R_1(f^n + f^*)/2 = 0, \quad (19)$$

$$(1 + \eta\tau^4 R_4)(f^{n+1} - f^n)/\tau + R_1(f^n/4 + f^{**}3/4) = 0. \quad (20)$$

Здесь R_1, R_4 — разностные операторы, определенные формулами (7), (8), η — параметр, который определим позже.

Исключим разностную функцию промежуточного слоя f^* , умножив уравнение (18) на оператор $-R_1\tau/3$ и сложив его с уравнением (19). Получим уравнение

$$(f^{**} - f^n)3/(2\tau) + R_1 f^n - R_1^2 f^n/3 = 0.$$

Исключим разностную функцию промежуточного слоя f^{**} , умножив последнее уравнение на оператор $-R_1\tau/2$ и сложив его с уравнением (20), получим уравнение

$$(1 + \eta\tau^4 R_4)(f^{n+1} - f^n)/\tau + R_1(1 - \tau R_1/2 + \tau^2 R_1^2/6)f^n = 0. \quad (21)$$

Учитывая соотношение $R_1 = \partial/\partial t + O(h^4)$ и отбрасывая стабилизирующий оператор, который имеет порядок малости выше, чем порядок схемы, который мы желаем показать, последнее уравнение преобразуем к следующему виду:

$$f^{n+1} = f^n + (\tau\partial f/\partial t + \tau^2\partial^2 f/\partial t^2/2 + \tau^3\partial^3 f/\partial t^3/6)|_{t=n\tau} + O(\tau^4).$$

Поскольку это выражение совпадает с разложением в ряд Тэйлора до слагаемых четвертого порядка, то из него следует, что схема имеет третий порядок аппроксимации по времени. Четвертый порядок по пространственным переменным определяется использованием формулы (7) для аппроксимации оператора конвективного переноса.

Для исследования устойчивости снова применим метод Фурье. Представив решение в виде $f^n = \rho^n \exp(\sum_{l=1}^m \alpha_l i_l j)$, $0 \leq \alpha_l \leq 2\pi$, $j = \sqrt{-1}$, получим множитель перехода для схемы

$$\rho = 1 - jP_1 B/A - C/A,$$

где

$$A = (1 + \eta P_4), \quad B = 1 - P_1^2/6, \quad C = P_1^2/2,$$

а P_1, P_4 даются формулами (11). Несложно проверить, что условие устойчивости $|\rho|^2 \leq 1$ записывается в виде неравенства

$$P_1^2 B^2 \leq C(2A - C)$$

или, с учетом определений параметров A, B, C , в виде

$$P_1^2(1 - P_1^2/6)^2 \leq P_1^2(1 + \eta P_4 - P_1^2/4).$$

Сократив в последнем выражении неотрицательный множитель P_1^2 и перенеся всё в левую часть, получаем квадратный трехчлен относительно переменной P_1^2 . Поскольку коэффициент при старшей степени неотрицателен, максимальное значение этот трехчлен может принимать лишь на границах интервала определения переменной P_1^2 . Левая граница интервала — ноль, очевидно, обеспечивает выполнение нужного неравенства. Из соотношений (12) можно получить ограничение

$$P_1^2 \leq \gamma(P_4)^{1/2}, \quad \gamma = m(m(1 + 7/243))^{1/2}, \quad (22)$$

используя которое в качестве правого интервала переменной P_1^2 , получаем неравенство

$$(1 - \gamma(P_4)^{1/2}/6)^2 \leq (1 + \eta P_4 - \gamma(P_4)^{1/2}/4). \quad (23)$$

Положим $\eta = \gamma^2/36$. Раскрывая квадрат в левой части неравенства (23) и сокращая одинаковые члены, получаем соотношение

$$-\gamma(P_4)^{1/2}/3 \leq -\gamma(P_4)^{1/2}/4,$$

которое, очевидно, верно. Таким образом, выбор $\eta = \gamma^2/36 = m^3(1+7/243)/36$ обеспечивает устойчивость схемы (18)–(20) при любом значении τ .

