

Численное исследование независимой аппроксимации граничных условий на решениях с разрывами производных*

Д. А. ИЧЕТОВКИН

Новосибирский государственный университет, Россия
e-mail: neo@211.ru

В. И. ПААСОНЕН

Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия
e-mail: paas@ict.nsc.ru

Работа является продолжением цикла статей, посвященных численному исследованию разностных схем для параболических и эллиптических уравнений с разрывными коэффициентами, в которых граничные условия аппроксимируются с произвольным порядком непосредственно, без привлечения дифференциального уравнения и его продолженной системы. Вопросы теоретического обоснования метода и его возможные приложения ранее обсуждались на страницах журнала “Вычислительные технологии”, а предметом настоящей работы является подтверждение порядков сходимости в численных экспериментах на решениях с разрывами первых производных.

Ключевые слова: односторонняя аппроксимация потока, многоточечные граничные условия, многоточечная аппроксимация потока, компактная схема, неоднородная область, аппроксимации граничных условий, схема высокого порядка точности, высокоточная схема.

Введение

Известно, что многие дифференциальные уравнения в частных производных второго порядка, в том числе и с переменными коэффициентами, в ортогональных координатных системах могут быть аппроксимированы с четвертым порядком относительно шагов пространственной сетки на компактном шаблоне, не выступающем за пределы $3 \times 3 \times \dots \times 3$ -точечного шаблона (см., например, [1, 2]). Для применения высокоточных схем и в задачах с разрывными коэффициентами необходимо решить вопрос об аппроксимации с адекватной точностью внутренних граничных условий. Среди существующих подходов для решения этой проблемы отметим методы [3, 4]. Первый базируется на требовании гладкости потока в точках разрыва производной, и его обобщение на двумерный случай проблематично, второй основан на разностных аппроксимациях закона сохранения в балансных ячейках.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 08-01-00264) и интеграционного проекта СО РАН № 103.

© ИВТ СО РАН, 2010.

Авторы настоящей статьи считают, что с точки зрения универсальности подхода (относительно характера дифференциальных уравнений, порядка точности, типа граничных условий) для построения простого, гибкого, удобного для пользователя и хорошо структурированного алгоритма целесообразно в граничных условиях непосредственно использовать односторонние разностные аналоги первых производных. При этом необходимая точность в граничных условиях может быть достигнута выбором достаточного числа точек в односторонней аппроксимации потока. В общем виде такой подход сформулирован и исследован в [5], а в [6] предложена эквивалентная параллельная технология для его реализации. Метод устойчив и универсален, пригоден для условий Неймана, для условий третьего рода и условий равенства потоков на границах раздела различных сред.

Представленный здесь материал является продолжением данного цикла работ и посвящен численному исследованию алгоритмов такого типа на одномерных и двумерных задачах теплопроводности с разрывными коэффициентами. Необходимость численного эксперимента вызвана тем, что иногда наличие разрывов в коэффициентах не позволяет получить в расчетах ошибку ожидаемого порядка, вычисленного из теории, которая обычно предполагает достаточную гладкость решения. Предлагаемые здесь численные исследования были проведены с целью подтверждения теоретических результатов путем изучения реально наблюдаемых порядков сходимости.

1. Постановка одномерной разностной задачи

Пусть x_0, x_1, \dots, x_r — возрастающая последовательность значений пространственной координаты x , представляющих собой координаты границ однородных слоев $x_{j-1} < x < x_j$, ($j = 1, \dots, r$) с постоянными теплофизическими характеристиками.

