Вычислительные технологии, 2024, том 29, № 1, с. 18–31. © ФИЦ ИВТ, 2024
Computational Technologies, 2024, vol. 29, no. 1, pp. 18–31. © FRC ICT, 2024
ISSN 1560-7534
eISSN 2313-691X

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

DOI:10.25743/ICT.2024.29.1.003

Разрешимость разностных схем с универсальной аппроксимацией потоков в граничных условиях

В. И. Паасонен
Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, 630090, Новосибирск, Россия
Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия
Контактный автор: Паасонен Виктор Иванович, e-mail: paas@ict.nsc.ru
Поступила 27 июля 2022 г., доработана 26 сентября 2022 г., принята в печать 25 октября 2022 г.

Исследуется способ аппроксимации граничных условий с произвольным порядком точности, основанный на односторонних многоточечных разностных аналогах потоков максимально возможной точности на данном шаблоне. Рассматриваемая технология универсальна в смысле однообразия алгоритма при любых порядках точности схемы и в смысле независимости граничного условия от вида решаемого уравнения. Исследована проблема реализации и разрешимости разностной задачи путем приведения “длинных” граничных условий к эквивалентным двухточечным условиям. Сформулированы условия диагонального преобладания в строках матрицы приведенной системы, соответствующих граничным соотношениям. Показано, что обсуждаемая универсальная технология расчета, в отличие от традиционных способов, не порождает проблем при расщеплении многомерных задач на одномерные.

Ключевые слова: многоточечная аппроксимация потока, высокоточные граничные условия, диагональное преобладание, компактная разностная схема.

Цитирование: Паасонен В.И. Разрешимость разностных схем с универсальной аппроксимацией потоков в граничных условиях. Вычислительные технологии. 2024; 29(1):18–31. DOI:10.25743/ICT.2024.29.1.003.

Введение

Существует несколько способов аппроксимации граничных условий. Первый заключается в аппроксимации законов сохранения в балансной ячейке, составленной из частей (в двумерном случае из четвертей) смежных ячеек сетки, примыкающих к данному узлу сетки. При этом разностные законы сохранения формулируются единообразно для внутренних и граничных балансных ячеек. Для задач с краевыми условиями второго и третьего рода этот метод не позволяет достигнуть точности выше второго порядка, хотя для задачи Дирихле известны балансные соотношения более высокого порядка [1].

Второй метод опирается на процедуру преобразования главного члена разложения погрешности простого граничного условия, при котором старшие производные выражаются из продолженной системы и полученный результат заменяется разностным выражением, компенсирующим главный член погрешности. С повышением порядка аппроксимации этим способом громоздкость разностных выражений возрастает, к тому же они зависят от решаемого дифференциального уравнения и его продолженной системы. В многомерном случае возникают серьезные проблемы, часто непреодолимые, при расщеплении задачи на одномерные.

Удобнее применять иной способ, основанный на непосредственной многоточечной односторонней аппроксимации потоков в граничном условии с необходимой точностью [2]. Такие граничные соотношения по построению универсальны в смысле единообразия их структуры при различных порядках точности и в смысле их независимости от решаемого уравнения. Кроме того, в рамках этого технологичного подхода не возникает никаких проблем при расщеплении задач на одномерные.

Платой за универсальность и простоту такой технологии является необходимость использовать в аппроксимации потока много узлов сетки (т. е. увеличивать “длину” разностного граничного условия), что приводит к нарушению трехдиагональной структуры матриц, подлежащих обращению, и связанному с ним нарушению диагонального преобладания в строках, соответствующих “длинным” граничным условиям.

В данной работе изучается вопрос о разрешимости такого рода задач и устойчивости при реализации их методом прогонки. С этой целью схемы с “длинными” граничными условиями приводятся с помощью локальных гауссовых процедур к эквивалентным трехдиагональным системам, а условия разрешимости последних устанавливаются исходя из требования соблюдения диагонального преобладания в преобразованных строках, соответствующих граничным условиям.

Обсуждаемая технология применима для решения широкого класса краевых задач, когда во внутренних узлах расчетной области на дробных шагах схемы трехточечные на верхнем слое, а в формулировке граничных условий участвуют потоки. Это могут быть, например, тепловые задачи, задачи для уравнения Пуассона, задачи исследования колебаний мембраны, задачи оптики и теории упругости, задачи расчета течения вязкой несжимаемой жидкости с так называемыми мягкими граничными условиями.

1. Традиционная аппроксимация граничных условий

Для простоты рассмотрим дифференциальное уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + f, \quad x \in (a, b), \quad t \in (0, T), \tag{1}$$

и соответствующую двухслойную разностную схему с весами

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = \lambda \Lambda [u^{n+1} + (1 - \sigma) u^n] + \phi^n,$$

где Λ — трехточечный разностный аналог оператора двойного дифференцирования на равномерной сетке $x_i = a + ih$, $i = 0, \ldots, N$, с шагом $h = (b - a)/N$; n — номер временного слоя сетки с постоянным шагом τ; $\sigma \in [0, 1]$ — вес схемы.

Известно, что при $\phi^n = f^n + O(\tau)$ погрешность схемы есть величина $O(\tau + h^2)$, при $\sigma = 1/2$ и $\phi^n = f^{n+1/2} + O(\tau^2)$ получается схема Кранка–Николсон, имеющая погрешность $O(\tau^2 + h^2)$, а при специальном значении веса и специальной правой части

$$\sigma = \sigma_0 = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12 \lambda \tau}, \quad \phi = f + \frac{\tau}{2} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + O(\tau^2 + h^4)$$

имеем схему Микеладзе [3], погрешность которой составляет величину $O(\tau^2 + h^4)$.