Сделаем некоторые замечания по данной схеме.

1. Числовой коэффициент $1+7/243$ определяется использованием формул (7) четвертого порядка аппроксимации для конвективных слагаемых уравнения (6). Возможны другие варианты аппроксимации оператора конвективного переноса. В этом случае приведенное выше доказательство устойчивости сохраняет силу, изменится лишь данный коэффициент.

2. В многомерном случае приходится использовать факторизацию стабилизирующего оператора в уравнении (20). Не повторяя всех выкладок, укажем, что, например, для двумерных задач доказательство устойчивости сводится к доказательству неравенства (23), в котором параметр η заменен выражением $\eta[1 + P_{4x}P_{4y}/(P_{4x} + P_{4y})]$, где $P_4 = P_{4x} + P_{4y}$ соответствует расщеплению стабилизирующего оператора по пространственным переменным. Ясно, что такое неравенство тем более верно, т.е. факторизация данной схемы не нарушает ее устойчивости.

3. Факторизация не ухудшает аппроксимационных свойств схемы как по времени, так и по пространству, так как стабилизирующий оператор имеет в любом случае порядок $O(\tau^4)$.

4. Схема имеет свойство полной аппроксимации, т.е. стационарное решение не зависит от временного шага, что позволяет использовать эту схему в рамках метода установления и выбирать оптимальный шаг по времени в соответствии с критерием наиболее высокой скорости сходимости.

Естественно, схемы повышенной точности для решения гиперболических уравнений первого порядка необходимо тестировать на разрывных решениях. При этом для подавления осцилляций решения возле разрывов следует вводить искусственные диффузионные слагаемые. Отметим, что используемый здесь способ временного центрирования, характерный для схем типа Рунге — Кутты, может быть применен для построения схем повышенной точности по времени [6] для решения параболических уравнений без конвективных слагаемых. Рассмотрим уравнение теплопроводности

$$\partial f / \partial t = \sum_{l=1}^m \sum_{k=1}^m a_{kl} \partial^2 f / \partial x_k \partial x_l, \quad a_{kl} = a_{lk}, \quad 1 \leq m \leq 3.$$

Для того чтобы это уравнение было параболическим, потребуем выполнения условий: в одномерном случае $a_{11} \geq 0$, в двумерном — $a_{12}^2 \leq a_{11}a_{22}$, в трехмерном — $a_{12}^2 \leq a_{11}a_{22}$, $a_{13}^2 \leq a_{11}a_{33}$, $a_{32}^2 \leq a_{33}a_{22}$.

Введем диффузионные операторы $U_{\text{diag}} = \sum_{l=1}^m a_{ll} \Delta_l^+ \Delta_l^-$, $U = U_{\text{diag}} + \sum_{l=1}^m \sum_{k \neq l} a_{kl} \Delta_l^0 \Delta_k^0$. Рассмотрим двухшаговую схему

$$(1 - \lambda \tau U_{\text{diag}})(f^* - f^n)3/(2\tau) = U f^n, \quad (24)$$

$$(1 - \tau\lambda U_{\text{diag}})(f^{n+1} - f^n)/\tau + \tau\lambda U_{\text{diag}}(f^* - f^n)3/2 = U(f^n/4 + f^*3/4). \quad (25)$$

Здесь λ — параметр, который определяется при анализе устойчивости схемы. Оказывается, что выбор $\lambda = m/4$ гарантирует [6] устойчивость данной схемы, т. е. в одномерном случае следует использовать $\lambda = 1/4$, в дву- и трехмерном случаях — $\lambda = 1/2$ и $\lambda = 3/4$.

Данная схема имеет второй порядок как по времени, так и по пространственным переменным. Достоинством схемы является то, что факторизация стабилизирующего оператора по пространственным переменным не ухудшает ее аппроксимационные свойства и оставляет устойчивой. Второй порядок имеет место несмотря на несогласованность стабилизирующего оператора с правой частью, а именно, этот оператор не содержит смешанных производных.

