Л.В. Дородницын

МЕТОД ПРИБЛИЖЕННОГО АНАЛИЗА УСТОЙЧИВОСТИ ПО КУРАНТУ ЦЕНТРАЛЬНО-РАЗНОСТНЫХ СХЕМ С КРАЕВЫМИ УСЛОВИЯМИ

Введение

Для компьютерного моделирования задач, описываемых гиперболическими системами уравнений, — например, из области газовой динамики и особенно аэроакустики — широко используются схемы с центральными разностями или, шире, с кососимметричными аппроксимациями производных по пространству [1, 2]. Для численного интегрирования по времени используются, как правило, явные алгоритмы [1]–[5]. Это вызвано необходимостью экономии вычислительных ресурсов и удобством параллельной реализации алгоритмов.

В задачах аэроакустики предъявляются высокие требования к точности методов. Такие дискретные модели, обладая низкой диссипацией и дисперсией, обычно хорошо воспроизводят волновые свойства физической среды, но при этом легко подвержены вычислительным неустойчивостям.

В задачах, о которых идет речь, важна постановка условий на границах расчетной области. Особый интерес представляют искусственные (свободные) границы, где задаются неотражающие граничные условия. Последние имеют порой весьма нетривиальный вид. Дискретизация граничных условий, наряду с основными уравнениями, может существенно влиять на устойчивость схемы.

Таким образом, корректность алгоритмов связана с двумя факторами. Во-первых, дискретные граничные условия, играя важную роль, не позволяют применять простые процедуры определения устойчивости, такие как метод гармоник фон-Неймана. Во-вторых, явные методы интегрирования по времени налагают дополнительное ограничение на устойчивость схемы в виде условия Куранта, которое зависит от конкретной реализации производной по времени.

Математически строгие методы анализа корректности нестационарных разностных схем [6, 7] являются отправной точкой для исследования свойств алгоритмов. Однако по мере нарастания сложности применение теории становится едва возможным.

Один из «ориентировочных» способов оценки устойчивости разностных схем основан на методе дифференциального приближения, изложенном в монографии [8] и получившем некоторое развитие в ряде последующих работ [9, 10]. В [11] была предложена новая технология анализа схем, учитывающая наличие пилообразной (англ. grid-to-grid) компоненты решения. Более глубокое обоснование методики дано в [12]. Такая модификация метода дифференциального приближения позволяет обнаруживать низкочастотную неустойчивость алгоритмов, однако она оказалась неприменимой для выяснения условия устойчивости Куранта, что установлено экспериментально.

В явных разностных схемах для гиперболических систем ограничение на шаг по времени обусловлено высокочастотными коротковолновыми колебаниями, которые не являются ни плавными модами, ни пилообразными осцилляциями. В отличие от двух упомянутых типов, эти колебания связаны с большими собственными значениями стационарных разностных задач — обычно максимальными по модулю. Для исследования данного объекта нужны специальные, «нетрадиционные» методы.

Настоящая работа посвящена явным алгоритмам интегрирования по времени разностных задач. Исследуется влияние граничных условий на устойчивость схем, начатое в [13]. Рассматриваются аппроксимации одномерного скалярного уравнения переноса. Предлагается новая методика оценки устойчивости по Куранту, использующая разновидность метода дифференциального приближения.

1. Устойчивость схем по фон-Нейману

Метод гармоник фон-Неймана в применении к схемам с постоянными коэффициентами дает необходимое и достаточное условие устойчивости задачи в бесконечной области или с периодическими граничными условиями.

На отрезке одномерного пространства $x \in [0, L]$ введем равномерную сетку

$$x_0 = 0, \quad x_j = x_0 + jh, \ j = 0, \dots, N, \quad x_N = L.$$

Рассмотрим вначале полудискретную (дифференциальную по времени и разностную по пространству) форму схемы

$$du_j/dt + \mathcal{L}_h u_j = 0, \quad j = m, \dots, N - m, \tag{1}$$

где участвует пространственный оператор с постоянными коэффициентами

$$\mathcal{L}_h u(x) \equiv \frac{1}{h} \sum_{j=-m}^m a_j u(x+jh),$$
 где $a_j \in \mathbb{R}, \ j=-m,\ldots,m.$ (2)

Такой вид имеет простейшая трехточечная (m = 1) схема с центральными разностями, схемы высокого порядка аппроксимации, а также оптимизированные схемы со спектральным разрешением из [1, 2].

Подставим в разностный оператор (2) гармонику

$$u(x) = \exp(ikx),$$
 где $-\pi/h < k \le \pi/h.$

Получаем

$$\mathcal{L}_h u(x) = \frac{1}{h} \sum_{j=-m}^m a_j e^{ijkh} u(x) \equiv i\tilde{k}u(x) .$$
(3)

Здесь введено эффективное, или модифицированное, волновое число $\tilde{k} = \tilde{k}(k)$.

Центрально-разностные аппроксимации обладают кососимметричными наборами коэффициентов:

$$a_j = -a_{-j}, \quad j = 0, \dots, m,$$
 (4)

благодаря чему функция $\tilde{k}(k)$ — вещественная:

$$\tilde{k}(k): \mathbb{R} \to \mathbb{R}.$$

Кроме того, $\tilde{k}(0) = \tilde{k}(\pm \pi/h) = 0$ и при некотором значении $k = k_*$ эффективное волновое число принимает максимум:

$$\tilde{k}(k_*) = \tilde{k}_{\max}$$

Величину k_* будем называть критическим волновым числом.

На рисунке 1 показаны зависимости модифицированного волнового числа от точного $\tilde{k}(k)$ для ряда центрально-разностных схем (2): трехточечной схемы порядка аппроксимации h^2 , 5-точечной $O(h^4)$, 7-точечной $O(h^6)$ и оптимизированной 7-точечной схемы DRP из [1]. Для сравнения проведена прямая линия, обозначающая точное волновое число k.

