
Лекция 4.

**ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ДИСКРЕТИЗАЦИЯ.
КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТИ. СПЕКТРАЛЬНЫЙ
АНАЛИЗ РАЗНОСТНЫХ ФОРМУЛ**

Компактные разности

- Можно ли каким-то образом повысить точность разностных формул, не расширяя их шаблона? Рассмотрим следующее простое преобразование трехточечной формулы 2-го порядка, позволяющее учесть отбрасываемый прежде главный остаточный член и получить в результате формулу 4-го порядка точности:

$$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \simeq u'_i + \frac{\Delta x^2}{6} u'''_i = u'_i + \frac{\Delta x^2}{6} \frac{u'_{i+1} - 2u'_i + u'_{i-1}}{\Delta x^2} = \frac{1}{6}u'_{i+1} + \frac{4}{6}u'_i + \frac{1}{6}u'_{i-1}.$$

- Полученное соотношение связывает значения функции и ее производных в трех точках шаблона. Подобные формулы называют обычно **компактными разностями**. Как, однако, из такого соотношения вычислить значение производной в точке x_i ? Для этого нужно записать его во всех точках сетки. В результате получается система связанных уравнений, из которой и должны определяться искомые значения производных во всех точках. В частности, для периодической ($u_0 = u_N$) функции получаем:

$$Au' = Bu, \quad A = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 4 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 4 \end{pmatrix}, \quad B = \frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

- Матрица A почти трехдиагональная (по одному дополнительному ненулевому элементу в первой и последней строке). Для других, непериодических, граничных условий она могла бы быть чисто трехдиагональной. Это произошло бы, например, если бы производные в первой и последней точках аппроксимировались формулами

$$u'_1 + 2u'_2 = \frac{-5u_1 + 4u_2 + u_3}{2\Delta x}, \quad 2u'_{N-1} + u'_N = \frac{-u_{N-2} - 4u_{N-1} + 5u_N}{2\Delta x}.$$

- Решение системы с трехдиагональной матрицей может быть найдено очень эффективно с помощью метода прогонки, который можно рассматривать как разновидность метода исключения Гаусса (разложение $A = LU$ в произведение нижней и верхней треугольных двухдиагональных матриц); оно требует всего $9N$ арифметических операций.

Компактные разности

- Если ограничиться пятиточечным шаблоном, то общее выражение для *центральных* компактных разностей можно записать как

$$\beta u'_{i-2} + \alpha u'_{i-1} + u_i + \alpha u'_{i+1} + \beta u'_{i+2} = a \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + b \frac{u_{i+2} - u_{i-2}}{4\Delta x} + c \frac{u_{i+3} - u_{i-3}}{6\Delta x}.$$

- Максимальный порядок точности такой формулы — 10-ый. Обычные (некомпактные) разности получаются при $\alpha = \beta = 0$. Формулы с $\beta = 0$ приводят к системе уравнений с трехдиагональной матрицей (существует и пятидиагональная прогонка, но она более сложна в реализации). Чаще всего ограничиваются формулами с $c = 0$, чтобы не выходить за пределы пятиточечного шаблона.
- Можно легко построить и компактные формулы для аппроксимации второй производной, а также скошенные (не центральные) компактные разности, имеющие, естественно, меньший порядок точности по сравнению с центральными на том же шаблоне.

Наиболее употребительные центральные компактные разности

- Первая производная:

$$\frac{1}{4}u'_{i-1} + u'_i + \frac{1}{4}u'_{i+1} = \frac{3(u_{i+1} - u_{i-1})}{4\Delta x} - \frac{\Delta x^4}{120}u_i^{(5)}$$

$$\frac{1}{3}u'_{i-1} + u'_i + \frac{1}{3}u'_{i+1} = \frac{7(u_{i+1} - u_{i-1})}{9\Delta x} + \frac{u_{i+2} - u_{i-2}}{36\Delta x} + \frac{\Delta x^6}{1260}u_i^{(7)}$$

