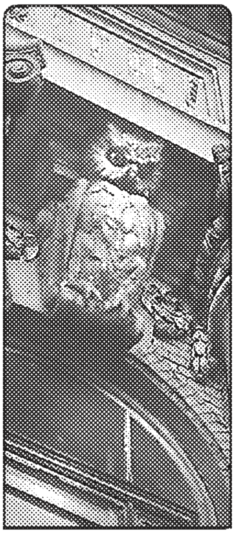

Научный отдел

МЕХАНИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2021. Т. 21, вып. 4. С. 472–488
Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics, 2021, vol. 21, iss. 4, pp. 472–488
https://mmi.sgu.ru
https://doi.org/10.18500/1816-9791-2021-21-4-472-488

Научная статья
УДК 517.98

О дифференциальных приближениях разностных схем

Ю. А. Блинков[1,3]✉, **М. Д. Малых**[2,3], **Л. А. Севастьянов**[2,3]

[1]Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83
[2]Российский университет дружбы народов (РУДН), Россия, 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6
[3]Объединенный институт ядерных исследований, Россия, Московская область, 141980, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6

Блинков Юрий Анатольевич, доктор физико-математических наук, доцент, [1]заведующий кафедрой математического и компьютерного моделирования; [3]сотрудник лаборатории информационных технологий, blinkovua@sgu.ru, https://orcid.org/0000-0001-7340-0919

Малых Михаил Дмитриевич, доктор физико-математических наук, [2]доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей, [3]сотрудник лаборатории информационных технологий, malykh_md@pfur.ru, https://orcid.org/0000-0001-6541-6603

Севастьянов Леонид Антонович, доктор физико-математических наук, профессор, [2]профессор кафедры прикладной информатики и теории вероятностей; [3]сотрудник лаборатории теоретической физики, sevastianov_la@pfur.ru, https://orcid.org/0000-0002-1856-4643

Аннотация. Понятие первого дифференциального приближения было введено в 1950-х годах для анализа разностных схем А. И. Жуковым и затем применялось для исследования качества разностных схем, возникающих при аппроксимации уравнений в частных производных. В настоящей работе первое дифференциальное приближение рассматривается как универсальная конструкция, позволяющая использовать методы компьютерной алгебры для исследования разностных схем, минуя прямое использование методов теории разностной алгебры. В первом разделе рассмотрено дифференциальное приближение для разностных схем, описывающих обыкновенные дифференциальные уравнения. Обсуждена связь между дифференциальным приближением, сингулярным возмущением исходной системы и понятием первого дифференциального приближения. Для этого простого случая показана связь между методом оценки ошибки аппроксимации решения, основанным на анализе первого дифференциального приближения, и методом Ричардсона – Калиткина. Во втором разделе обсуждаются дифференциальные приближения для разностных схем, аппроксимирующих дифференциальные уравнения в частных производных. Понятие первого дифференциального приближения описано на языке степенной геометрии. Показано, что при аппроксимации совместной системы дифференциальных уравнений в частных производных не всегда получаются совместные разностные системы уравнений. В качестве способа проверки совместности системы разностных уравнений предлагается проверять совместность первого дифференциального приближения для разностной системы. С этих позиций обсуждается понятие полной совместности системы разностных уравнений. Приведено несколько примеров не вполне совместных систем. Для анализа совместности первого дифференциального приближения используется программное обеспечение, разработанное для исследования дифференциальных уравнений в частных производных. Рассмотрены вопросы вычисления первого дифференциального приближения в системах компьютерной алгебры, Sage и SymPy.

Ключевые слова: разностные уравнения, разностные схемы, дифференциальные уравнения, компьютерная алгебра, совместные системы дифференциальных уравнений

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 20-11-20257).

Для цитирования: *Блинков Ю. А., Малых М. Д., Севастьянов Л. А.* О дифференциальных приближениях разностных схем // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2021. Т. 21, вып. 4. С. 472–488. https://doi.org/10.18500/1816-9791-2021-21-4-472-488

Article

On differential approximations of difference schemes

Yu. A. Blinkov[1,3]✉, **M. D. Malykh** [2,3], **L. A. Sevastianov**[2,3]

[1]Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

[2]Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), 6 Miklukho-Maklaya St., Moscow 117198, Russia

[3]Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie St., Dubna, Moscow Region 141980, Russia

Yuri A. Blinkov, blinkovua@sgu.ru, https://orcid.org/0000-0001-7340-0919
Mikhail D. Malykh, malykh_md@pfur.ru, https://orcid.org/0000-0001-6541-6603
Leonid A. Sevastianov, sevastianov_la@pfur.ru, https://orcid.org/0000-0002-1856-4643

Abstract. The concept of the first differential approximation was introduced in the 1950s for the analysis of difference schemes by A. I. Zhukov and then was used to study the quality of difference schemes approximating equations in partial derivatives. In the present work, the first differential approximation is considered as a universal construction that allows to use computer algebra methods for investigation difference schemes, bypassing the direct use of the methods of difference algebra. The first section discusses the differential approximation for difference schemes approximating ordinary differential equations. The relationship between differential approximation, singular perturbation of the original system and the concept of the first differential approximation is discussed. For this simple case, the estimation for the difference between exact and approximate solutions is given and justified, the method is compared with Richardson – Kalitkin method. The second section discusses differential approximations for difference schemes approximating partial differential equations. The concept of the first differential approximation is described in the language of power geometry. As it has been shown, when approximating a consistent system of partial differential equations, consistent difference systems of equations are not always obtained. As a method of checking the consistency of a difference equations system, it is proposed to check the consistency of the first differential approximation for the difference system. From this point of view, the concept of strong consistency (s-consistency) of a system of difference equations is discussed. A few examples of systems that are not strongly consistent are given. To analyse the consistency of the first differential approximation, software developed for the investigation of partial differential equations is used. The problem of calculation of the first differential approximation in computer algebra, Sage and SymPy systems is considered.

Keywords: difference equations, difference scheme, differential equations, computer algebra, consistency of differential equations

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 20-11-20257).