Однако, как показывает анализ Фурье, объединение приведенных выше аппроксимаций для диффузионных членов и аппроксимаций (9)–(10) или (18)–(20) не позволяет получить устойчивую схему. Попытки расчетов оказались безуспешными также в случае, когда диффузия вводилась максимально устойчивым, согласно обычным представлениям, образом, а именно, в уравнения (18)–(20) в правую часть добавлялись явные диффузионные слагаемые, а в уравнение (20) соответствующая добавка с коэффициентом 1 введена в стабилизирующий оператор (обычно в одномерных задачах достаточно использовать коэффициент $1/2$).

В дальнейших поисках было найдено обобщение схемы (18)–(20), в котором аппроксимационные свойства по времени снижены, однако имеет место абсолютная устойчивость. Итак, рассмотрим m -мерное уравнение переноса с эллиптическим оператором в правой части (ориентируясь на включение в схему (18)–(20) искусственной вязкости, будем полагать, что этот оператор не содержит смешанных производных):

$$\partial f / \partial t + \sum_{l=1}^m a_l \partial f / \partial x_l = Df. \quad (26)$$

Введя соответствующий диффузионный разностный оператор U , построим трехшаговую схему:

$$(f^* - f^n)3/(2\tau) + R_1 f^n = U f^n, \quad (27)$$

$$(1 - \xi\tau^2 R_2 - \tau U/2)(f^{**} - f^n)3/(2\tau) + R_1(f^n + f^*)/2 = U f^n, \quad (28)$$

$$(1 + \eta\tau^4 R_4 - \xi\tau^2 R_2 - \tau U/2)(f^{n+1} - f^n)/\tau + R_1(f^n/4 + f^{**}3/4) = U f^n. \quad (29)$$

Здесь R_1, R_2, R_4 — разностные операторы, определяемые формулами (7), (8), $\eta = m^3(1 + 7/243)/36$, ξ — параметр, который определим в анализе устойчивости.

Исключим разностную функцию промежуточного слоя f^* , умножив уравнение (27) на оператор $-R_1\tau/3$ и сложив его с уравнением (28). Получим уравнение

$$(1 - \xi\tau^2 R_2 - \tau U/2)(f^{**} - f^n)3/(2\tau) + R_1 f^n - \tau R_1^2 f^n/3 = 0.$$

Исключим разностную функцию промежуточного слоя f^{**} , умножив последнее уравнение на оператор $-R_1\tau/2$ и сложив его с (29), умноженным на оператор $1 - \xi\tau^2 R_2 - \tau U/2$; в результате получим уравнение

$$(1 - \tau U/2 - \xi\tau^2 R_2 + \eta\tau^4 R_4)(1 - \xi\tau^2 R_2 - \tau U/2)(f^{n+1} - f^n)/\tau +$$

$$+(R_1 - U)(1 - \xi\tau^2 R_2 - \tau U/2 - \tau R_1/2 + \tau^2 R_1^2/6)f^n = 0. \quad (30)$$

Используя для исследования устойчивости метод Фурье, получаем множитель перехода для схемы

$$\rho = 1 - jP_1 B/A - C/A,$$

где

$$A = (1 + \xi P_2 + \eta P_4 + V/2)(1 + \xi P_2 + V/2), \quad B = 1 + \xi P_2 - P_1^2/6,$$

$$C = P_1^2/2 + V(1 + \xi P_2 + V/2 - P_1^2/6),$$

P_1, P_4 даются формулами (11), $V \geq 0$ — спектральный образ оператора $-\tau U$. Несложно проверить, что условие устойчивости $|\rho|^2 \leq 1$ записывается в виде неравенства

$$C(2A - C) \geq P_1^2 B^2$$

или, с учетом определений параметров A, B, C ,

$$\begin{aligned} & [P_1^2/2 + V(1 + \xi P_2 + V/2 - P_1^2/6)][2(1 + \xi P_2 + \eta P_4 + V/2)(1 + \xi P_2 + V/2) - \\ & - P_1^2/2 - V(1 + \xi P_2 + V/2 - P_1^2/6)] - P_1^2[1 + \xi P_2 - P_1^2/6]^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (31)$$