Вернемся к нестационарной схеме для уравнения переноса. Будем искать ее решения вида

$$u(x,t) = \exp\{ikx + \lambda t\}, \quad k \in \mathbb{R}, \ \lambda \in \mathbb{C}.$$
 (5)

Из (1) следует соотношение

$$\lambda = -i\tilde{k}(k) \,.$$

Тем самым центрально-разностные операторы (2), (4) дают чисто мнимые значения λ в диапазоне

$$\operatorname{Re} \lambda \equiv 0, \quad -\tilde{k}_{\max} \le i\lambda \le \tilde{k}_{\max} \,. \tag{6}$$



Рис. 1. Зависимость эффективного волнового числа $\tilde{k}h$ от kh для центрированных схем: $O(h^2)$; $O(h^4)$; $O(h^6)$; DRP

Это означает, что для схемы с непрерывным временем выполнено необходимое и достаточное условие устойчивости: область значений $\lambda(k)$ целиком лежит в отрицательной комплексной полуплоскости:

$$\operatorname{Re}\lambda(k) \leq 0, \quad \forall k \in \mathbb{R}.$$

Перейдем к вопросу о численной реализации производной по времени d/dt. Остановимся на явных методах Рунге–Кутты. Обозначим временной шаг через Δt . Пусть полудискретная задача для гармоник (5) дает значения $\lambda(k)$. Тогда метод Рунге–Кутты для функций u(x,t) таких, что

$$\partial u/\partial x = iku\,,$$

имеет решение

$$u(x, t + \Delta t) = R(\lambda(k) \Delta t) u(x, t),$$

где R(z) — функция перехода, или функция устойчивости [14], данного метода Рунге–Кутты, представляющая собой алгебраический многочлен, если метод явный. Критерием устойчивости полностью дискретной схемы является принадлежность всех возможных значений $z = \lambda(k) \Delta t$ области устойчивости

$$S\{z\} = \{z \in \mathbb{C} : |R(z)| \le 1\}.$$

Широко известно, что для центрально-разностных операторов явная схема Эйлера является абсолютно неустойчивой. Однако среди более



Рис. 2. Область устойчивости $S\{z\}$ метода RKo5s

сложных явных алгоритмов существует немало устойчивых при ограничении на шаг по времени. Таковы, например, стандартные 3- и 4-этапные методы Рунге–Кутты (см. [14]), а также специальные алгоритмы, экономящие память, из [2]–[5]. Все они содержат в своих областях устойчивости (рис. 2) отрезки мнимой оси

$$\{z: -C_1 \le iz \le C_1\} \subset S\{z\}.$$

Например, для 5-этапной схемы RKo5s из [2] имеет место $C_1 = 3.5584$; для классического 4-этапного метода Рунге–Кутты $C_1 = 2.8284$.

Таким образом, устойчивость метода Рунге–Кутты для центральноразностной схемы, с учетом (6), определяется неравенством

$$\Delta t \le C_1 / \tilde{k}_{\max} \,. \tag{7}$$

Это показывает, что ключевую роль в выборе шага по времени играют гармоники с критическим волновым числом $k = k_*$.

В свою очередь, величина \hat{k}_{\max} , согласно определению (3), обратно пропорциональна шагу сетки h:

$$k_{\max} = C_2/h.$$

Следовательно, алгоритмы являются устойчивыми при ограничении на временной шаг, близком к условию Куранта: из (7) следует, что число Куранта

$$CFL \equiv \Delta t/h \le C_1/C_2.$$
(8)

Надо сказать, что расположение чисел $\lambda(k)$ свидетельствует не только об устойчивости нестационарной задачи, но и о ее диссипативных свойствах. Обратимся к схеме с непрерывным временем. Чем дальше точка $\lambda(k)$ при данном k углубляется от мнимой оси в отрицательную (положительную) полуплоскость, тем быстрее затухает (возрастает) амплитуда соответствующей гармоники. В нашем случае любые колебания не затухают и не усиливаются.

Что касается явных методов Рунге–Кутты, реализующих производную по времени, то, как видно из рис. 2, при умеренных числах Куранта (8) концы отрезка (6) оказываются вблизи границы области устойчивости и дают практически незатухающие колебания. С приближением к максимально допустимому CFL диссипация таких мод поначалу усиливается, а по достижении предельного значения CFL вновь наступает нейтральная устойчивость.

Результаты, получаемые методом гармоник фон-Неймана, служат ориентиром для нахождения условий устойчивости начально-краевых задач. Граничные условия могут почти не влиять на максимально допустимый шаг по времени, но иногда они ведут к резкому его уменьшению или к абсолютной неустойчивости.

2. Исследование устойчивости краевых задач

Представим одномерную нестационарную разностную задачу в форме линейной системы уравнений

$$B_h \, d\mathbf{U}/dt + A_h \mathbf{U} = 0\,,\tag{9}$$

где $\mathbf{U}(t) = (u_0, u_1, \dots, u_N)^T \in \mathbb{R}^M$ — искомая сеточная функция (M = N + 1); $A_h, B_h \in \mathbb{R}^{M \times M}$ — пространственные операторы, не зависящие от времени t. В нашем случае (1)–(2) во внутренних узлах

$$(A_h\mathbf{U})_j = \mathcal{L}_h u_j, \quad (B_h\mathbf{U})_j = u_j, \quad j = m, \dots, N-m.$$

Операторы A_h и B_h включают также граничные условия.

