

АДАПТИВНЫЕ КОМПАКТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ ОСНОВНЫХ ТИПОВ ЭВОЛЮЦИОННЫХ УРАВНЕНИЙ С ОДНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

В. И. Паасонен^{1,2}

¹ *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

² *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6

Исследование посвящено разработке компактных разностных схем третьего порядка точности на адаптивной сетке для ряда эволюционных уравнений (теплопроводности, волнового, Шрёдингера и Гинзбурга — Ландау). Методика расчета опирается на совмещение в рамках одного алгоритма разнородных факторов, улучшающих эффективность вычислений. Это неравномерная сетка, повышенный порядок аппроксимации схем, модифицированный механизм адаптации сетки и адекватная по точности интерполяция. Представлены результаты численных экспериментов в сравнении с другими методами.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, уравнение Гинзбурга — Ландау, волновое уравнение, неравномерная сетка, компактная схема, адаптивная схема, солитон

Введение

Рассматривается задача Дирихле на конечном пространственном и временном отрезке для дифференциального уравнения

$$\frac{\partial^k U}{\partial t^k} = a \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + f, \quad k = 1, 2. \quad (1)$$

В случае положительного коэффициента a при $k = 1$ имеем уравнение теплопроводности, а при $k = 2$ — волновое уравнение. Если же a является мнимой величиной (в безразмерном виде $a = i/2$), а $k = 1$, то при специальной правой части $f = i|U|^2 U$ имеем уравнение Шрёдингера [1]. При комплексном $a = \beta + i/2$ с положительной вещественной частью $\beta > 0$ и при более сложной правой части $f = (\delta + z|U|^2 + w|U|^4)U$, где $z = \varepsilon + i$, $w = \nu + i\mu$ уравнение (1) превращается в уравнение Гинзбурга — Ландау [2]. Независимые переменные в уравнении Шрёдингера и уравнении Гинзбурга — Ландау имеют иной смысл, чем для классических уравнений математической физики (для некоторого класса задач x — ‘медленное’ время, а t — циклическая переменная), но для простоты всюду ниже условно будем именовать эволюционную переменную t временем, а x — пространственной переменной, как принято в классической математической физике.

Тестовые расчеты в данной работе приведены для решений с резко переменным характером профилей типа солитонов. Для таких задач чаще применяют методы, основанные на спектральных разложениях [3], так как традиционные схемы на равномерных сетках для достижения достаточной точности требуют чрезвычайно мелкого шага сетки. Однако в отличие от спектральных методов разностные схемы без осложнений распараллеливаются, что особенно важно при переходе к многомерным задачам. Попытки использовать вместо обычных схем компактные схемы четвертого порядка точности на равномерной сетке [4, 5, 6] дают существенное улучшение результатов в сравнении с традиционными схемами, однако аппроксимационные требования к шагу сетки и для них оказываются довольно жесткими, поскольку противоречие между необходимостью детализации сетки в зоне больших градиентов и ненужностью настолько мелкого шага на обширных промежутках вне таких зон является общей чертой любых схем на равномерной сетке. Естественным выходом из такого противоречия представляется использование адаптивных неравномерных сеток, особенно если при этом удастся сохранить также и повышенный порядок аппроксимации.

Данная работа посвящена разработке технология, основанная на сочетании ряда факторов, улучшающих качество расчетов. Это неравномерная сетка, компактные разностные схемы третьего порядка аппроксимации на ней, механизм динамической адаптации сетки к решению, и аккуратная интерполяция решения без потери порядка точности.

1 Компактные разностные схемы повышенной точности

Зафиксируем произвольно узел неравномерной сетки по переменной x и обозначим через h_+ и h_- локальные значения шагов сетки справа и слева от этого узла, а через Δ_+ и Δ_- — соответствующие простейшие разделенные разности ‘вперед’ и ‘назад’. Введем также обозначения для разности, суммы и произведения соседних шагов h_+ и h_- :

$$d = h_+ - h_-, \quad s = h_+ + h_-, \quad p = h_+ h_-.$$

Для разностных аппроксимаций

$$\Delta = \frac{h_- \Delta_+ + h_+ \Delta_-}{s}, \quad \Lambda = \frac{\Delta_+ - \Delta_-}{s/2}$$

операторов однократного и двукратного дифференцирования справедливы разложения

$$\begin{aligned} \Delta w &= \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{p}{6} \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} + O(h^3), \\ \Lambda w &= \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{d}{3} \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} + \frac{d^2 + p}{12} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + O(h^3). \end{aligned}$$

Представим формально уравнение (1) в виде ОДУ

$$a \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = F, \quad F = -f + \frac{\partial^k U}{\partial t^k}, \quad (2)$$

