А. А. САМАРСКИЙ

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

1. Применение численных методов для прикладных целей фактически привело к появлению нового мощного метода теоретического исследования в науке и технике — вычислительного эксперимента [1]. Особенно велики успехи этого метода в физике (в ядерной физике, в физике плазмы и др.). Вычислительный эксперимент условно можно разбить на пять этапов: 1) выбор физического приближения («физической модели») и адекватная математическая постановка задачи (выбор математической модели), 2) разработка вычислительного алгоритма для ЭВМ, 3) программирование алгоритма для ЭВМ, 4) проведение расчетов на ЭВМ, 5) анализ результатов расчетов, сравнение с физическим экспериментом, пересмотр и уточнение модели. Таков один технологический цикл вычислительного эксперимента. Характерные черты вычислительного эксперимента состоят в следующем. В рамках выбранной модели проводится расчет не одного, а нескольких вариантов для различных значений параметров, управляющих процессом; это позволяет провести детальное изучение физического процесса в рамках принятой модели.

Далее возможен переход к более полной математической модели (учитывающей дополнительные физические эффекты) и оценке границ применимости первой модели. Удачный выбор модели позволяет не только объяснить известные факты, но и предсказать новые физические эффекты. Ограничусь ссылкой на эффект $T$-слоя, открытый в вычислительном эксперименте [2] и подтвержденный через несколько лет с помощью физического эксперимента.

2. Изучением математических моделей физики занимается математическая физика. Обычно уравнения математической физики выражают законы сохранения (массы, количества движения, энергии, заряда и т. д.). Современная физика высоких скоростей и энергий (например, физика высокотемпературной плазмы) приводит к системам нелинейных дифференциальных уравнений с частными производными.

Чтобы получить математическую модель надо, кроме уравнений, задать коэффициенты уравнений (это могут быть, например, коэффициенты теплопроводности, электропроводности, диффузии, вязкости и др.), дополнительные термодинамические соотношения (уравнения состояния), геометрию области, краевые и начальные условия. Коэффициенты и уравнения состояния являются нелинейными функциями температуры и плотности среды и отражают свойства среды.

Для процессов в плотной плазме используются магнитогидродинамические модели (МГД-модели), описывающие газодинамические движения в электромагнитном поле. Если необходимо учитывать излучение света, то к уравнениям газодинамики и Максвелла присоединяются уравнения переноса излучения, что приводит к уравнениям магнитной радиационной гидродинамики (МРГД-моделей).

Много новых математических МГД-моделей возникает в связи с проблемой управляемого термоядерного синтеза (УТС).

Здесь требуется выяснить условия, при которых дейтериево-тритиевую (ДТ-) плазму можно нагреть и сжать до такой степени, что начнется реакция термоядерного синтеза (горения). Существует ряд проектов получения такой «термоядерной плазмы» — сжатие и удержание плазмы магнитным полем в так называемых установках «Токамак», использование для сжатия и нагрева ДТ-мишени энергии лазерного луча (ЛТС) (см. [3]) или энергии релятивистского электронного пучка (РЭП) и др. МГД-модели представляют собой сложные системы нелинейных уравнений в частных производных. Их изучение традиционными методами общей теории дифференциальных уравнений необходимо, но малоэффективно. Удается найти лишь некоторые автомодельные решения для весьма частных случаев, однако общих результатов об условиях разрешимости, единственности, корректности задачи установить не удается.

Между тем метод вычислительного эксперимента позволяет провести всестороннее изучение различных проектов УТС в МГД-приближении — найти условия термоядерного горения, оценить влияние различных физических факторов на горение, устойчивость процесса по отношению к возмущениям формы мишени и импульса энергии, объяснить физические эксперименты и оценить применимость выбранной математической модели.

3. Тесный контакт физиков и математиков при проведении вычислительного эксперимента оказывается чрезвычайно плодотворным. Именно при исследовании физических задач возникают часто новые математические постановки, новые идеи, методы. Так, например, вычислительные эксперименты стимулировали развитие разделов математической физики, связанных с исследованием уравнений переноса нейтронов и излучения, уравнений диффузии, систем уравнений гиперболического типа, уравнений с разрывными коэффициентами, нелинейных уравнений и др. Несколько слов стоит сказать о кинетических уравнениях Власова, описывающих бесстолкновительную плазму. Лишь в последние 5 лет было начато систематическое изучение системы Власова и установлены условия ее разрешимости, единственности для двух- и трехмерных задач (А. А. Арсеньев [4]). Эта система уравнений мало приспособлена для численного решения, и сейчас на первый план выступает проблема построения более простых моделей, допускающих эффективные вычислительные алгоритмы (см., например, [5]).

Задачи физики плазмы замечательны тем, что математические модели для них фактически содержат все типичные задачи математической физики.

Поэтому мы ограничимся здесь моделями для плазмы.