После разделения переменных

$$\mathbf{U}(t) = \widehat{\mathbf{U}} \exp\{\lambda t\}, \quad \text{где} \ \lambda \in \mathbb{C}, \ \widehat{\mathbf{U}} \in \mathbb{C}^M,$$

система (9) превращается в спектральную задачу, или разностную задачу Штурма–Лиувилля,

$$\lambda B_h \widehat{\mathbf{U}} + A_h \widehat{\mathbf{U}} = 0.$$
⁽¹⁰⁾

(В дальнейшем для неизвестных функций двух задач будем использовать одинаковое обозначение.)

Пусть для интегрирования задачи (9) по времени применяется какойлибо метод Рунге–Кутты. Вопрос о его устойчивости связан с решением спектральной задачи (10). Необходимо выяснить, насколько расположение собственных чисел $\lambda = \lambda_n$ задачи (10) отличается от множества (6), получаемого методом гармоник.

Следует иметь в виду, что принадлежность всех масштабированных собственных значений области устойчивости (спектральная устойчивость):

$$\lambda_n \, \Delta t \in S\{z\}, \ \forall n,$$

— является лишь необходимым условием устойчивости пространственновременной разностной схемы. Эта проблематика освещается, например, в обзоре [15]. Также заметим, что для вещественных матриц A_h и B_h спектры симметричны относительно вещественной оси.

Как известно, оценивать границы спектра дискретного оператора позволяет теорема Гершгорина. Однако задаваемая ею область в большинстве случаев оказывается намного шире, чем фактически расположены собственные числа. Особенно это несоответствие заметно при использовании «нестандартных» краевых условий. Поэтому требуется более детальное изучение конкретной разностной задачи — пусть даже не всегда строгое.

Автором [12, 13] проводились вычисления спектров ряда операторов (2) с различными краевыми условиями при фиксированных значениях числа узлов N. Полученные данные помогут в валидации теоретических методов, разрабатываемых здесь.

Примеры вычисленных спектров двух разностных задач представлены на рис. 3. По осям $\text{Re }\lambda$ и Im λ масштабы различаются. Выбрана трехточечная центрально-разностная схема с дискретными краевыми условиями 1-го рода слева и 2-го рода справа (рис. 3,а). (Полная формулировка будет в следующем параграфе.) Число узлов N = 31, шаг сетки h = 1.

В другом случае рассмотрена семиточечная схема, сохраняющая дисперсионные соотношения, (DRP-схема) из [1] с согласованными граничными условиями [16, 17] у обоих краев области при N = 100, h = 1. На рис. 3,6 показан фрагмент комплексной плоскости, включающий нижний конец отрезка (6).

Эти и другие многочисленные примеры [12, 13, 16] демонстрируют, что собственные значения выстраиваются в цепочку, лежащую между двумя крайними точками отрезка (6). При этом цепочка довольно сильно отклоняется от прямой линии в средней части, напоминая изгиб лука, однако «крайние» собственные числа располагаются очень близко к концам отрезка, и другие спектральные точки концентрируются там же. В некоторых случаях [13] существуют также изолированные точки спектра, количество которых мало и не зависит от числа узлов сетки.



Рис. 3. Спектры разностных задач: а) 3-точечная схема (21); б) 7-точечная DRP-схема при специальных краевых условиях (фрагмент)

При выяснении устойчивости центрально-разностных схем, реализуемых явными методами Рунге–Кутты, выделяются три практически важных вопроса.

- В какую сторону спектр смещается от мнимой оси отрицательную (устойчивую) или положительную (неустойчивую)? Индикатором служит поведение собственных чисел, малых по абсолютной величине. Методика их приближенного анализа изложена в [12].
- Существуют ли изолированные спектральные точки? Они могут при масштабировании выходить за пределы области устойчивости метода Рунге–Кутты и тем самым изменить допустимый временной шаг. Теоретический подход к исследованию изолированных точек предложен в [13].
- 3. Где лежат «концы» цепочки собственных чисел? Необходимо определить их отклонение от двух крайних точек из условия фон-Неймана по направлению и величине. Последним займемся здесь.

Для исследования интересующих нас свойств задачи (10) выполним ее преобразование, сохраняющее взаимно-однозначное соответствие между спектрами старой и новой задач. Идея позаимствована из [11], где аналогичным способом выделялась пилообразная компонента. Главной нашей целью будет получить более наглядный вид уравнений, который позволяет найти их дифференциальное представление, близкое к разностному. Это важно прежде всего в случаях, когда не удается проводить строгие доказательства.

Выпишем пространственный оператор (2) еще раз:

$$\mathcal{L}_h u(x) \equiv \frac{1}{h} \sum_{j=-m}^m a_j u(x+jh),$$
 где $a_j \in \mathbb{R}, \ j=-m,\ldots,m.$

Вместо u(x) введем новую функцию, используя гармонику с критическим волновым числом:

$$u(x) = \exp\{ik_*x\}\,v(x).$$

На основе оператора \mathcal{L}_h построим оператор

$$\mathcal{M}_{h}v(x) \equiv \sum_{j} b_{j}v(x+jh) - i\tilde{k}_{\max}v(x),$$

где $b_{j} = \frac{1}{h}a_{j}\exp\{ijk_{*}h\} \in \mathbb{C}, \ j = -m, \dots, m.$ (11)

Задачи, сформулированные для функции u, будем превращать в равносильные им задачи для функции v с оператором \mathcal{M}_h .

Вначале докажем одно свойство разностного оператора (11), а именно то, что он аппроксимирует некоторый дифференциальный оператор Шредингера (второй производной) с коэффициентом порядка *h*.

Утверждение 1. При условии гладкости $v(x) \in C^3[0, L]$ выражение $\mathcal{M}_h v$ из (11) представимо в виде

$$\mathcal{M}_h v(x) = ich \frac{d^2 v}{dx^2}(x) + O(h^2),$$
 где $c \in \mathbb{R}.$ (12)

Доказательство. На основе формулы Тейлора выпишем общее разложение

$$\mathcal{M}_h v = \frac{\alpha}{h} v + \beta \frac{dv}{dx} + \gamma h \frac{d^2 v}{dx^2} + O(h^2).$$

Рассмотрим коэффициенты при производных по отдельности:

$$\frac{\alpha}{h} = \sum_{j} b_{j} - i\tilde{k}_{\max} = \frac{1}{h} \sum_{j} a_{j} \exp\{ijk_{*}h\} - i\tilde{k}(k_{*}) = 0,$$

в силу определения (3).