For citation: Blinkov Yu. A., Malykh M. D., Sevastianov L. A. On differential approximations of difference schemes. *Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics*, 2021, vol. 21, iss. 4, pp. 472–488 (in Russian). https://doi.org/10.18500/1816-9791-2021-21-4-472-488

Введение

При численном решении дифференциальных уравнений происходит переход от функций, зависящих от своих аргументов непрерывным образом, к функциям дискретных аргументов. В результате вместо дифференциальных уравнений получаются разностные. Если исходная система дифференциальных уравнений рассматривается в ограниченной области, то эти разностные уравнения превращаются в систему алгебраических уравнений, которая далее решается численно, в результате чего получается приближенное решение. Однако вместе с приближенным решением важно иметь еще и оценку того, насколько сильно оно отличается от точного, т. е. оценку ошибки. К сожалению, форма, удобная для отыскания приближенного решения, весьма неудобна для проведения каких-либо оценок.

Дело в том, что в настоящее время хорошо разработаны методы анализа дифференциальных уравнений, а разработка их аналогов для разностных уравнений только начата. Поэтому для получения оценок следует перейти от разностных уравнений обратно к дифференциальным уравнениям, передающим не только свойства исходной дифференциальной системы, но и аппроксимирующей ее системы разностных уравнений. Эта система получила название дифференциального приближения разностной схемы.

Дифференциальные приближения были введены в практику анализа свойств разностных схем в 1950-х гг. А. И. Жуковым. Роль этого подхода в создании известной разностной схемы распада разрыва описана в воспоминаниях С. К. Годунова [1]. Дальнейшее развитие этого понятия и использование его при анализе свойств разностных схем было дано в работах Н. Н. Яненко и Ю. И. Шокина [2–4]. В этих работах понятие первого разностного приближения разрабатывалось для анализа разностных схем, аппроксимирующих уравнения в частных производных. Однако сам подход с успехом может применяться к обыкновенным дифференциальным уравнениям, и, более того, основные идеи метода удобно описать именно на этом заметно более простом случае.

В настоящей статье мы изложим основные идеи метода первого дифференциального приближения для анализа разностных схем, аппроксимирующих обыкновенные дифференциальные уравнения (раздел 1), уравнения в частных производных (раздел 2), а также системы таких уравнений (раздел 3). При этом мы будем делать акцент на возможности вычисления дифференциального приближения в системах компьютерной алгебры и открывающиеся в связи с этим новые возможности для исследования свойств разностных схем.

1. Обыкновенные дифференциальные уравнения

1.1. Дифференциальные и разностные уравнения

Рассмотрим автономную систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dx}{\Delta t} = f(x),$$

где $x = (x_1, \ldots, x_m)$. Разностная схема для этого уравнения представляет собой алгебраическое уравнение, связывающее значение переменной x при t со значением этой же переменной при $t + \Delta t$, т. е. уравнение вида

$$F(x(t), x(t + \Delta t), \Delta t) = 0. \tag{1}$$

Чтобы отыскать приближенное решение по этой схеме, переменной Δt придают числовое значение, вводят сетку на оси t с шагом Δt и по заданному значению x_0 при $t = t_0$ вычисляют x_1 как корень уравнения

$$F(x_0, x_1, \Delta t) = 0,$$

затем x_2 — как корень уравнения

$$F(x_1, x_2, \Delta t) = 0,$$

и т.д.

Чтобы исследовать схему (1), напротив, шаг Δt рассматривают как символьную переменную, принимающую малые положительные значения, а в центре внимания оказывается предел $\Delta t \to 0$, в котором должно получиться точное решение. В таком случае уравнение (1) вполне естественно рассматривать как разностное уравнение, и возникает вопрос о существовании функции x переменной t, удовлетворяющей уравнению (1) при всех рассматриваемых значениях t, а не на сетке. К сожалению, вопрос этот весьма сложный.

Во-первых, решение не является единственным. Например, уравнение

$$x(t + \Delta t) = x(t)$$

имеет целое семейство решений, а именно

$$x = g(Tt/\Delta t),$$

где g — любая периодическая функция с периодом T. Такие решения будут иметь особенность при $\Delta t \to 0$ и по этой причине нам не интересны. Поэтому мы должны рассматривать как решение функции t и Δt, гладкие в окрестности $\Delta t = 0$.

Во-вторых, в современной алгебре разностные уравнения рассматриваются в разностной алгебре [5], важнейшей частью которой является разностная теория Галуа [6, 7]. Там рассматриваются линейные разностные уравнения, и вопрос о существовании решений сводится к вопросу о существовании расширений исходного разностного кольца, на котором можно продолжить оператор сдвига. Теория именно гладких решений разностных уравнений развивалась лишь от случая к случаю, мы можем здесь упомянуть работы Крелля, Крампа и Вейерштрасса по теории аналитических факториалов, с одной стороны [8], и работы Грамматикоса по дискретному аналогу свойства Пенлеве [9], с другой. Это обстоятельство подталкивает уйти от разностных уравнений обратно к дифференциальным.

1.2. Первое дифференциальное приближение

Допустим теперь, что $x(t,\Delta t)$ является гладкой функцией обоих аргументов. Тогда

$$x(t+\tau,\Delta t) = x(t,\Delta t) + \partial_t x(t,\Delta t)\tau + \frac{1}{2}\partial_t^2 x(t,\Delta t)\tau^2 + \dots$$

и

$$F(x(t), x(t+\Delta t), \Delta t) = F(x(t), x(t,\Delta t) + \partial_t x(t,\Delta t)\Delta t + \dots, \Delta t)$$

можно представить в виде ряда

$$F_0(x, \partial_t x, \dots)\Delta t^r + F_1(x, \partial_t x, \dots)\Delta t^{r+s} + \dots$$

Если мы оставим в этом ряде только первый член, то получим с точностью до множителя исходное уравнение $\partial_t x - f(x)$. Весьма часто это принимают за определение аппроксимации дифференциального уравнения разностной схемой.

Если же мы оставим еще и следующий член, мы получим дифференциальное уравнение вида

$$\partial_t x - f(x) + g(x, \partial_t x, \dots)\Delta t^s = 0,$$

зависящее от шага Δt и, следовательно, унаследовавшее некоторые свойства схемы. Его и называют первым дифференциальным приближением (ПДП) и надеются на то, что при малых Δt оно передает свойства разностной схемы. Оставляя пока в стороне вопросы обоснования этой гипотезы, заметим, что в системе компьютерной алгебры Sage имеется готовый инструментарий для отыскания дифференциальных приближений.