4. Математические модели плазмы очень сложны и представляют собой системы нелинейных дифференциальных и интегродифференциальных уравнений с частными производными. Эти системы не поддаются детальному теоретическому исследованию в целом (за исключением, быть может, простейших случаев). Однако ряд свойств можно понять, если рассматривать отдельные уравнения и их линейные модели. Всю задачу можно разбить на отдельные модули (блоки). Так, например, МГД-задачу можно разбить на ряд модулей: 1) уравнения движения и неразрывности при заданной температуре и электромагнитных полях, 2) уравнения для внутренней энергии (температуры) при заданных скорости, плотности и электромагнитном поле, 3) уравнения Максвелла при заданной газодинамике. Модульный анализ задачи и предварительное изучение свойств каждого из модулей позволяют получить информацию о характере решения, о свойствах всей системы уравнений. Важную роль для предварительного изучения задачи играют и автомодельные решения, которые можно найти для некоторых частных случаев (например, решения типа бегущей волны). Эти частные решения являются тестами для численных методов.

5. Одной и той же физической задаче могут соответствовать несколько математических моделей, эквивалентных друг другу (соответствующих одному и тому же физическому приближению). Так, например, стационарное распределение температуры в однородной среде, на границе $\Gamma$ которой задана постоянная во времени температура, описывается задачей Дирихле для уравнения Лапласа. С другой стороны, эта задача эквивалентна интегральному уравнению вдоль $\Gamma$ для плотности потенциала двойного слоя, через который выражается искомое распределение температуры в среде. Выбор той или иной эквивалентной модели делается в зависимости от численного метода. Следует предпочесть ту модель, которая лучше приспособлена

для численного решения на ЭВМ, для которой имеются надежные экономичные алгоритмы, программы. Если говорить проще, то выбирать надо ту модель, которая позволяет найти решение задачи быстрее и дешевле (за меньшее машинное время).

Приведем два примера, иллюстрирующие важность удачного выбора математической модели в рамках заданного физического приближения.

6. Задачи динамики волновых процессов. В нелинейной оптике и физике плазмы большой интерес представляют в настоящее время задачи о динамике волновых полей, о локализации энергии колебаний электрического поля в окрестности некоторой точки, например, задача о самофокусировке света в нелинейной среде. Медленно меняющаяся амплитуда электрического поля и плазмы описывается уравнением [6]

$$2i\frac{\partial E}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial E}{\partial r}\right)+|E|^2E=0,$$

$$r>0;\ t>0\,(i=\sqrt{-1}). \qquad (1)$$

Это — нелинейное уравнение шредингеровского типа; его численное решение затруднено. Сведем его к уравнениям газодинамики

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v)=0,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}+v\frac{\partial v}{\partial r}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r}+g=0, \qquad (2)$$

для которых имеются разработанные численные методы. Здесь $\rho=|E|^2$; $E=\rho^{1/2}e^{i\Phi}$, $v=\partial\Phi/\partial r$ — групповая скорость колебаний. «Уравнение состояния» имеет экзотический вид

$$p=-\frac{1}{4}\rho^2\left[\frac{1}{\rho r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{r}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial r}\right)+1\right],$$

а

$$g=\frac{1}{4}r\left(\frac{1}{\rho r}\frac{\partial\rho}{\partial r}\right)^2.$$

Удобно ввести энергетическую лагранжеву координату $s = \int_0^r \rho r dr$ и решать уравнения газодинамики (2) при помощи стандартных схем на фиксированной сетке по координате $s$.

Такой подход оказался весьма эффективным и позволил исследовать динамику самофокусировки в кубической среде и решить ряд других задач.

7. Равновесные конфигурации плазмы в тороидальном магнитном поле [7].

Приведем еще один пример, иллюстрирующий важность преобразования модели к эквивалентному виду, удобному для применения численных методов.

Одной из актуальных задач физики является отыскание возможных равновесных конфигураций высокотемпературной плазмы, удерживаемой магнитным полем. Равновесие в тороидальном плазменном шнуре описывается уравнением для функции потока $\psi$

$$r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-ri_\varphi,$$

$$j_\varphi = r\frac{\partial p}{\partial\psi}+\frac{1}{r}f\frac{\partial f}{\partial\psi}, \tag{3}$$

где $j_\varphi$ — тороидальная компонента плотности тока, $p$ — давление плазмы, $f=rB_\varphi$, $B$ — тороидальная компонента магнитного поля. Для плазмы внутри идеально проводящего кожуха к (3) надо присоединить краевое условие $\psi=0$ на кожухе. Найти линии уровня решения уравнения (3) при заданных $p(\psi)$ и $f(\psi)$. Для численного решения этой задачи удобно обратить переменные и сформулировать задачу для новых неизвестных функций $r(\psi, \theta)$, $z(\psi, \theta)$ от $\psi$ и некоторой второй координаты $\theta$. При этом граница области (кожуха) является координатной поверхностью, а исходная область отображается в прямоугольник. Для $r(\psi, \theta)$ и $z(\psi, \theta)$ получаем квазилинейные эллиптические уравнения

$$Lr=\frac{\partial}{\partial\psi}\left(\mu r\frac{\partial r}{\partial\psi}\right)+\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\mu r}\frac{\partial r}{\partial\theta}\right)=0;\quad Lz=0, \tag{4}$$

где $\mu=\mu(\psi, \theta)$ определяется из нелинейного дифференциального уравнения первого порядка.