Чтобы найти следующий коэффициент, воспользуемся свойством производной функции $\tilde{k}(k)$ из (3) в точке экстремума:

$$\frac{d\tilde{k}}{dk}(k_*) \equiv \sum_j ja_j \exp\{ijk_*h\} = 0.$$

Выразим искомый коэффициент:

$$\beta = \sum_{j} jhb_j = \sum_{j} ja_j \exp\{ijk_*h\} = 0.$$

Наконец, исследуем коэффициент

$$\gamma h = \sum_j rac{1}{2} j^2 h^2 b_j$$
 .

Из симметрии (4) параметров a_i следует:

$$b_{-j} = -\frac{1}{h}a_j \exp\{-ijk_*h\} = -b_j^*.$$

Отсюда

$$\operatorname{Re}\sum_{j}j^{2}b_{j}=0$$

то есть коэффициент при второй производной чисто мнимый:

$$\gamma h = ich$$
.

Подытожив результаты, получаем формулу (12). Утверждение 1 до-казано.

Рассмотрим для оператора \mathcal{L}_h из (2) спектральную задачу

$$\mathcal{L}_h u + \lambda u = 0. \tag{13}$$

Уравнение дополняется некоторым набором краевых условий. Выпишем для функции *v* эквивалентную спектральную задачу, вытекающую из (11):

$$\mathcal{M}_h v + \mu h v = 0$$
, где $\lambda = \mu h - i \tilde{k}_{\text{max}}$. (14)

При этом краевые условия должны быть переформулированы в терминах новой неизвестной v.

Вспомним аппроксимационное свойство (12) оператора \mathcal{M}_h . Из элементарных «физических» соображений естественно предполагать, что задача (14) обладает собственными значениями $\mu = O(1)$, которые мы будем считать младшими:

$$|\mu_1| \le |\mu_2| \le |\mu_3| \le \cdots$$

Тем самым у исходной задачи (13) существуют собственные значения λ_n , расположенные вблизи мнимого числа $i\tilde{k}_{\max} = O(h^{-1})$ на расстояниях

O(h). Отсюда и наблюдаемое в разностных задачах сгущение собственных чисел в районе «концов» цепочки.

Рассуждая об устойчивости начально-краевых задач, мы вновь видим, что на нее оказывают основное влияние именно «крайние» собственные значения λ_1 и λ_1^* . В схеме с непрерывным временем, как следует из предыдущего, эти числа лежат близко от мнимой оси — вопрос в том, по отрицательную или положительную сторону от нее. В явных методах Рунге–Кутты с увеличением временного шага именно число $\lambda_1 \Delta t$ первым пересекает границу области устойчивости (рис. 2), если спектр целиком принадлежит отрицательной полуплоскости.

Говоря о диссипативных свойствах схем, отметим, что в полудискретных задачах, как правило, колебания, ответственные за устойчивость Куранта, почти не затухают и не усиливаются. При использовании интегрирования Рунге–Кутты примерно повторяется картина, наблюдаемая в методе гармоник (§ 2): затухание критических мод может иметь место лишь в небольшом диапазоне чисел Куранта чуть ниже предельного значения.

Однако общие рассуждения не дают ответа на вопрос об устойчивости конкретной начально-краевой задачи. Каждую задачу необходимо исследовать отдельно. В настоящей работе мы ограничимся схемами с трехточечными шаблонами. Будем выяснять их спектральную устойчивость, для чего применим метод приближенного анализа, основанный на замене неизвестной сеточной функции и на использовании дифференциального приближения разностной задачи.

3. Примеры задач для трехточечной схемы с центральными разностями

Простейшая схема с центральными разностями для уравнения переноса аппроксимации $O(h^2)$ представляет собой частный случай (1)–(2) с коэффициентами $a_{-1} = -1/2$, $a_1 = 1/2$ и выглядит как

$$du_j/dt + (u_{j+1} - u_{j-1})/(2h) = 0, \quad j = 1, \dots, N-1.$$
 (15)

Для такого оператора \mathcal{L}_h имеем

$$\tilde{k} = \sin(kh)/h, \ k_* = \pi/(2h), \ \tilde{k}_{\max} = 1/h.$$

Преобразованный оператор, согласно формуле (11), приобретает вид

$$\mathcal{M}_h v = \frac{i}{2h} v_{j+1} + \frac{i}{2h} v_{j-1} - \frac{i}{h} v_j = \frac{ih}{2} v_{\bar{x}x},$$

где использовано индексное обозначение [6] второй разностной производной.

Пусть для разностного уравнения переноса (15) ставятся дискретные краевые условия 1-го рода:

$$du_j/dt + u_{\hat{x},j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \quad t > 0,$$

 $u_0 = u_N = 0, \qquad u_j(0) = \varphi(x_j).$

Индексное обозначение центрально-разностной производной взято из [6]. Соответствующая спектральная задача принимает вид:

$$u_{\hat{x},j} + \lambda u_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, u_0 = u_N = 0.$$
 (16)

Преобразуя задачу, получим:

$$iv_{\bar{x}x,j} + 2\mu v_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1,$$

 $v_0 = v_N = 0.$
(17)

Собственные значения (17) пропорциональны тем, которые имеют место в хрестоматийной задаче Штурма–Лиувилля для оператора второй разности из [6]:

$$\mu = \mu_n = \frac{2i}{h^2} \sin^2 \frac{\pi nh}{2L}, \quad n = 1, \dots, N-1.$$
(18)

Отсюда по формуле из (14) выражаем исходные собственные числа задачи (16):

$$\lambda = \lambda_n = -\frac{i}{h} + \frac{2i}{h}\sin^2\frac{\pi nh}{2L}, \quad n = 1, \dots, N-1.$$

Таким образом, спектр чисто мнимый, целиком принадлежит множеству (6), и крайние собственные значения отстоят от концов отрезка $\pm i/h$ на расстояние около $\pi^2 h/(2L^2)$.