- Вторая производная:

$$\frac{1}{10}u''_{i-1} + u''_i + \frac{1}{10}u''_{i+1} = \frac{6(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})}{5\Delta x^2} + \frac{\Delta x^4}{200}u_i^{(6)}$$

$$\frac{2}{11}u''_{i-1} + u''_i + \frac{2}{11}u''_{i+1} = \frac{12(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})}{11\Delta x^2} + \frac{3(u_{i+2} - 2u_i + u_{i-2})}{44\Delta x^2} - \frac{23\Delta x^6}{11 \cdot 7!}u_i^{(8)}$$

Употребительные скошенные компактные разности

- Компактная формула 5-го порядка:

$$\alpha_{i-1}u'_{i-1} + \alpha_i u'_i + \alpha_{i+1}u'_{i+1} \simeq \frac{1}{\Delta x} \sum_{k=-2}^2 b_{i+k}u_{i+k} - \Delta x^5 u_i^{(6)},$$

$$b_{i\pm 2} = \pm \frac{5}{3} + \frac{5}{6}\theta, \quad b_{i\pm 1} = \pm \frac{140}{3} + \frac{20}{3}\theta, \quad b_i = -15\theta,$$

$$\alpha_{i\pm 1} = 20 \pm \theta, \quad \alpha_i = 60.$$

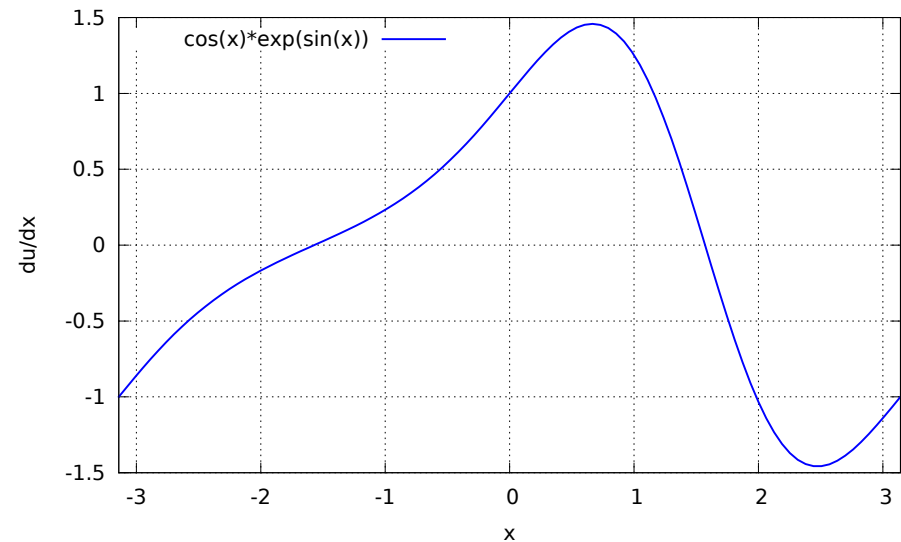
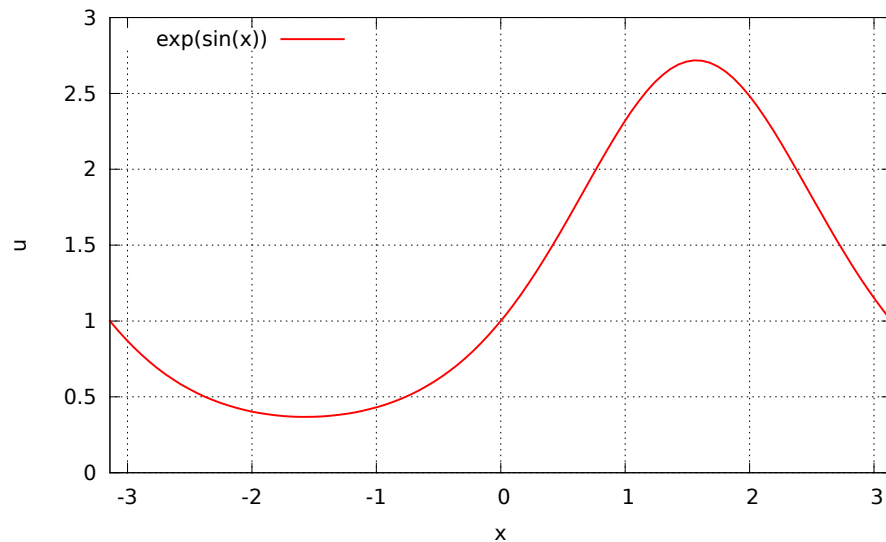
Центральноразностная формула получается отсюда при $\theta = 0$. Хорошим компромиссом между устойчивостью и точностью является выбор $\theta = -1$:

$$25u'_{i-1} + 60u'_i + 5u'_{i+1} \simeq \frac{1}{\Delta x} \left(-\frac{5}{2}u_{i-2} - \frac{160}{3}u_{i-1} + 15u_i + 40u_{i+1} + \frac{5}{6}u_{i+2} \right).$$

Компактные разности нашли широкое применение при численном моделировании дозвуковых сжимаемых течений.

Экспериментальное исследование точности и сходимости

$$u(x) = e^{\sin(x)}, \quad -\pi \leq x \leq \pi, \quad u'(x) = \cos(x) e^{\sin(x)}.$$



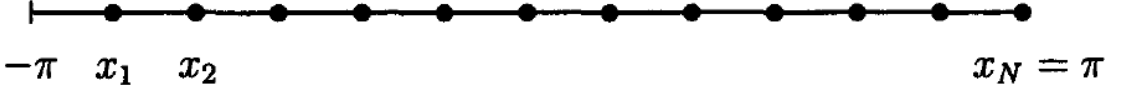
```
% p1.m - convergence of fourth-order finite differences

% For various N, set up grid in [-pi,pi] and function u(x):
Nvec = 2.^(3:12);
clf, subplot('position',[.1 .4 .8 .5])
for N = Nvec
    h = 2*pi/N; x = -pi + (1:N)*h;
    u = exp(sin(x)); uprime = cos(x).*u;

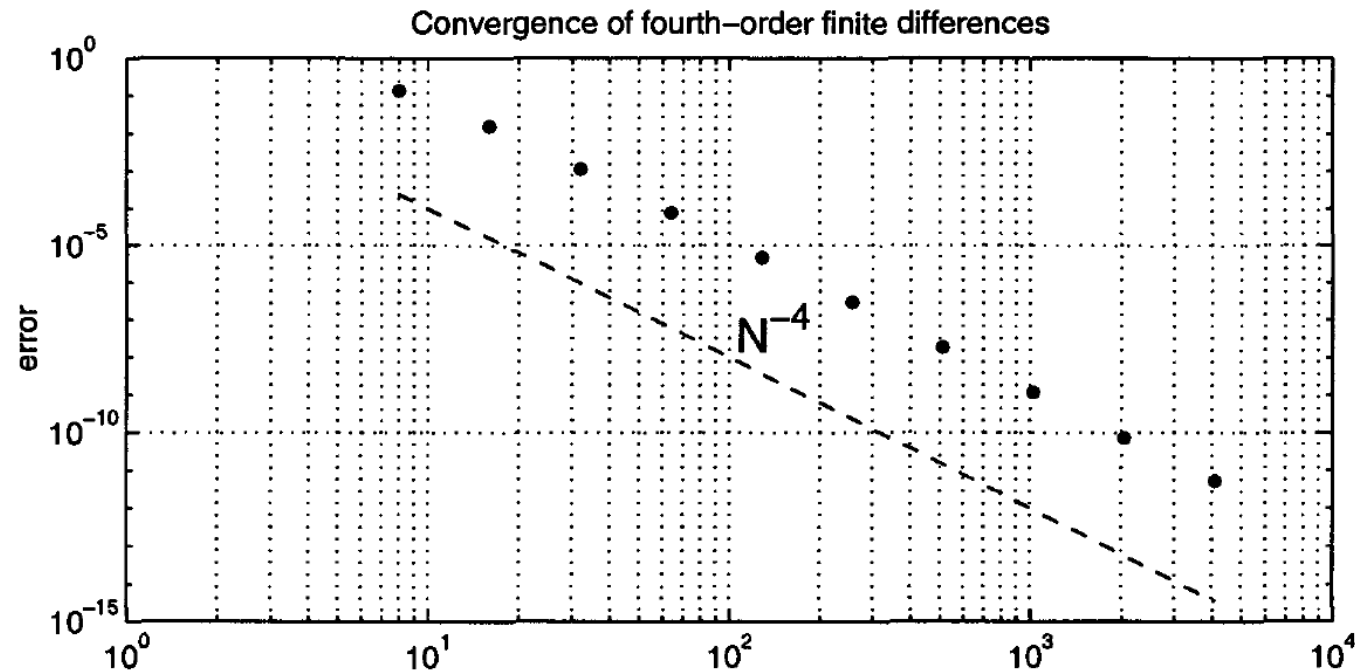
    % Construct sparse fourth-order differentiation matrix:
    e = ones(N,1);
    D = sparse(1:N,[2:N 1],2*e/3,N,N)...
        - sparse(1:N,[3:N 1 2],e/12,N,N);
    D = (D-D')/h;

    % Plot max(abs(D*u-uprime)):
    error = norm(D*u-uprime,inf);
    loglog(N,error, '.', 'markersize',15), hold on
end
grid on, xlabel N, ylabel error
title('Convergence of fourth-order finite differences')
semilogy(Nvec,Nvec.^(-4),'--')
text(105,5e-8,'N^{-4}','fontsize',18)
```