При введении величины $G = (1 + \xi P_2 + \eta P_4)(1 + \xi P_2 + V/2) - P_1^2 V/12 - P_1^2/4$, то (31) можно переписать в следующем виде:

$$[2V(1 + \xi P_2 + V/2 - P_1^2/6)]G + P_1^2[G - (1 + \xi P_2 - P_1^2/6)^2] \geq 0.$$

Таким образом, если величина G и фигурирующие в последнем неравенстве выражения в квадратных скобках неотрицательны, то оно, очевидно, верно. Если выбрать $\xi = \beta/6$, где $\beta = m250/243$ — параметр, связывающий, ввиду неравенств (12), величины P_2, P_1 , то выражение в первой квадратной скобке (31) неотрицательно. Выражение во второй квадратной скобке заведомо меньше G , и, следовательно, если оно неотрицательно, то и G неотрицательно, и нужное нам неравенство верно. Итак, докажем неотрицательность выражения во второй квадратной скобке, причем запишем его, используя тождество $(1 + \xi P_2 - P_1^2/6)^2 = (1 + \xi P_2)(1 + \xi P_2 - P_1^2/3) + (P_1^2/6)^2$. В результате получаем следующее неравенство:

$$(\gamma^2/36P_4 + P_1^2/3)(1 + \xi P_2) + (1 + \gamma^2/36P_4 + \xi P_2)V/2 + P_1^2 V/12 - P_1^2/4 - (P_1^2/6)^2 \geq 0.$$

Отбросим множитель $(1 + \xi P_2)$ возле первой скобки, тем самым лишь уменьшая, возможно, левую часть искомого неравенства. Поскольку слагаемые в ней в совокупности с двумя вычитаемыми в конце соотношения, с учетом (22), образуют неотрицательное выражение и остальные слагаемые неотрицательны, то неравенство (31) справедливо.

Итак, абсолютно устойчивая схема с диффузионными слагаемыми построена. Однако включение диффузии достигнуто за счет понижения аппроксимационных свойств схемы. Варианты построения диффузионных операторов и способы избежать понижения аппроксимационных свойств схемы обсуждаются далее при численном исследовании одного точного решения уравнения Бюргерса. Рассмотрим нелинейное уравнение

$$\partial u/\partial t + \partial(u^2/2)/\partial x = 0. \quad (32)$$

Построим трехшаговую схему:

$$(u^* - u^n)3/(2\tau) + R_1(u^n)^2/2 = U^n u^n, \quad (33)$$

$$(1 - \xi\tau^2 R_2^* - \tau U^*/2)(u^{**} - u^n)3/(2\tau) + R_1[(u^n)^2 + (u^*)^2]/4 = U^* u^n, \quad (34)$$

$$(1 + \eta\tau^4 R_4^{**} - \xi\tau^2 R_2^{**} - \tau U^{**}/2)(u^{n+1} - u^n)/\tau + R_1[(u^n)^2 + (u^{**})^2]3/8 = U^{**} u^n. \quad (35)$$

Здесь $\eta = (1 + 7/243)/36$, $\xi = (1 + 7/243)/6$, $R_1 = \Delta^0(1 - \delta^- \delta^+ / 6)$, R_2 , R_4 , U — нелинейные разностные операторы, верхний индекс которых отмечает временной слой, на котором вычисляются фигурирующие в них коэффициенты. Например, $R_4^* = (1/2)^4 \Delta^- (u_i^* + u_{i+1}^*)^4 \Delta^+ \Delta^- \Delta^+$. Операторы U с различными индексами предназначены для подавления осцилляций решения возле скачков и строятся на основе подхода [7], в частности:

$$U^* = \Delta^- | u_{i+1}^* + u_i^* | (1 - \gamma_i^*/2 - \gamma_{i+1}^*/2) \delta^+,$$

$$\gamma_i^* = [\min\text{mod}(| \delta^+ u_i^* |, s_i \delta^- u_i^* 2\lambda + \epsilon) + \min\text{mod}(| \delta^- u_i^* |, s_{i-1} \delta^+ u_i^* 2\lambda + \epsilon)] /$$

$$/(| \delta^+ u_i^* | + | \delta^- u_i^* | + 10^{-8}), \quad \epsilon = 10(u^{\max*} - u^{\min*})/I^2, \quad 1 \leq i \leq I.$$

Другие верхние индексы у данного оператора повлекут использование таких же индексов в правой части приведенных формул. Как обычно, $\min\text{mod}(x, y) = \text{sign}(x) \times \max[0, \min(\text{sign}(x)y, | y |)]$. Отметим, что для “гладкого” решения вне экстремумов имеет место $\gamma_i = 1$, и, нетрудно видеть, диффузионные слагаемые исчезают. Возле разрывов коэффициенты γ_i принимают значения, меньшие единицы. Малая константа ϵ введена для того, чтобы не включать диффузионные слагаемые низкого порядка вблизи “гладких” экстремумов. Этот прием предложен в [8] для построения TVB-схем, т. е. схем с ограниченной полной вариацией (вообще говоря, возрастающей, в отличие от TVD-схем).

В приведенных выше формулах коэффициенты γ_i являются индикаторами включения искусственной диффузии. Поэтому их удобно использовать при построении стабилизирующего оператора R_2 , который, как показывает анализ схемы (18) – (20), может отсутствовать при нулевой искусственной диффузии и должен включаться, когда она появляется.

В итоге использовалась формула

$$R_2^* = 0.25 \Delta^- (u_i^* + u_{i+1}^*)^2 e_{i+1/2} \Delta^+, \quad e_{i+1/2} = \min(2 - \gamma_i^* - \gamma_{i+1}^*, c)(250/243)/(6c),$$

здесь $c \geq 0$ — эмпирическая константа, влияющая на размеры области, где включен стабилизирующий оператор R_2 . Отметим, что на гладком решении $e = 0$, и схема имеет третий порядок аппроксимации по времени. Максимальное значение параметра e равно, как и следует в соответствии с анализом устойчивости схемы (27) – (29), $(250/243)/6$. В пробных расчетах найдено, что величина $c = 0.125$ обеспечивает приемлемые результаты.

3. Результаты расчетов

Рассмотрим результаты решения уравнения (32) с начальным распределением, представляющим собой прямоугольник единичной высоты на нулевом фоне. При этом передний скачок распространяется со скоростью 0.5, второй скачок, имеющийся в начальный момент времени, превращается в линейное распределение, левая граница которого, смыкающаяся