Внутри каждого слоя решение $U(x, t)$ удовлетворяет уравнению теплопроводности на интервале времени $0 < t < T$

$$c \frac{\partial U}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - f(x, t).$$

На внешних границах $x = x_0$, $x = x_r$ поставлены граничные условия первого, второго или третьего рода (объединенные общей формулой)

$$\nu_j \frac{\partial U}{\partial n} + \mu_j U = \phi_j, \quad j = 0, r,$$

а на внутренних границах $x = x_1, \dots, x_{r-1}$ заданы условия равенства потоков

$$\left(\lambda \frac{\partial U}{\partial x} \right)_+ - \left(\lambda \frac{\partial U}{\partial x} \right)_- = 0, \quad j = 1, \dots, r-1,$$

где индексы $+$ и $-$ означают пределы справа и слева.

Во внутренних узлах слоев уравнение теплопроводности аппроксимируем либо обычной чисто неявной схемой точности $O(\tau + h^2)$, либо компактной схемой точности $O(\tau^2 + h^4)$:

$$cA \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = \lambda \Lambda u^n - S f^{n+1/2}, \quad A = E + \alpha h^2 \Lambda, \quad S = E + \frac{h^2}{12} \Lambda,$$

где E — тождественный оператор, Λ — обычная аппроксимация двойного дифференцирования, а вес s с целью повышения порядка точности выражается следующим образом:

$$\alpha = \frac{1}{12} - \frac{\sigma}{2}, \quad \sigma = \frac{\lambda\tau}{ch^2}.$$

Таким образом, во внутренних узлах любого однородного слоя разностное уравнение приводится к симметричным трехточечным (временной индекс опущен) соотношениям

$$a u_{i-1} + b u_i + a u_{i+1} = F_i,$$

где F — результат операций над значениями функции u на нижнем слое и правой части f уравнения теплопроводности.

Так как теплофизические характеристики и шаг сетки в пределах слоя постоянны, то s , λ и h , а также коэффициенты разностного уравнения следовало бы снабдить индексом, означающим номер слоя, которому принадлежит текущий узел сетки. Здесь и ниже будем его опускать, подразумевая зависимость этих величин от номера слоя.

Первые производные, входящие во внешние и внутренние граничные условия, аппроксимируем, применяя односторонние разделенные разности на $(s+1)$ -точечном шаблоне. Разность “вперед” имеет вид

$$\frac{\Delta_s}{h} = \frac{1}{h} \sum_{k=0}^s \alpha_k T_h^k.$$

Здесь T_h — оператор сдвига, а α_k — коэффициенты разностного оператора. Максимально возможный порядок аппроксимации равен s , при этом

$$\alpha_k = \frac{(-1)^{k+1}}{k} C_s^k, \quad k \neq 0, \quad \alpha_0 = - \sum_{k=1}^s \alpha_k,$$

где C_s^k — число сочетаний из s по k .

Аналогично выглядит разность “назад” порядка s :

$$\frac{\Delta_{-s}}{h} = \frac{1}{-h} \sum_{k=0}^s \alpha_k T_{-h}^k = -\frac{1}{h} \sum_{k=0}^s \alpha_k T_h^{-k}.$$

Иначе говоря, коэффициенты противоположно ориентированных односторонних высокоточных разностей, как и в случае простейших разностей первого порядка, различаются только знаком.

В узлах, совпадающих с границами раздела сред, разностное уравнение запишем с помощью $(s+1)$ -точечных односторонних разностей:

$$\lambda_+ \frac{\Delta_s}{h_+} u_i - \lambda_- \frac{\Delta_{-s}}{h_-} u_i = 0,$$

где индексы $+$ и $-$ означают принадлежность к правому или левому слою относительно данной границы раздела сред. На внешних границах также воспользуемся односторонними аналогами первых производных порядка $O(h^s)$:

$$\nu_0 \frac{\Delta_s}{h_+} u_0 + \mu_0 u_0 = \phi_0, \quad \nu_r \frac{\Delta_{-s}}{h_-} u_N - \mu_r u_N = -\phi_r.$$

При сравнении методов различного порядка условимся использовать двух- и трехточечные граничные условия в сочетании с чисто неявной схемой, а в сочетании с компактной схемой — четырех- и пятиточечные граничные условия. Таким образом, при естественном предположении $\tau = O(h^2)$ получим разностные схемы первого, второго, третьего и четвертого порядка точности относительно h , построенные с использованием односторонних разностей на различных шаблонах.