Переход от (3) к (4) позволяет развить новый подход для численного решения задач МГД-равновесия, который является более точным и исключает трудоемкую процедуру построения формы магнитной поверхности.

8. От математической модели мы переходим к численным методам. В теории численных методов решения задач математической физики есть два основных вопроса:

1) построение и исследование разностных схем для уравнений математической физики; априорная и апостериорная оценка их свойств (сходимость, точность, устойчивость),

2) решение разностных уравнений.

Надо сказать, что построение вычислительных алгоритмов высокого качества не является простым делом, как это иногда кажется «чистым» математикам и «чистым» физикам. Имеются известные примеры, иллюстрирующие этот факт [1].

Очевидно, следует требовать, чтобы вычислительные алгоритмы отражали модульную структуру исходной задачи. Предварительное изучение алгоритмов для отдельных модулей должно облегчить построение эффективного алгоритма для всей задачи. Пригодность алгоритма для частных случаев является необходимым условием его применимости вообще.

Линейные задачи играют роль моделей для нелинейных задач: аналогичная связь должна существовать и между соответствующими разностными схемами. Например, естественно требовать, чтобы линеаризованные разностные схемы для уравнений газовой динамики хорошо аппроксимировали уравнения акустики — линейную модель дифференциальных уравнений газодинамики.

Многовариантный характер расчетов в ходе вычислительного эксперимента предъявляет жесткие требования к алгоритмам, а также к соответствующему математическому обеспечению ЭВМ. В процессе решения одной проблемы может смениться вид нелинейности и тип уравнения, меняться геометрия и топология области, сетки, коэффициенты уравнения, могут одновременно протекать разномасштабные процессы (например, газодинамическое движение и горение) и т. д. Для правильного описания основных характеристик сложных нелинейных процессов численные методы должны обладать достаточной разрешающей способностью, т. е. точностью, при допустимом объеме вычислений. При дискретизации задач сплошной среды, т. е. при переходе от дифференциальных уравнений к разностным, естественно требовать, чтобы полученная дискретная модель правильно отражала основные свойства сплошной среды. Такими свойствами являются законы сохранения массы, количества движения, полной энергии, а также уравнения баланса внутренней и кинетической энергии, энергии электромагнитного поля и др. Разностные схемы, обладающие такими же свойствами на сетке, мы называем полностью консервативными схемами [8], [9].

**9.** Можно указать простой эвристический прием получения полностью консервативных схем, который с успехом был применен для уравнений газодинамики и магнитной гидродинамики [8], а также в случае кинетического уравнения Ландау [10]. Пусть дано несколько эквивалентных систем дифференциальных уравнений, например, системы (I), (II), (III), причем каждая из них переходит в другую с помощью тождественных преобразований. Примером могут быть одномерные уравнения газодинамики в переменных Лагранжа

$$(1)\quad \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x},$$

$$(2)\quad \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{\rho}\right) = \frac{\partial v}{\partial x},$$

$$(3)\quad \frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon + \frac{v^2}{2}\right) = -\frac{\partial}{\partial x}(pv)$$

$$(1)\quad \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x},$$
$$(2)\quad \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{\rho}\right) = \frac{\partial v}{\partial x},\qquad \text{II}$$
$$(3')\quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -p\frac{\partial v}{\partial x};$$

$$(1)\quad \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x},$$
$$(2)\quad \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{\rho}\right) = \frac{\partial v}{\partial x},\qquad \text{III}$$
$$(3'')\quad \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{\rho}\right) = -\rho\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{\rho}\right).$$

Эти три системы отличаются друг от друга только третьим уравнением.

Требования полной консервативности означает, что схема, аппроксимирующая некоторую из этих систем, должна преобразовываться к виду, аппроксимирующему другую эквивалентную систему.

**10.** Для практического нахождения полностью консервативных схем используются интегро-интерполяционный метод и вариационно-разностные методы. Особенно эффективным при получении полностью консервативных схем газовой динамики и магнитной гидродинамики оказался полудискретный аналог принципа наименьшего действия Гамильтона—Остроградского [11]—[14].

Пусть дана механическая система с обобщенными координатами $q_i$; $i=1, 2, \ldots, N$. Функционал действия равен

$$S = \int_0^t L\,dt,\quad L = K - \Pi,$$

где $L$ — функция Лагранжа, $K$ — кинетическая энергия, $\Pi$ — потенциальная энергия. Приравнивая нулю первую вариацию $\delta S = 0$, получаем систему уравнений Лагранжа; они ковариантны относительно точечного преобразования координат

$$q_i = f_i(q_1', q_2', \ldots, q_N');\ i = 1, 2, \ldots, N.$$

Для описания гидродинамических течений в лагранжевых координатах используется непосредственное обобщение принципа наименьшего действия на случай системы с бесконечным числом степеней свободы.