не обращая пока внимания на зависимость функций от t и на конкретный вид правой части F . Тогда в силу выписанных выше разложений разностных операторов можно построить трёхточечную компактную разностную схему третьего порядка аппроксимации по переменной x :

$$a\Lambda U = \Sigma F, \quad \Sigma = E + \frac{d}{3}\Delta + \frac{d^2 + p}{12}\Lambda. \quad (3)$$

Схема (2) является основой для создания компактных схем для всех рассматриваемых уравнений; необходимо лишь подставить в (3) выражение F из (2), осуществить дискретизацию по эволюционной переменной t , аппроксимировать производные по t и выполнить необходимые осреднения функций. Так, в случае $k = 1$ для уравнения теплопроводности, уравнения Шрёдингера и Гинзбурга—Ландау получается двухслойная схема

$$\Sigma \frac{U^{n+1} - U^n}{\tau} = a\Lambda \frac{U^{n+1} + U^n}{2} + \frac{f^{n+1} + f^n}{2} + (\Sigma - E)f^n, \quad (4)$$

аппроксимирующая уравнение (1) с погрешностью $O(\tau^2 + h^3)$. При наличии нелинейности в правой части схема (4) потребовала бы итераций по нелинейности, однако есть возможность избежать этого, следуя рекомендациям [5] и записывая схему (4) по трем слоям с двойным шагом по времени, а правую часть аппроксимируя на среднем слое:

$$\Sigma \frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\tau} = a\Lambda \frac{U^{n+1} + U^{n-1}}{2} + \Sigma f^n. \quad (5)$$

Схема (5) является безитерационной, но на старте вычислений требует задания решения на двух начальных слоях, тогда как из начальных условий краевой задачи решение известно только на одном. Поэтому на первом шаге необходимо использовать какую-нибудь линеаризацию двухслойной схемы (4), например

$$\Sigma \frac{V^{k+1} - U^0}{\tau} = a\Lambda \frac{V^{k+1} + U^0}{2} + \frac{f(V^k) + f(U^0)}{2} + (\Sigma - E)f^0, \quad V^0 = U^0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (6)$$

Формально в (4)–(6) объединены схемы для уравнения теплопроводности, уравнения Шрёдингера и уравнения Гинзбурга — Ландау в зависимости от вида правой части и типа константы a . В частном случае равномерной сетки схема совпадает с классической схемой Микеладзе [7] четвертого порядка точности по пространственной переменной, в случае уравнений Шрёдингера и Гинзбурга — Ландау — со схемой [4] и [8] соответственно.

Заметим, что если в разностном операторе Σ удержать лишь два слагаемых ($\Sigma = E + \frac{d}{3}\Delta$) или одно ($\Sigma = E$), то порядок погрешности схемы (5) по пространственной переменной понизится до второго или соответственно до первого. Именно с этими схемами вида (5) с разными усеченными версиями осредняющего оператора Σ проводилось сравнение компактной схемы.

Построим на основе исходной схемы (3) компактную схему для волнового уравнения. С этой целью подставим в (3) вместо правой части F ее представление, проведем симметричное осреднение слагаемых по трем временным слоям с весом σ и отбросим несущественные слагаемые, сравнимые по порядку аппроксимации с погрешностью. В результате получим схему

$$\Sigma \frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{\tau^2} = a\Lambda(\sigma \frac{U^{n+1} + U^{n-1}}{2} + (1 - \sigma)U^n) + G^n, \quad (7)$$

где

$$G^n = \Sigma f^n + \frac{\sigma\tau^2}{2} \frac{f^{n+1} - 2f^n + f^{n-1}}{\tau^2}.$$

Нетрудно показать, что при $\sigma = 1/6$ схема (7) достигает четвертого порядка аппроксимации по времени, т. е. имеет погрешность $O(\tau^4 + h^q)$, где $q = 1, 2, 3$ — число удержанных слагаемых в выражении разностного оператора Σ . При любом другом значении веса σ порядок аппроксимации падает до второго, т. е. погрешность составляет величину $O(\tau^2 + h^q)$.