Пример 1. Пусть требуется исследовать первое дифференциальное приближение к схеме для ОДУ 1-го порядка

$$\dot{x} = f(x).$$

Схема Эйлера пишется как

$$x(t+\Delta t) - x(t) = f(x(t))\Delta t,$$

поэтому первое приближение к ней можно найти так:

```
sage: var("xx,t,dt")
(xx, t, dt)
sage: x=function("x")(t)
sage: f=function("f")(xx)
sage: eq=x.subs(t=t+dt)-x-f.subs(xx=x)*dt
sage: taylor(eq,(dt,0),2)
1/2*dt^2*diff(x(t), t, t) - dt*(f(x(t)) - diff(x(t), t))
```

Это означает, что первым дифференциальным приближением будет

$$f(x) - \dot{x} - \frac{\Delta t}{2}\ddot{x} = 0.$$

Неявная схема Эйлера пишется как

$$x(t + \Delta t) - x(t) = f(x(t + \Delta t))\Delta t,$$

поэтому первое приближение к ней можно найти так:

```
sage: var("xx,t,dt")
(xx, t, dt)
sage: x=function("x")(t)
sage: f= function("f")(xx)
sage: eq=x.subs(t=t+dt)-x-f.subs(xx=x(t+dt))*dt
sage: taylor(eq,(dt,0),2)
-1/2*(2*D[0](f)(x(t))*diff(x(t), t)
- diff(x(t), t, t))*dt^2 - dt*(f(x(t)) - diff(x(t), t))
```

Это означает, что первым дифференциальным приближением будет

$$f(x) - \dot{x} - \frac{\Delta t}{2}\left(\ddot{x} - 2f'(x)\dot{x}\right) = 0.$$

Разумеется, первое дифференциальное приближение всегда является сингулярным возмущением исходной, причем $\mu = \Delta t/2$ играет роль малого параметра. Более того, первое дифференциальное приближение к схеме Эйлера для гармонического осциллятора можно записать как Тихоновскую систему [10], вырожденная система для которой совпадает с исходной системой.

Пример 2. Для схемы Эйлера имеем

$$\begin{cases} \dfrac{\Delta t}{2}\dot{v} = f(x) - v, \\ \dot{x} = v. \end{cases}$$

Поскольку правая часть первого уравнения является линейной относительно v, выполнены условия 1–3 теоремы Тихонова [10, Theorem 4.1]. Поэтому, взяв решение с начальными условиями

$$x|_{t=0} = x_0, \quad \dot{x}|_{t=0} = v_0, \tag{2}$$

мы получим в пределе $\Delta t \to 0$ решение $x = x_0(t)$ начальной задачи

$$\dot{x} = f(x), \quad x|_{t=0} = x_0.$$

Напомним, что стремление не является равномерным по t, чем ближе мы подходим к $t = 0$, тем медленнее эта сходимость, вплоть до полного ее отсутствия при $t = 0$. Дело в том, что решению первого дифференциального приближения, удовлетворяющему начальным условиям (2), нужно сделать скачок к начальным условиям

$$x|_{t=0} = x_0, \quad \dot{x}|_{t=0} = f(x_0),$$

который называют погранслоем. При этом решение сингулярно возмущенной задачи никоим образом не разлагается в ряд по степеням Δt. Вместо этого справедливо асимптотическое представление

$$x = x_0(t) + x_1(t)\Delta t + \dots + \Pi_0 x(\tau) + \Pi_1 x(\tau)\Delta t + \dots,$$

где $\tau = \frac{t}{\Delta t}$. Нам подходит решение без погранслоев, для чего следует брать $v_0 = f(x_0)$.

В случае системы дифференциальных уравнений первое дифференциальное приближение любой разностной схемы представляет собой сингулярное возмущение исходной системы. При этом порядок системы увеличивается вдвое, но и на выбор начальных условий появляется ограничение в виде требования отсутствия погранслоев.

1.3. Каноническая форма первого дифференциального приближения

Чтобы избавить от сингулярности первое дифференциальное приближение, нужно дать этому понятию более широкую трактовку.

Определение 1. Двучлен

$$g_0(x, \partial_t x, \dots)\Delta t^p + g_1(x, \partial_t x, \dots)\Delta t^q,$$

где g_0, g_1 — нетривиальные многочлены относительно переменной x и ее производных по t, $p < q$, будем называть *первым дифференциальным приближением* (ПДП) разностного уравнения, если для всякого гладкого решение $x(t, \Delta t)$ этого уравнения верно

$$g_0(x, \partial_t x, \dots, \Delta t)\Delta t^p + g_1(x, \partial_t x, \dots, \Delta t)\Delta t^q|_{x=x(t,\Delta t)} = o(\Delta t^q).$$

При таком определении первое дифференциальное приближение перестает быть однозначно определенным, но становится определенным с точностью до членов того же порядка малости, что и члены, отброшенные при формировании этого приближения.

Среди первых дифференциальных приближений имеется такое, которое не содержит сингулярных возмущений. Это приближение называют каноническим первым дифференциальным приближением. Его применение сводит исследование сходимости разностной схемы к исследованию регулярного возмущения исходного дифференциального уравнения.

Пример 3. Обратимся к явной схеме

$$x(t + \Delta t) - x(t) = f(x(t))\Delta t$$

из примера 1. Одно из ПДП к этому уравнению мы уже знаем: точное решение разностного уравнения удовлетворяет соотношению

$$f(x) - \dot{x} - \frac{\Delta t}{2}\ddot{x} = o(\Delta t).$$

Продифференцируем его по t:

$$f'(x)\dot{x} - \ddot{x} - \frac{\Delta t}{2}\dddot{x} = o(\Delta t).$$

Умножим это следствие на $\Delta t/2$ и вычтем из исходного. Тогда получим другое ПДП:

$$f(x) - \dot{x} - \frac{\Delta t}{2}f'(x)\dot{x} = o(\Delta t).$$

Таким образом, канонической формой ПДП для явной схемы Эйлера будет

$$f(x) - \dot{x} - \frac{\Delta t}{2}f'(x)\dot{x} = 0.$$

С той же точностью $o(\Delta t)$ можно написать и

$$\dot{x} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2} f'(x)\right) f(x),$$

поэтому каноническая форма ПДП не определена однозначно.