Рассмотрим различные варианты разностных граничных условий для этих трех схем в частном случае смешанной начально-краевой задачи

$$U(x,0) = U_0(x), \quad \lambda\frac{\partial U}{\partial x}(a,t) = q(t), \quad U(b,t) = g(t). \tag{2}$$

С правым граничным условием проблем нет, оно может быть задано точно, а условие на левой границе может аппроксимироваться по-разному. Самое грубое условие

$$\lambda\Delta_+ u_0^{n+1} = q_0^{n+1}, \quad \Delta_+ u_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} \tag{3}$$

не годится ни для одной из рассматриваемых схем, так как оно понижает порядок в целом до первого по h.

Для повышения порядка вычислим погрешность аппроксимации граничного условия (3) в точке (a, t^{n+1}) на достаточно гладких решениях краевой задачи (1), (2):

$$\Psi_0 = \lambda\frac{\partial U}{\partial x} + \lambda\frac{h}{2}\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + O(h^2) - q = \frac{h}{2}\left(\frac{\partial U}{\partial t} - f\right) + O(h^2).$$

Заменяя здесь производную разделенной разностью с точностью до $O(\tau)$ и компенсируя вычисленные главные члены погрешности в исходном граничном условии (3), получим уточненное граничное условие

$$\lambda\Delta_+ u_0^{n+1} = q_0^{n+1} + \frac{h}{2}\left(\Delta_t u_0^{n+1} - f_0^{n+1}\right), \quad \Delta_t u^{n+1} = \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau}, \tag{4}$$

имеющее погрешность $O(\tau + h^2)$. Оно по точности вполне подходит для самой простой схемы, но не годится для двух других. Для схемы Кранка – Николсон подходит условие, аналогичное (4), но усредненное по двум временным слоям:

$$\lambda\Delta_+\frac{u_0^{n+1} + u_0^n}{2} = q_0^{n+1/2} + \frac{h}{2}\left(\Delta_t u_0^{n+1} - f_0^{n+1/2}\right). \tag{5}$$

Для повышения порядка аппроксимации до третьего в разложении погрешности необходимо удержать еще одно слагаемое:

$$\Psi_0 = \frac{h}{2}\left(\frac{\partial U}{\partial t} - f\right) + \frac{h^2}{6}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U}{\partial t} - f\right) + O(h^3). \tag{6}$$

Сделав естественное для параболических задач предположение о предельном соотношении шагов сетки $\tau = O(h^2)$, аппроксимируем выражения в скобках:

$$\frac{\partial U}{\partial t} - f = (\Delta_t U - f) + O(\tau), \quad \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U}{\partial t} - f\right) = \Delta_+(\Delta_t U - f) + O(\tau + h),$$

Подставляя эти выражения в (6) и компенсируя результат с обратным знаком в исходном граничном условии (3), получим искомое условие с погрешностью $O(\tau^2 + h^3)$:

$$\lambda\Delta_+ u_0^{n+1} - \left(\frac{h}{2}E + \frac{h^2}{6}\Delta_+\right)\Delta_t u_0^{n+1} = q_0^{n+1} - \left(\frac{h}{2}E + \frac{h^2}{6}\Delta_+\right) f_0^{n+1}. \tag{7}$$

Для построения еще более точной аппроксимации граничного условия необходимо воспользоваться разложением погрешности до четвертого порядка:

$$\Psi_0 = \frac{h}{2}\left(\frac{\partial U}{\partial t} - f\right) + \frac{h^2}{6}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U}{\partial t} - f\right) + \lambda\frac{h^3}{24}\frac{\partial^4 U}{\partial x^4} + O(h^4)$$

и более точными разностными аппроксимациями слагаемых

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U}{\partial t} - f &= \left(\Delta_t U + \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - f\right) + O(\tau^2),\\
\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} &= \frac{\partial U}{\partial t}\left(\lambda\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + f\right) = \Delta_t(\lambda\Delta_+^2 U + f) + O(\tau + h),\\
\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U}{\partial t} - f\right) &= \left(\Delta_+ - \frac{h}{2}\Delta_+^2\right)(\Delta_t U - f) + O(\tau + h^2),\\
\lambda\frac{\partial^4 U}{\partial x^4} &= \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\left(\frac{\partial U}{\partial t} - f\right) = \Delta_+^2(\Delta_t U - f) + O(\tau + h).
\end{aligned}$$

В результате получим граничное условие с погрешностью $O(\tau^2 + h^4)$:

$$\begin{aligned}
&\lambda\Delta_+ u_0^{n+1} - \left[\frac{h}{2}E + \frac{h^2}{6}\Delta_+ + \left(\frac{\tau h}{4} - \frac{h^3}{24}\right)\Delta_+^2\right]\Delta_t u^{n+1} =\\
&= q_0^{n+1} - \left(\frac{h}{2}E + \frac{h^2}{6}\Delta_+ - \frac{h^3}{24}\Delta_+^2\right) f_0^{n+1} + \frac{\tau h}{4}\Delta_t f_0^{n+1}.
\end{aligned} \tag{8}$$

Шаблон данного условия имеет по три узла на верхнем и нижнем слоях.

Из приведенного примера видно, что в случае традиционных схем второго порядка точности построение адекватного граничного условия осуществляется просто. Однако построение высокоточного граничного условия является довольно сложным занятием, а результат построения — громоздким. Кроме того, граничное условие повышенной точности сложным образом связано с решаемым уравнением и его продолженной системой. Еще сложнее граничные условия многомерной задачи, так как в этом случае замена старших производных по нормали из продолженной системы осуществляется также через производные по касательным направлениям, а их аппроксимация приводит к многомерному граничному условию, которое не только сложно реализовать при расщеплении задачи на одномерные, но ввиду громоздкости даже затруднительно безошибочно вывести.

