Разностная схема 4-го порядка точности для дифференциального уравнения с переменными коэффициентами

Гордин В.А. [1,2]***, Цымбалов Е.А.*** [1]
[1] *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»*
[2] *ФГБУ «Гидрометцентр России»*

Аппроксимируется линейное обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка с переменным коэффициентом. Для краевой задачи получена компактная разностная схема, 4-го порядка точности. Приведены результаты численных экспериментов с этой схемой и сравнения с расчетами по классической дивергентной схеме.

Ключевые слова: компактные разностные схемы, порядок сходимости, тестовые функции, самосопряженность.

1. Введение

Рассматривается компактная разностная аппроксимация линейного обыкновенного уравнения второго порядка с переменным коэффициентом на отрезке $[-\pi;\pi]$:

$$-d_x\theta(x)d_xu = f(x), \qquad (1.1)$$

где $\theta(x), f(x)$ - известные функции: $\theta(x) > 0$ - коэффициент дифференциального уравнения, $f(x)$ - правая часть. В экспериментах рассмотрен только случай граничных условий первого рода. Построена компактная разностная схема, в которой для неизвестной функции используется трехточечный шаблон и нужно решить систему линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей (а значит, решение вычисляется обычной прогонкой). Добавление в уравнение (1.1) младшего члена:

$$-d_x\theta(x)d_xu + \rho(x)u = f(x), \qquad (1.2)$$

оставляет матрицу трехдиагональной и порядок точности аппроксимации не меняет.

В случае, когда коэффициенты ϑ постоянны, разностные уравнения компактной схемы во внутренних точках сетки на трехточечном шаблоне имеют вид

$$\vartheta[24u(x_j) - 12(u(x_{j-1}) + u(x_{j+1}))] = [(f(x_{j-1}) + f(x_{j+1})) + 10f(x_j)]h^2, \qquad (1.3)$$

где $j = 1,...,N-1$, $(N+1)$ – количество точек сетки.

Уравнение (1.2) в этом случае аппроксимируется следующим образом:

$$\vartheta[24u(x_j) - 12(u(x_{j-1}) + u(x_{j+1}))] = [(f(x_{j-1}) - \rho(x_{j-1})u(x_{j-1}) + f(x_{j+1}) - \rho(x_{j+1})u(x_{j+1})) + 10f(x_j) - \rho(x_j)u(x_j)]h^2$$

или

$$\left[24\vartheta+10\rho(x_j)h^2\right]u(x_j)-\left[12\vartheta+\rho(x_{j-1})h^2\right]u(x_{j-1})-\left[12\vartheta+\rho(x_{j+1})h^2\right]u(x_{j+1})= \\ =[(f(x_{j-1})+f(x_{j+1}))+10f(x_j)]h^2. \qquad (1.4)$$

Известно, что решение краевых задач для уравнений (1.1) и (1.2) в этом случае аппроксимируется по схеме (1.3) или (1.4) с 4-м порядком точности; см., например, [горд-05, горд-10]. Для реализации такой схемы требуется всего $O(N)$ арифметических операций, т. е. она весьма экономична.

В работе строится схема 4-го порядка для аппроксимации уравнений (1.1) и (1.2) при переменных гладких коэффициентах. Для обеспечения 4-го порядка оказывается недостаточным использовать значения функции - коэффициента ϑ на трехточечном шаблоне (в тех точках сетки, где ищется неизвестная функция, - они ниже нумеруются целыми значениями индекса), и в наши расчеты включены значения коэффициента (но не решения и не правой части уравнения) в полуцелых точках сетки. На объеме вычислений это почти не сказывается, - решение краевой задачи снова сводится к обычной трехточечной прогонке.

Краевые задачи для линейных дифференциальных уравнений второго порядка встречаются в большом количестве различных приложений, как непосредственно, так и в виде важной части задачи для уравнений и систем в частных производных, которые допускают разделение переменных, [Тихонов-Самарский, гордин-10]. Обычно речь идет о L^2-самосопряженных задачах (к такому виду умножением на подходящую функцию можно привести любое линейное обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка), и важно, чтобы и разностная аппроксимация также сохранила свойство самосопряженности – предложенные схемы это обеспечивают. Разностные схемы 4-го порядка точности существенно более экономичны по сравнению с классическими схемами 2-го порядка – в этом их главное достоинство.