Отыскание ПДП для заданной разностной схемы — задача чисто алгебраическая: путем дифференцирования исходного дифференциального уравнения можно явно выразить старшие производные через младшие, а далее остается исключить из дифференциального приближения старшие производные по этим формулам. Как видно, при этом не придется даже решать системы нелинейных уравнений.

1.4. Близость решений дифференциального и разностного уравнений

Как уже отмечалось выше, решения дифференциального уравнения и аппроксимирующего его разностного уравнения должны быть близки. Рассмотрим теперь, как именно решение ПДП позволяет оценить эту близость.

Допустим, что решение разностного уравнения — гладкая функция $x = x(t, \Delta t)$, которая удовлетворяет ПДП в канонической форме

$$F_0(x, \partial_t x)\Delta t^p + F_1(x, \partial_t x)\Delta t^q = o(\Delta t^q).$$

Подставляя сюда ряд

$$x(t, \Delta t) = x_0(t) + x_1(t)\Delta t + \dots,$$

видим, что x_0 — решение уравнения $F_0 = 0$, т. е. решение точного уравнения.

Если $q = p + 1$, то x_1 — решение уравнения

$$[F_0(x_0 + x_1\Delta t, \partial_t x_0 + \partial_t x_1 \Delta t)]_{\Delta t} + F_1(x_0, \partial_t x_0) = 0,$$

где $[\dots]_{\Delta t^r}$ означает коэффициент при Δt^r выражения, заключенного в скобки. Таким образом, начало ряда

$$x = x_0 + x_1\Delta t + \dots$$

для решения разностного уравнения и решения его первого дифференциального приближения совпадают. Это означает, что решение x_0 дифференциального уравнения и решение аппроксимирующего его разностного уравнения отличаются на величину

$$x_1\Delta t + \dots,$$

главный член которого совпадает с главным членом в разложении решения ПДП по степеням Δt.

Если $q > p + 1$, то x_1 удовлетворяет однородному линейному уравнению

$$[F_0(x_0 + x_1\Delta t, \partial_t x_0 + \partial_t x_1 \Delta t)]_{\Delta t} = 0.$$

Если x и x_0 совпадают при некотором значении t, как это обычно бывает при решении задачи Коши, то x_1 тождественно равно нулю. То же случится и со всеми другими членами, вплоть до члена при Δt^{q-p}. При этом совершенно не важно, равно ли выписанное выражение нулю или $o(\Delta t^q)$. Поэтому начало ряда

$$x = x_0 + x_1\Delta t + \dots + x_{q-p}\Delta t^{q-p} + \dots$$

для решения разностного уравнения и решения его первого дифференциального приближения совпадают.

Теорема 1. *Если решение x_0 дифференциального уравнения и гладкое решение аппроксимирующего его разностного уравнения совпадают при некотором значении t, то они отличаются на величину, главный член которого совпадает с главным членом в разложении решения ПДП по степеням Δt.*

Предположение о том, что при оценке ошибки, совершаемой при расчетах по разностной схеме, достаточно ограничиться главным членом в разложении ошибки, делается, вероятно, во всех употребляемых на практике методах оценки точности приближенного решения, как в методе Ричардсона – Калиткина [11], так и в методе, основанном на ПДП. Различие состоит лишь в способе вычисления этого первого члена — путем сгущения сетки или путем оценки регулярного возмущения в ПДП.

Пример 4. Обратимся к неявной схеме

$$x(t+\Delta t)-x(t)=f(x(t+\Delta t))\Delta t$$

из примера 1. Точное решение этого разностного уравнения удовлетворяет соотношению

$$f(x)-\dot{x}-\frac{\Delta t}{2}\left(\ddot{x}-2f'(x)\dot{x}\right)=o(\Delta t).$$

Продифференцируем его по t и умножим на $\Delta t/2$:

$$\frac{\Delta t}{2}(f'(x)\dot{x}-\ddot{x})=o(\Delta t).$$

Если теперь мы вычтем это следствие из исходного, то получим другое ПДП:

$$f(x)-\dot{x}+\frac{\Delta t}{2}f'(x)\dot{x}=0$$

или

$$\left(1-\frac{\Delta t}{2}f'(x)\right)\dot{x}=f(x).$$

В частности, для задачи Коши

$$\frac{dx}{dt}=1+x^2, \quad x(0)=0$$

мы получим

$$(1-\Delta t x)\frac{dx}{dt}=1+x^2, \quad x(0)=0.$$

Ее решение нетрудно найти в WolframAlpha:

$$t=\arctan x+\frac{\Delta t}{2}\ln(x^2+1).$$

Разрешив это уравнение относительно x, получим

$$\tan t=\tan\left(\arctan x+\frac{\Delta t}{2}\ln(x^2+1)\right)=x+\frac{\ln(1+\tan^2 t)}{1+\tan^2 t}\frac{\Delta t}{2}+o(\Delta t).$$

Поэтому ошибка при расчетах по разностной схеме равна

$$x-\arctan t=\frac{\ln(1+\tan^2 t)}{1+\tan^2 t}\frac{\Delta t}{2}+o(\Delta t).$$

Теорема 1 позволяет получить оценки для ошибки приближенного решения по оценкам для решения ПДП. В тех случаях, когда таковые не известны, можно решить ПДП численно, понадеявшись на то, что найденное таким путем приближенное решение по порядку величины близко к точному.

Более того, есть довольно большой класс задач, когда решение ПДП известно точно, — это тестовые задачи. Дело в том, что одним из основных способов исследования разностных схем является их изучение на тестовых примерах, решения для которых известны точно. При стандартном подходе это исследование проводится в форме серии компьютерных экспериментов. Однако при этом оценивается не только сама разностная схема, но и ее реализация на ЭВМ. Для организации расчетов по неявным схемам могут быть использованы различные численные методы решения систем нелинейных уравнений и вносятся ошибки, которые далеко не всегда можно оценить и далеко не всегда малы. Поэтому вполне можно забраковать схему из-за ее неудачной реализации. По графику же точного решение ПДП видны недостатки самой разностной схемы, и это без каких-либо сложных расчетов на ЭВМ.