Для старта вычислений по трехслойной схеме необходимо задать значения решения на двух первых временных слоях по заданным в начальный момент функции и ее производной по времени:

$$U(x, 0) = \Phi(x), \quad \frac{\partial U}{\partial t}(x, 0) = \Psi(x).$$

Очевидно, на нулевом слое $U^0 = \Phi$. А для вычисления решения на первом слое с достаточной точностью необходимо воспользоваться разложением решения в ряд Тейлора и заменить старшие производные по времени с помощью дифференциальных следствий уравнения (1), а затем аппроксимировать дифференциальные операторы разностными. Например, для схемы $O(\tau^4 + h^3)$ в результате получим

$$U^1 = (E + \frac{a\tau^2}{2}\Lambda)\Phi + \tau(E + \frac{a\tau^2}{6}\Delta)\Psi + \frac{\tau^2}{6}(2f^0 + f^1) + O(\tau^4 + h^3).$$

Следует заметить, что в частном случае равномерной сетки схема (7) совпадает с компактной схемой [9, 10] четвертого порядка точности.

2 Описание алгоритма расчета

Для схемы на неравномерной сетке необходим эффективный механизм адаптации сетки к решению. Существует два основных подхода к построению сетки с регулируемым масштабом изменения решения на шаге. Первый использует специальную замену переменных, с тем чтобы в исходных переменных подходящее масштабирование достигалось бы автоматически при использовании в новых переменных равномерной сетки. Этот способ очень широко применяется, например, при расчете течений в пограничном слое. Другой подход предполагает расчеты в исходных переменных на неравномерной сетке, перестраиваемой во времени. В данном случае предпочтителен именно второй подход, так как при первом способе нелинейное преобразование сильно усложняет дифференциальное уравнение, что приводит к непреодолимым осложнениям при попытке построения компактных высокоточных аппроксимаций.

Известны различные алгоритмы адаптации сетки к решению, например, по длине дуги кривой, по норме погрешности, по скорости изменения решения и другие. Здесь применяется оригинальная модификация классического метода [11] построения сетки, квазиравномерной по приращению функции на шаге.

Алгоритм расчета для трехслойных схем выглядит следующим образом: Сначала решение на предыдущем $(n - 1)$ -м слое интерполируется на сетку текущего n -го слоя. Затем решается разностное уравнение, и

в результате на сетке текущего n -го слоя получается решение на следующем слое. После этого осуществляется перестройка сетки на следующем $(n + 1)$ -м слое с адаптацией к характеру полученного решения. Завершает алгоритм интерполяция вычисленного решения на новую сетку. Заметим, что для схем второго и выше порядка точности линейная интерполяция неприемлема, для сохранения порядка точности метода в целом необходимо прибегать к более точным инструментам, например, к сплайновой или локальной полиномиальной. В нашем случае для схем точности $O(h^q)$ использовалась локальная лагранжева интерполяция по ближайшим $(q + 1)$ узлам.

Новая сетка \hat{x} , почти равномерная относительно приращения данной функции U на сетке x , строится способом, близким к [11], с некоторой модификацией. Вначале строится монотонная сеточная функция переменной x_i , $(i = 0, \dots, N)$, где N — число шагов сетки:

$$W_i = \sum_{j=1}^i |U_j - U_{j-1}| \simeq \int_{x_0}^{x_i} \left| \frac{\partial U}{\partial \xi} \right| d\xi.$$

После этого добавлением линейной функции с весом $\alpha > 0$, строится безразмерная строго возрастающая управляющая сеточная функция

$$Z_i = (1 - \alpha) \frac{W_i}{W_N} + \alpha \frac{x_i - x_0}{x_N - x_0}, \quad \alpha > 0,$$

обеспечивающая взаимно-однозначное отображение $Z(x)$ на единичный отрезок. Затем в области значений $(0, 1)$ функции Z строится равномерная сетка, и обратная функция $x(Z)$ определяет однозначно новую сетку с равномерным изменением управляющей функции Z . Вес α позволяет регулировать размер шага на промежутках постоянства функции $U(x)$. Испытания данного метода на решениях в виде солитонов выявили его недостаток, проявляющийся в резком изменении шага сетки в областях большой кривизны, например, у ‘пьедестала’ солитона, на его вершине и вблизи фронта волны. Поэтому и была предпринята попытка модификации метода [11], направленные на детализацию сетки в зонах, где вторая производная значительна.

Суть модификации заключается в следующем. Вычисляются значения разностной второй производной

$$D_i = \Lambda Z_i = \frac{2}{h_+ + h_-} \left(\frac{Z_{i+1} - Z_i}{h_+} - \frac{Z_i - Z_{i-1}}{h_-} \right)$$

от управляющей функции, и в случае превышения по модулю заранее заданного порога ($|D_i| > d$) компоненты вычисленного вектора D обрезаются по амплитуде до пороговой величины, а затем по скорректированному таким способом вектору \hat{D} строится подправленная управляющая функция \hat{Z} как решение разностной задачи

$$\Lambda \hat{Z}_i = \hat{D}_i, \quad i = 1, \dots, N - 1, \quad \hat{Z}_0 = 0, \quad \hat{Z}_N = 1,$$

и уже по обновленной управляющей функции строится сетка. Данная модификация позволила добиться благоприятного перераспределения узлов сетки и более плавного изменения шага в проблемных зонах.

