§2. Разностные схемы

В качестве численных алгоритмов решения уравнений в частных производных наиболее часто используют *метод сеток* (разностные схемы). Его математический смысл чрезвычайно прост. Суть метода заключается в покрытии расчетной области (x,t) *сеткой* из NxM точек (см. рис. 3 и 4 ниже), что определит шаги по времени и пространству τ и Δ соответственно. Тем самым определяются узлы, в которых будет осуществляться поиск решения. Затем надо заменить дифференциальные уравнения в частных производных (в нашем примере – уравнение диффузии) аппроксимирующими их уравнениями в конечных разностях, выписав соответствующие разностные уравнения для каждого (i,n)-го узла сетки.

В случае уравнения теплопроводности достаточно просто заменить первую производную по времени и вторую по пространству их разностными аналогами (такой способ дискретизации называется *методом Эйлера*). Полученную систему разностных уравнений называют *разностной схемой*.

Поскольку уравнения в частных производных, по определению, зависят от производных неизвестных функций по нескольким переменным, то вариантов дискретизации этих уравнений может быть довольно много. Конфигурацию узлов, используемую для разностной записи уравнений в частных производных на сетке, называют *шаблоном*.

Корректное построение разностной схемы обязательно подразумевает одинаковое число уравнений и неизвестных (т.е. значений искомой функции в узлах сетки). В этом случае можно надеяться, что решение системы разностных уравнений (или, как говорят, *реализация* разностной схемы) существует. В то же время, рассчитывать на единственность решения системы разностных уравнений (в случае нелинейного уравнения в частных производных) не приходится. Следует стремиться к тому, чтобы численным методом было найдено именно то «правильное» решение, которое и соответствует исходному уравнению в частных производных, а не другие «паразитные» (часто нефизичные) решения.

Таким образом, вместо поиска непрерывных зависимостей u(x,t) реализация разностной схемы позволяет отыскать значения функции в узлах сетки. Ее поведение в промежутках между узлами может быть получено при помощи построения какой-либо интерполяции. Как уже отмечалось, численное решение сеточных уравнений (даже с учетом интерполяции между узлами) отличается от точного решения исходной задачи. По этой причине полученное дискретное представление функции u часто называют *сеточной функцией*.

При построении разностных схем практически всегда исследователь имеет определенный выбор в конкретном способе аппроксимации и производных, в частности, для какого интервала записывать разностное представление производных. Для примера запишем две разные схемы – одну для интервалов, приведенных на рис.3 (такой схематический рисунок, кстати говоря, называют шаблоном), а другую – для шаблона, представленного на рис.4.

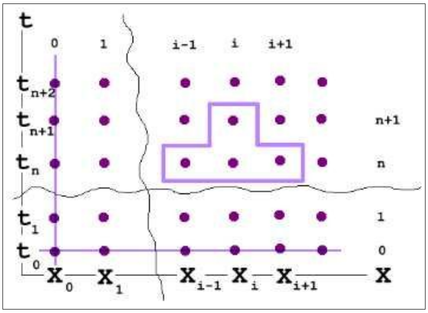

Рис. 3. *Шаблон явной схемы*

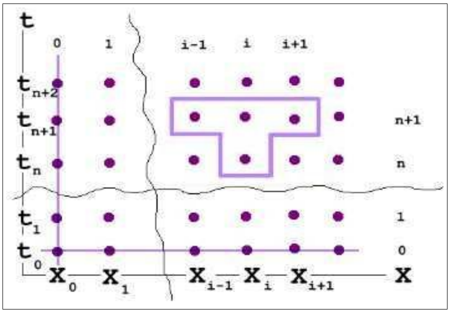

Рис. 4. *Шаблон неявной схемы*

В первом случае (рис. 3) (i,n)-е разностное уравнение имеет вид:

$$\frac{u_{i,n+1} - u_{i,n}}{\tau} = D \cdot \frac{u_{i-1,n} - 2u_{i,n} + u_{i+1,n}}{\Delta^2} + \phi_{i,n}, \qquad (4)$$

а во втором (рис. 4) –

$$\frac{u_{i,n+1} - u_{i,n}}{\tau} = D \cdot \frac{u_{i-1,n+1} - 2\,u_{i,n+1} + u_{i+1,n+1}}{\Delta^2}. \qquad (5)$$

Два представленных шаблона и, соответственно, две разностные схемы, являются примерами схем различных типов. *Явной* называют схему, в которой неизвестное значение искомой функции на (n+1)-м шаге стоит только в левой части, а в правой части стоят уже вычисленные ранее значения функций. Если в правой части стоят неизвестные значения функций, то схема - *неявная*.

Легко догадаться, что, согласно этой классификации, среди приведенных схем первая *явная*, а вторая – *неявная*. Отметим, что в силу линейности конкретной задачи, неизвестные $u_{i,n+1}$ из правой части можно перенести в левую и разрешить относительно него уравнение реализации шага. Однако, не в таких чересчур модельных, а реальных случаях уравнение схемы нелинейное, и на каждом (!) шаге по времени приходится решать нелинейное алгебраическое уравнение, что сразу усложняет алгоритм и сильно увеличивает время счета.