Рассмотрим в качестве примера адиабатическое течение сжимаемого газа. Пусть $\Omega$ — область на плоскости $(\alpha_1, \alpha_2)$, где $\alpha_1$, $\alpha_2$ — лагранжевы координаты, а $x_1 = x_1(\alpha_1, \alpha_2, t)$, $x_2 = x_2(\alpha_1, \alpha_2, t)$ — эйлеровы координаты частиц среды. Лагранжиан объема $\Omega$ равен

$$L(t) = \iint\limits_{\Omega} \rho D \left(\frac{|\vec{v}|^2}{2} - \mathscr{E}\right) d\alpha_1 d\alpha_2,$$

где $\rho$ — плотность, $v$ — скорость, $\mathscr{E}$ — удельная внутренняя энергия, $D = \partial(x_1, x_2)/\partial(\alpha_1, \alpha_2)$ — якобиан перехода от эйлеровых переменных к лагранжевым переменным.

Варьируя интеграл действия $S$ с учетом дополнительных связей — уравнений неразрывности и адиабатичности $\rho D = \rho_0(\alpha_1, \alpha_2)$, $\delta\mathscr{E} = \frac{1}{\rho^2}\delta\rho$ и полагая $\delta S = 0$, получаем уравнения движения. Чтобы получить соответствующую разностную схему, в области $\Omega(\alpha_1, \alpha_2)$ вводим сетку с шагами $h_1$ и $h_2$ и аппроксимируем лагранжиан суммой по узлам сетки $\omega_h$:

$$L_h = \sum_{\omega_h} \sigma\rho \left(\frac{|\tilde{\vec{v}}|^2}{2} - \mathscr{E}\right),$$

где $\sigma = \sigma_{i_1 i_2}$ — площадь лагранжевой ячейки, $|\tilde{\vec{v}}|$ — некоторое среднее значение по соседним с центром ячейки $(i_1, i_2)$ узлам сетки $\omega_h$. Вариация функционала действия $S_h = \int\limits_0^t L_h(t')\,dt'$ вычисляется при дополнительных условиях, которыми являются разностные аналоги закона сохранения массы и условия адиабатичности. В результате получается дифференциально-разностная схема (разностная по ($\alpha_1$, $\alpha_2$), дифференциальная по $t$) второго порядка аппроксимации; она обладает свойством полной консервативности. Заменяя затем производные по времени разностными отношениями и беря правые части, как обычно, с весами, получим при определенных значениях весовых множителей полностью консервативные разностные схемы.

Гамильтонов формализм сохраняет силу и для МГД-течения идеально проводящего сжимаемого газа в магнитном поле; к $\mathscr{E}$ добавляется энергия магнитного поля и, кроме того, добавляется еще одна связь — условие вмороженности магнитного поля в идеально проводящую среду.

**11.** Эффективность численного метода решения задач магнитной гидродинамики определяется не только качеством разностной схемы, но и сильно зависит от выбора диссипатора (псевдовязкости). Для МГД-течений, в отличие от газодинамики, характерно наличие большего количества типов разрывов, поэтому использования обычных типов искусственной вязкости, вообще говоря, недостаточно. Во-первых, псевдовязкость, подобранная для одного типа разрывов, часто оказывается неудовлетворительной для разрывов другого типа; во-вторых, величина коэффициента вязкости зависит не только от сетки и термодинамических величин (как в газовой динамике), но и от напряженности и ориентации магнитного поля. В работе [12] предложен способ построения диссипаторов для вариационно-разностных схем, не зависящих ни от числа измерений, ни от системы координат. Вводятся эффективное давление $p^*$ и эффективная напряженность магнитного поля $\vec{H}^*$, равные

$$p^* = p + q, \quad \vec{H}^* = \vec{H} + \vec{Q},$$

где $q$ — газодинамическая составляющая искусственного диссипатора, $\vec{Q}$ — вектор магнитной составляющей диссипатора:

$$q = -\varkappa \frac{c^2\rho}{V} \frac{dV}{dt}, \quad \vec{Q} = -\varkappa \frac{d\vec{H}}{dt},$$

где $c$ — адиабатическая скорость звука, $V$ — объем ячейки, $\varkappa=2/\omega^*$; $\omega^*$ — максимальная частота собственных колебаний линеаризованной дискретной модели.

Изложенный подход без каких-либо изменений переносится на случай любого числа пространственных переменных, независимо от выбора системы координат. Вариационный подход позволяет получать полностью консервативные дифференциально-разностные уравнения произвольного порядка аппроксимации.

12. Вариационный подход можно использовать также и при построении численных методов для уравнений теплопроводности или диффузии, описывающих большое число физических процессов. Один из наиболее простых вариантов вариационного метода состоит в том, что уравнение заменяется системой

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\operatorname{div}\vec{W}=0,\quad \vec{W}+k\operatorname{grad}u=0.$$

Первое уравнение трактуется как параметрически меняющаяся во времени связь, а второе уравнение получается из условия стационарности функционала

$$F(\vec{W})=\int\limits_{\Gamma}\frac{|\vec{W}|^2}{k}\,d\sigma+2\int\limits_{G}u\operatorname{div}\vec{W}\,dG,$$

где $G$ — область, $\Gamma$ — ее граница. Отсюда получаются разностные схемы второго порядка аппроксимации на криволинейных сетках, причем разностный оператор сохраняет свойства самосопряженности и знакоопределенности. Сначала находятся потоки $\vec{W}$ и затем уже искомая функция.