2. Уравнения в частных производных

Обратимся теперь к уравнениям в частных производных. Пусть u — функция нескольких переменных, для простоты — двух x и y. Тогда в рамках метода конечных разностей дифференциальное уравнение

$$F(x, y, u, u_x, u_y, \dots) = 0$$

заменяют на разностное, которое связывает x, y и значения u в точках вида $(x + n\Delta x, y + m\Delta y)$. Тем же путем, что и с ОДУ, мы можем поставить вопрос об отыскании гладкого решения этого уравнения и разложить разностное уравнение в ряд Тейлора, который будет иметь вид

$$\sum F_{ij}(x, y, u, u_x, u_y, \dots)\Delta x^i \Delta y^j = 0,$$

коэффициенты которого — многочлены относительно своих аргументов.

Чтобы можно было говорить об аппроксимации дифференциального уравнения разностным, нужно, чтобы в ряду

$$\sum F_{ij}(x, y, u, u_x, u_y, \dots)\Delta x^i \Delta y^j$$

содержался моном $m_0 = \Delta x^{i_0} \Delta y^{j_0}$, на который делились бы все прочие мономы с ненулевыми коэффициентами и коэффициент при котором сводился бы к исходному уравнению в частных производных. Тогда разностное уравнение можно переписать в виде

$$F(x, y, u, u_x, u_y, \dots) + \sum F_{ij}(x, y, u, u_x, u_y, \dots)\Delta x^{i-i_0} \Delta y^{j-j_0} = 0.$$

В таком случае нетрудно доказать, что гладкое решение в пределе $dx, dy \to 0$ дает решение исходного дифференциального уравнения.

Имеющегося в Sage инструментария достаточно для отыскания первых членов ряда для разностного уравнения в Sage.

Пример 5. Аппроксимируем нелинейное уравнение переноса

$$\frac{\partial u}{\partial x} + u\frac{\partial u}{\partial y} = 0$$

разностным уравнением

$$(u(x+\Delta x, y) - u(x,y))\Delta y + u(x,y)(u(x, y+\Delta y) - u(x,y))\Delta x = 0.$$

Разложим это уравнение в ряд:

```
sage: var("x,y,dx,dy")
(x, y, dx, dy)
sage: u=function("u")(x,y)
sage: eq=(u.subs(x=x+dx) - u)*dy + u*(u.subs(y=y+dy) - u)*dx
sage: taylor(eq,(dx,0),(dy,0),5)
   1/24*dx*dy^4*u(x, y)*diff(u(x, y), y, y, y, y)
+ 1/24*dx^4*dy*diff(u(x, y), x, x, x, x)
+ 1/6*dx*dy^3*u(x, y)*diff(u(x, y), y, y, y)
+ 1/6*dx^3*dy*diff(u(x, y), x, x, x)
+ 1/2*dx*dy^2*u(x, y)*diff(u(x, y), y, y)
+ 1/2*dx^2*dy*diff(u(x, y), x, x)
+ (u(x, y)*diff(u(x, y), y)
+ diff(u(x, y), x))*dx*dy
```

Здесь все мономы делятся на моном $\Delta x \Delta y$, коэффициент при котором совпадает с левой частью исходного уравнения.

Введение понятия первого дифференциального приближения к разностной схеме осложнено теперь тем, что выбор второго члена зависит от выбора порядка на мономах полиномиального кольца $k[\Delta x, \Delta y]$. Чтобы избавить от этого понятие ПДП, воспользуемся идеями степенной геометрией [12, 13]. Поставим в соответствие моному $\Delta x^i \Delta y^j$ точку $(i,j) \in \mathbb{Z}^2$ и рассмотрим множество M всех мономов, входящих в разложение разностного уравнения с ненулевыми коэффициентами. Проведем на плоскости $\mathbb{Z}^2$ прямую L, обладающую следующими свойствами:

1) на прямой лежат хотя бы две точки из M;

2) среди точек M лишь точка m_0 лежит ниже этой прямой;

3) число точек из M, лежащих на прямой L, конечно.

Этой прямой поставим в соответствие дифференциальное приближение схемы, получаемое из исходного ряда, где отсекаются все члены, мономы которых лежат строго выше L. Если существует в точности одна прямая, обладающая всеми перечисленными свойствами, будем говорить о первом дифференциальном приближении без уточнения прямой L.

В простых примерах имеется только одна грань, обладающая всеми перечисленными свойствами.

Пример 6. Возвращаясь к примеру 5, видим, что M образовано мономами

$$\Delta x^i \Delta y, \quad \Delta x \Delta y^j, \quad , i, j = 1, 2, \ldots$$

Поэтому в качестве L можно взять прямую, соединяющую мономы $\Delta x^2 \Delta y$ и $\Delta x \Delta y^2$, и первым дифференциальным приближением будет

$$\frac{\partial u}{\partial x} + u\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{u\Delta y}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0.$$

Пусть на прямой L: $ai + bj = c$, лежит r мономов $\Delta x^{i_k} \Delta y^{j_k}$, $k = 1, 2, \ldots, r$. Тогда $c = ai_k + bj_k$.

Поэтому в подстановке

$$\Delta x = \alpha\varepsilon^a, \quad \Delta y = \beta\varepsilon^b \tag{3}$$

мы преобразуем наше разностное уравнение в ряд по степеням ε:

$$\varepsilon^{ai_0+bj_0} F\alpha^{i_0}\beta_{j_0} + \varepsilon^c \sum_L F_k \alpha^{i_k}\beta_{j_k} + o(\varepsilon^c) = 0.$$

Разность $s = c - (ai_0 + bj_0) > 0$ вполне естественно по аналогии с одномерным случаем называть порядком аппроксимации исходного уравнения разностным. Переход к дифференциальному приближению сводится к удалению $o(\varepsilon^c)$, а подстановка фиксирует способ, каким Δx, Δy стремятся к нулю.

Нетрудно видеть, что ПДП любой разностной схемы и в этом случае представляет собой сингулярное возмущение исходной системы. Мы полагаем, что методы степенной геометрии позволят построить гладкое решение, однако пока мы сделали лишь первые два шага в этом направлении.