2. Многомерные разностные краевые задачи

В двумерном случае для простоты будем рассматривать только задачу Дирихле для уравнения теплопроводности в области, составленной из полос, занятых материалами с различными постоянными характеристиками. При кусочно-постоянных коэффициентах разностное уравнение, аппроксимирующее с погрешностью $O(\tau^2 + h^4)$ уравнение теплопроводности во внутренних узлах подобластей, получается факторизацией схемы с весами при специальных значениях весов осреднения

$$a_k = \frac{1}{12} - \frac{\sigma_k}{2}, \quad \sigma_k = \frac{\lambda\tau}{ch_k^2}, \quad k = 1, 2.$$

На границах раздела сред использованы одномерные разностные условия равенства потоков порядка s , описанные выше. При этом, как и в одномерном случае, рассмотрим варианты $s = 1$ и $s = 2$ для схемы второго порядка и $s = 3$ и $s = 4$ для компактной схемы четвертого порядка с фиксацией естественного предельного соотношения между τ и h . Тогда с учетом точности аппроксимации граничных условий имеем четыре схемы порядка $O(h^s)$ для значений $s \leq 4$. Сравнение проводилось также с расчетами по схеме сквозного счета (СС) приближенной факторизации.

Для схемы в дробных шагах по линиям сетки с учетом разностных граничных условий на каждом временном шаге стандартным способом формируются одномерные разностные задачи такого же типа, что и в одномерном случае. Каждая из одномерных систем линейных алгебраических уравнений, к которым сводится общая задача, имеет почти трехдиагональную структуру. Ниже в качестве примера приведены два фрагмента расширенной матрицы системы для частного случая $s = 4$. Для компактности записи здесь использованы обозначения

$$\beta_j = \frac{\mu_0}{h_1} \alpha_j, \quad \gamma_j^- = \frac{\lambda_-}{h_-} \alpha_j, \quad \gamma_j^+ = \frac{\lambda_+}{h_+} \alpha_j.$$

Первый фрагмент соответствует окрестности левой границы многослойного пакета:

$$\left| \begin{array}{cccccccc|c} -\nu_0 + \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 & 0 & 0 & \cdots & -\phi_0 \\ a_+ & b_+ & a_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & F_1 \\ 0 & a_+ & b_+ & a_+ & 0 & 0 & 0 & \cdots & F_2 \\ 0 & 0 & a_+ & b_+ & a_+ & 0 & 0 & \cdots & F_3 \\ 0 & 0 & 0 & a_+ & b_+ & a_+ & 0 & \cdots & F_4 \end{array} \right|$$

Второй фрагмент иллюстрирует структуру матрицы в окрестности любой границы раздела сред:

$$\begin{array}{cccccccccccc|c} a_- & b_- & a_- & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & F_{i-4} \\ 0 & a_- & b_- & a_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & F_{i-3} \\ \dots & 0 & a_- & b_- & a_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & F_{i-2} \\ \dots & 0 & 0 & a_- & b_- & a_- & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & F_{i-1} \\ 0 & \gamma_4^- & \gamma_3^- & \gamma_2^- & \gamma_1^- & \gamma_0^- + \gamma_0^+ & \gamma_1^+ & \gamma_2^+ & \gamma_3^+ & \gamma_4^+ & 0 & 0 \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & a_+ & b_+ & a_+ & 0 & 0 & \dots & F_{i+1} \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_+ & b_+ & a_+ & 0 & \dots & F_{i+2} \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_+ & b_+ & a_+ & 0 & F_{i+3} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & a_+ & b_+ & a_+ & F_{i+4} \end{array}$$

Если разбивать каждый слой не грубее, чем на s шагов, то “длинные” условия на соседних границах не будут “переплетаться” между собой, что позволяет с помощью стандартных операций метода Гаусса понизить их длину, вычитая из длинных строк комбинации соседних трехточечных строк. В результате таких операций матрица системы превращается в трехдиагональную, после чего можно воспользоваться обычным методом прогонки. Именно так проводилась программная реализация, хотя существует и другой эквивалентный параллельный алгоритм [6].

