Лекция 6.

ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО ВРЕМЕНИ

Аппроксимация

Система эволюционных уравнений

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathsf{L}\mathbf{u},$$

где в общем случае L — нелинейный оператор.

После дискретизации

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathsf{T}(\Delta t, \Delta x)\mathbf{u}^n$$

(T — оператор перехода, $\mathbf{u}^n \equiv \mathbf{u}(n\Delta t)$).

Определение. Разностная схема *аппроксимирует уравнение* (или *согласована с уравнением*), если

$$\lim_{\Delta t\to 0}\lim_{\Delta x\to 0}\frac{\mathsf{T}(\Delta t, \Delta x) - \mathsf{I}}{\Delta t} = \mathsf{L} \qquad (\Delta t/\Delta x \to \beta).$$

Пусть $u_e(x,t)$ — точное решение. Тогда локальная ошибка аппроксимации записывается как

$$LTE \equiv u_e^{n+1} - \mathsf{T}u_e^n = O(\Delta t \sum_{p,q\geq 0,\ p+q=\ell} \Delta t^p \Delta x^q).$$

В этом случае порядок локальной ошибки аппроксимации равен $\ell + 1$, а порядок схемы ℓ.

Пример. Схема с разностями против потока для линейного уравнения переноса $u_t + au_x = 0$.

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0, \qquad (\mathsf{T}u_e^n)_j = u_{e,j}^n + \sigma(u_{e,j-1}^n - u_{e,j}^n), \quad \sigma = a\Delta t/\Delta x.$$

$$LTE = u_e^{n+1} - \mathsf{T}u_e^n = (\partial u_e/\partial t + a\,\partial u_e/\partial x)\Delta t + O(\Delta x\Delta t + \Delta t^2) = \Delta t\, O(\Delta x + \Delta t)$$

Таким образом, это схема первого порядка точности.

Устойчивость

Это понятие связано с изменением во времени ошибки численного решения.

Обозначим вектор ошибки, появляющейся на n-м шагу, через $\boldsymbol{\varepsilon}^n = \mathbf{u}^n - \mathbf{u}_e^n$.

Матрица перехода G определяется как $\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1} = \mathsf{G}\,\boldsymbol{\varepsilon}^n$.

Для линейного уравнения матрица перехода G эквивалентна оператору перехода T.

В общем случае $$\mathsf{G} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}}(\mathsf{T}\mathbf{u}), \quad G_{\mu\nu} = \frac{\partial u_\mu^{n+1}}{\partial u_\nu^n}.$$

Метод устойчив, если норма $||\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1}|| = ||\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}_e^{n+1}||$ может быть ограничена величиной $||\boldsymbol{\varepsilon}^n||$, умноженной на константу, независящую как от $\mathbf{u}^n$, так и от $\mathbf{u}_e^n$:

$$||\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1}|| \leq (1 + K\Delta t)\;||\boldsymbol{\varepsilon}^n||.$$

Если точное решение не растет со временем, то никакого роста не должно происходить и в численном решении, т.е. должно быть $K = 0$.

Если уравнение перехода приведено к диагональному виду $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu^{n+1} = g_\mu\, \boldsymbol{\varepsilon}_\mu^n$, тогда для устойчивости надо потребовать, чтобы норма каждого собственного вектора ошибки не возрастала

$$|\varepsilon_\mu^{n+1}| \leq |\varepsilon_\mu^n|,$$

откуда получаем

$$|g_\mu| = \sqrt{g_\mu g_\mu^*} \leq 1 \qquad \text{для всех} \quad \mu.$$

Сходимость

Приближенное решение сходится к точному, когда

$$||u^n - u_e^n|| \to 0 \qquad \text{при} \qquad \Delta t \to 0,\ n\Delta t \to t_0.$$

Теорема Лакса об эквивалентности:
Аппроксимация + *Устойчивость* → *Сходимость*

$$||\mathbf{u}^n - \mathbf{u}_e^n|| \le ||\mathsf{T}\mathbf{u}^{n-1} - \mathsf{T}\mathbf{u}_e^{n-1}|| + ||\mathsf{T}\mathbf{u}_e^{n-1} - \mathbf{u}_e^n|| \le$$

$$\le ||\mathbf{u}^{n-1} - \mathbf{u}_e^{n-1}|| + \Delta t \left(\sum_{p+q=l} \Delta x^p \Delta t^q \right) \le$$

$$\le ||\mathbf{u}^0 - \mathbf{u}_e^0|| + n\Delta t \left(\sum_{p+q=l} \Delta x^p \Delta t^q \right)$$

Искомый результат получается при $\Delta t \to 0,\ n\Delta t \to t_0$.