3. Системы уравнений в частных производных

Каждое из уравнений системы уравнений в частных производных можно аппроксимировать разностным и для каждого из них написать ПДП. В этом случае мы получим систему уравнений в частных производных, сингулярно возмущенных двумя параметрами — шагами Δx и Δy. Эта новая система может оказаться несовместной или совместной при выполнении некоторых условий, которые не снимаются при $\Delta x, \Delta y \to 0$.

Пример 7. Аппроксимируем систему $u_x = f(x, y)$, $u_y = g(x, y)$, левые части которой удовлетворяют условиям разрешимости $f_y = g_x$, системой разностных уравнений

$$\begin{cases} (u(x + \Delta x, y) - u(x, y))\Delta y = f(x, y)\Delta x\Delta y, \\ (u(x, y + \Delta y) - u(x, y))\Delta x = g(x, y)\Delta x\Delta y. \end{cases}$$

Разложим их левые части в ряды Тейлора

$$\begin{cases} (u_x - f)\Delta x\Delta y + \frac{1}{2}u_{xx}\Delta x^2\Delta y + \cdots = 0, \\ (u_y - g)\Delta x\Delta y + \frac{1}{2}u_{yy}\Delta x\Delta y^2 + \cdots = 0. \end{cases}$$

Грань L определяется однозначно, и в первом приближении мы имеем

$$\begin{cases} u_x - f + \frac{\Delta x}{2}u_{xx} = 0, \\ u_y - g + \frac{\Delta y}{2}u_{yy} = 0. \end{cases}$$

Продифференцируем первое уравнение по x, второе — по y и вычтем одно уравнение из другого. В результате получится их дифференциальное следствие

$$u_{xxy}\Delta x = u_{xyy}\Delta y.$$

Это следствие означает, что на гладком решении системы разностных уравнений, которыми мы пытаемся аппроксимировать исходную пару уравнений, выполняется соотношение

$$u_{xxy} : u_{xyy} = \Delta y \ : \Delta x,$$

аналогов которого в исходной дифференциальной системе не было. Поэтому не всякое решение исходного уравнения можно получить путем решения разностного уравнения.

Отмеченный дефект встречается очень часто, однако на практике он известен лишь своими проявлениями. Мы полагаем, что истинные причины, из-за которых расчеты по «плохим» разностным схемам «срываются» и «разваливаются», состоят в том, что приближенные решения, найденные по этим схемам, удовлетворяют дополнительным соотношениям и по этой причине не могут в пределе $\Delta x, \Delta y \to 0$ переходить в точные решения, этим соотношениям не удовлетворяющие.

Мы полагаем, что условие строгой совместности разностной схемы, введенное в [14], можно и нужно трактовать как условие отсутствия такого рода нетривиальных условий.

Определение 2. Будем говорить, что система разностных уравнений *строго совместна*, если для любого частного решения исходной системы дифференциальных уравнений можно указать такое гладкое решение системы разностных уравнений, которое в пределе переходит в заданное решение исходной системы.

Определение 3. Будем говорить, что система разностных уравнений *строго совместна в первом порядке* (или, при необходимости этого уточнения, относительно грани L), если для любого частного решения исходной системы дифференциальных уравнений можно указать такое гладкое решение системы дифференциальных приближений разностных уравнений, которое в пределе переходит в заданное решение исходной системы.

На деле проверка строгой совместимости сводится к выяснению, можно ли получить из ПДП дифференциальные следствия, главные члены которых отличны от дифференциальных следствий из исходной системы. Поясним это несколькими примерами.

Пример 8. Аппроксимируем систему Коши – Римана $u_x = v_y$, $u_y = -v_x$, системой разностных уравнений

$$\begin{cases} (u(x+\Delta x) - u(x,y))\Delta y = (v(x, y+\Delta y) - v(x,y))\Delta x, \\ (u(x,y) - u(x, y+\Delta y))dx = -(v(x+\Delta x, y) - v(x,y))dx. \end{cases}$$

Разложим их левые части в ряды Тейлора

$$\begin{cases} (u_x - v_y)\Delta x\Delta y + \frac{1}{2}(u_{xx}\Delta x - v_{yy}\Delta y)\Delta x\Delta y + \dots = 0, \\ (u_y + v_x)\Delta x\Delta y + \frac{1}{2}(u_{yy}\Delta y + v_{xx}\Delta x)\Delta x\Delta y + \dots = 0. \end{cases}$$

Грань L определяется однозначно, и в первом приближении мы имеем

$$\begin{cases} u_x - v_y + \frac{1}{2}(u_{xx}\Delta x - v_{yy}\Delta y) = 0, \\ u_y + v_x + \frac{1}{2}(u_{yy}\Delta y + v_{xx}\Delta x) = 0. \end{cases}$$

Тем же приемом, что и в примере 7, мы получим

$$u_{xx} + u_{yy} + \frac{1}{2}\left(\partial_{xx}(u_x + v_y)\Delta x + \partial_{yy}(u_y - v_x)\Delta y\right) = 0.$$

Однако в данном случае главный член дает уравнение $\Delta u = 0$, которое является дифференциальным следствием исходной системы. Поэтому появление этого дифференциального следствия не дает никаких дополнительных ограничений на решение.

В отличие от систем обыкновенных дифференциальных уравнений, исследование совместности системы дифференциальных уравнений в частных уравнениях является нетривиальной и сложной задачей. Для ее решения разработан ряд компьютерных инструментов, в том числе DifferentialThomas в Maple [15]. Поэтому проверка строгой совместности в первом порядке — алгоритмически разрешимая задача, но требует весьма значительных ресурсов, и прежде всего большого объема памяти.