Между тем описанный способ повышения порядка точности граничных условий является в практике вычислений основным, поскольку подавляющее большинство исследователей используют при расчетах традиционные схемы до второго порядка точности, а в этом случае при аппроксимации граничных условий попросту не возникает масштабных сложностей. С другой стороны, именно сложность формулирования граничных условий выше второго порядка, опирающихся на продолженную систему, — основное препятствие для широкого использования разностных схем высокой точности при решении краевых задач более сложных, чем задача Дирихле. Таким образом, трудности с аппроксимацией граничных условий препятствуют использованию компактных схем, а предпочтение специалистами высокоточным схемам более простых схем не создает повода отойти от традиционного не универсального способа задания граничных условий.

2. Универсальные граничные условия

Для осуществления более удобного способа аппроксимируем поток одномерными многоточечными односторонними разделенными разностями, не привлекая вовсе решаемого дифференциального уравнения, и используем при этом столько узлов сетки, сколько требуется для достижения необходимого порядка точности.

Такая технология, вероятно, впервые была применена в работе [2] при решении смешанной краевой задачи для уравнения Пуассона в прямоугольной области по схемам четвертого и шестого порядков точности. В расчетах на самых грубых сетках “длинные” разностные граничные условия записывались на шаблоне, достигающем даже противоположной границы области. У оппонентов были сомнения в применимости такой технологии, так как, во-первых, чередующиеся знаки коэффициентов в разностной аппроксимации потока якобы непременно должны были привести к потере устойчивости, и, во-вторых, использование “длинных” условий якобы противоречит локальному характеру граничного условия. Однако численные результаты работы [2] и многих последующих расчетов, полученные при решении уравнений различных типов [4–7], никогда не подтверждали справедливость этой критики. Таким образом, вопрос о теоретическом обосновании технологии оставался открытым.

Итак, аппроксимируем производную на левой границе $a = x_0$ односторонней разделенной разностью общего вида

$$\Delta_s u_0 = \frac{1}{h}\sum_{k=0}^{s} \alpha_k u_k \approx \frac{\partial u}{\partial x}(x_0),$$

а коэффициенты α_k выберем так, чтобы порядок аппроксимации был наибольшим из возможных. Отсюда для определения коэффициентов оператора Δ_s получаем систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{k=0}^{s} \alpha_k k^m = \delta_{1m}, \quad m = 0, 1, \dots, s,$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Погрешность аппроксимации есть $O(h^s)$. Система элементарно решается по правилу Крамера, явные выражения коэффициентов имеют вид

$$\alpha_k = \frac{(-1)^{k+1}}{k} C_s^k, \quad k = 1, \dots, s, \quad \alpha_0 = -(\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_s), \tag{9}$$

где C_s^k — число сочетаний из s по k. Коэффициенты левосторонней аппроксимации производной $\Delta_{-s}u$ имеют те же выражения, но с обратным знаком.

Итак, при любом заданном порядке аппроксимации односторонние разностные производные определяются единообразно по очень простой формуле, что выгодно отличает данную технологию от использования компактных граничных условий, опирающихся на продолженную систему уравнений. При этом формула остается инвариантной относительно решаемого уравнения, что тоже привлекательно. Решается ли краевая задача для уравнений теплопроводности, волнового, теории упругости, Пуассона или Навье–Стокса, граничное условие не требуется формулировать заново. С помощью таких односторонних аппроксимаций потоков очевидным образом формулируются с высокой точностью также условия третьего рода и условия баланса потоков на границе раздела сред [4]. Равенство “длинных” разностных аналогов лево- и правосторонней производных можно использовать также в качестве условий гладкости в узлах интерполяции при построении сплайнов с помощью разностных схем [5]. Кроме того, условие $\Delta_{-s}u = 0$ может выступать в качестве “мягкого” граничного условия в выходном сечении канала при расчете течений жидкости.

Реализация многоточечных граничных условий. Весьма часто на практике шаблоны разностных схем, в том числе компактных схем третьего – четвертого порядков точности, не выходят за пределы трех узлов по x, что приводит к линейным алгебраическим уравнениям с трехдиагональной матрицей. Однако многоточечные граничные условия нарушают трехдиагональную структуру матриц. В случае постоянных коэффициентов фрагмент расширенной матрицы системы с “длинным” граничным условием на левой границе выглядит следующим образом:

$$\left|\begin{array}{cccccccccc|c} \alpha_0 & \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \cdots & \alpha_{s-2} & \alpha_{s-1} & \alpha_s & 0 & \cdots & hq \\ a & b & c & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & F_1 \\ 0 & a & b & c & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & F_2 \\ 0 & 0 & a & b & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \cdots & F_3 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & a & b & c & 0 & 0 & \cdots & F_{s-2} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & a & b & c & 0 & \cdots & F_{s-1} \end{array}\right|.$$

Вектор $\mathbf{F}$ содержит слагаемые с результатами применения операторов на нижнем шаге и правую часть схемы. Преобразование фрагмента к эквивалентному трехдиагональному осуществляется локальной гауссовой процедурой — вычитанием из длинной (нулевой) строки подходящей линейной комбинации строк с номерами $k = 1, \ldots, s-1$. Следует заметить, что постоянство коэффициентов схемы не является лимитирующим фактором для реализации описанного процесса.