Впрочем, спектр задачи (16) легко вычисляется непосредственно (см., напр., [12]), но форма его представления может быть различной.

Ради иллюстрации покажем, как для оценки свойств разностной схемы можно применить к ней метод дифференциального приближения [8]. Данный метод заключается в представлении дискретной задачи в виде дифференциальных уравнений, получаемых конечным разложением Тейлора по степеням шагов сетки. Тем самым исходная разностная задача аппроксимируется задачей дифференциальной с некоторой погрешностью.

Заменяя в (17) вторую разностную производную дифференциальной, получаем дифференциальное приближение $O(h^2)$:

$$i\frac{d^2\bar{v}}{dx^2} + 2\bar{\mu}\bar{v} = 0, \quad 0 < x < L,$$

$$\bar{v}(0) = \bar{v}(L) = 0.$$
(19)

Выписанная система представляет собой задачу Штурма–Лиувилля для уравнения Шредингера с условиями Дирихле. Собственные значения (19) суть

$$\bar{\mu} = \bar{\mu}_n = \frac{i\pi^2 n^2}{2L^2}, \quad n \in \mathbb{N}.$$
(20)

В двух задачах собственные числа (18) и (20) при фиксированном n связаны соотношением

$$\bar{\mu}_n = \mu_n + O(h^2).$$

Тем самым для исходной задачи (16) мы приблизили собственные значения λ около концов «эталонного» отрезка $\pm i/h$ с порядком h^3 .

В таблице 1 сопоставлены первые три собственных значения $\bar{\mu}_n$, полученные по дифференциальному приближению согласно (20), и точные значения μ_n из (18). Выбрана сетка из N = 50 узлов при длине области L = 1 и шаге h = 0.02.

задача	n	1	2	3
(16)	$\bar{\mu}_n$	4.934802i	19.739208i	44.413219i
	μ_n	4.933179i	19.713247i	44.281873i
(21)	$\bar{\mu}_n$	0987 + 5.0335 i	3947 + 20.1340 i	8883 + 45.3015 i
	μ_n	1017 + 5.0318 i	4068 + 20.1068 i	9153 + 45.1642 i
(27)	$\bar{\mu}_n$	1974 + 4.9348 i	7896 + 19.7392 i	-1.7765 + 44.4132 i
	μ_n	1972 + 4.9273 i	7889 + 19.6895 i	-1.7751 + 44.2281 i
(32)	$\bar{\mu}_n$	2961 + 5.0335 i	-1.1844 + 20.1340 i	-2.6648 + 45.3015 i
	μ_n	3046 + 5.0194 i	-1.2183 + 20.0573 i	-2.7413 + 45.0523 i

Таблица 1. Теоретические собственные числа $\bar{\mu}_n$ и вычисленные μ_n на сетке N = 50 для ряда разностных задач

Еще раз подчеркнем такой на первый взгляд парадоксальный факт, что от разностного уравнения переноса мы перешли к дифференциальному уравнению Шредингера. Именно это помогает объяснить свойства определенных дискретных мод, ответственных за устойчивость задачи.

Более сложные варианты краевых условий дают менее предсказуемые результаты. Рассмотрим центрально-разностную схему с условиями 1-го рода слева и 2-го рода справа:

$$u_{\hat{x},j} + \lambda u_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, u_0 = 0, \quad u_N - u_{N-1} = 0.$$
(21)

Расположение собственных значений (21), найденных численно, проиллюстрировано в [12] и в данной работе на рис. 3,а. Здесь не существует аналитических формул; потому будем применять приближенную технологию, описанную выше.

Задача в переменных v такова:

$$iv_{\bar{x}x,j} + 2\mu v_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1,$$

 $v_0 = 0, \quad v_N + iv_{N-1} = 0.$
(22)

Правое краевое условие перепишем в более удобном виде — напоминающем дифференциальное выражение:

$$(1+i) v_N - ihv_{\bar{x},N} = 0,$$

где $\varphi_{\bar{x}}$ — разностная производная назад. Отсюда получается дифференциальное приближение $O(h^2)$ задачи (22):

$$i\frac{d^{2}\bar{v}}{dx^{2}} + 2\bar{\mu}\bar{v} = 0, \quad 0 < x < L,$$

$$\bar{v}(0) = 0, \quad [(1+i)\,\bar{v} - ih\,d\bar{v}/dx]_{x=L} = 0.$$
(23)

Будем искать решение задачи (23). Из основного уравнения и левого краевого условия следует, что

$$v(x) = \operatorname{sh}(\sigma x),$$
 где $\sigma^2 = 2i\bar{\mu}.$

Множество значений σ определяется правым краевым условием и приводится к решению уравнения

$$\sigma h = (1 - i) \operatorname{th}(\sigma L), \quad$$
при $\sigma \neq 0.$ (24)

Похожее трансцендентное уравнение возникает при решении известной задачи Штурма–Лиувилля для одномерного уравнения теплопроводности с краевым условием 3-го рода [18].