В работе рассматриваются уравнения с гладкими коэффициентами и правой частью; случай компактной разностной аппроксимации уравнения (1.1) с разрывными коэффициентом ϑ и (или) правой частью f предполагается рассмотреть в отдельной публикации.

Если коэффициент дифференциального уравнения $\vartheta(x)$ имеет корни (особые точки дифференциального уравнения (1.1)), то это существенно меняет свойства фундаментальной системы решений однородного уравнения (ф значит, и функции Грина краевой задачи) – возможны негладкие и даже неограниченные решения, см., например, [федорюк]. Наиболее распространенный в приложениях случай – особые точки расположены на краях отрезка $[-\pi;\pi]$. В этом случае разностная аппроксимация должна учитывать асимптотику искомого решения уравнения (1.1) в окрестности края, см., например, [абрамов, гордин-10].

2. Компактная аппроксимация

Будем выбирать аппроксимацию дифференциального уравнения (1.1) вида:

$$R_{j,+}u_{j+1}+R_{j,0}u_j+R_{j,-}u_{j-1}=p_jf(x_{j+1})+q_jf(x_j)+r_jf(x_{j-1}),\ \ j=1...N-1, \qquad (2.1)$$

где *N-1* – число внутренних узлов равномерной сетки на отрезке $[-\pi;\pi]$, и пусть $h=2\pi N^{-1}$ - шаг сетки.

Сформулируем требования к коэффициентам искомой разностной схемы (2.1):

i) l^2 - самосопряженность разностного оператора (поскольку дифференциальный в уравнении (1.1) имеет L^2 - самосопряженную форму):

$$R_{j+1,-} = R_{j,+},\ j = 1...N-1. \qquad (2.2)$$

ii) Константа (*u(x) = const*) принадлежит ядру дифференциального оператора (1.1), а, следовательно, этим свойством должен обладать и разностный оператор (2.1). Отсюда следует равенство:

$$R_{j,+} + R_{j,0} + R_{j,-} = 0,\ j = 1,...,N-1. \qquad (2.3)$$

iii) Для расчета коэффициента схемы $R_{j,+}$ в формуле (2.3) будем использовать значения коэффициента дифференциального уравнения $\vartheta(x)$ в следующих пяти точках (целых и полуцелых): $x_{j+k/2} = (j + k/2)\mathrm{h},\ k = -2,...,2$. Поскольку коэффициент $\vartheta(x)$ предполагается везде строго положительным, будем применять полиномиальную интерполяцию не к нему, а к его логарифму. Другими словами, используем представление

$$\vartheta(\mathrm{y}) \approx A\exp\left(ay + by^2 + cy^3 + dy^4\right),\ y = x - jh, \qquad (2.4)$$

где A, *a, b, c, d* – коэффициенты, зависящие от индекса *j*.

Тогда $A = \vartheta(0)$, а для вычисления остальных четырех коэффициентов получаем:

$$\ln\vartheta(\mathrm{y}) \approx \ln A + \left(ay + by^2 + cy^3 + dy^4\right),$$

где $\ln A$, *a, b, c, d* – коэффициенты Тейлора для логарифма коэффициента при *y*=0.

Используем интерполяционные условия:

$$\ln[\vartheta(\mathrm{y}_j)/\vartheta(\mathrm{y}_0)] = ay_j + by_j^{\ 2} + cy_j^{\ 3} + dy_j^{\ 4},\ j = -1, -1/2, 1/2, 1.$$

Из этой системы четырех линейных алгебраических уравнений:

$$\ln[\vartheta(-h)/\vartheta(0)] = a(-h) + b(-h)^2 + c(-h)^3 + d(-h)^4$$
$$\ln[\vartheta(-h/2)/\vartheta(0)] = a(-h/2) + b(-h/2)^2 + c(-h/2)^3 + d(-h/2)^4$$
$$\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)] = a(h/2) + b(h/2)^2 + c(h/2)^3 + d(h/2)^4$$
$$\ln[\vartheta(h)/\vartheta(0)] = a(h) + b(h)^2 + c(h)^3 + d(h)^4$$