Многоточечное граничное условие на правой границе преобразуется точно так же. Если узел сетки лежит на границе раздела сред и в нем с погрешностью $O(h^s)$ поставлено условие равенства потоков, процедура приведения “длинного” условия к трехточечному выполняется аналогично с привлечением по $(s-1)$ разностных уравнений слева и справа.

Двумерный случай. Рассмотрим смешанную краевую задачу для двумерного уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \lambda\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right) + f, \quad x \in D, \quad t \in (0, T), \tag{10}$$

в прямоугольной области $D = \{(x, y), x \in (0, l_x), y \in (0, l_y)\}$ с начальным полем температур $U(x, y, 0) = U_0(x, y)$. Для простоты предположим, что на левой границе задана первая производная

$$\frac{\partial U}{\partial x}(0, y, t) = q(y, t),$$

а на трех других участках границы задано решение U, в частности на правой границе $U(l_x, y, t) = \phi(y, t)$. В углах области предполагаются выполненными условия согласования, при которых пределы граничных условий в каждом углу области при стремлении к нему точек по двум смежным участкам границы не противоречат одно другому.

Аппроксимируем уравнение (10), например, схемой переменных направлений

$$\frac{u^{n+1/2}-u^n}{\tau/2}=\lambda\Lambda_x u^{n+1/2}+\lambda\Lambda_y u^n+f^{n+1/2},$$
$$\frac{u^{n+1}-u^{n+1/2}}{\tau/2}=\lambda\Lambda_x u^{n+1/2}+\lambda\Lambda_y u^{n+1}+f^{n+1/2}.$$

Разностные аналоги граничных условий всегда ставятся только на целых шагах, в частности, слева и справа имеем разностные граничные условия

$$L_h u^n|_{x=0}=q^n,\quad u^n|_{x=l_x}=\phi^n,\quad n=0,1,\ldots,$$

где L_h — односторонняя многоточечная разностная аппроксимация оператора дифференцирования. Для того чтобы решить уравнение первого дробного шага, на вертикальных участках границы следует определить граничные условия для $u^{n+1/2}$, которые требуется выводить как следствие самой схемы в дробных шагах и граничных условий на целых шагах. Иначе схема в целых шагах не будет эквивалентна схеме в дробных шагах [8]. С целью получения таких граничных условий вычтем из второго уравнения первое и выразим отсюда величину на дробном шаге

$$u^{n+1/2}=\frac{u^{n+1}+u^n}{2}-\lambda\frac{\tau^2}{4}\Lambda_y\frac{u^{n+1}-u^n}{\tau},$$

а затем применим к обеим частям этого выражения операторы граничных условий. В результате получим

$$L_h u_{0j}^{n+1/2}=\frac{q_j^{n+1}+q_j^n}{2}-\lambda\frac{\tau^2}{4}\Lambda_y\frac{q_j^{n+1}-q_j^n}{\tau},\qquad u_{N_xj}^{n+1/2}=\frac{\phi_j^{n+1}+\phi_j^n}{2}-\lambda\frac{\tau^2}{4}\Lambda_y\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^n}{\tau}.$$

Вторыми слагаемыми порядка $O(\tau^2)$ без ущерба для точности можно пренебречь.

Следует заметить, что принудительное задание граничных условий для промежуточного шага без их вывода из граничных условий на целых шагах не является правильным действием, так как результат вывода существенно зависит от типа схемы в дробных шагах. Например, в случае схемы приближенной факторизации

$$A_x u^{n+1/2}=\lambda(\Lambda_x+\Lambda_y)u^n+f^{n+1/2},\qquad A_y\frac{u^{n+1}-u^n}{\tau}=u_{n+1/2},$$

эквивалентной той же самой схеме в целых шагах, для ее промежуточного шага граничные условия следует ставить иначе:

$$L_h u_{0j}^{n+1/2}=A_y\frac{q_j^{n+1}-q_j^n}{\tau},\qquad u_{N_xj}^{n+1/2}=A_y\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^n}{\tau}.$$

Таким образом, одномерные граничные условия в многомерном случае остаются инвариантными относительно решаемого уравнения и не порождают никаких проблем при расщеплении задачи на одномерные. В противоположность ей многомерная аппроксимация граничных условий может создать серьезные препятствия при расщеплении, иногда непреодолимые.

3. Разрешимость системы при традиционной форме граничных условий

Достаточным условием разрешимости системы и устойчивости метода прогонки для системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей является диагональное преобладание. В рассматриваемом случае схем с весами обращения требует ее разностный оператор $A = E - \sigma\lambda\tau\Lambda$, для которого диагональные коэффициенты матрицы $b = 1 + 2\sigma r > 0$, где $r = \lambda\tau/h^2$, а коэффициенты на побочных диагоналях $a = c = -\sigma r < 0$. Следовательно, для строк матрицы, соответствующих внутренним узлам сетки, диагональное преобладание имеет место, так как $D = |b| - |a| - |c| = 1 > 0$. Случай $\sigma = 0$ исключаем из рассмотрения, так как он соответствует явной схеме, не требующей обращения матрицы.

Особое место занимает компактная схема $O(\tau^2 + h^4)$, так как в этом случае вес σ связан с соотношением шагов r и параметры имеют вид

$$\sigma = \frac{1}{2} - \frac{1}{12r}, \qquad b = \frac{5}{6} + r, \qquad a = c = \frac{1}{12} - \frac{r}{2}.$$

Если $r > 1/6$, то внедиагональные коэффициенты $a = c$ по-прежнему отрицательны, поэтому $D = 1 > 0$, а при $r < 1/6$ они становятся положительными, однако диагональное преобладание не нарушается, так как $D = |b| - |a| - |c| = 2/3 + 2r > 0$. При $r = 1/6$ схема вырождается в явную, сохраняя четвертый порядок точности по пространственной переменной.