Вариационно-разностные схемы для многомерных задач магнитной гидродинамики использовались для решения ряда задач о развитии неустойчивости Релея—Тейлора в несжимаемой жидкости [14], о симметрии сферических мишеней при сжатии их лазерным излучением [15] и др.

13. Теоретическое исследование разностных схем, аппроксимирующих нелинейные уравнения

(например, уравнения газодинамики и магнитной гидродинамики), представляет большие математические трудности и может быть проведено лишь в некоторых частных случаях и для соответствующих линейных моделей.

К тому же решения нелинейных задач являются, как правило, разрывными и кусочно-гладкими. Поэтому оценка погрешности аппроксимации является весьма условной. Важную роль играет проверка алгоритмов на точных решениях для частных случаев. Можно пользоваться также известным методом пробных функций.

Для линейных задач теория разностных схем является в большой степени законченной. Эта теория является в то же время и абстрактной и конструктивной. Центральным разделом общей теории разностных схем является теория устойчивости. Цель теории устойчивости — найти необходимые и достаточные условия устойчивости и априорные оценки без предположения о структуре разностных операторов схемы. Она формулируется для операторно-разностных схем с операторами в абстрактном пространстве. Напомню основную теорему для двухслойной операторно-разностной схемы [1], [16]:

$$B\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau}+Ay_n=0,\ n=0, 1, \ldots,\ y_0\in H, \tag{5}$$

где $A=A^*>0$ и $B>0$ — линейные операторы, заданные в гильбертовом пространстве $H$.

*Пусть $A=A^*>0$, $B>0$ — несамосопряженный оператор. Для устойчивости схемы в $H_A$, т. е. для выполнения неравенства*

$$\|y_{n+1}\|_A\leqslant\|y_n\|_A,\ n=0, 1, \ldots\ \left(\|y\|_A=\sqrt{(Ay, y)}\right), \tag{6}$$

*необходимо и достаточно, чтобы выполнялось неравенство*

$$(By, y)\geqslant 0{,}5\tau(Ay, y)\ \textit{для всех}\ y\in H,$$

*или*

$$B\geqslant 0{,}5\tau A. \tag{7}$$

Эта теорема сохраняет силу и для многослойных схем, так как они могут быть записаны в виде (5), где $A$ и $B$ — операторные матрицы (для трехслойной схемы они имеют второй порядок).

Для схем с несамосопряженными операторами $A$ и $B$ основное значение имеет получение достаточных условий устойчивости схем в энергетическом пространстве $H_D$ [17]. Существенные результаты получены в последние годы А. В. Гулиным. В частности, он указал класс схем с несамосопряженными операторами, для которого находится оператор $D=D^*>0$ и формулируются совпадающие условия устойчивости схемы с $B=D+\tau AC$, $A\neq A^*$, $C\neq C^*$ в $H_D$:

$$\| y_{n+1} \|_D \leqslant \| y_n \|_D. \tag{8}$$

Эти результаты позволили найти совпадающие необходимые и достаточные условия устойчивости схем с весами для уравнений акустики в энергетической норме, отличной от сеточной нормы $L_2$ [18].

**14.** Остановимся коротко на некоторых работах, посвященных построению разностных схем для типичных линейных уравнений математической физики. В последние годы большое внимание уделяется построению разностных схем для уравнений общего вида при различных типах краевых условий на нерегулярных сетках. Используются интегро-интерполяционный метод или метод баланса, вариационные и проекционные методы, в том числе метод конечных элементов. Само понятие разностной схемы подверглось пересмотру. Наряду с обычными схемами важную роль стали играть аддитивные схемы, представляющие собой последовательность схем обычного типа, аппроксимирующих исходное уравнение в суммарном смысле. Введение аддитивных схем существенно расширило класс разностных схем и позволило построить большое число экономичных алгоритмов для многомерных нестационарных задач [1]. Изучение схем для эллиптических и параболических уравнений общего типа в областях произвольной формы привело И. В. Фрязинова к понятию векторной схемы и существенно расширило возможности для конструирования разностных схем [19], [20].

Были построены векторные аддитивные схемы для уравнений параболического типа. Оказалось, что векторная схема простейшего типа на нерегулярных сетках, полученная методом баланса, совпадает со схемой метода конечных элементов (И. В. Фрязинов).

**15.** Особый интерес представляет изучение разностных методов для задач с негладкими решениями. Известно, что точность схемы зависит от гладкости решения исходной задачи. Однако часто встречаются задачи, решения которых имеют весьма ограниченную гладкость из-за особенностей в отдельных точках самого решения или его производных. Производные решения эллиптических задач могут быть неограничены в окрестности точек смены типа краевых условий, разрыва краевых значений, в окрестности вершин углов многоугольника и др. Это приводит к понижению погрешности аппроксимации и точности. Цикл работ по исследованию классических схем для отыскания негладких решений выполнен в работах [21]—[23], где указан способ повышения точности путем сглаживания (немонотонного) граничной функции.