3. Результаты численных экспериментов

С целью исследования практически наблюдаемых порядков сходимости схем на предмет сравнения их с теоретическими были проведены численные эксперименты. Сравнивались результаты, полученные по четырем различным схемам с односторонними многоточечными разностями в граничных условиях — с первого до четвертого порядка аппроксимации. Эти схемы обозначаются в описании тестов цифрами, соответствующими порядку точности. С целью достижения жестких условий тестирования шаги в слоях были взяты равными, а не подбирались из соображения равенства тепловых сопротивлений слоев, и использовалась двумерная квадратная сетка. Пространственные и поверхностные источники тепла отсутствовали.

При детализации сетки начиная с начального шага $h_0 = 0.1$ наблюдалось стремление численных решений, полученных по различным схемам, к одному пределу, при этом, как и ожидалось, сходимость была быстрее для схем более высокого порядка. Поэтому при сравнении результатов на сетках с шагами h и $h/2$ за точное решение условно принималось численное решение, полученное по схеме четвертого порядка аппроксимации на сетке с шагом $h/4$. Всюду ниже термин “точное решение” имеет именно этот смысл. В одномерной задаче для контроля проводилось до восьми дроблений шага вдвое. В двумерной задаче такая детализация сетки была бы обременительна, особенно если учесть, что в этом случае для сохранения постоянства отношения τ/h^2 шаг по времени каждый раз уменьшался бы в четыре раза. Оценка практически наблюдаемого порядка точности проводилась на сгущающихся сетках по коэффициенту убывания ошибки

$$r_h = \frac{\epsilon_h}{\epsilon_{h/2}} = \frac{\|U_h - U\|_C}{\|U_{h/2} - U\|_C},$$

который теоретически при малых h должен стремиться к степеням двойки 2^s .

В одномерном случае рассматривался двухслойный пакет единичной толщины с границей раздела сред посередине. Теплоемкость в обоих слоях принималась равной единице, а коэффициенты теплопроводности различались в сто раз ($\lambda_- = 2$ и $\lambda_+ = 0.02$ соответственно для левого и правого слоев).

На рис. 1 показаны результаты расчетов на момент времени $t = 0.8$, полученные на различных сетках (с шагом $h = 0.1$ и 0.05) по схемам первого и четвертого порядка аппроксимации для смешанной задачи с начальным распределением температур

$$U(x, 0) = \frac{1}{2} \exp(-x^2)(1 - 100x)$$

и внешними граничными условиями

$$U(0, t) = \frac{1}{2}(1 + \sin(4\pi t)), \quad \frac{\partial U}{\partial x}(1, t) = 49/e.$$

Из рис. 1 видно, что даже на очень грубой сетке расчеты по схеме 4 весьма близки к точному решению. Расчеты по схемам второго и третьего порядка точности занимали промежуточное положение между приведенными крайними результатами и, чтобы не загромождать рисунок, их графики не представлены.

В таблице приведены нормы ошибок на сгущающихся сетках для тестируемых схем и их отношения. Для всех порядков обнаруживается стремление отношений к 2^s , а это свидетельствует о том, что несмотря на наличие существенных изломов в точном решении теоретический порядок точности на практике подтверждается.