Мы поступим проще. Поскольку дифференциальное приближение (23) справедливо с точностью до $O(h^2)$, с тем же порядком найдем и приближенное решение уравнения (24). Искомое решение разложим по степеням малого параметра h/L, то есть

$$\sigma = \sigma_n(h) = \sigma_n(0) + h \,\sigma'_n(0) + O(h^2), \quad \sigma_n(0) = i\pi n/L \,, \quad n \in \mathbb{N}.$$
 (25)

Последнее равенство следует из того, что задача (23) при $h \to 0$ переходит в (19), и из формулы (20). Имеем, таким образом, возмущенную задачу на собственные значения.

Чтобы найти в (25) член O(h), продифференцируем (24) по h:

$$h\frac{d\sigma}{dh} + \sigma = (1-i)\left[1 - \operatorname{th}^2(\sigma L)\right]L\frac{d\sigma}{dh}$$

Подставим сюда h = 0 и $\sigma = \sigma_n(0)$ из (25), откуда после алгебраических преобразований получим

$$\sigma'_n(0) = (-1+i) \frac{\pi n}{2L^2}.$$

Разложение (25) конкретизируется:

$$\sigma_n(h) = \frac{i\pi n}{L} \left[1 + (1+i)\frac{h}{2L} + O(h^2) \right]$$

Из этого выражения легко выводится

$$\bar{\mu}_n = -\frac{i}{2}\sigma_n^2 = \frac{\pi^2 n^2}{2L^2} \left[i + (-1+i)\frac{h}{L} \right] + O(h^2), \quad n \in \mathbb{N}.$$
(26)

Данная формула в равной степени справедлива как для $\bar{\mu}_n$ из задачи (23), так и для исходных μ_n из (22) — при умеренных значениях n.

На основании (26) найдем приближенно собственные числа задачи (21) согласно соотношению (14):

$$\lambda = \lambda_n = -\frac{i}{h} + \frac{\pi^2 n^2 h}{2L^2} \left[i + (-1+i) \frac{h}{L} \right] + O(h^3), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Второй член в квадратных скобках показывает, что по сравнению с задачей Дирихле (16) спектр изменился на величину $O(h^2)$, слегка сместившись в отрицательную полуплоскость и удалившись от концов сегмента $\pm i/h$ из (6). Таким образом, устойчивость типичных методов Рунге–Кутты (рис. 2) при соблюдении условия Куранта сохраняется.

В таблице 1 приведены значения $\bar{\mu}_n$ из формулы (26) и найденные численно значения μ_n для задачи (22). Точнее, вычислялись непосредственно величины λ_n из (21), а затем пересчитывались и нужным образом перенумеровывались числа μ_n . Хорошее соответствие теории эксперименту имеет место и здесь.

Следующий пример — центрально-разностное уравнение переноса с левым краевым условием 1-го рода и с неотражающим условием справа, т.е. с противопотоковой аппроксимацией уравнения переноса O(h) в точке N. Спектральная задача принимает вид

$$u_{\hat{x},j} + \lambda u_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, u_0 = 0, \quad u_{\bar{x},N} + \lambda u_N = 0.$$
(27)

Устойчивость решения соответствующей нестационарной задачи была строго доказана в [7, 19], где рассматривалось непрерывное время либо неявная схема. Расположение собственных значений (27) исследовалось численно в [13].

Задача в переменных v повторяет (22), за исключением правого краевого условия:

$$\frac{1}{h}(v_N + iv_{N-1}) + \left(-\frac{i}{h} + \mu h\right)v_N = 0.$$

Данное выражение сведем к разностным операторам и домножим на h. В результате имеем дискретную задачу

$$iv_{\bar{x}x,j} + 2\mu v_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, v_0 = 0, \quad (v - ihv_{\bar{x}} + \mu h^2 v)_N = 0.$$
(28)

Дифференциальное приближение $O(h^2)$ для задачи (28) выглядит как

$$i\frac{d^{2}\bar{v}}{dx^{2}} + 2\bar{\mu}\bar{v} = 0, \quad 0 < x < L,$$

$$\bar{v}(0) = 0, \quad [\bar{v} - ih\,d\bar{v}/dx]_{x=L} = 0.$$
(29)

Для нахождения собственных чисел вновь получаем похожее на (24) уравнение

$$\sigma h = -i \operatorname{th}(\sigma L), \quad \sigma \neq 0. \tag{30}$$

Разложение (25) решения по степеням h в конечном итоге приводит к выражению

$$\bar{\mu}_n = \frac{\pi^2 n^2}{2L^2} \left[i - 2\frac{h}{L} \right] + O(h^2), \quad n \in \mathbb{N}.$$
(31)

Пересчет значений λ_n из μ_n показывает, что, как и в предыдущем случае (26), спектр слегка сместился относительно сегмента (6) в сторону повышения устойчивости методов Рунге–Кутты.

В таблице 1 приведены значения $\bar{\mu}_n$ из формулы (31) и найденные численно значения μ_n , отвечающие задаче (27). Наблюдается согласие между теорией и экспериментом. Также можно заметить практическое отсутствие сдвига по мнимой оси в сравнении с разностной задачей Дирихле (16).

В центрально-разностном уравнении переноса левое краевое условие 1-го рода может сочетаться с правым неотражающим условием точности $O(h^2)$. Этому соответствует спектральная задача

$$u_{\hat{x},j} + \lambda u_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, u_0 = 0, \quad (3u_N - 4u_{N-1} + u_{N-2})/(2h) + \lambda u_N = 0.$$
(32)

Расположение собственных значений (32) исследовалось численно в [13]. Устойчивость полудискретной задачи доказана в [19].