В [24] предложена разностная схема, имеющая точность $O\left(h^2 \ln \frac{1}{h}\right)$ в окрестности особой точки. При построении схемы требуется, чтобы главная часть разложения искомой функции $u=u(x_1, x_2)$ в окрестности особой точки удовлетворяла разностному уравнению. Уравнение Лапласа $\Delta u=0$, $u=u(x_1, x_2)$ в квадрате со смешанным краевым условием аппроксимируется разностной схемой

$$(a_1 y_{\bar{x}_1})_{x_1} + (a_2 y_{\bar{x}_2})_{x_2} = -\varphi(x_1, x_2)$$

с переменными коэффициентами $a_1$, $a_2$ и правой частью (формально эта схема соответствует уравнению $\operatorname{div}(k \operatorname{grad} u) = -f$), причем $a_1$ и $a_2$ фактически отличны от 1, а $\varphi$ — от нуля лишь в окрестности особой точки. Эта схема дает хорошую точность как в окрестности особой точки, так и вне ее. Аналогично строятся схемы для уравнений

Пуассона в произвольном многоугольнике на прямоугольной сетке.

**16.** Многовариантный характер вычислений при проведении вычислительного эксперимента предъявляет жесткие требования экономичности к вычислительному алгоритму. Неявные схемы для линейных и нелинейных нестационарных задач приводят к необходимости на каждом временном слое решать соответствующую стационарную задачу. Стационарные задачи возникают также при изучении установившихся процессов, и в этом случае им соответствуют разностные эллиптические краевые задачи.

Математические проблемы, возникающие при численном решении указанных задач, следующие: необходимо разработать эффективные вычислительно устойчивые методы решения систем алгебраических уравнений (линейных и нелинейных) высокого порядка, пригодные для решения широкого класса задач; для узкого, но наиболее важного класса задач (в основном для простейших линейных задач) разработать специальные прямые методы.

Поясним связь между этими проблемами. Для решения сложных стационарных задач используют неявные итерационные методы, позволяющие свести решение исходной задачи к решению на каждой итерации простейшего линейного уравнения. При этом выбор последнего уравнения стараются осуществить так, чтобы для его решения можно было использовать экономичный прямой метод.

В последние годы были получены существенные результаты в теории итерационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений. Выделим два результата: 1) построение упорядоченного набора оптимальных чебышевских параметров, обеспечивающего вычислительную устойчивость процесса итераций, 2) разработка универсального попеременно-треугольного итерационного метода.

Построение упорядоченного набора параметров для двухслойного чебышевского итерационного метода делает возможным его применение в тех ситуациях, когда решаются большие задачи и требование экономии памяти ЭВМ является наряду требованием максимальной быстроты решения главным фактором. Эта проблема, возникшая более четверти века назад, была решена советскими математиками в 1971—1973 гг.

Следует отметить, что существует способ обойти трудность использования неупорядоченного набора параметров, но он связан с переходом к трехслойным итерационным схемам и, следовательно с дополнительной памятью ЭВМ.

Разработка попеременно-треугольного метода (ПТМ) началась в 1964 г. [25]. Для решения уравнения

$$Au = f,$$

трактуемого как операторное уравнение с самосопряженным положительно определенным оператором, заданным в гильбертовом пространстве $H$, рассматривается неявная итерационная схема [1, 26—28]:

$$B\frac{y_{k+1}-y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f;\ k = 0, 1, \ldots;\ y_0 \in H,$$

$$B = (D + \omega R_1)D^{-1}(D + \omega R_2);\ \ R_1 + R_2 = A;\ \ R_1 = R_2^*,$$

где $D = D^* > 0$ — некоторый оператор, играющий роль дополнительного параметра. В классическом варианте ПТМ бралось $D = E$—единичный вектор.

Универсальность метода заключается в том, что любой самосопряженный оператор $A$ может быть представлен в виде суммы сопряженных друг другу операторов, причем неединственным образом. Для выбора параметра $\omega$ необходимо задать два числа $\delta > 0$ и $\Delta$ из операторных неравенств $A \geqslant \delta D$ и $R_1 D^{-1} R_2 \leqslant \frac{\Delta}{4} A$. В качестве $\{\tau_k\}$ можно использовать упорядоченный набор чебышевских параметров. В этом случае для числа итераций будет верна оценка

$$n \geqslant n_0(\varepsilon) = \ln\frac{2}{\varepsilon}/(2\sqrt{2}\sqrt[4]{\eta}),\ \eta = \frac{\delta}{\Delta}.$$

В качестве оператора $D$ можно взять диагональную матрицу, подчиняя выбор ее элементов условию максимальности $\eta$. Метод оказался весьма эффективным при решении разностной задачи Дирихле для уравнения Пуассона и уравнения с переменными коэффициентами в прямоугольнике и в произвольной области в случае сильно меняющихся коэффициентов. Форма области практически не влияет на число итераций — оно совпадает с числом итераций для той же задачи в квадрате, сторона которого равна диаметру области.