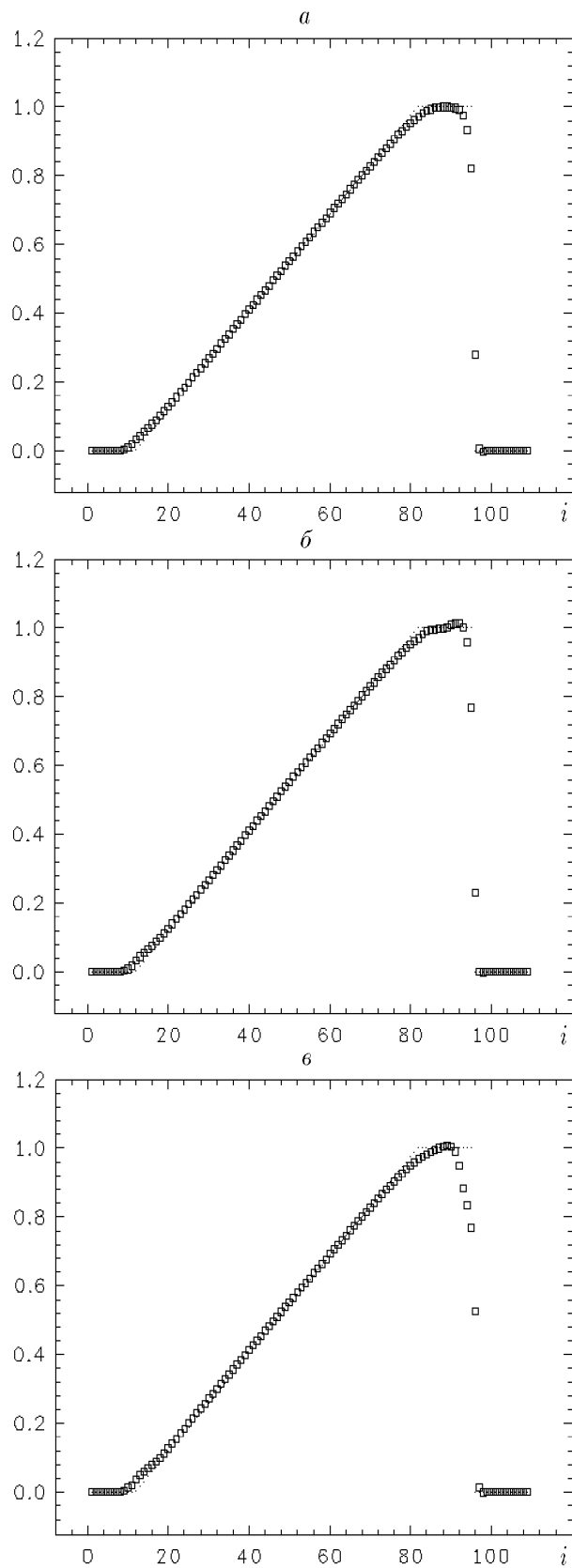


Рис. 1. Уравнение Бюргерса; число Куранта равно 0.5 (*a*), 1 (*б*), 2 (*в*).