находим коэффициенты *a,b,c,d*:

$$\begin{aligned}
a &= 6h^{-1}(-\ln[\vartheta(h)/\vartheta(0)] + 8\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)] + \ln[\vartheta(-h)/\vartheta(0)] - 8\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)]) \\
b &= 6h^{-2}(-\ln[\vartheta(h)/\vartheta(0)] + 16\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)] - \ln[\vartheta(-h)/\vartheta(0)] + 16\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)]) \\
c &= 3h^{-3}(2\ln[\vartheta(h)/\vartheta(0)] - 4\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)] - 2\ln[\vartheta(-h)/\vartheta(0)] + 4\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)]) \\
d &= 6h^{-4}(2\ln[\vartheta(h)/\vartheta(0)] - 8\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)] + 2\ln[\vartheta(-h)/\vartheta(0)] - 8\ln[\vartheta(h/2)/\vartheta(0)])
\end{aligned} \quad . \qquad (2.5)$$

iv) Условие максимального порядка аппроксимации, используемое для построения компактных схем. Положим *j=0* в равенстве (2.1) – оно должно быть верным для четырех пар тестовых функций

$$< u_k(x),\ f_k(x) >,\ k = 1,2,3,4 \text{, где } u_k(x) = x^k, \qquad (2.6)$$

а правые части f_k получаются по формулам (1.1) и (2.4):

$$f_k(x) = -Akx^{k-2}\exp(ax + bx^2 + cx^3 + dx^4)(4dx^4 + 3cx^3 + 2bx^2 + ax + k - 1) =$$
$$= -\vartheta(x)\left[kx^{k-2}(4dx^4 + 3cx^3 + 2bx^2 + ax + k - 1)\right].$$

Подставляя в (2.1), получим

$$R_{j,+}h^k + R_{j,-}(-h)^k = p_j f_k(x_{j+1}) + q_j f_k(x_j) + r_j f_k(x_{j-1}),\ k = 1,...,4, \qquad (2.7)$$

т. е. при всех *j=1,...N-1* четыре линейных однородных алгебраических уравнения с пятью неизвестными: $R_{j,+}, R_{j,-}, p_j, q_j, r_j$, причем коэффициенты (а значит, и компоненты решения) зависят от параметров $\left\{\vartheta_{j+k/2}\right\}_{k=-2}^{2}$. Коэффициенты системы (2.7) при трех последних неизвестных для *k*=1, 2, 3, 4 приведены в таблице (*a, b, c, d* выражаются из (2.5))

k

1	$-\vartheta_{j+1}\cdot\left(4dh^3 + 3ch^2 + 2bh + a\right)$	$-\vartheta_j \cdot a$	$-\vartheta_{j-1}\cdot\left(-4dh^3 + 3ch^2 - 2bh + a\right)$
2	$-\vartheta_{j+1}\cdot[2\left(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 1\right)]$	$-2\vartheta_j$	$-\vartheta_{j-1}\cdot[2\left(4dh^4 - 3ch^3 + 2bh^2 - ah + 1\right)]$
3	$-\vartheta_{j+1}\cdot[3\mathrm{h}\left(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 2\right)]$	0	$-\vartheta_{j-1}\cdot[3\mathrm{h}\left(-4dh^4 + 3ch^3 - 2bh^2 + ah - 2\right)]$
4	$-\vartheta_{j+1}\cdot[4\mathrm{h}^2\left(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 3\right)]$	0	$-\vartheta_{j-1}\cdot[4\mathrm{h}^2\left(4dh^4 - 3ch^3 + 2bh^2 - ah + 3\right)]$

Поскольку все значения коэффициента $\vartheta(x)$ положительны, можно ввести новые неизвестные: $P_j = \vartheta(x_{j+1})p_j, \mathrm{Q}_j = \vartheta(x_j)q_j, \mathrm{R}_j = \vartheta(x_{j-1})r_j$.

Тогда таблицу коэффициентов следует переписать:

1	$-\left(4dh^3 + 3ch^2 + 2bh + a\right)$	$-a$	$-\left(-4dh^3 + 3ch^2 - 2bh + a\right)$
2	$-2\left(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 1\right)$	-2	$-2\left(4dh^4 - 3ch^3 + 2bh^2 - ah + 1\right)$
3	$-3\mathrm{h}\left(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 2\right)$	0	$-3\mathrm{h}\left(-4dh^4 + 3ch^3 - 2bh^2 + ah - 2\right)$
4	$-4\mathrm{h}^2\left(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 3\right)$	0	$-4\mathrm{h}^2\left(4dh^4 - 3ch^3 + 2bh^2 - ah + 3\right)$

Из этих четырех линейных алгебраических однородных уравнений с пятью неизвестными можно исключить переменные $P_j, \mathrm{Q}_j, \mathrm{R}_j$ и выразить: $R_{j,-} = \Omega_j \cdot R_{j,+}$.