Сходимость разностных формул

$$u(x) = e^{\sin(x)}, \quad -\pi \leq x \leq \pi,$$


The diagram shows a horizontal line segment representing the interval $[-\pi, \pi]$. The left endpoint is labeled $-\pi$ and the right endpoint is labeled $x_N = \pi$. Several points are marked along the line with dots, and the first two points are labeled x_1 and x_2 .



Преобразование Фурье

Рассмотрим функцию $u(x)$, периодическую на интервале $[0, L]$. Ее можно разложить в ряд Фурье

$$u(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{u}_k e^{I \cdot \frac{2\pi}{L} kx}, \quad \text{где} \quad \hat{u}_k = \frac{1}{L} \int_0^L u(x) e^{-I \cdot \frac{2\pi}{L} kx} dx, \quad I = \sqrt{-1}$$

Построим на интервале $[0, L]$ конечноразностную сетку

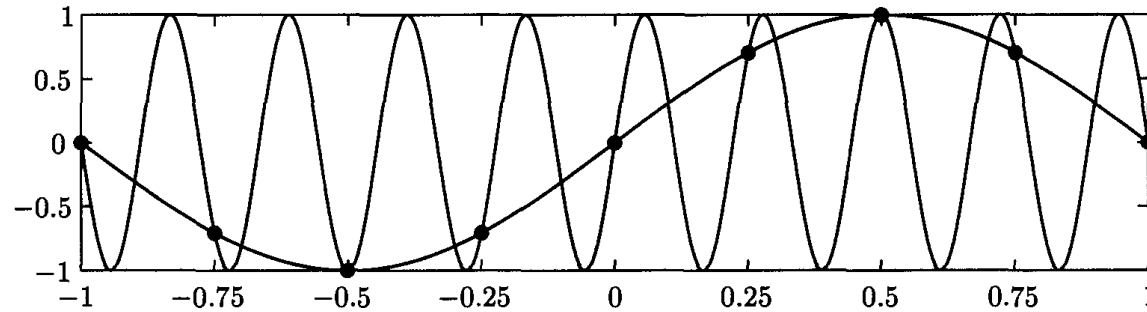
$$x_j = jL/N, \quad x_0 = 0, \quad x_N = L.$$