Важным элементом алгоритма является старт, так как в классе рассматриваемых решений начальная функция может иметь резкие изменения. По этой причине основному вычислительному процессу должна предшествовать стандартная процедура построения стартовой сетки, согласованной с характером начальной функции. Кроме того, для дифференциальных уравнений первого порядка по времени с нелинейностью в правой части на первом временном шаге ввиду трехслойности схем требуется отдельный итерационный процесс. Для волнового уравнения процедура вычисления решения на первом слое также особая, связанная с обработкой двух исходных начальных условий. В результате работы стартового блока начальные данные на двух первых слоях, необходимые для основной разностной задачи, оказываются сформированными на неравномерной сетке, соответствующей характеру начальных данных.

3 Результаты численных экспериментов

Для уравнения теплопроводности точное решение взято в виде волны, сосредоточенной на отрезке $|w| \leq 1$, где

$$w = \frac{x - vt}{\mu},$$

v — скорость, а μ — полуширина. Форма волны симметричная полиномиальная

$$U = (1 - w^2)^4, \quad |w| \leq 1,$$

гладко примыкающая с обеих сторон к оси x , а правая часть

$$f = 8 \left(\frac{7w^2 - 1}{\mu^2} - \frac{vw(1 - w^2)}{\mu} \right) (1 - w^2)^2, \quad |w| \leq 1.$$

Вне отрезка $|w| \leq 1$ решение U и правая часть f уравнения равны нулю.

Задача решалась в области $(0 < x < 1) \times (0.4 \leq t \leq 1.6)$. Скорость волны была $v = 0.5$, ее полуширина $\mu = 0.1$. Ошибка в C -норме, полученная на последовательности сеток по трем схемам различного порядка точности по x , приведены в таблице 1. Параметры n_x и n_t обозначают число шагов по x и t соответственно. В левой половине таблицы приводятся результаты при одновременной детализации сетки по обоим переменным, а в правой — при фиксированном заведомо мелком шаге по времени.

Таблица 1: Результаты расчета уравнения теплопроводности по схемам различных порядков точности на последовательности неравномерных сеток

n_x	n_t	$q = 1$	$q = 2$	$q = 3$		n_x	n_t	$q = 1$	$q = 2$	$q = 3$
20	40	0.450	0.740	0.526		20	1280	0.316	0.383	0.277
40	80	0.344	0.321	0.116		40	1280	0.279	0.318	0.123
80	160	0.192	0.196	0.050		80	1280	0.185	0.195	0.051
160	320	0.100	0.101	0.013		160	1280	0.098	0.102	0.013
320	640	0.046	0.045	0.003		320	1280	0.045	0.045	0.003

По трем схемам для однородного волнового уравнения рассчитано взаимодействие солитонов с полушириной 0.5 и 0.25, движущихся из начальных положений -0.5 и 0.5 . На рис. 1 приведены решения на момент времени $t = 1$, когда после взаимопроникновения солитоны обменялись местами.

Ниже приводятся результаты расчета уравнения Шрёдингера при известном точном решении

$$U = \exp\left(-\frac{it}{2}\right) \operatorname{sech}(x).$$

В таблице 2 приведены результаты расчета в области $(0 \leq t \leq 10) \times (-20 \leq x \leq 20)$ на последовательности сеток при $\alpha = 0.2$.

Таблица 2: Результаты расчета нелинейного уравнения Шрёдингера на последовательности неравномерных сеток

n_x	n_t	$q = 1$	$q = 2$	$q = 3$		n_x	n_t	$q = 1$	$q = 2$	$q = 3$
20	40	0.193	0.277	0.1701		20	1280	0.199	0.246	0.1807
40	80	0.038	0.028	0.0144		40	1280	0.026	0.016	0.0016
80	160	0.141	0.011	0.0028		80	1280	0.371	0.114	0.0126
160	320	0.022	0.004	0.0005		160	1280	0.090	0.015	0.0031
320	640	0.051	0.002	0.0001		320	1280	0.109	0.003	0.0004

На старте вычислений итерации по нелинейности проводились до достижения различия между итерациями $\epsilon = 10^{-8}$. Результаты, приведенные в таблице 2, также свидетельствуют об очень высокой эффективности компактной схемы.