Оба коэффициента, $R_{j,-}$ и $R_{j,+}$ зависят от параметров *a, b, c, d, h.*

Поскольку параметры *a, b, c, d* выражаются через значения $\left\{\vartheta_{j+k/2}\right\}_{k=-2}^{2}$, это же верно и для $R_{j,-}$ и $R_{j,+}$, но первый – от первых (левых) трех, а второй – от последних (правых) трех значений. Символьные вычисления дают нам явную формулу для функции $\Omega_j\left(\vartheta_{j-1}, \vartheta_{j-1/2}, \vartheta_j, \vartheta_{j+1/2}, \vartheta_{j+1}\right)$.

Коэффициенты разностной схемы в общем виде выражаются через функцию трех переменных F:

$$R_{j+} = F\left(\vartheta_j, \vartheta_{j+1/2}, \vartheta_{j+1}\right), R_{j-} = F\left(\vartheta_j, \vartheta_{j-1/2}, \vartheta_{j-1}\right) \Rightarrow R_{j0} = -F\left(\vartheta_{j+1}, \vartheta_{j+1/2}, \vartheta_j\right) - F\left(\vartheta_j, \vartheta_{j-1/2}, \vartheta_{j-1}\right).$$

Условие самосопряженности разностного оператора эквивалентно симметричности функции:

$$R_{j+} = R_{j+1,-} \Rightarrow F\left(x, y, z\right) = F\left(z, y, x\right).$$

Поскольку оператор (1) линейно зависит от коэффициента, функция F однородна первой степени по совокупности переменных.

Эти два условия означают, что F может быть представлена в виде

$$F = \vartheta_{j+1/2} \cdot g\left(\vartheta_{j+1/2}, \frac{\vartheta_{j+1} + \vartheta_j}{2}, \sqrt{\vartheta_{j+1}\vartheta_j}\right),$$

где g – произвольная однородная функция (трех переменных), однородная нулевой степени. Классическая дивергентная схема получается при выборе g=const. Поскольку нас интересуют лишь положительные значения аргументов, схемы можно параметризовать одной функцией двух переменных:

$$F\left(\vartheta_j, \vartheta_{j+1/2}, \vartheta_{j+1}\right) = \vartheta_{j+1/2} \cdot H\left(\frac{\vartheta_{j+1} + \vartheta_j}{2\vartheta_{j+1/2}}, \frac{\sqrt{\vartheta_{j+1}\vartheta_j}}{\vartheta_{j+1/2}}\right) = \vartheta_{j+1/2} \cdot K\left(\ln\left[\frac{\vartheta_{j+1} + \vartheta_j}{2\vartheta_{j+1/2}}\right], \ln\left[\frac{\sqrt{\vartheta_{j+1}\vartheta_j}}{\vartheta_{j+1/2}}\right]\right),$$

где H, K – произвольные функции.

Нас особенно интересует случай близких друг к другу значений коэффициента в соседних точках, т. е. там, где логарифмы близки к нулю.

Таким образом, необходимое и достаточное условие самосопряженности оператора и 4-го порядка точности разностной аппроксимации – тождественное (или с малой погрешностью) выполнение соотношения

$$\vartheta_{j-1/2} \cdot K\left(\ln\left[\frac{\vartheta_{j-1} + \vartheta_j}{2\vartheta_{j-1/2}}\right], \ln\left[\frac{\sqrt{\vartheta_{j-1}\vartheta_j}}{\vartheta_{j-1/2}}\right]\right) = \Omega_j\left(\vartheta_{j-1}, \vartheta_{j-1/2}, \vartheta_j, \vartheta_{j+1/2}, \vartheta_{j+1}\right) \vartheta_{j+1/2} \cdot K\left(\ln\left[\frac{\vartheta_{j+1} + \vartheta_j}{2\vartheta_{j+1/2}}\right], \ln\left[\frac{\sqrt{\vartheta_{j+1}\vartheta_j}}{\vartheta_{j+1/2}}\right]\right). \quad (2.7)$$

В этом функциональном уравнении неизвестной является функция трех переменных K. Если равенство (2.7) продифференцировать по переменным $\vartheta_{j+1/2}$ или ϑ_{j+1}, то в левой части получаем нуль. Таким образом, мы получаем переопределенную систему из двух дифференциальных уравнений на функцию K. Полное решение этой задачи пока не получено. Однако уже удалось построить схему 4-го порядка точности.