Фактически теорема Лакса полезна только для линейных разностных схем.

Анализ устойчивости по фон Нейману

Пусть оператор перехода $\mathsf{T}(\Delta t, \Delta x)$ равен постоянной величине. Тогда можно рассмотреть устойчивость фурье-моды зависимой переменной $u_j^n = \hat{u}_k^n e^{ikx_j}$ и потребовать ограниченности ее амплитуды. Для устойчивости множитель перехода g (или для системы уравнений собственные значения матрицы перехода g_μ) должен не превосходит по модулю единицу, $|g| \leq 1$, для всех фурье-мод.

Пример 1. Разности против потока

$$u_t + a u_x = 0, \qquad \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma(u_i^n - u_{i-1}^n), \quad \sigma = a\Delta t/\Delta x$$

$$\hat{u}_k^{n+1} = \hat{u}_k^n - \sigma(\hat{u}_k^n - e^{-ik\Delta x}\ \hat{u}_k^n)$$

$$\Rightarrow \quad g = 1 - \sigma + \sigma e^{-ik\Delta x} \quad \Rightarrow \quad gg^* = 1 - 4\sigma(1-\sigma)\, sin^2 \frac{k\Delta x}{2}$$

Условие устойчивости есть условие Куранта-Фридрихса-Леви:

$$\sigma = a\Delta t/\Delta x \leq 1.$$

Пример 2. Разности по потоку $u_t + au_x = 0,\quad \dfrac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a\dfrac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} = 0$

$$g = 1 + \sigma - \sigma e^{ik\Delta x} \quad \Rightarrow \quad gg^* = (1+\sigma)^2 + \sigma^2 - 4\sigma(1+\sigma)\, cos^2 \frac{k\Delta x}{2} > 1$$

Схема всегда неустойчива.

Пример 3. Центральные разности $u_t + au_x = 0,\ \dfrac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a\dfrac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0$

$$g = 1 - i\sigma\, sin\, k\Delta x \quad \Rightarrow \quad gg^* = 1 + \sigma^2\, sin^2\, k\Delta x > 1$$

Схема всегда неустойчива.

Схемы Рунге–Кутты

$$\frac{du}{dt} = f(u,t), \qquad \Rightarrow \qquad u^{n+1} = u^n + \int\limits_{t^n}^{t^{n+1}} f(u,t)dt.$$

Метод Эйлера основан на простейшей аппроксимации данного интеграла:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t f(u^n, t^n), \qquad \Delta t = t^{n+1} - t^n$$

Порядок точности можно увеличить до второго, используя для вычисления интеграла правило средней точки. При этом для оценки значения правой части в момент времени $\left(t^n + t^{n+1}\right)/2 = t^n + \Delta t/2$ можно использовать метод Эйлера. Это приводит к **методу Рунге–Кутты** 2-го порядка:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(u^n, t^n), \\ k_2 &= f\left(u^n + \frac{\Delta t}{2}k_1, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ u^{n+1} &= u^n + \Delta t k_2. \end{aligned}$$

Общий метод Рунге–Кутты

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(u^n, t^n),\\
k_2 &= f\left(u^n + a_{21}\Delta t k_1, t^n + c_2\Delta t\right),\\
k_3 &= f\left(u^n + a_{31}\Delta t k_1 + a_{32}\Delta t k_2, t^n + c_3\Delta t\right),\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\
k_s &= f\left(u^n + a_{s1}\Delta t k_1 + \dots + a_{s,s-1}\Delta t k_{s-1}, t^n + c_s\Delta t\right),\\
u^{n+1} &= u^n + \Delta t(b_1 k_1 + \dots + b_s k_s.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{array}{c|ccccc}
0 & & & & & \\
c_2 & a_{21} & & & & \\
c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & & \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{s,s-1} & \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & b_s
\end{array}
$$