Возможно использование оператора $B$ попеременно-треугольного метода в итерационных схемах сопряженных направлений. Таким способом целесообразно пользоваться, если есть хорошее начальное приближение, например при нахождении решения на верхнем слое в неявной схеме для нестационарной задачи.

В последние годы были построены специальные прямые методы, используемые при решении разностных краевых задач для эллиптических уравнений с разделяющимися переменными, которые практически вытеснили широко использовавшийся метод переменных направлений. Это метод полной редукции и метод разделения переменных, использующий алгоритм быстрого дискретного преобразования Фурье. Эти методы позволяют получить точное решение указанных задач за $O(N^2 \ln N)$ арифметических операций, где $N$ — число узлов по направлению (двумерный случай).

Использование указанных прямых и итерационных методов для решения линейных задач способствовало развитию соответствующих методов и для решения нелинейных задач. Видимо, в ближайшее время можно ожидать новых достижений и в этой области.

**17.** Характерной чертой развития современной теории численных методов является постоянный пересмотр старых алгоритмов, уточнение области их применимости и в случае необходимости замена их новыми, более эффективными алгоритмами. В настоящее время наряду с усложнением задач повышаются требования к точности алгоритмов.

Характерной является ситуация с численными методами решения многомерных задач. 10—20 лет тому назад большое внимание уделялось разработке экономичных методов для численного решения многомерных нестационарных задач математической физики. Широкое распространение получили аддитивные схемы, обладающие суммарной аппроксимацией (сюда относятся схемы расщепления, дробных шагов, переменных направлений, локально-одномерные схемы — все это фактически синонимы).

Алгоритмическая идея всех экономичных методов одна и та же — последовательное решение простых (как правило, одномерных) задач с помощью стандартных экономичных алгоритмов (например, с помощью прогонки). Многие аддитивные схемы иногда формально переносятся на нелинейные уравнения газовой динамики и магнитной гидродинамики без надлежащего исследования точности.

Между тем помимо числа операций надо обращать внимание и на точность применяемых методов.

Вопрос о точности экономичных методов для двумерного уравнения теплопроводности с коэффициентом теплопроводности $k=k(x_1, x_2, t)$, имеющим разрывы первого рода на кривой $C$, не параллельной осям координат, исследовал И. В. Фрязинов. Оказалось, что локально-одномерная схема дает плохую точность, есть скачок $k$ на $C$ велик. Это объясняется тем, что локально-одномерные схемы не сохраняют непрерывность нормальной проекции теплового потока на $C$, что соответствует появлению фиктивных источников (стоков) в окрестности $C$. Применение аддитивных схем на графах (с аппроксимацией уравнения на $C$ при помощи естественной многомерной схемы) обеспечивает хорошую точность.

Аналогичный эффект потери точности может наблюдаться и для задач газодинамики и магнитной газодинамики при наличии теплопроводности, так как коэффициент теплопроводности зависит от плотности, которая имеет разрывы на ударных волнах (их может быть несколько) или большие градиенты на температурных волнах.

Поэтому вопрос об использовании аддитивных схем требует дополнительного исследования точности для каждого типа задач.

Повышение быстродействия ЭВМ, увеличение их оперативной памяти, а также появление быстросходящихся итерационных (и прямых) методов решения разностных уравнений позволяет в ряде случаев использовать обычные неявные многомерные схемы. Так, например, неявная схема для уравнения теплопроводности $\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + F$ приводит к разностному уравнению для решения $y = y^{j+1}$ на новом слое:

$$Ay = f,$$

где $Ay = \frac{y}{\tau} - \sigma \Lambda y$, $\Lambda$ — разностная аппроксимация эллиптического оператора $L$, $\sigma$ — весовой множитель схемы ($0 \leqslant \sigma \leqslant 1$). Для решения уравнения $Ay = f$ можно использовать попеременно-треугольный метод (ПТМ) с чебышевским набором параметров (см. п. 16). В качестве нулевой итерации можно взять значение $y = y^j$ на предыдущем слое, что приводит к ускорению сходимости итераций. Пусть $L = \Delta$ — оператор Лапласа и $h_1 = h_2 = h$ (сетка квадратная). Число итераций по ПТМ зависит от отношения $\tau/h^2$ ($\tau$ — шаг по $t$) и пропорционально $\sqrt[4]{1 + \alpha\tau/h^2}$ ($\alpha = \mathrm{const} > 0$). Для схемы $O(\tau^2 + h^2)$ (при $\sigma = 0{,}5$) естественно выбирать (с учетом требования асимптотической устойчивости) $\tau = O(h)$, тогда число итераций для ПТМ пропорционально $\frac{1}{\sqrt[4]{h}}$, $n(\varepsilon) = O\left(\frac{1}{\sqrt[4]{h}} \ln \frac{1}{\varepsilon}\right)$.