Полученная компактная схема в численных экспериментах сравнивается с классической дивергентной схемой [Самарский]:

$$\theta(x_{j-1/2})u(x_{j-1}) - [\theta(x_{j-1/2}) + \theta(x_{j+1/2})]u(x_j) + \theta(x_{j+1/2})u(x_{j+1}) = f(x_j)h^2. \quad (2.8)$$

Полученную схему легко обобщить на случай аппроксимации линейного самосопряженного дифференциального уравнения второго порядка с коэффициентом при младшем члене (потенциалом) *q(x)*:

$$-d_x\rho(x)d_x u + q(x)u = f\ . \qquad (2.8)$$

Численные эксперименты для уравнения (2.8) вместо (1.1) показали схожие результаты в этом случае; амплитуда колебаний потенциала *q(x)* на относительные результаты погрешности схем не влияет.

3. Численные эксперименты

Численный эксперимент по сравнению компактной разностной схемы (2.1) и классической дивергентной (2.7) проведен на пробных решениях (1.1):

$$u = \sin^2(x);\ \theta(x) = x^3 + 1;$$
$$f = -\cos(2x)(2x^3 + 2) - 3\,\mathrm{x}^2\sin(2\,\mathrm{x}). \qquad (3.1)$$

и

$$u = \sin(x)\cos^2(x);\ \theta(x) = K\cos^2(x) + 1;$$
$$f = -\sin(x)[9\,\mathrm{K} - 24\,\mathrm{K}\sin^2(\mathrm{x}) + 15\,\mathrm{K}\sin^4(\mathrm{x}) - 9\sin^2(\mathrm{x}) + 7]. \qquad (3.2)$$

В формуле (3.2) числовой параметр *K* регулирует амплитуду колебаний коэффициента $\theta(x)$.

На обоих решениях схема (2.1) показала второй порядок точности, в то время как компактная схема (2.7) демонстрирует четвертый порядок и меньшую погрешность, см. Табл. 3.1, Рис. 3.1, 3.3. Невязка схемы (2.7) схожа с оной для схемы (2.1), см. Рис. 3.2, 3.4; однако норма невязки компактной схемы меньше на несколько порядков.

Таблица 3.1.
Результаты численных экспериментов для решений (3.1), (3.2).

	Схема	**(3.1)**	**(3.2), K = 100**	**(3.2), K = 10**	**(3.2), K = 0.1**	**(3.2), K=0.0001**
Погрешность (C) при N = 100	Классик	1.31-3	1.20-3	7.65-4	7.93-4	7.99-4
	Компакт	1.68-6	4.38-5	8.43-6	1.75-6	1.38-6
Погрешность (C) при N = 1000	Классик	1.29-5	1.16-5	7.49-6	7.78-6	7.83-6
	Компакт	1.71-10	4.23-9	8.04-10	1.69-10	2.25-10
Порядок	Классик	2.0080	2.0147	2.0089	2.0082	2.0086
	Компакт	3.9912	4.0151	4.0204	4.0149	3.7869
Отношение погрешностей при N = 1000 (классик / компакт)		75272	2750	9315	45919	34802