Дискретное преобразование Фурье имеет вид

$$u_j \equiv u(x_j) = \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} \hat{u}_k e^{I \cdot \frac{2\pi}{L} kx_j} = \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} \hat{u}_k e^{I \cdot \frac{2\pi}{N} jk}, \quad \hat{u}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u_j e^{-I \cdot \frac{2\pi}{N} jk}.$$

Легко видеть, что в точках сетки значения гармоник с номерами k и $k + N$ совпадают:

$$e^{I \cdot \frac{2\pi}{N} j(k+N)} = e^{I \cdot 2\pi j} e^{I \cdot \frac{2\pi}{N} jk} = 1^j \cdot e^{I \cdot \frac{2\pi}{N} jk} = e^{I \cdot \frac{2\pi}{N} jk}.$$

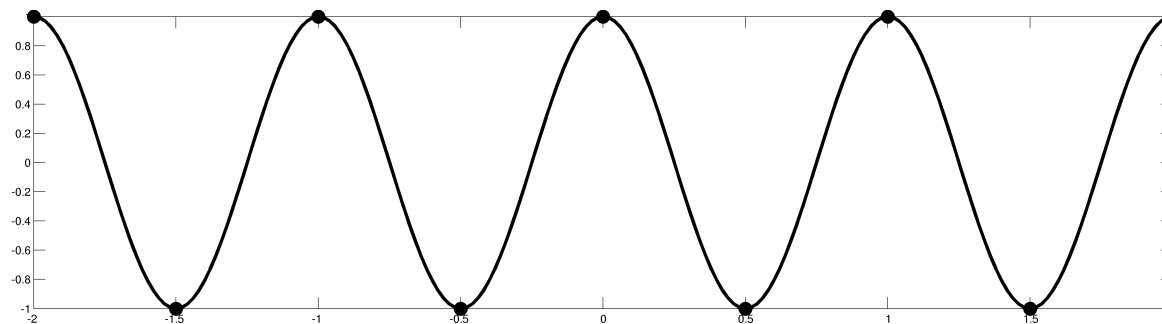


Таким образом, существует максимальное значение номера и волнового числа

$$k_{max} = N/2, \quad \alpha_{max} = \pi N/L = \pi/\Delta x$$

для гармоник, значения которых не совпадают в точках конечноразностной сетки $x_j = jL/N$. Соответствующая гармоника имеет вид

$$e^{I \cdot \alpha_{max} x} = e^{I \cdot \pi x N/L} = e^{I \cdot \pi x / \Delta x}, \quad e^{I \cdot \alpha_{max} x_j} = e^{I \cdot \pi j} = (-1)^j.$$



Фурье-анализ формул дифференцирования

$$\frac{d}{dx} \simeq D_x, \quad \frac{d}{dx} e^{I \cdot \alpha x} = I \alpha e^{I \cdot \alpha x}, \quad D_x e^{I \cdot \alpha x} = I \tilde{\alpha} e^{I \cdot \alpha x}.$$

Модифицированное волновое число $\tilde{\alpha}(\alpha) = \text{Re}(\tilde{\alpha}) + I \cdot \text{Im}(\tilde{\alpha})$.

Разности вперед 1-го порядка $\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$:

$$\tilde{\alpha} \Delta x = \frac{e^{I \cdot \alpha \Delta x} - 1}{I} = \sin \alpha \Delta x + I \cdot (1 - \cos \alpha \Delta x) = \sin \alpha \Delta x + I \cdot 2 \sin^2 \frac{\alpha \Delta x}{2}.$$

Разности назад 1-го порядка $\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$:

$$\tilde{\alpha} \Delta x = \frac{1 - e^{-I \cdot \alpha \Delta x}}{I} = \sin \alpha \Delta x - I \cdot (1 - \cos \alpha \Delta x) = \sin \alpha \Delta x - I \cdot 2 \sin^2 \frac{\alpha \Delta x}{2}.$$

Центральные разности 2-го порядка $\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$:

$$\tilde{\alpha} \Delta x = \frac{e^{I \cdot \alpha \Delta x} - e^{-I \cdot \alpha \Delta x}}{2I} = \sin \alpha \Delta x$$