Таблица и рис. 2 иллюстрируют сходимость численных решений на сгущающихся сетках для задачи Дирихле в двумерном случае. Область представляет собой единичный квадрат, разделенный по вертикали на два равных прямоугольника, занятых материалами с теми же теплофизическими характеристиками, что и в одномерном варианте. Условия на границе и начальные данные задавались из выражения

$$U(x, y, t) = \frac{1}{2} (1 + \sin(4\pi t)) \left(\frac{1}{x+1} + \frac{1}{y+1} \right).$$

Заметим, что точным решением эта функция не является, она используется лишь для генерирования согласованных начальных и граничных условий. Сплошной линией

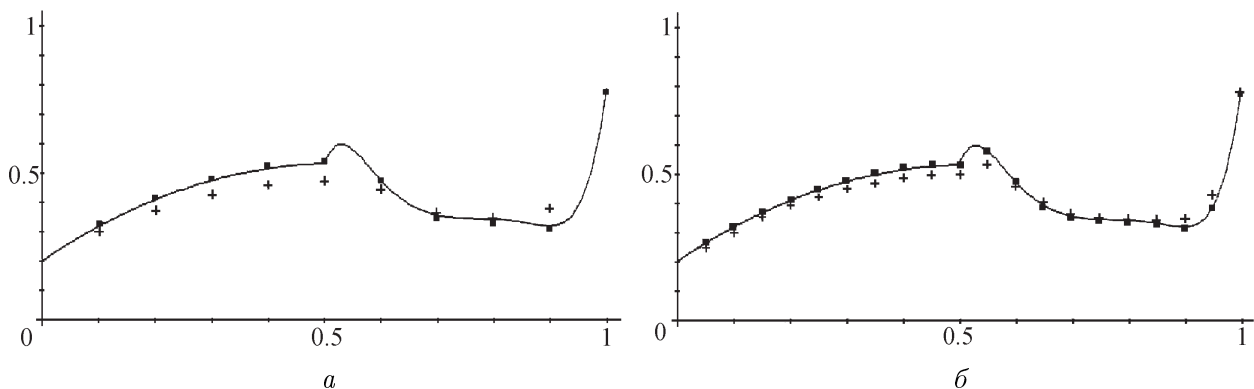


Рис. 1. Численное решение одномерной задачи при пяти (а) и десяти (б) шагах в слое; сплошная линия — точное решение, квадратики — результаты расчета по схеме 4, + — результаты расчета по схеме 1

Экспериментальная оценка порядка точности в одномерной и двумерной задаче

Схема расчета	Ошибка ϵ_h	Ошибка $\epsilon_{h/2}$	Коэффициент r_h
<i>Одномерная задача</i>			
1 $h = 1/20$	0.04099	0.01881	2.17931
2	0.03648	0.00903	4.03675
3	0.01207	0.00212	5.68965
4	0.00742	0.00061	12.0609
1 $h = 1/40$	0.02684	0.01338	2.00677
2	0.02132	0.00503	4.23852
3	0.00595	0.00079	7.53160
4	0.00215	0.00013	16.0440
<i>Двумерная задача</i>			
CC	0.077821	0.030338	2.565067
1 $h = 1/20$	0.142020	0.049197	2.886750
2	0.077260	0.021209	3.642719
3	0.063559	0.010129	6.274994
4	0.042807	0.003269	13.09257
CC	0.071975	0.024872	2.893750
1 $h = 1/40$	0.148847	0.051145	2.910278
2	0.057868	0.013118	4.411326
3	0.027224	0.003122	8.720084
4	0.012520	0.000776	16.13031