Диаграмма Бутчера

Примеры схем Рунге–Кутты

Рунге, порядок 2

$$
\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\
\hline
 & 0 & 1
\end{array}
$$

Рунге, порядок 3

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
1 & 0 & 1 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & 0 & \frac{1}{6}
\end{array}
$$

Хойн, порядок 3

$$
\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & \\
\frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \\
\hline
 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4}
\end{array}
$$

«Классический» метод Рунге—Кутты

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2}{6} & \frac{2}{6} & \frac{1}{6}
\end{array}
$$

Правило 3/8

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & & \\
\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 1 & & \\
1 & 1 & -1 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8}
\end{array}
$$

Множитель перехода

$$\frac{du}{dt} = \lambda u \qquad\qquad (\lambda = \partial f/\partial u)\,.$$

$$u^{n+1} = u^n + \lambda \Delta t u^n, \qquad \Rightarrow \qquad g = 1 + \lambda \Delta t$$

РК 2-го порядка $\quad k_1 = \lambda u^n, \qquad k_2 = \lambda\left(u^n + \Delta t k_1/2\right) = \lambda\left(u^n + \Delta t \lambda u^n/2\right)$

$$g = 1 + \lambda \Delta t + \frac{1}{2}\lambda^2 \Delta t^2$$

РК 4-го порядка $\quad g = 1 + \lambda \Delta t + \frac{1}{2}\lambda^2 \Delta t^2 + \frac{1}{6}\lambda^2 \Delta t^3 + \frac{1}{24}\lambda^2 \Delta t^4$

Многошаговые методы

- В схемах Рунге–Кутты повышение порядка точности схемы достигается за счет того, что на каждом шаге по времени правая часть вычисляется несколько раз. Это естественно, приводит к соответствующему увеличению времени счета. Можно построить более экономичную схему высокого порядка точности, если воспользоваться правыми частями, уже вычисленными на нескольких предыдущих шагах. Данная идея приводит к так называемым **многошаговым методам**.
- В отличие от схем Рунге–Кутта, многошаговые методы не являются «самостартующими»: вычисления на нескольких первых временных слоях не могут быть выполнены по той же схеме, поскольку для них информация о предыдущих слоях недоступна. Соответственно требуется отдельная стартовая процедура: решение на нескольких первых слоях может быть вычислена с помощью схемы Рунге–Кутты соответствующего порядка или даже методом Эйлера с уменьшенным в большое число раз временным шагом.

Методы Адамса–Бэшфорта

- Наиболее известными представителями класса многошаговых методов являются так называемые методы Адамса–Бэшфорта. Они часто используются при численном моделировании течений несжимаемой жидкости. Схемы Адамса–Бэшфорта до четвертого порядка включительно выписаны ниже.

$$
\begin{aligned}
p = 1: \qquad & u^{n+1} = u^n + \Delta t f^n, \\
p = 2: \qquad & u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{3}{2} f^n - \frac{1}{2} f^{n-1} \right), \\
p = 3: \qquad & u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{23}{12} f^n - \frac{16}{12} f^{n-1} + \frac{5}{12} f^{n-2} \right), \\
p = 4: \qquad & u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{55}{24} f^n - \frac{59}{24} f^{n-1} + \frac{37}{24} f^{n-2} - \frac{9}{24} f^{n-3} \right).
\end{aligned}
$$

Методы Адамса–Мултона

- Наряду с явными методами Адамса–Бэшфорта достаточно часто используются также неявные многошаговые схемы Адамса–Мултона. Они имеют более широкую область устойчивости и, соответственно, более слабые ограничения на временной шаг. Их применение, однако, требует, в случае нелинейных систем уравнений, использование итерационных методов для нахождения решения на каждом шаге. Ниже даны методы Адамса–Мултона вплоть до четвертого порядка.

$$
\begin{aligned}
p = 1: &\qquad u^{n+1} = u^n + \Delta t\, f^{n+1}, \\
p = 2: &\qquad u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{1}{2} f^{n+1} + \frac{1}{2} f^n \right), \\
p = 3: &\qquad u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{5}{12} f^{n+1} + \frac{8}{12} f^n - \frac{1}{12} f^{n-1} \right), \\
p = 4: &\qquad u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{9}{24} f^{n+1} + \frac{19}{24} f^n - \frac{5}{24} f^{n-1} + \frac{1}{24} f^{n-2} \right),
\end{aligned}
$$

Формулы дифференцирования назад

- Неявные схемы различных порядков могут быть построены и немножко другим способом: используя значения на предыдущих слоях не правой части, а самого решения. Подобные методы называют формулами дифференцирования назад. Они часто используются при численном интегрировании жестких систем уравнений. Ниже даны формулы дифференцирования назад младших порядков.