На практике не вполне совместные системы возникают в теории вязкой несжимаемой жидкости, когда к системе уравнений Навье – Стокса добавляют их дифференциальные следствия и не заботятся о согласовании аппроксимации исходных уравнений и этих следствий. Как известно, динамика несжимаемой жидкости на плоскости описывается системой уравнений Навье – Стокса:

$$\begin{cases} F^1: & u_x + v_y = 0, \\ F^2: & u_t + uu_x + vu_y + p_x - \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2 u = 0, \\ F^3: & v_t + uv_x + vv_y + p_y - \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2 v = 0. \end{cases} \tag{4}$$

Эти уравнения имеют дифференциальное следствие

$$\left(F^2_x - F^1_t\right) + F^3_y + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2 F^1 = 0,$$

или

$$\nabla^2 p - 2u_x v_y + 2u_y v_x = 0. \tag{5}$$

Поэтому исходную систему можно заменить на эквивалентную ей инволютивную систему

$$\begin{cases} F^1: & u_x + v_y = 0, \\ F^2: & u_t + uu_x + vu_y + p_x - \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2 u = 0, \\ F^3: & v_t + uv_x + vv_y + p_y - \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2 v = 0, \\ F^4: & \nabla^2 p - 2u_x v_y + 2u_y v_x = 0. \end{cases} \tag{6}$$

Четвертое уравнение весьма удобно использовать при численном решении уравнений Навье – Стокса, поэтому часто аппроксимируют не исходную систему, а всю систему (6). Исследование совместимости полученной таким путем аппроксимации требует значительных ресурсов, здесь мы ограничимся кратким рассмотрением одного конкретного примера.

Пример 9. В статье [16] для аппроксимации системы (6) ввели операторы сдвига σ_i по i переменной и заменили дифференциальные операторы разностными:

$$\mathrm{D_i} = \frac{\sigma_i - \sigma_i^{-1}}{2h}, \quad \mathrm{D_t} = \frac{\sigma_t - 1}{\tau}, \quad \tilde{\Delta} = \frac{\sigma_1 - 2 + \sigma_1^{-1}}{h^2} + \frac{\sigma_2 - 2 + \sigma_2^{-1}}{h^2}.$$

В результате получили систему разностных уравнений

$$\begin{cases} F^1: & \mathrm{D}_1(u) + \mathrm{D}_2(v) = 0, \\ F^2: & \mathrm{D_t}(u) + u\,\mathrm{D}_1(u) + v\,\mathrm{D}_2(u) + \mathrm{D}_1(p) - \frac{1}{\mathrm{Re}}\tilde{\Delta}(u) = 0, \\ F^3: & \mathrm{D_t}(v) + u\,\mathrm{D}_1(v) + v\,\mathrm{D}_2(v) + \mathrm{D}_2(p) - \frac{1}{\mathrm{Re}}\tilde{\Delta}(v) = 0, \\ F^4: & \tilde{\Delta}(p) - 2\,\mathrm{D}_1(u)\,\mathrm{D}_2(v) + 2\,\mathrm{D}_1(v)\,\mathrm{D}_2(u) = 0. \end{cases} \tag{7}$$

Мы исследовали ее совместимость. Как следствие первых трех уравнений системы (7) и тем же путем, что и уравнение (5) в дифференциальном случае, получается уравнение

$$\left(\mathrm{D}_1(F^2) - \mathrm{D}_t(F^1)\right) + \mathrm{D}_2(F^3) + \frac{1}{\mathrm{Re}}\tilde{\Delta}(F^1) = 0,$$

или

$$\left(\mathrm{D}_1{}^2 + \mathrm{D}_2{}^2\right) p + \; + \mathrm{D}_1\left(u\,\mathrm{D}_1\,u\right) + \mathrm{D}_1\left(v\,\mathrm{D}_2\,u\right) + \mathrm{D}_2\left(u\,\mathrm{D}_1\,v\right) + \mathrm{D}_2\left(v\,\mathrm{D}_2\,v\right) = 0. \qquad (8)$$

Это уравнение, однако, отличается от четвертого уравнения системы (7). В ПДП разность этих уравнений дает еще следствие,

$$\begin{aligned} -h^2\Big(&-\frac{Re^2p_xvv_x}{2} + \frac{Re^2p_yuu_y}{2} + \frac{Re^2u^2u_yv_x}{2} + \frac{Re^2uu_yvv_y}{2} + \frac{Re^2uu_yv_t}{2} + \\ &+ \frac{Re^2uvv_xv_y}{2} - \frac{Re^2u_tvv_x}{2} - \frac{Re^2u_yv^2v_x}{2} + \frac{Rep_{xy}u_y}{2} - \frac{Rep_{xy}v_x}{2} - \\ &- \frac{3Rep_xv_{xy}}{2} + \frac{Rep_{yy}v_y}{2} - \frac{Rep_yv_{yy}}{2} - \frac{Reuu_yv_{yy}}{2} + 2Reuv_{xy}v_y - \frac{Reu_{ty}v_x}{2} - \\ &- \frac{3Reu_tv_{xy}}{2} - Reu_yvv_{xy} + \frac{Reu_yv_{tx}}{2} + \frac{Reu_yv_xv_y}{2} - \frac{Revv_{xy}v_x}{2} + \frac{Rev_{ty}v_y}{2} - \\ &- \frac{Rev_tv_{yy}}{2} + \frac{Rev_y^3}{2} - \frac{p_{yyyy}}{2} - \frac{3u_yv_{xyy}}{2} - \frac{v_{xyy}v_x}{2} - v_{xy}^2 - 2v_{yyy}v_y - v_{yy}^2\Big) = 0, \qquad (9) \end{aligned}$$

которое не является следствием исходной дифференциальной системы (6).

Расчеты выполнены с использованием пакета SymPy и доступны по следующему адресу: https://github.com/blinkovua/sharing-blinkov/blob/master/NavierStokes2D-PDA-pepan.ipynb

Заключение

В настоящей работе мы рассмотрели проблему оценки ошибки конечно-разностных методов решения дифференциальных уравнений с позиций компьютерной алгебры. За основу мы взяли понятие первого дифференциального приближения, которому дали универсальное определение, вписав это понятие в круг идей степенной геометрии. Мы убедились, что вычисление первого приближения в символьном виде легко выполняется в система компьютерной алгебры штатными средствами. Сведение исследования разностных схем к исследованию дифференциальных приближений позволило дать такое определение строгой совместности, проверка которой выполняется в пакете DifferentialThomas или его аналогах.