Задача в переменных v имеет вид

$$iv_{\bar{x}x,j} + 2\mu v_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1,$$

$$v_0 = 0, \quad \frac{1}{2h}(3v_N + 4iv_{N-1} - v_{N-2}) + \left(-\frac{i}{h} + \mu h\right)v_N = 0.$$
(33)

Правое краевое условие преобразуем по примеру (28), после чего получим дифференциальное приближение $O(h^2)$ в форме

$$i\frac{d^{2}\bar{v}}{dx^{2}} + 2\bar{\mu}\bar{v} = 0, \quad 0 < x < L,$$

$$\bar{v}(0) = 0, \quad [(1+i)\,\bar{v} + (1-2i)\,h\,d\bar{v}/dx]_{x=L} = 0.$$
(34)

Решая последнюю задачу, приходим к уравнению, аналогичному (24):

$$5\sigma h = (1 - 3i) \operatorname{th}(\sigma L), \ \sigma \neq 0.$$

Применяя разложение (25) по степеням h, получаем итоговое выражение

$$\bar{\mu}_n = \frac{\pi^2 n^2}{2L^2} \left[i + (-3+i) \frac{h}{L} \right] + O(h^2), \quad n \in \mathbb{N}.$$
(35)

Смещение спектра вдоль вещественной и мнимой оси показывает, что условие устойчивости методов Рунге–Кутты сохраняется.

Собственные значения — теоретические $\bar{\mu}_n$ из (35) и вычисленные μ_n — указаны в таблице 1. Задача (32) в целом похожа на (21) с условием 2-го рода, но отличается значительно большей диссипацией.

Перейдем к следующему варианту центрально-разностной схемы. До сих пор мы рассматривали левое краевое условие 1-го рода. Вместо него можно задать условие входящего потока [20]. Справа выберем условие 2-го рода. Этому отвечает спектральная задача

$$u_{\hat{x},j} + \lambda u_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, (u_0 + u_1)/(2h) + \lambda u_0 = 0, \quad u_N - u_{N-1} = 0.$$
(36)

Задача в переменных v приобретает вид

$$iv_{\bar{x}x,j} + 2\mu v_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \frac{1}{2h}(v_0 + iv_1) + \left(-\frac{i}{h} + \mu h\right) v_0 = 0, \quad v_N + iv_{N-1} = 0.$$
(37)

Дифференциальное приближение $O(h^2)$ для задачи (37) имеет следующий вид:

$$i\frac{d^2\bar{v}}{dx^2} + 2\bar{\mu}\bar{v} = 0, \quad 0 < x < L,$$

$$[(1-i)\,\bar{v} + ih\,d\bar{v}/dx]_{x=0} = 0, \quad [(1+i)\,\bar{v} - ih\,d\bar{v}/dx]_{x=L} = 0.$$
(38)

Общее решение дифференциального уравнения представимо в форме

$$v(x) = C_1 e^{\sigma x} + C_2 e^{-\sigma x}.$$

Удовлетворяющее краевым условиям нетривиальное решение $|C_1| + |C_2| \neq 0$ существует при обращении в нуль соответствующего определителя, что приводит к уравнению

$$\frac{(1-i+i\sigma h)\left(1+i+i\sigma h\right)}{(1-i-i\sigma h)\left(1+i-i\sigma h\right)} = \exp\{2\sigma L\}.$$
(39)

Приближение решения (39) с точностью $O(h^2)$ дает тот же результат, что и уравнение (30). В итоге повторяется формула (31):

$$\bar{\mu}_n = \frac{\pi^2 n^2}{2L^2} \left[i - 2\frac{h}{L} \right] + O(h^2), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Стандартное условие устойчивости методов Рунге-Кутты подтверждается.

Следующая задача, которая ранее рассматривалась в [13], сводится к разностному уравнению переноса с симметричными краевыми условиями справа и слева, основанными на неотражающем условии O(h) из (27):

$$u_{\hat{x},j} + \lambda u_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, (u_0 - u_1)/h + \lambda u_0 = 0, \quad (u_N - u_{N-1})/h + \lambda u_N = 0.$$
(40)

Спектральная устойчивость полудискретной задачи экспериментально установлена в [13].

Выпишем задачу в переменных *v*:

$$iv_{\bar{x}x,j} + 2\mu v_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1,$$

$$(v_0 - iv_1) + (-i + \mu h^2) v_0 = 0,$$

$$(v_N + iv_{N-1}) + (-i + \mu h^2) v_N = 0.$$
(41)

Затем найдем дифференциальное приближение $O(h^2)$ для задачи (41):

$$i\frac{d^{2}\bar{v}}{dx^{2}} + 2\bar{\mu}\bar{v} = 0, \quad 0 < x < L,$$

$$[(1-2i)\,\bar{v} - ih\,d\bar{v}/dx]_{x=0} = 0, \quad [\bar{v} - ih\,d\bar{v}/dx]_{x=L} = 0.$$
(42)

Нетривиальное решение, удовлетворяющее краевым условиям, существует при выполнении равенства

$$\frac{\left(1-2i-i\sigma h\right)\left(1+i\sigma h\right)}{\left(1-2i+i\sigma h\right)\left(1-i\sigma h\right)} = \exp\{2\sigma L\}.$$
(43)

Решение $\sigma_n(h)$ в первом приближении дает собственные значения

$$\bar{\mu}_n = \frac{\pi^2 n^2}{2L^2} \left[i + \frac{4}{5} (-2+i) \frac{h}{L} \right] + O(h^2), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Сдвиг спектра не нарушает условие устойчивости методов Рунге-Кутты.

Проведенное исследование простейшей разносной схемы для одномерного уравнения переноса при задании разнообразных краевых условий показывает ряд общих закономерностей.

- 1. «Концевые» точки спектра располагаются очень близко к краям сегмента, задаваемого условием фон-Неймана.
- 2. Спектры всех рассмотренных разностных задач не выходят по мнимой оси за пределы «эталонного» отрезка.
- 3. Если дифференциальная по времени задача устойчива, то явные методы Рунге–Кутты устойчивы при числе Куранта, определяемом методом гармоник фон-Неймана.
- 4. Не обнаружено ни одного примера устойчивой на низких частотах разностной задачи, для которой критические собственные значения отклонялись бы от мнимой оси в положительную сторону.