Традиционная форма граничных условий. При традиционной аппроксимации граничных условий Неймана в соответствующих строках матрицы также имеет место диагональное преобладание, строгое или не строгое. Например, для двухточечных условий (3), (4), записанных (после сокращения на λ) в виде $d_0u_0 + d_1u_1 = \phi$, коэффициент d_0 равен -1 и $-(1 + 1/(2r))$ соответственно, а $d_1 = 1$ в обоих случаях. Для граничного условия (5) $d_0 = -(1 + 1/r)$, а $d_1 = 1$. Таким образом, в простейшем случае (3) имеем равенство $|d_0| = |d_1|$, а в других двух $|d_0| > |d_1|$.

Следует заметить, что при граничном условии третьего рода в сравнении с условием Неймана диагональное преобладание только усиливается, так как в этом случае от отрицательной величины d_0 дополнительно вычитается αh, где α — коэффициент теплоотдачи. Это верно для любых разностных аппроксимаций граничных условий, и на этом основании всюду в дальнейшем будет рассматриваться только условие Неймана как наименее благоприятное для выполнения диагонального преобладания. Нестрогое диагональное преобладание в строке, соответствующей условию Неймана, для условия третьего рода становится строгим.

В связи со сказанным выше для уверенности в разрешимости системы и устойчивости прогонки представляется естественным требовать (нестрогого) диагонального преобладания в строках матрицы, полученных после преобразования “длинных” граничных условий, в короткие двухточечные. Рассмотрим, например, трехточечное граничное условие (8) для компактной схемы $O(\tau^2 + h^4)$. Умножим его на h и разделим на λ, а затем соберем в левой части все слагаемые со значениями решения на верхнем слое и перенесем все остальные слагаемые в правую часть. В результате получим уравнение вида

$$\left[(u_1 - u_0) - \frac{1}{2r}u_0 - \frac{1}{6r}(u_1 - u_0) - \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{24r}\right)(u_2 - 2u_1 + u_0)\right]^{n+1} = \Phi^n.$$

После приведения подобных его левую часть представим в виде линейной комбинации значений u_0, u_1, u_2 с коэффициентами

$$d_0 = -\frac{5}{4} - \frac{7}{24r}, \qquad d_1 = \frac{3}{2} - \frac{1}{4r}, \qquad d_2 = -\frac{1}{4} + \frac{1}{24r}.$$

С другой стороны, левая часть разностного уравнения, записанного в узле x_1, представляет линейную комбинацию тех же трех неизвестных компонент решения с коэффициентами $-\sigma r$, $1 + 2\sigma r$ и $-\sigma r$ соответственно. Разделив коэффициенты на σr, упростим их к виду -1, B, -1, где $B = (1 + 2\sigma r)/(\sigma r)$. Для компактной схемы $\sigma = 1/2 - 1/(12r)$, следовательно, в этом случае $B = 2 + 2/(r - 1/6)$.

Исключая из двух трехточечных уравнений u_2, получим двухточечное граничное условие с новыми коэффициентами

$$d_0 = -1 - \frac{1}{3r}, \qquad d_1 = -\frac{1}{6} - \frac{1}{4r} - 2r.$$

Условие диагонального преобладания $|d_0| \geq |d_1|$ для него эквивалентно неравенству

$$2r^2 - \frac{5}{6}r - \frac{1}{12} \leq 0,$$

которое выполняется при $-1/12 \leq r \leq 1/2$. Так как соотношение шагов $r = \lambda\tau/h^2$ положительно, окончательно получаем ограничение $r \leq 1/2$, при котором исходное граничное условие (8) эквивалентно двухточечному граничному условию с диагональным преобладанием.

Граничное условие (7) третьего порядка аппроксимации является двухточечным и имеет коэффициенты

$$d_0 = -1 - \frac{1}{3r}, \qquad d_1 = 1 - \frac{1}{6r}.$$

Элементарный анализ свидетельствует о безусловном диагональном преобладании в данном граничном условии при любых значениях r.

4. Разрешимость при универсальных граничных условиях

Преобразуем "длинную" строку фрагмента матрицы системы, предполагая симметрию $a = c$, при которой, не уменьшая общности, можно считать, что $a = c = -1$, $b = B = 2 + 1/(\sigma r)$. Вычтем из нее линейную комбинацию остальных $s - 1$ строк с коэффициентами γ_j $(j = 1, \ldots, s-1)$ и выберем их так, чтобы элементы преобразованной строки, выступающие за пределы трех диагоналей матрицы, обратились бы в нуль. Дополним для удобства совокупность искомых коэффициентов двумя фиктивными (γ_s и γ_{s+1}) и получим в результате задачу Коши для трехточечного разностного уравнения

$$-\gamma_{j+1} + B\gamma_j - \gamma_{i-1} = \alpha_j, \quad j = 2, \ldots, s, \quad \gamma_s = \gamma_{s+1} = 0.$$

Задача Коши сводится к двум рекуррентным соотношениям первого порядка

$$\gamma_{j+1} - p\gamma_j = I_{j+1},\ j = 1, \ldots, s-1, \quad \gamma_s = 0, \quad I_{j+1} - qI_j = -\alpha_j,\ j = 2, \ldots, s, \quad I_{s+1} = 0,$$

где p и q — корни уравнения $\rho^2 - B\rho + 1 = 0$ (вещественные и различные), причем по теореме Виета $p + q = B$, $pq = 1$.