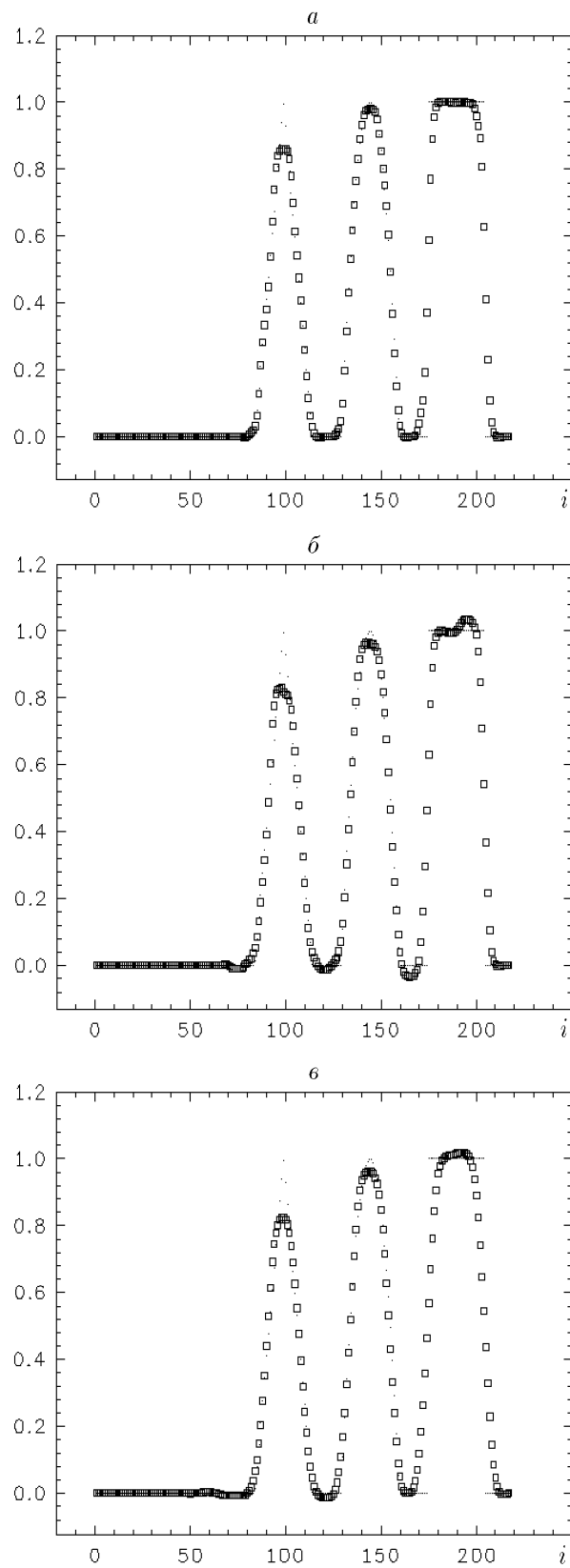


Рис. 2. Уравнение переноса; число Куранта равно 0.5 (*a*), 1 (*б*), 2 (*в*).

с нулевым фоном, неподвижна, а правая, на которой значение u равно единице, движется с единичной скоростью вправо, постепенно догоняя разрыв.

На рис. квадратиками изображено численное, точками — точное решение в момент времени $t = 0.65$ для чисел Куранта 0.5, 1, 2. Используется равномерная сетка, содержащая 108 узлов по переменной x . Произведено 140, 70, 35 шагов схемы (33)–(35) численного интегрирования уравнения (32). При дальнейшем увеличении временного шага решение значительно ухудшается.

Для тестирования численных методов популярной является задача линейного переноса возмущений различных форм. Эта задача решалась численным интегрированием одномерного уравнения переноса с помощью схемы (33)–(35), в которой в качестве потоков вместо $u^2/2$ используется u , в стабилизирующих операторах u заменяется на 1, однако диссипативные операторы и адаптивные алгоритмы сохранены для возможности моделирования возмущений с разрывами функции или ее производных. Начальное распределение включает последовательно треугольное, параболическое и прямоугольное возмущения единичной высоты.

На рис. 2 квадратиками изображено численное, точками — точное решение в момент времени $t = 0.33$ для чисел Куранта 0.5, 1, 2. Используется равномерная сетка, включающая 217 узлов. Произведено 144, 72, 36 шагов схемы. При дальнейшем увеличении временного шага решение, как и для уравнения Бюргерса, значительно ухудшается.

Список литературы

- [1] РУСАНОВ В. В. Разностные схемы третьего порядка точности для сквозного расчета разрывных решений. *Докл. АН СССР*, **180**, №6, 1968, 1303–1305.
- [2] BURSTEIN S.Z., MIRIN A.A. Third order difference methods for hyperbolic equations. *J. Comput. Phys.*, **5**, No. 3, 1970, 547–571.
- [3] KUTLER P., LOMAX H., WARMING R. Computation of space shuttle flow fields using noncentered finite-difference schemes. *AIAA Paper*, No. 72–193, 1972.
- [4] ТОЛСТЫХ А.И. *Компактные разностные схемы и их приложения к проблемам аэрогидродинамики*. Наука, М., 1990.
- [5] НОВИКОВ Е.А. *Явные методы для жестких систем*. Наука, Новосибирск, 1997.
- [6] ПИНЧУКОВ В.И. *Численные методы аэрогидромеханики высоких порядков аппроксимации*. Новосиб. гос. ун-т, 1997.
- [7] ПИНЧУКОВ В.И. Энтروпийные и квазиэнтропийные условия для схем высоких порядков аппроксимации. *Вычислит. технологии*, **2**, №6, 1997, 71–87.
- [8] SHU C.W. TVB Uniformly High-Order Schemes for Conservation Laws. *Math. Comput.*, **49**, No. 179, 1987, 105–121.

*Поступила в редакцию 18 июня 1998 г.,
в переработанном виде 4 декабря 1998 г.*