Как несложно убедиться, обе схемы имеют *порядок аппроксимации* по пространственной координате – $o(\Delta)$, а по времени – $o(\tau)$. Если предложить более сложный (например, шеститочечный) шаблон, то порядок аппроксимации может быть повышен. Имея в виду, что способы оценки порядка аппроксимации были представлены в гл.3 (для ОДУ), не будем детально останавливаться на данном вопросе применительно к уравнениям в частных производных.

Суммируя сказанное, перечислим основные этапы решения уравнений в частных производных (не отвлекаясь, как и везде в данной книге, на математическое обоснование применяемого метода):

- Покрываем расчетную область сеткой NxM узлов (рис. 3 и 4). Для решения уравнения следует определить искомую функцию в каждом узле, т.е. отыскать N·M неизвестных.
- Для каждого внутреннего узла записываем дискретное представление уравнения в частных производных.
- Дополняем полученную систему алгебраических уравнений соотношениями, дискретизирующими начальные и граничные условия, чтобы общее число алгебраических уравнений равнялось числу неизвестных (т.е. N·M).
- Реализуем разностную схему, т.е. решаем систему из N·M алгебраических уравнений каким-либо подходящим численным методом.
- Полученное решение системы разностных уравнений считают решением уравнения в частных производных. (Формально, для этого необходимо доказать, что при $N, M \to \infty$ разностное решение сходится к решению исходного дифференциального уравнения).

Обратимся вновь к уравнению диффузии и проанализируем сначала *явную схему* (4). Выразим из нее значение сеточной функции на верхнем слое, перегруппировав слагаемые в (4):

$$u_{i,n+1} = \frac{C_{i,n}}{2} u_{i-1,n} + (1 - C_{i,n}) u_{i,n} + \frac{C_{i,n}}{2} u_{i+1,n} \quad , \tag{6}$$

где параметр

$$C_{i,n} = \frac{2\tau D_{i,n}}{\Delta^2} \tag{7}$$

называется *числом Куранта*.

Выражение (6) показывает, что разностные уравнения на каждом слое по времени связаны между собой рекуррентно. Значение в каждом неизвестном узле на (n+1)-м слое выражается через три уже вычисленных ранее значения с предыдущего n-го слоя.

Поэтому явная разностная схема реализуется при помощи простого пересчета верхнего слоя через нижний, без необходимости решать какую-либо систему разностных уравнений.

Действительно, если все $u_{i,0}$ (на нулевом слое по времени) известны из начальных условий, то мы сразу определим все $u_{i,1}$. Отметим только, что во внешних точках, т.е. $u_{0,1}$ и $u_{M,1}$ они определятся граничными условиями, а во внутренних точках будут вычислены согласно (6). По 1-му слою точно так же можно определить $u_{i,2}$ и т.д. Такой алгоритм называют схемой *бегущего счета*. Соответствующие расчеты для линейного уравнения диффузии будут представлены в следующем параграфе.

Для *неявной* разностной схемы (5) алгоритм немного усложняется, но не сильно, т.к. исходное дифференциальное уравнение является линейным. В случае данного конкретного уравнения нам очень повезло с организацией численного решения по неявной схеме. А именно, нетрудно заметить, что система N·M уравнений распадается на независимые фрагменты. Каждое n-е разностное уравнение (т.е. уравнение на каждом шаге решения) содержит неизвестные только с этого или предыдущего (n-1)-го шага (или, по-другому, слоя) по времени. Поэтому решать уравнения на каждом слое можно, исходя из известного решения на предыдущем слое, что существенно облегчает алгоритмизацию метода сеток.

Действительно, искомые функции на 0-м слое известны из начального условия, поэтому для их нахождения на 1-м слое надо решить только систему N пространственных уравнений. Зная решение на 1-м слое можно так же перейти ко 2-му слою и т.д. Иными словами, вместо решения большой системы из N·M уравнений достаточно N раз решить куда меньшую систему из M алгебраических уравнений, что представляет собой более простую и существенно более устойчивую с вычислительной точки зрения задачу.

Примеры решения уравнения диффузии по неявной схеме мы приведем в §4, когда будем излагать чрезвычайно эффективный алгоритм реализации неявных схем, называемый *прогонкой*.

Каков критерий выбора той или иной схемы для конкретного уравнения? Говоря о разностных схемах для уравнений в частных производных, следует иметь в виду, что для них применимы те же рассуждения, что мы приводили для разностных схем при решении ОДУ. Иными словами, составляя алгоритм, следует учитывать его устойчивость, порядок аппроксимации, точность и эффективность. Почти всегда неявные схемы устойчивее явных. Однако, даже на примере уравнения диффузии видно, что, если бы оно было нелинейным (коэффициент диффузии или источник тепла являлся бы функцией u), то реализация неявной схемы усложнилась. В этом случае на каждом слое по времени пришлось бы решать систему уже нелинейных уравнений, что сразу многократно усложнило бы задачу.

Подводя итог, скажем, что основным способом численного решения уравнений в частных производных является метод сеток, заключающийся в аппроксимации производных конечными разностями. Вариантов такой аппроксимации одного и того же уравнения может быть несколько. В зависимости от выбранного шаблона, получаются те или иные разностные схемы, в связи с чем они подразделяются на несколько групп. Наиболее важная классификация разностных схем связана с отнесением их к явным или неявным. В любом случае, для получения сеточного решения приходится решать систему линейных или нелинейных алгебраических уравнений, аппроксимирующих исходное дифференциальное уравнение.