Список литературы

1. *Годунов С. К.* Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Математический сборник. 1959. Т. 47, № 3. С. 271–306.
2. *Яненко Н. Н., Шокин Ю. И.* О первом дифференциальном приближении разностных схем для гиперболических систем уравнений // Сибирский математический журнал. 1969. Т. 10, № 5. С. 1173–1187.
3. *Шокин Ю. И.* Метод дифференциального приближения. Новосибирск : Наука ; АН СССР. Сибирское отделение. Институт теоретической и прикладной механики, 1979. 222 с.
4. *Шокин Ю. И., Яненко Н. Н.* Метод дифференциального приближения. Применение к газовой динамике. Новосибирск : Наука ; АН СССР. Сибирское отделение. Институт теоретической и прикладной механики. Вычислительный центр (Красноярск), 1985. 364 с.

5. *Levin A.* Difference Algebra. Springer, 2008. 521 p. https://doi.org/10.1007/978-1-4020-6947-5
6. *van der Put M., Singer M. F.* Galois Theory of Difference Equations. Springer, 1997. 188 p. https://doi.org/10.1007/BFb0096118
7. *Hendriks P. A.* Algebraic aspects of linear differential and difference equations. University of Groningen, 1996. PhD thesis. 106 p.
8. Weierstrass K. Über der Theorie der analytischen Facultäten // Mathematische werke. Berlin : Mayer & Müller, 1894. Vol. 1. P. 153–221.
9. *Grammaticos B., Nijhoff F. W., Ramani A.* Discrete Painleve equations // The Painleve Property, One Century Later. Berlin, Heidelberg : Springer, 1999. P. 413–516.
10. *Васильева А. Б., Бутузов В. Ф.* Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений. Москва : Высшая школа, 1990. 208 с.
11. *Калиткин Н. Н., Альшин А. Б., Альшина Е. А., Рогов Б. В.* Вычисления на квазиравномерных сетках. Москва : Наука ; Физматлит, 2005. 204 с.
12. *Брюно А. Д.* Решение алгебраического уравнения алгоритмами степенной геометрии. Москва : Наука, 1998. 288 с.
13. *Брюно А. Д.* Степенная геометрия в алгебраических и дифференциальных уравнениях // Препринты ИПМ № 34. Москва : ИПМ имени Келдыша, 2017. С. 1–18.
14. *Zhang Xiaojing, Gerdt V. P., Blinkov Yu. A.* Algebraic Construction of a Strongly Consistent, Permutationally Symmetric and Conservative Difference Scheme for 3D Steady Stokes Flow // Symmetry. 2019. Vol. 11, № 2. URL: https://www.mdpi.com/2073-8994/11/2/269 (дата обращения: 10.05.2021).
15. *Robertz D.* Formal Algorithmic Elimination for PDEs. Springer, 2014. 284 p.
16. *Hans Johnston, Jian-Guo Liu.* Finite difference schemes for incompressible flow based on local pressure boundary conditions // Journal of Computational Physics. 2002. № 180. P. 120–154.

References

1. Godunov S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik*, 1959, vol. 47, no. 3, pp. 271–306 (in Russian).
2. Yanenko N. N., Shokin Yu. I. The first differential approximation of difference schemes for hyperbolic systems of equations. *Siberian Mathematical Journal*, 1969, vol. 10, no. 5, pp. 868–880. https://doi.org/10.1007/BF00971662
3. Shokin Yu. I. *Metod differentsial'nogo priblizheniya* [Differential Approximation Method]. Novosibirsk, Nauka, AN SSSR, 1979. 222 p. (in Russian).
4. Shokin Yu. I., Yanenko N. N. *Metod differencial'nogo priblizhenija. Primenenie k gazovoj dinamike* [Differential Approximation Method. Application to Gas Dynamics]. Novosibirsk, Nauka, AN SSSR, 1985. 364 p. (in Russian).
5. Levin A. *Difference Algebra*. Springer, 2008. 521 p. https://doi.org/10.1007/978-1-4020-6947-5
6. van der Put M., Singer M. F. *Galois Theory of Difference Equations*. Springer, 1997. 188 p. https://doi.org/10.1007/BFb0096118
7. Hendriks P. A. Algebraic aspects of linear differential and difference equations. University of Groningen, 1996. PhD thesis. 106 p.
8. Weierstrass K. Über der Theorie der analytischen Facultäten. *Mathematische werke*. Berlin : Mayer & Müller, 1894, vol. 1, pp. 153–221.
9. Grammaticos B., Nijhoff F. W., Ramani A. Discrete Painleve equations. In: *The Painleve Property, One Century Later*. Berlin, Heidelberg, Springer, 1999, pp. 413–516.
10. Vasil'eva A. B., Butuzov V. F. *Asimptoticheskie metody v teopii singuljapnyh vozmushchenij* [Asymptotic Methods in the Theory of Singular Perturbations]. Moscow, Vysshaja shkola, 1990. 208 p. (in Russian).

11. Kalitkin N. N., Al'shin A. B., Al'shina E. A., Rogov B. V. *Vychislenija na kvazi-ravnomernykh setkakh* [Calculations on Quasi-uniform Grids]. Moscow, Nauka, Fizmatlit, 2005. 204 p. (in Russian).
12. Bruno A. D. *Reshenie algebraicheskogo uravnenija algoritmami stepennoj geometrii* [Solving an Algebraic Equation by Algorithms of Power Geometry]. Moscow, Nauka, 1998. 288 p. (in Russian).
13. Bruno A. D. Power Geometry in Algebraic and Differential Equations. *Preprinty IPM No. 34*. Moscow, IPM imeni Keldysha, 2017, pp. 1–18 (in Russian).
14. Zhang Xiaojing, Gerdt V. P., Blinkov Yu. A. Algebraic Construction of a Strongly Consistent, Permutationally Symmetric and Conservative Difference Scheme for 3D Steady Stokes Flow. *Symmetry*, 2019, vol. 11, no. 2. Available at: https://www.mdpi.com/2073-8994/11/2/269 (accessed 10 May 2021).
15. Robertz D. *Formal Algorithmic Elimination for PDEs*. Springer, 2014. 284 p.
16. Hans Johnston, Jian-Guo Liu. Finite difference schemes for incompressible flow based on local pressure boundary. *Journal of Computational Physics*, 2002, no. 180, pp. 120–154.

Поступила в редакцию / Received 29.06.2021
Принята к публикации / Accepted 15.07.2021
Опубликована / Published 30.11.2021