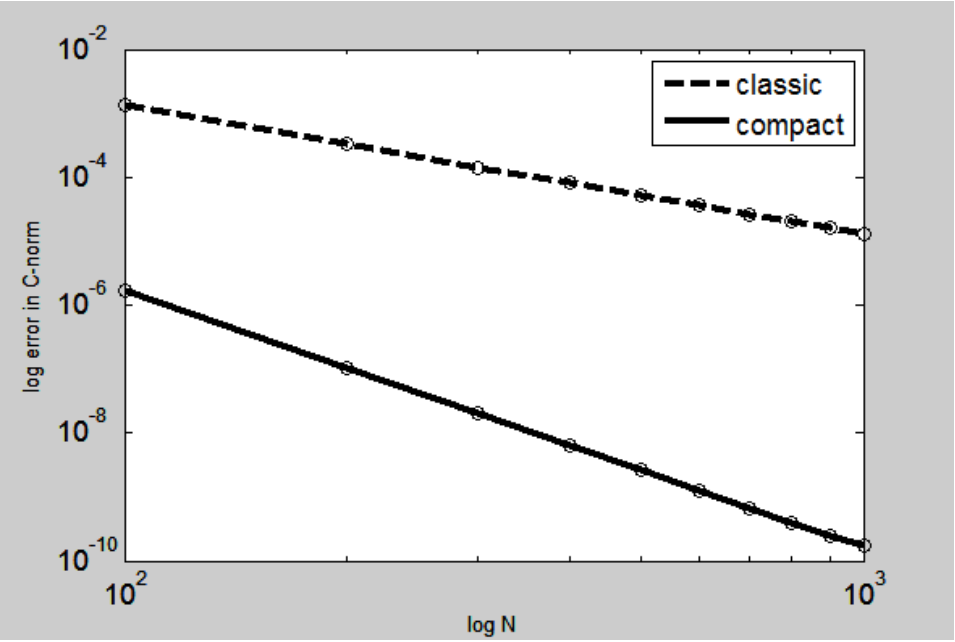

Рис. 3.1. Зависимость чебышевской нормы погрешности схем от числа узлов сетки на решении (3.1). Билогарифическая шкала. Классическая схема (2.7) имеет второй порядок аппроксимации, компактная (2.1) – четвертый и меньшую погрешность.

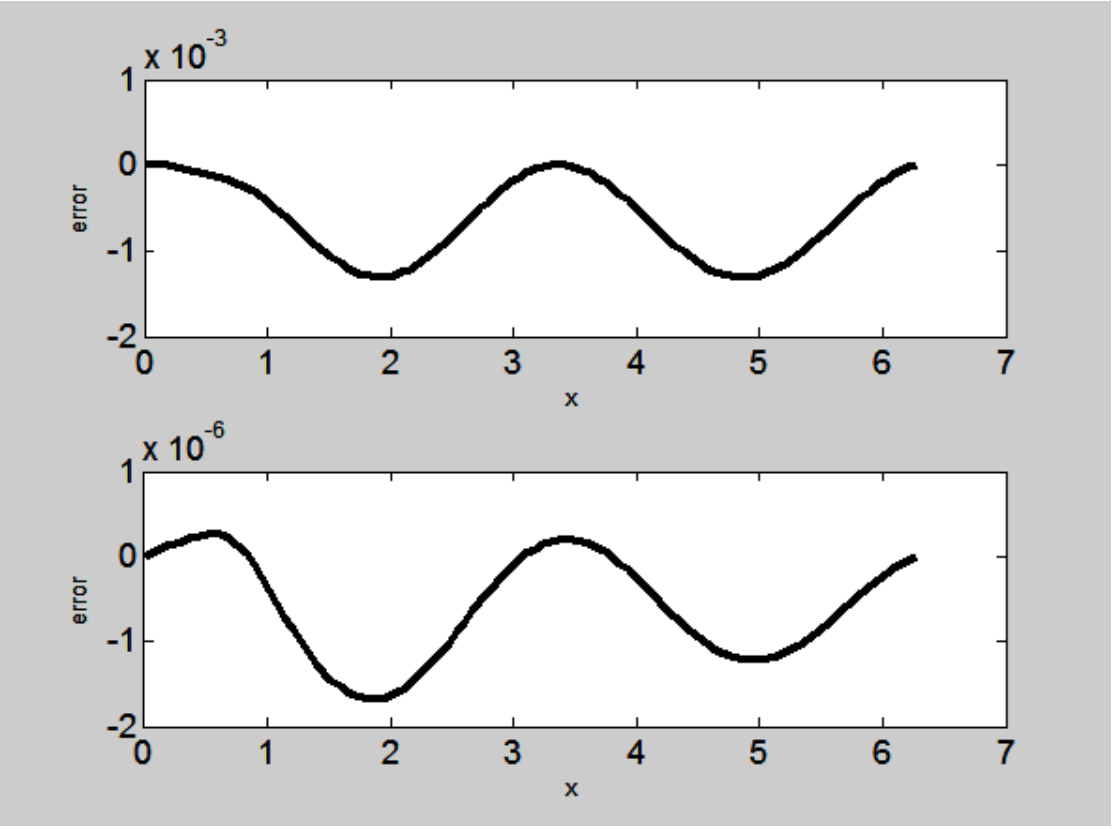

Рис. 3.2. Зависимость погрешности схем от x на решении (3.1): сверху – классическая схема, снизу - компактная. $N = 100$.