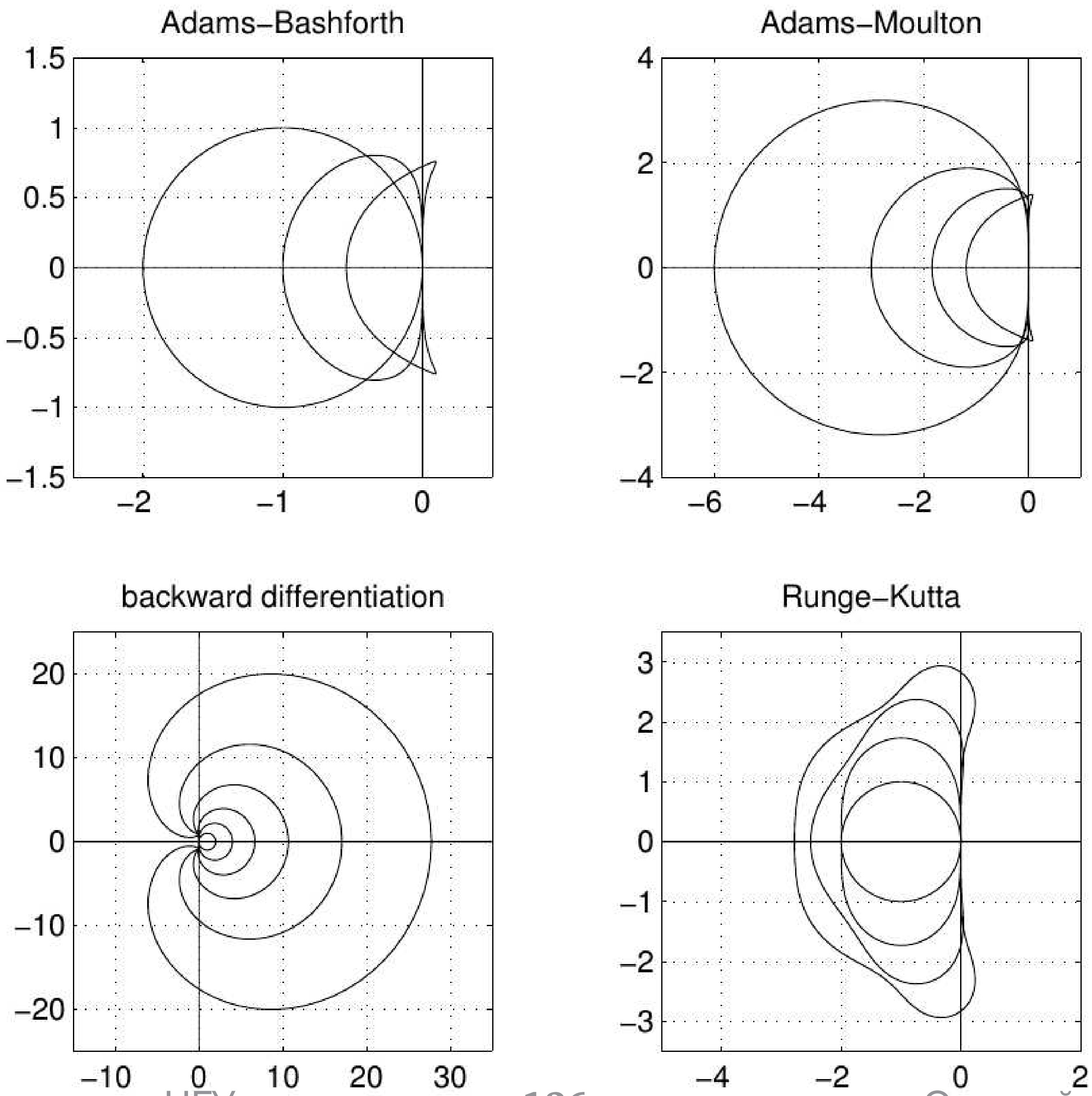
$$
\begin{aligned}
p = 1: &\qquad u^{n+1} - u^n = \Delta t f^{n+1}, \\
p = 2: &\qquad \frac{3}{2} u^{n+1} - 2u^n + \frac{1}{2} u^{n-1} = \Delta t f^{n+1}, \\
p = 3: &\qquad \frac{11}{6} u^{n+1} - 3u^n + \frac{3}{2} u^{n-1} - \frac{1}{3} u^{n-2} = \Delta t f^{n+1}, \\
p = 4: &\qquad \frac{25}{12} u^{n+1} - 4u^n + 3u^{n-1} - \frac{4}{3} u^{n-2} + \frac{1}{4} u^{n-3} = \Delta t f^{n+1}
\end{aligned}
$$