Решая второе рекуррентное соотношение, получим

$$I_{j+1} = q^j \sum_{\ell=j+1}^{s} p^\ell \alpha_\ell.$$

Подставляя полученное выражение в правую часть первого рекуррентного соотношения и решая его, получим

$$\gamma_j = -\sum_{m=j+1}^{s} p^{j-m} \sum_{\ell=m}^{s} q^{m-\ell-1}\alpha_\ell = \frac{1}{p-q}\sum_{\ell=j+1}^{s}(q^{\ell-j} - p^{\ell-j})\alpha_\ell, \quad j = 1, \ldots, s-1.$$

Пользуясь данной общей формулой и вводя обозначения

$$P = \sum_{\ell=0}^{s} p^\ell \alpha_\ell, \qquad Q = \sum_{\ell=0}^{s} q^\ell \alpha_\ell, \tag{11}$$

вычислим первые два из этих коэффициентов:

$$\gamma_1 = \frac{qP - pQ}{p-q} - \alpha_0, \qquad \gamma_2 = \frac{q^2P - p^2Q}{p-q} - \alpha_0(p+q) - \alpha_1.$$

Отсюда в результате непосредственного вычисления получим коэффициенты преобразованного (двухточечного) граничного соотношения:

$$d_0 = \alpha_0 + \gamma_1 = \frac{qP - pQ}{p-q}, \qquad d_1 = \alpha_1 - B\gamma_1 + \gamma_2 = \frac{Q-P}{p-q}.$$

Следовательно, критерий диагонального преобладания в строке преобразованного граничного условия $|d_0| \geq |d_1|$ для произвольного порядка s имеет вид

$$\left|\frac{qP - pQ}{p-q}\right| \geq \left|\frac{Q-P}{p-q}\right|. \tag{12}$$

Числители дробей в обеих частях (12) являются полиномами переменных p и q, равными нулю при $p = q$, значит, обе дроби сокращаются на разность $p - q$, поэтому неравенство (12) является полиномиальным. Более того, ввиду теоремы Виета выражения в обеих частях неравенства приводятся к виду полиномов от единственной переменной $B = p+q$. Заметим, что подстановка коэффициентов α_ℓ в явном виде (9) в формулы (11) приводит к достаточно простым выражениям вида $P = V(p)$, $Q = V(q)$ через интеграл

$$V(z) = \int_1^z \frac{(1-\xi)^s - 1}{\xi} d\xi.$$

Если предположить для определенности, что p — больший из двух корней, то критерий (12) можно представить также в следующих эквивалентных формах:

$$qP^2 \leq pQ^2, \qquad P^2 \leq p^2Q^2, \qquad q^2P^2 \leq Q^2.$$

Таким образом, задача исследования условий диагонального преобладания (12) сводится к полиномиальным или интегральным неравенствам, которые при любом порядке s легко исследуются численно.

Примеры. Рассмотрим схему с весами при $(s+1)$-точечном левом граничном условии, аппроксимирующем с погрешностью $O(h^s)$ условие Неймана.

1. При $s = 2$ имеем
$$V(z) = \frac{1}{2}z^2 - 2z + \frac{3}{2}.$$
Легко видеть, что в этом случае $d_0 = -1$, $d_1 = 2 - B/2$, откуда следует условие диагонального преобладания $2 \le B \le 6$, которое выполняется при условии $4\sigma r \ge 1$.

Таким образом, для абсолютно устойчивой схемы с весом $\sigma \ge 1/2$ требование диагонального преобладания ограничивает снизу соотношение шагов $r \ge 1/(4\sigma)$. В частности, для схемы Кранка – Николсон $r \ge 1/2$, а для чисто неявной схемы $r \ge 1/4$.

Для схемы с весом $\sigma < 1/2$ условие диагонального преобладания вместе с условием устойчивости дает допустимый промежуток для соотношения шагов
$$\frac{1}{4\sigma} \le r \le \frac{1}{2(1-2\sigma)},$$
не пустой при $\sigma \in [1/4, 1/2)$; при меньшем весе $(\sigma < 1/4)$ диагональное преобладание в приведенном граничном условии не может быть достигнуто.

2. При $s = 3$
$$V(z) = -\frac{1}{3}z^3 + \frac{3}{2}z^2 - 3z + \frac{11}{6}.$$
В результате преобразования первой строки получим двухточечное граничное условие с коэффициентами
$$d_0 = -\frac{B}{3} - \frac{1}{3}, \quad d_1 = \frac{B^2}{3} - \frac{3}{2}B + \frac{8}{3}.$$
Условие диагонального преобладания сводится к неравенству
$$B^2 - \frac{11}{2}B + 7 \le 0 \quad \Longleftrightarrow \quad 2 \le B \le \frac{7}{2},$$
которое дает ограничение $3\sigma r \ge 2$. Например, для чисто неявной схемы и схемы Кранка – Николсон получаются соответственно ограничения снизу на соотношение шагов $r \ge 2/3$ и $r \ge 4/3$.

При $\sigma < 1/2$ пара ограничений по требованиям устойчивости и диагонального преобладания
$$\frac{2}{3\sigma} \le r \le \frac{1}{2(1-2\sigma)}$$
имеет непустое пересечение только в случае $\sigma \in [4/11, 1/2)$.