Центральные разности 4-го порядка $\frac{-u_{i+2} + 8u_{i+1} - 8u_{i-1} + u_{i-2}}{12\Delta x}$:

$$\tilde{\alpha}\Delta x = \frac{-e^{I\cdot 2\alpha\Delta x} + 8e^{I\cdot\alpha\Delta x} - 8e^{-I\cdot\alpha\Delta x} + e^{-I\cdot 2\alpha\Delta x}}{12I} = \frac{4}{3} \sin \alpha\Delta x - \frac{1}{6} \sin 2\alpha\Delta x.$$

Компактные разности 4-го порядка $\frac{1}{4}u'_{i-1} + u'_i + \frac{1}{4}u'_{i+1} = \frac{3(u_{i+1} - u_{i-1})}{4\Delta x}$:

$$I\tilde{\alpha} \left(\frac{1}{4}e^{-I\cdot\alpha\Delta x} + 1 + \frac{1}{4}e^{I\cdot\alpha\Delta x} \right) = \frac{3}{4\Delta x} (e^{I\cdot\alpha\Delta x} - e^{-I\cdot\alpha\Delta x}),$$

$$\tilde{\alpha}\Delta x = \frac{\frac{3}{2} \sin \alpha\Delta x}{1 + \frac{1}{2} \cos \Delta x} = \frac{3 \sin \alpha\Delta x}{2 + \cos \Delta x}$$

Компактные разности 6-го порядка

$$\frac{1}{3}u'_{i-1} + u'_i + \frac{1}{3}u'_{i+1} = \frac{7(u_{i+1} - u_{i-1})}{9\Delta x} + \frac{u_{i+2} - u_{i-2}}{36\Delta x} :$$

$$\tilde{\alpha}\Delta x = \frac{\frac{14}{9} \sin \alpha\Delta x + \frac{1}{18} \sin 2\alpha\Delta x}{1 + \frac{2}{3} \cos \Delta x} = \frac{28 \sin \alpha\Delta x + \sin 2\alpha\Delta x}{18 + 12 \cos \Delta x}.$$

Односторонние разности 2-го порядка $\frac{3u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}}{2\Delta x}$:

$$\tilde{\alpha}\Delta x = \frac{3 - 4e^{-I\cdot\alpha\Delta x} + e^{-I\cdot 2\alpha\Delta x}}{2I} = \frac{4 \sin \alpha\Delta x - \sin 2\alpha\Delta x}{2} - I \cdot \frac{3 - 4 \cos \alpha\Delta x + \cos 2\alpha\Delta x}{2}.$$

Скошенные разности 5-го порядка

$\frac{-3u_{i+2} + 30u_{i+1} + 20u_i - 60u_{i-1} + 15u_{i-2} - 2u_{i-3}}{60\Delta x}$:

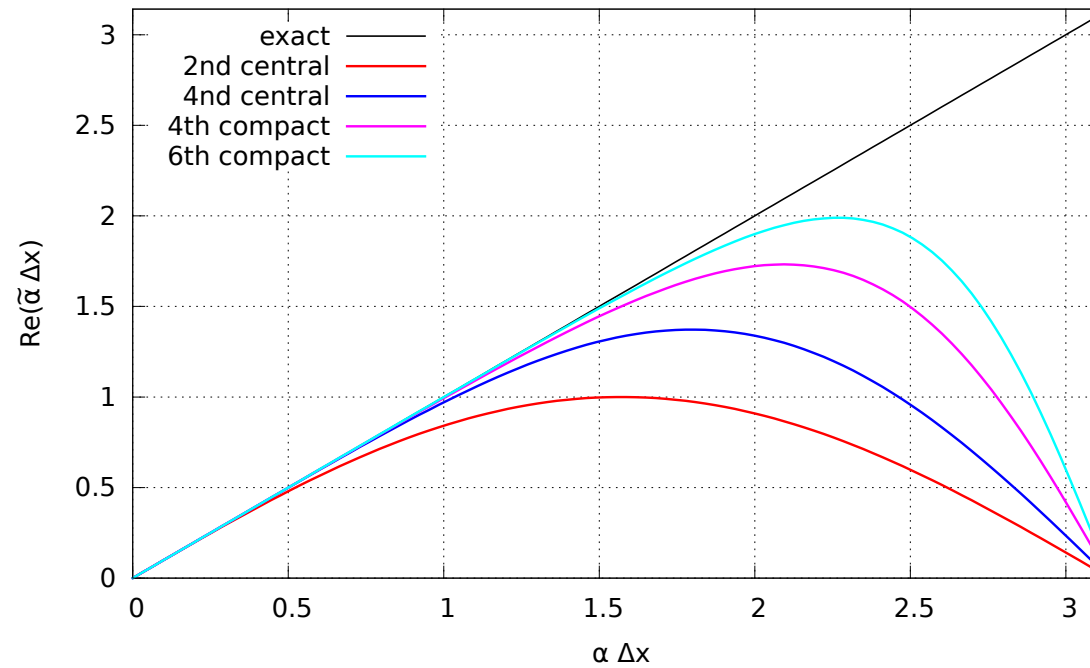
$$\tilde{\alpha}\Delta x = \frac{45 \sin \alpha\Delta x - 9 \sin 2\alpha\Delta x + \sin 3\alpha\Delta x}{30} - I \cdot \frac{10 - 15 \cos \alpha\Delta x + 6 \cos 2\alpha\Delta x - \cos 3\alpha\Delta x}{30}.$$

Скошенные компактные разности 5-го порядка

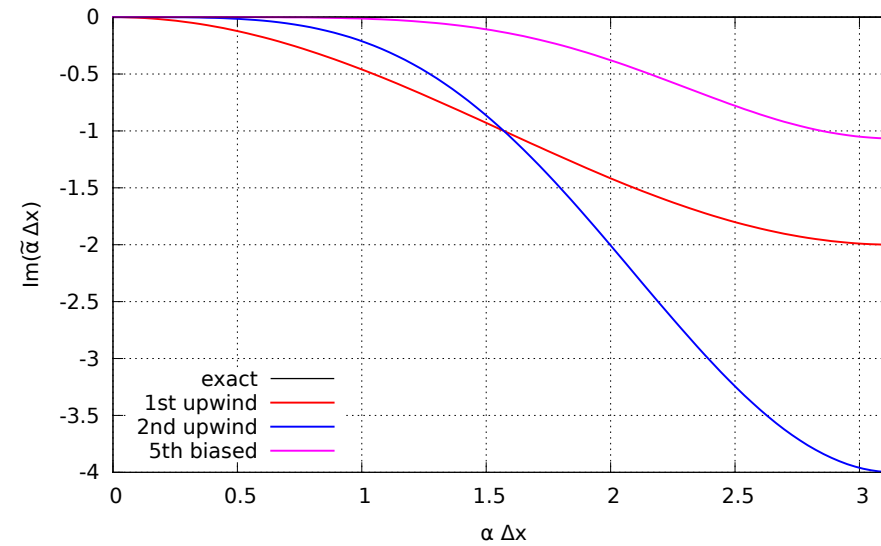
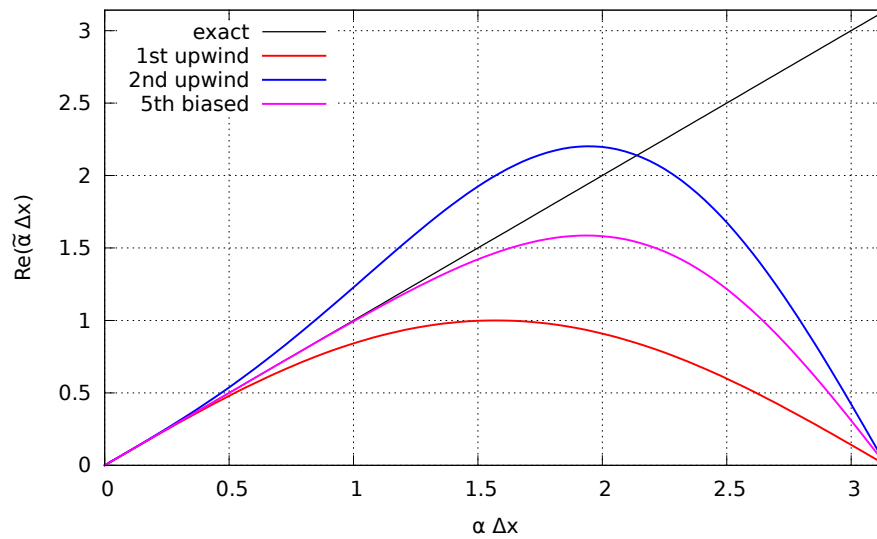
$25u'_{i-1} + 60u'_i + 5u'_{i+1} = \frac{1}{\Delta x} \left(-\frac{5}{2}u_{i-2} - \frac{160}{3}u_{i-1} + 15u_i + 40u_{i+1} + \frac{5}{6}u_{i+2} \right)$:

$$\tilde{\alpha}\Delta x = \operatorname{Re}(\Omega) + I \cdot \operatorname{Im}(\Omega), \quad \Omega = \frac{-\frac{5}{2}e^{-I\cdot 2\alpha\Delta x} - \frac{160}{3}e^{-I\cdot\alpha\Delta x} + 15 + 40e^{I\cdot\alpha\Delta x} + \frac{5}{6}e^{2I\cdot\alpha\Delta x}}{I \cdot (25e^{-I\cdot\alpha\Delta x} + 60 + 5e^{I\cdot\alpha\Delta x})}.$$

Спектральные свойства центральных разностей



Спектральные свойства скошенных разностей



Влияние спектральных свойств разностных формул

На примере простого уравнения переноса рассмотрим, как влияют спектральные свойства разностных формул на получаемое приближенное решение.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \text{Решение в виде гармоники} \quad u(x, t) = Ae^{I \cdot (\alpha x - \omega t)}.$$

Получаем **дисперсионное соотношение** $\omega = \alpha c$, $\Rightarrow u(x, t) = Ae^{I \cdot \alpha(x - ct)}$

Аппроксимируем теперь производную по x разностью назад:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + c \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} = 0, \quad \omega = \tilde{\alpha}c = c(\tilde{\alpha}_r + I \cdot \tilde{\alpha}_i) = c \frac{\sin \alpha \Delta x}{\Delta x} - I \cdot c \frac{2 \sin^2 \frac{\alpha \Delta x}{2}}{\Delta x}.$$

Получаем в качестве решения

$$u(x, t) = Ae^{I \cdot (\alpha x - \tilde{\alpha}ct)} = Ae^{I \cdot \alpha(x - \tilde{c}t)} e^{-\kappa t},$$

$$\tilde{c} = c \frac{\tilde{\alpha}_r}{\alpha} = c \frac{\sin \alpha \Delta x}{\alpha \Delta x}, \quad \kappa = c \frac{2 \sin^2 \frac{\alpha \Delta x}{2}}{\Delta x}.$$

Таким образом, волна распространяется с неправильной скоростью, $\tilde{c} \neq c$ (дисперсионная ошибка) и, кроме того, затухает, ее амплитуда уменьшается (схемная диссипация).

Подобным же образом, для аппроксимации разностью вперед получаем

$$u(x, t) = Ae^{I \cdot \alpha(x - \tilde{c}t)} e^{\kappa t}.$$

Таким образом, в этом случае амплитуда волна неограниченно растет! Рассмотрим аппроксимацию центральной разностью.

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = 0, \quad \omega = \tilde{\alpha}c = c \frac{\sin \alpha \Delta x}{\Delta x}.$$

В этом случае наличествует только дисперсионная ошибка, амплитуда же волны не изменяется.