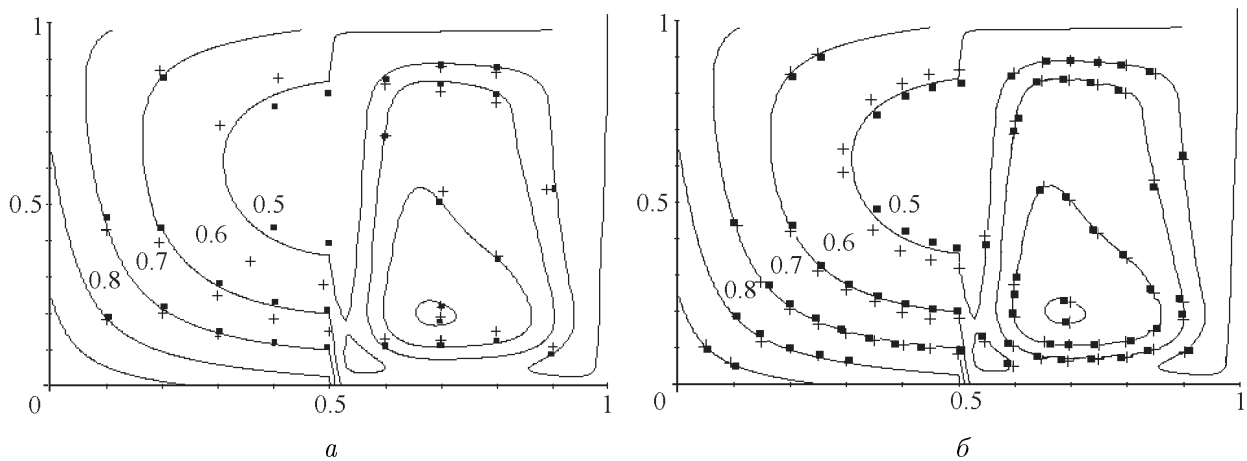


Рис. 2. Численное решение двумерной задачи при пяти (а) и десяти (б) шагах в слое

изображены изолинии точного решения на момент времени $t = 1$, а маркеры имеют тот же смысл, что и в одномерном случае. Здесь также решение по схеме 4 существенно ближе к точному, чем по схеме 1.

Результаты исследования порядка сходимости для данного двумерного теста приведены в таблице. Здесь сравнение проводилось также со схемой сквозного счета. Видно стремление отношения погрешностей к целым степеням двойки с показателем, равным порядку аппроксимации, что согласуется с теоретическими результатами.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что схемы с односторонней аппроксимацией потоков в граничных условиях в кусочно-однородных областях имеют порядки точности, совпадающие с теоретическими. Это объясняется тем, что предложенный алгоритм основан на непосредственной аппроксимации потоков односторонними разностными аналогами без привлечения самого дифференциального уравнения или его продолженной системы, в силу чего полная гладкость решения фактически не требуется, необходима лишь его достаточная гладкость в пределах каждого однородного включения отдельно. По этой же причине в отличие от методов, в которых разностные аппроксимации граничных условий зависят от дифференциального уравнения, в рассматриваемом случае не требуется гладкость потока на границах раздела сред.

Список литературы

- [1] ПААСОНЕН В.И. Компактные схемы для уравнений второго порядка с конвективными членами // Вычисл. технологии. 1998. Т. 3, № 1. С. 55–66.
- [2] PAASONEN V.I. Compact schemes for system of second-order equations without mixed derivatives // Rus. J. Numer. Analys. and Math. Model. 1998. Vol. 13, No. 4. P. 335–344.
- [3] КОСКИН П.И. Схема повышенной точности для уравнения теплопроводности с разрывными коэффициентами // Численные методы механики сплошной среды. 1979. Т. 10, № 2. С. 85–96.
- [4] ИЛЬИН В.П. Балансные аппроксимации повышенной точности для уравнения Пуассона // Сибирский мат. журн. 1996. Т. 37, № 1. С. 151–169.
- [5] PAASONEN V.I. Compact difference schemes for inhomogeneous boundary value problems // Rus. J. Numer. Analys. and Math. Model. 2004. Vol. 19, No. 1. P. 65–81.
- [6] ПААСОНЕН В.И. Параллельный алгоритм для компактных схем в неоднородных областях // Вычисл. технологии. 2003. Т. 8, № 3. С. 98–106.

*Поступила в редакцию 22 декабря 2008 г.,
в переработанном виде — 8 августа 2009 г.*