Если рассмотренное выше граничное условие третьего порядка точности с $s = 3$ используется в сочетании с компактной схемой $O(\tau^2 + h^4)$, то получается ограничение
$$\frac{3}{2}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{12r}\right) r \ge 1 \quad \Longleftrightarrow \quad r \ge \frac{3}{2}.$$

3. Рассмотрим случай, когда компактная схема $O(\tau^2 + h^4)$ снабжена левым “длинным” граничным условием с $s = 4$, согласованным по порядку точности с разностным уравнением. В этом случае
$$V(z) = \frac{1}{4}z^4 - \frac{4}{3}z^3 + 3z^2 - 4z + \frac{25}{12}.$$

Коэффициенты двухточечного условия имеют вид

$$d_0(B)=\frac{1}{4}B^2-\frac{4}{3}B+\frac{2}{3},\qquad d_1(B)=-\frac{1}{4}B^3+\frac{4}{3}B^2-\frac{11}{4}B+\frac{8}{3}.$$

Графики модулей полиномов $d_0(B)$, $d_1(B)$ изображены на рисунке. Корни квадратного трехчлена $D_0(B)$ суть $b_1 \simeq 0.559$ и $b_2 \simeq 4.775$, а полином третьей степени имеет единственный вещественный корень $b_0 \simeq 2.739$, лежащий между этими значениями. Интересующее нас неравенство $|d_0(B)| \geq |d_1(B)|$ справедливо на промежутке $B \in [B_1, B_2]$, где $B_1 \simeq 1.431$, $B_2 \simeq 3.355$. Так как в данном случае $B = 2 + 2/(r - 1/6)$, для r получается допустимый интервал $r \geq r_0 \simeq 1.644$.

Таким образом, преобразованные (двухточечные) граничные соотношения, эквивалентные разностным граничным условиям различных порядков точности, во всех случаях имеют нестрогое диагональное преобладание при некоторых необременительных ограничениях на соотношение шагов сетки. Следует заметить, что диагональное преобладание дает достаточное, но не необходимое условие разрешимости системы и устойчивости прогонки; на практике устойчивость счета обычно наблюдается и при не слишком грубых нарушениях этого условия.

Полученные выше результаты базируются лишь на том, что схема требует обращения симметричного трехточечного оператора $E - \sigma\tau\lambda\Lambda$ с отрицательными равными внедиагональными коэффициентами $a = c = -\sigma r < 0$ $(r = \lambda\tau/h^2)$ и положительным диагональным коэффициентом $b = 1 + 2\sigma r$, поэтому выводы справедливы для любых задач с таким оператором на верхнем слое независимо от вида аппроксимируемого дифференциального уравнения, в том числе для итерационных схем решения стационарных задач. Заметим, что в случае уравнения колебаний оператор на верхнем слое имеет несколько иной вид $E - \sigma\lambda^2\tau^2\Lambda$, однако коэффициенты для него имеют совершенно то же выражение, меняется только определение параметра r — здесь это квадрат параметра Куранта $r = (\lambda\tau/h)^2$. Для системы уравнений упругости операторы на верхнем слое схем аналогичны.

Если в исходном уравнении имеются конвективные члены, то обращать требуется асимметричные операторы вида $E - \sigma\tau\lambda\Lambda + \gamma a\tau\Delta$, где Δ — оператор разделенной разности, односторонней или центральной. Очевидно, в этом случае при стремлении шагов сетки к нулю коэффициенты конвективных слагаемых, имеющие порядок $O(\tau/h)$, становятся ничтожными в сравнении с коэффициентами диссипативных членов $O(\tau/h^2)$, поэтому при малых шагах такой оператор близок с симметричному оператору $E - \sigma\tau\Lambda$. В связи с этим критерии диагонального преобладания в таких преобразованных асимметричных системах при достаточно малых шагах близки к полученным выше. Сум-

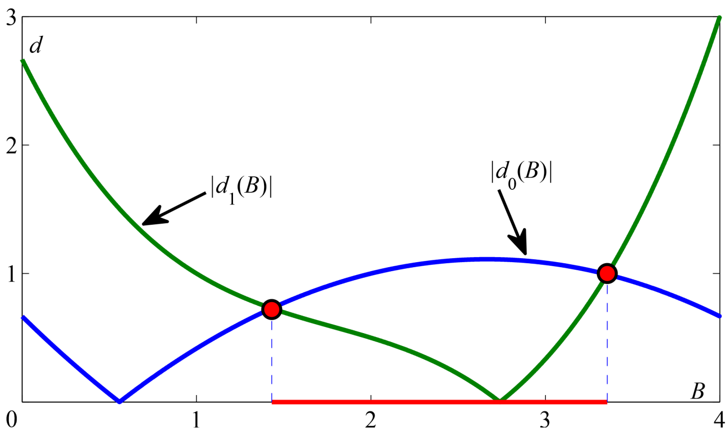

Иллюстрация к анализу граничного условия четвертого порядка точности
Illustration to the analysis of the boundary condition of the fourth order of accuracy

мируя сказанное, можно утверждать, что проведенный анализ имеет отношение к значительно более широкому кругу задач, чем задача для уравнения теплопроводности, взятая здесь в качестве простого примера. При этом, как показано выше, выводы справедливы и для многомерных задач, решаемых методом дробных шагов.

Благодарности. Результаты исследований, представленные в разд. 1–3 (связанные с разработкой идеи), получены в рамках государственного задания Минобрнауки России для ФИЦ ИВТ. Результаты исследований, представленные в разд. 4 (связанные с выводом общего критерия диагонального преобладания для граничных условий произвольного порядка точности), получены за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-11-20040, `https://rscf.ru/project/20-11-20040/`).

Список литературы

[1] **Ильин В.П.** Балансные аппроксимации повышенной точности для уравнения Пуассона. Сибирский математический журнал. 1996; 37(1):151—169.

[2] **Валиуллин А.Н., Сафин Р.И., Паасонен В.И.** О схеме расщепления с повышенным порядком аппроксимации краевых задач для уравнения Пуассона. Численные методы механики сплошной среды. 1972; 3(1):17–25.