Таким образом, на примере простых уравнениях показано, как в рамках одного алгоритма удастся совместить несколько инструментов повышения эффективности разностных методов. Это повышение порядка точности, применение неравномерных сеток, надежного механизма адаптации сетки к решению и интерполяции, не снижающей порядка точности. Следует заметить, что формальное построение компактных схем

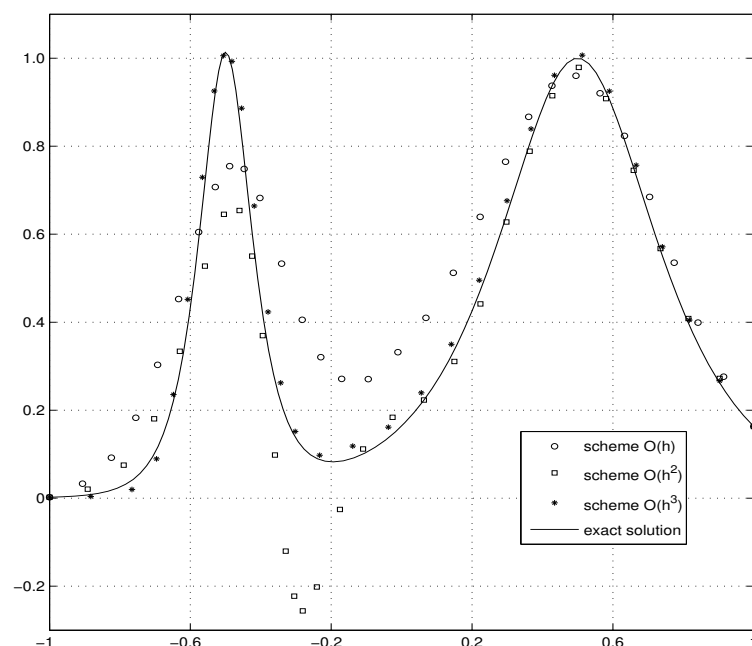


Рис. 1: Результаты расчетов взаимодействия солитонов по схемам различной точности

для аналогичных уравнений с несколькими пространственными переменными также возможно. Однако в многомерном случае прямоугольная неравномерная сетка может быть полезна лишь для специального класса задач (например, для расчета пограничного слоя, для моделирования задач с точечными источниками). В общем случае расположения особенностей решения неколлинеарно одному из семейств координатных линий востребованность таких сеток снижается. В одномерном же случае нет никаких ограничений на класс решений, для которых с успехом может применяться описанная здесь технология высокоточных вычислений.

Список литературы

- [1] Кившарь Ю. С., Агравал Г. П. Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам. Москва: Физматлит, 2005.
- [2] Akhmediev N. N., Afanasiev V. V. Singularities and special soliton solutions of the cubic-quintic complex Ginzburg-Landau equation // *Physical Review E*. 1996. V. 53, iss.1, P. 1190–1201.
- [3] Lu S., Lu Q., Twizell E. H. Fourier spectral approximation to long-time behaviour of the derivative three-dimensional Ginzburg-Landau equation // *J. Comput. Appl. Math.* 2007. V. 198, P. 167–186.
- [4] Паасонен В. И., Федорук М. П. Компактная диссипативная схема для нелинейного уравнения Шредингера // *Вычислительные технологии*. 2011. Т. 16, № 6, С. 68–73.
- [5] Паасонен В. И., Федорук М. П. Компактная безитерационная схема для нелинейного уравнения Шредингера // *Вычислительные технологии*. 2012. Т. 17, № 3, С. 83–90.
- [6] Shu-Sen Xie, Guang-Xing Li, Sucheol Yi. Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 2009. V. 198, P. 1052–1061.
- [7] Микеладзе Ш. Е. О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов // *Известия АН СССР. Серия матем.* 1941. Т. 5, № 1, С. 57–74.

- [8] Паасонен В. И., Федорук М. П. Трехслойная безытерационная схема повышенного порядка точности для уравнения Гинзбурга — Ландау // Вычислительные технологии. 2015. Т. 20, № 3, С. 46–57.
- [9] Валлиулин А.Н., Паасонен В.И. Экономичные разностные схемы повышенного порядка точности для многомерного уравнения колебаний // Численные методы механики сплошной среды, 1, № 1, 1970, 34–47.
- [10] Паасонен В.И. Компактные схемы для систем уравнений второго порядка с конвективными членами // Вычислительные технологии, 3, № 1, 1998, 55–66.
- [11] Dwyer H. A. Grid adaptive for problem in fluid dynamics // AIAA Journal, 22, № 12, 1984, 1705–1712.

*Виктор Иванович Паасонен — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института
вычислительных технологий СО РАН;*

e-mail: paas@ict.nsc.ru.

Дата поступления — 4 мая 2017 г.