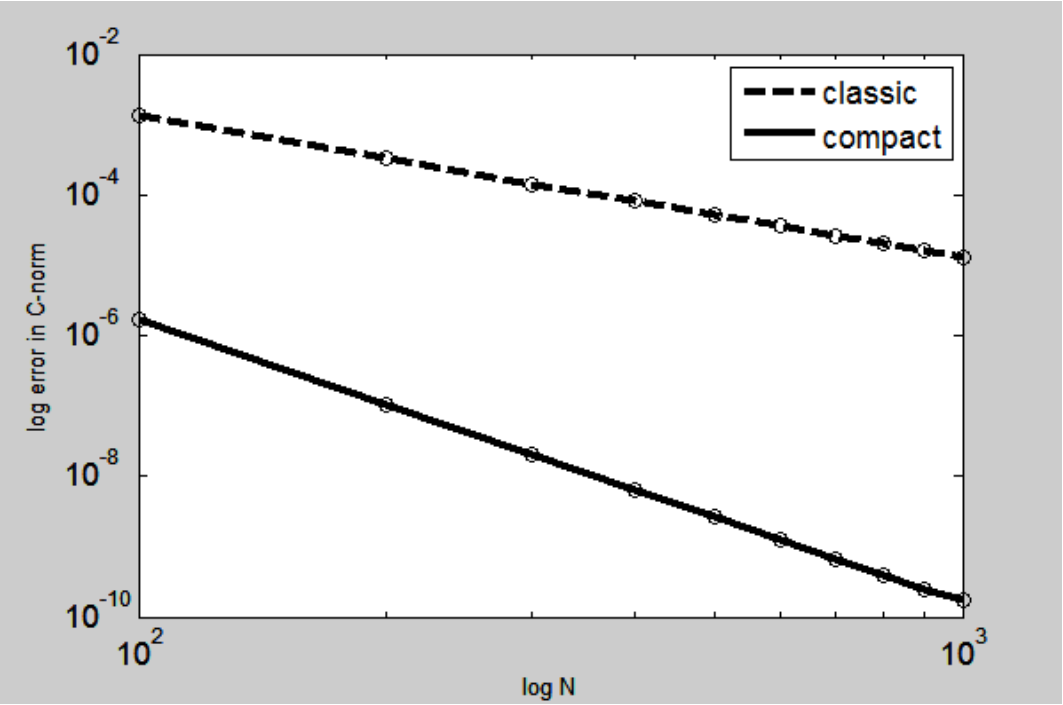

Рис. 3.3. Зависимость чебышевской нормы погрешности схем от числа узлов сетки на решении (3.2), $K = 100$. Билогарифическая шкала. Классическая схема (2.7) имеет второй порядок аппроксимации, компактная (2.1) – четвертый и меньшую погрешность.