[3] **Микеладзе Ш.Е.** О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов. Известия АН СССР. Серия математическая. 1941; 5(1):57–74.

[4] **Paasonen V.I.** Compact difference schemes for inhomogeneous boundary value problems. Russian Journal Numerical Analysis Mathematical Modelling. 2004; 19(1):65–81.

[5] **Паасонен В.И.** Высокоточные методы построения гиперболических сплайнов. Вычислительные технологии. 2007; 12(2):115–121.

[6] **Ичетовкин Д.А., Паасонен В.И.** Численное исследование высокоточных схем в областях клетчатой структуры. Вычислительные технологии. 2010; 15(6):81–87.

[7] **Паасонен В.И.** О применении компактных схем для уравнения колебаний в кусочно-однородных средах. Вычислительные технологии. 2010; 15(5):92–98.

[8] **Яненко Н.Н.** Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука; 1967: 196.

Вычислительные технологии, 2024, том 29, № 1, с. 18–31. © ФИЦ ИВТ, 2024 ISSN 1560-7534
Computational Technologies, 2024, vol. 29, no. 1, pp. 18–31. © FRC ICT, 2024 eISSN 2313-691X

COMPUTATIONAL TECHNOLOGIES

DOI:10.25743/ICT.2024.29.1.003

The solvability of difference schemes with universal approximation of flows in boundary conditions

V. I. Paasonen

Federal Research Center for Information and Computational Technologies, 630090, Novosibirsk, Russia
Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk, Russia
Corresponding author: Viktor I. Paasonen, e-mail: `paas@ict.nsc.ru`

Received July 27, 2022, revised September 26, 2022, accepted October 25, 2022.

Abstract

One of the ways of setting the difference boundary conditions with high order of accuracy is based on the direct multi-point one-sided approximation of the flows. Such boundary relations, unlike traditional ones, are universal in the sense of uniformity of their structure at different orders of accuracy, as well as in the sense of their independence from the differential equation being solved. In addition, this technology does not create any obstacles in splitting multidimensional problems into one-dimensional ones, since the boundary conditions turn out to be the same universal one-dimensional ones at the intermediate steps. However, the number of nodes in the boundary relation stencil, i. e. the "length" of the boundary condition, increases as the order of accuracy of the scheme increases. This leads to a violation of the traditional tridiagonal structure of the matrices to be reversed, and a related violation of the diagonal predominance in the rows corresponding to "long" boundary conditions. Although extensive experience of applying universal boundary conditions in numerical simulations of various types of boundary value problems has not revealed violations of computational stability, this technique required a theoretical justification.

This paper addresses the question of the solvability of such problems and the stability of calculations when they are implemented by the proposed method. For this purpose, matrix rows with "long" boundary conditions are reduced by means of local Gaussian procedures to equivalent short two-point rows, and the solvability and stability conditions for solutions of the transformed systems are established based on the requirement of a diagonal predominance in the transformed rows corresponding to the boundary conditions.

A general criterion for diagonal predominance in a transformed string is formulated for an arbitrary order of flow approximation. For several difference schemes up to the fourth order of accuracy, it is found that the criterion is satisfied unconditionally or under not burdensome restrictions on the ratio of grid steps.

Keywords: multipoint flow approximation, high-accuracy boundary conditions, diagonal domination, compact difference scheme.

Citation: Paasonen V.I. The solvability of difference schemes with universal approximation of flows in boundary conditions. Computational Technologies. 2024; 29(1):18–31. DOI:10.25743/ICT.2024.29.1.003. (In Russ.)

Acknowledgements. The research results presented in Sect. 1–3 (related to the development of the idea) were obtained within the framework of the state assignment of the Ministry of Education and Science of Russia for the FRC ICT. The research results presented in Sect. 4 (related to the derivation of the general criterion of diagonal predominance for boundary conditions of arbitrary order of accuracy) were obtained by a grant from the Russian Science Foundation (project No. 20-11-20040, `https://rscf.ru/project/20-11-20040/`).

References

1. **Ilin V.P.** Balance approximations of increased accuracy for the Poisson equation. Siberian Mathematical Journal. 1996; 37(1):130–146. DOI:10.1007/BF02104764.
2. **Valiullin A.N., Safin R.I., Paasonen V.I.** On a splitting scheme with increased order of approximation of boundary value problems for the Poisson equation. Chislennye Metody Mekhaniki Sploshnoy Sredy. 1972; 3(1):17–25. (In Russ.)
3. **Mikeladze Sh.E.** Numerische integration der gleichungen vom elliptischen und parabolischen typus. Izvestiya Akademii Nauk SSSR. Seriya Matematicheskaya. 1941; 5(1):57–74. (In Russ.)
4. **Paasonen V.I.** Compact difference schemes for inhomogeneous boundary value problems. Russian Journal Numerical Analysis Mathematical Modelling. 2004; 19(1):65–81.
5. **Paasonen V.I.** High-order methods for construction of hyperbolic splines. Computational Technologies. 2007; 12(2):115–121. (In Russ.)
6. **Ichetovkin D.A., Paasonen V.I.** Numerical investigation of high-order schemes in domains with checked structure. Computational Technologies. 2010; 15(6):81–87. (In Russ.)
7. **Paasonen V.I.** On application of compact schemes for the wave equation in piece wise homogeneous media. Computational Technologies. 2010; 15(5):92–98. (In Russ.)
8. **Yanenko N.N.** The method of fractional steps. The solution of problems of mathematical physics in several variables. Berlin: Springer-Verlag; 1971: 160. DOI:10.1007/978-3-642-65108-3.