Заключение

Итак, явные методы Рунге–Кутты для центрально-разностных схем устойчивы при ограничении на шаг по времени, близком к критерию Куранта. Это легко устанавливается методом гармоник фон-Неймана. Что касается начально-краевых задач, то проведенные исследования позволяют сделать общий вывод. Несмотря на то, что от граничных условий существенно зависит корректность полудискретной задачи, что было показано ранее, они не способны повлиять на ограничение Куранта ни качественно, ни количественно.

Оценивать поведение дискретных мод, ответственных за устойчивость Куранта, удалось благодаря новой методике, дающей возможность находить для разностной задачи близкую ей дифференциальную задачу. Важно отметить, что такая близость относится не к гладким решениям, а быстроосциллирующим по пространству и времени. Разностные схемы с операторами (2), затрагивающими 5, 7 и более узлов, требуют большего числа краевых условий, чем трехточечные схемы. Доказанное в § 2 утверждение дает основания предполагать близость критических собственных значений к крайним точкам, определяемым по фон-Нейману. Однако более тонкую методику приближенного анализа, изложенную в § 3, нельзя непосредственно перенести на схемы с широкими шаблонами. Тем не менее, схожее поведение спектров таких задач дает надежду на создание аналогичных технологий исследования широкого класса центрально-разностных схем. Возможно, не останутся в стороне и диссипативные схемы.

Литература

- 1. C.K.W. Tam, J.C. Webb. Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics // J. Comput. Phys., v.107, 1993, pp.262–281.
- 2. *C. Bogey, C. Bailly.* A family of low dispersive and low dissipative explicit schemes for flow and noise computations // J. Comput. Phys., v.194, 2004, pp.194–214.
- 3. F.Q. Hu, M.Y. Hussaini, J.L. Manthey. Low dissipation and dispersion Runge-Kutta Schemes for computational acoustics // J. Comput. Phys., v.124, 1996, pp.177–191.
- 4. *M. Calvo, J.M. Franco, L. Randez.* A new minimum storage Runge–Kutta scheme for computational acoustics // J. Comput. Phys., v.211, 2004, pp.1–12.
- 5. J. Berland, C. Bogey, C. Bailly. Low-dissipation and low-dispersion fourthorder Runge–Kutta algorithm // Comput. Fluids, v.35, 2006, pp.1459–1463.
- 6. *А.А. Самарский*. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. (*A.A. Samarskii*. The Theory of Difference Schemes. – Marcel Dekker inc., New York and Basel, 2001.)
- 7. А.А. Самарский, А.В. Гулин. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973.
- 8. *Ю.И. Шокин, Н.Н. Яненко*. Метод дифференциального приближения. Применение к газовой динамике. – Новосибирск: Наука, 1985.
- 9. *Ю.И. Шокин, А.И. Урусов, В.Н. Яньшин.* К анализу устойчивости двухслойных разностных схем методом дифференциального приближения // Докл. АН СССР, 1989, т.305, № 3, с.543–545.
- 10. *З.И. Федотова*. О конструктивном подходе к исследованию устойчивости разностных схем // Вычислительные технологии, 2003, т.8, спец. выпуск, с.93–103.
- 11. *Л.В. Дородницын*. Искусственные граничные условия при численном моделировании дозвуковых течений газа // ЖВМ и МФ, 2005, т.45,

№ 7, c.1251–1278. (*L.V. Dorodnitsyn*. Artificial boundary conditions for numerical simulation of subsonic gas flows // Comput. Math. Math. Phys., 2005, v.45, pp.1209–1234.)

- 12. Л.В. Дородницын. Сеточные осцилляции в разностных схемах и метод их приближенного анализа // Прикладная математика и информатика № 50 М.: Изд-во факультета ВМК МГУ, 2015, с.93–111. (*L.V. Dorodnitsyn.* Grid oscillations in finite-difference scheme and a method for their approximate analysis // Comput. Math. Model., 2016, v.27, pp.472–488.)
- 13. Л.В. Дородницын. Аналитическое и численное исследование спектров трехточечных разностных операторов // Прикладная математика и информатика № 27 – М.: МАКС Пресс, 2007, с.25–45. (*L.V. Dorodnitsyn*. Analytical and numerical investigation of the spectra of three-point difference operators // Comput. Math. Model., 2008, v.19, pp.343–358.)
- 14. Э. Хайрер, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. (*E. Hairer, G. Wanner*. Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems. Springer-Verlag, Berlin, 1996.)
- 15. *D. Levy, E. Tadmor.* From semidiscrete to fully discrete: Stability of Runge– Kutta Schemes by The Energy Method // SIAM Rev., 1998, v.40, No.1, pp.40–73.
- 16. *L.W. Dorodnicyn*. Artificial boundary conditions for high-accuracy aeroacoustic algorithms // SIAM J. Scientific Computing, 2010, v.32, No.4, pp.1950–1979.
- 17. *Л.В. Дородницын*. Разностные граничные условия высокой точности для двумерных задач аэроакустики // Матем. моделирование, 2011, т.23, № 11, с.131–155.
- А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. Уравнения математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1999. (A.N. Tikhonov and A.A. Samarskii. Equations of Mathematical Physics. – Dover Publications, inc., New York, 2011.)
- 19. Л.В. Дородницын. Об устойчивости некоторых разностных задач с неотражающими краевыми условиями // Прикладная математика и информатика № 49 – М.: Изд-во факультета ВМК МГУ, 2015, с.97–102. (*L.V. Dorodnitsyn.* Stability of finite-difference problems with nonreflecting boundary conditions // Comput. Math. Model., 2016, v.27, pp.270–274.)
- 20. C. Hirsch. Numerical Computation of Internal and External Flows Vol. 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows. Wiley, New York, 1990.