Области устойчивости

```
% p25.m - stability regions for ODE formulas

% Adams-Bashforth:
  clf, subplot('position',[.1 .56 .38 .38])
  plot([-8 8],[0 0]), hold on, plot([0 0],[-8 8])
  z = exp(1i*pi*(0:200)/100); r = z-1;
  s = 1; plot(r./s)                                   % order 1
  s = (3-1./z)/2; plot(r./s)                          % order 2
  s = (23-16./z+5./z.^2)/12; plot(r./s)               % order 3
  axis([-2.5 .5 -1.5 1.5]), axis square, grid on
  title Adams-Bashforth

% Adams-Moulton:
  subplot('position',[.5 .56 .38 .38])
  plot([-8 8],[0 0]), hold on, plot([0 0],[-8 8])
  s = (5*z+8-1./z)/12; plot(r./s)                     % order 3
  s = (9*z+19-5./z+1./z.^2)/24; plot(r./s)            % order 4
  s = (251*z+646-264./z+106./z.^2-19./z.^3)/720; plot(r./s)    % 5
  d = 1-1./z;
  s = 1-d/2-d.^2/12-d.^3/24-19*d.^4/720-3*d.^5/160; plot(d./s) % 6
  axis([-7 1 -4 4]), axis square, grid on, title Adams-Moulton
```

Области устойчивости

```
% Backward differentiation:
  subplot('position',[.1 .04 .38 .38])
  plot([-40 40],[0 0]), hold on, plot([0 0],[-40 40])
  r = 0; for i = 1:6, r = r+(d.^i)/i; plot(r), end   % orders 1-6
  axis([-15 35 -25 25]), axis square, grid on
  title('backward differentiation')

% Runge-Kutta:
  subplot('position',[.5 .04 .38 .38])
  plot([-8 8],[0 0]), hold on, plot([0 0],[-8 8])
  w = 0; W = w; for i = 2:length(z)                   % order 1
    w = w-(1+w-z(i)); W = [W; w]; end, plot(W)
  w = 0; W = w; for i = 2:length(z)                   % order 2
    w = w-(1+w+.5*w^2-z(i)^2)/(1+w); W = [W; w];
    end, plot(W)
  w = 0; W = w; for i = 2:length(z)                   % order 3
    w = w-(1+w+.5*w^2+w^3/6-z(i)^3)/(1+w+w^2/2); W = [W; w];
    end, plot(W)
  w = 0; W = w; for i = 2:length(z)                   % order 4
    w = w-(1+w+.5*w^2+w^3/6+w.^4/24-z(i)^4)/(1+w+w^2/2+w.^3/6);
    W = [W; w]; end, plot(W)
  axis([-5 2 -3.5 3.5]), axis square, grid on, title Runge-Kutta
```


Adams–Bashforth
1.5
1
0.5
0
–0.5
–1
–1.5
–2
–1
0
Adams–Moulton
4
2
0
–2
–4
–6
–4
–2
0
backward differentiation
20
10
0
–10
–20
–10
0
10
20
30
Runge–Kutta
3
2
1
0
–1
–2
–3
–4
–2
0
2