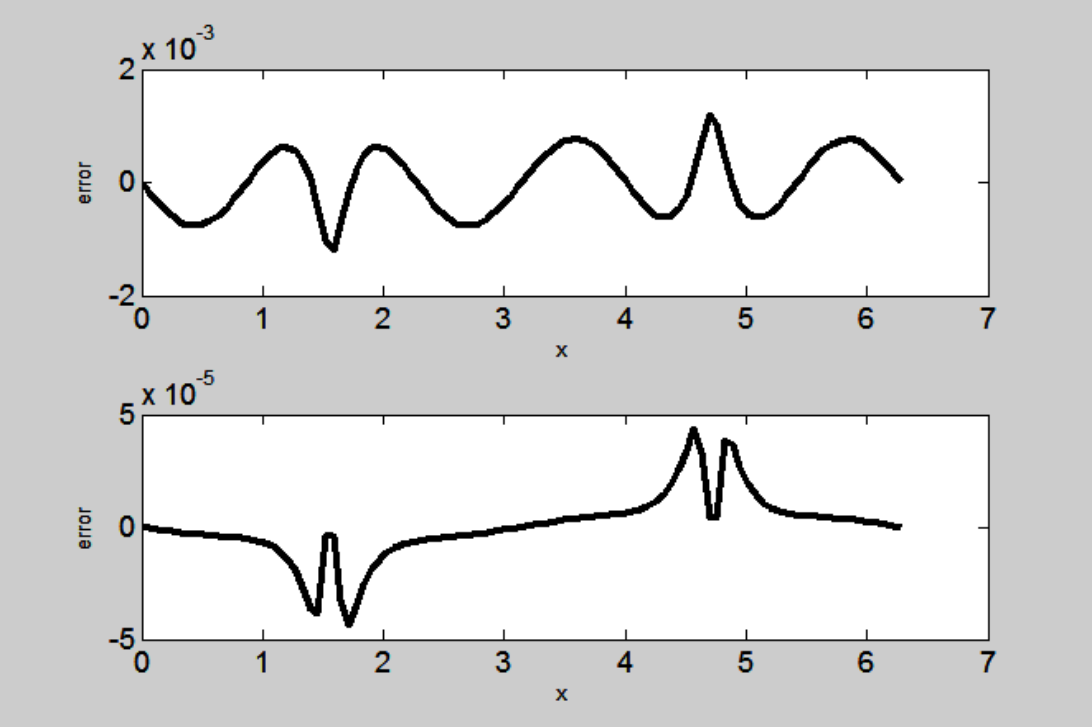

Рис. 3.4. Зависимость погрешности схем от x на решении (3.2): сверху – классическая схема, снизу - компактная. $N = 100$, $K = 100$.

Заключение

Для краевой задачи представлена новая компактная разностная схема. Численные эксперименты показали превосходство новой схемы над классической по точности и порядку аппроксимации.

Полученные схемы создают задел для решения более сложных задач, таких как уравнение диффузии (теплопроводности) с коэффициентом диффузии, зависящим от пространственной переменной, уравнения струны с переменным сечением или уравнения поперечных колебаний стержня:

$$\rho\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\frac{\partial}{\partial x}[R^2(x)\rho\frac{\partial^3 u}{\partial x\partial t^2}]+\frac{\partial^2}{\partial x^2}[ER^2(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}]=f.$$

Также возможны компактные схемы четвертого порядка точности для аппроксимации уравнений со слабой нелинейностью, например, для уравнения ФКПП (Фишера – Колмогорова – Петровского – Пискунова):

$$\partial_t u = D\partial_x^2 u + \varphi(u),\ \mathrm{D} = \mathrm{const} > 0.$$

Компактная схема 4 порядка показала свое преимущество в точности для линейных уравнений в частных производных диффузии и Шрёдингера [Gordin-Tsymbalov], и она составляет основу для обобщения на указанные задачи.

Работа подготовлена в ходе проведения исследования (16-05-0069) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)» в 2016 - 2017 гг. и с использованием средств субсидии на государственную поддержку ведущих университетов Российской Федерации в целях повышения их конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, выделенной НИУ ВШЭ.

Список литературы

Абрамов А.А. О граничных условиях в сингулярной точке системы обыкновенных дифференциальных уравнений. ``Журнал Вычислительной математики и математической физики", 1971, т.11, №1, стр.275-278.

Федорюк М.В. Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: ``Наука", 1983, стр.352.

Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1971.

Гордин В.А. Как это посчитать? – М.: МЦНМО, 2005.

Гордин В.А. Математика, компьютер, прогноз погоды и другие сценарии математической физики. – Москва.: Физматлит, 2010, 2013.

Тихонов А.Н., **Самарский А.А.** Уравнения математической физики. Наука, 1966.

Gordin V.A. Tsymbalov E.A. Compact differential schemes for the diffusion and Schrödinger equations. Approximation, stability, convergence, effectiveness, monotony // Journal of Computational Mathematics. - 2014 г. - Т. 32 (2.2). 348-370.

Spotz W.F. High-Order Compact Finite Difference Schemes for Computational Mechanics: PhD Thesis / University of Texas at Austin. - Austin, TX , 1995.