Если определить постоянные $\gamma_1$, $\gamma_2$ трудно, что имеет место, например, для схем на произвольных неортогональных сетках, то можно применить ПТМ в сочетании с методом сопряженных градиентов.

## ЛИТЕРАТУРА


1. Самарский А. А. Теория разностных схем. М., «Наука», 1977.

2. Тихонов А. Н., Самарский А. А., Заклязьминский Л. А., Волосевич П. П., Дегтярев Л. М., Курдюмов С. П., Попов Ю. П., Соколов В. С., Фаворский А. П. Нелинейный эффект образования самоподдерживающегося высокотемпературного электропроводного слоя газа в нестационарных процессах магнитной гидродинамики.— ДАН, 1967, **173**, № 4, 808—811.

3. Волосевич П. П., Дегтярев Л. М., Леванов Е. И., Курдюмов С. П., Попов Ю. П., Самарский А. А., Фаворский А. П. Процесс сверхвысокого сжатия вещества и инициирования термоядерной реакции мощным импульсом лазерного излучения.— «Физика плазмы», 1976, **2**, № 6, 883—897.

4. Арсеньев А. А. Существование в целом слабого решения системы уравнений Власова.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1975, **15**, № 1, 136—147; Построение турбулентной меры для системы уравнений Власова.— «Матем. сб.», 1977, **102**(**144**), № 1, 13—32.

5. Мокин Ю. И. О двух моделях стационарного движения заряженных частиц в вакуумном диоде.— «Матем. сб.», 1978, **106**(**148**), № 2(6), 234—264.

6. Дегтярев Л. М., Крылов В. В. Метод численного решения задач динамики волновых полей с особенностями.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1977, **17**, № 6, 1523—1530.

7. Вабищевич П. Н., Дегтярев Л. М., Фаворский А. П. Метод обращения переменных в задачах МГД-равновесия. — Препринт ИПМ АН СССР, № 123, 1977.

8. Попов Ю. П., Самарский А. А. Полностью консервативные разностные схемы для уравнений магнитной гидродинамики.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1970, **10**, № 4, 990—998.

9. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные схемы газовой динамики. М., «Наука», 1975.

10. Бобылев А. В., Чуянов В. А. О численном решении кинетического уравнения Ландау.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1976, **16**, № 2, 407—416.

11. Головизнин В. М., Самарский А. А., Фаворский А. П. Вариационный подход к построению конечно-разностных математических моделей в гидродинамике.— ДАН, 1977, **235**, № 6, 1285—1288.

12. Головизнин В. М., Самарский А. А., Фаворский А. П. Об искусственной вязкости и устойчивости разностных уравнений газовой динамики.— Препринт ИПМ АН СССР, № 70, 1976.

13. Головизнин В. М., Коршия Т. К., Тишкин В. Ф., Фаворский А. П. О некоторых свойствах вариационно-разностных уравнений МГД и искусственных диссипативных процессах типа «псевдовязкости».— Препринт ИПМ АН СССР, № 25, 1978.

14. Гасилов В. А., Головизнин В. М., Тишкин В. Ф., Фаворский А. П. Численное решение одной модельной задачи о релей-тейлоровской неустойчивости.— Препринт ИПМ АН СССР, № 119, 1977.

15. Волосевич П. П. и др. Двумерные эффекты при лазерном сжатии стекляиных оболочек.— «Письма в ЖЭТФ», 1976, **24**, № 5, 283—286.

16. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М., «Наука», 1973.

17. Гулин А. В., Самарский А. А. О некоторых результатах и проблемах теории устойчивости разностных схем.— «Матем. сб.», 1976, **99(141)**, № 3, 299—330.

18. Арделян Н. В., Гулин А. В. К обоснованию устойчивости разностных схем для уравнений акустики.— Препринт ИПМ АН СССР, № 96, 1978.

19. Фрязинов И. В. Об одной разностной аппроксимации задач для эллиптического уравнения.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1976, **16**, № 1, 102—118.

20. Самарский А. А., Фрязинов И. В. О разностных методах аппроксимации задач математической физики.— «Успехи мат. наук», 1976, **31**, № 6, (192), 167—197.

21. Андреев В. Б., Архипова Е. Ю. Об использовании разностных схем для решения уравиения Лапласа с разрывными граничными условиями первого рода.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1975, **15**, № 6, 1466—1484.

22. Андреев В. Б. Смешанная задача для сеточного уравнения Лапласа в полуплоскости.— ДАН, 1977, **234**, № 5, 997—1000.

23. Андреев В. Б., Кряквина С. А. О фундаментальном решении однопараметрнческого семейства разностных аппроксимаций оператора Лапласа на плоскости.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1973, **13**, № 2, 343—355.

24. Фрязинов И. В. Разностные схемы для уравнения Пуассона и уравнения теплопроводности в многоугольнике при различных типах краевых условий на различных частях границы.— Препринт ИПМ АН СССР, № 25, 1977.

25. Самарский А. А. Об одном экономичиом алгоритме численного решения систем дифференциальных и алгебраических уравнеиий.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1964, **4**, № 3, 580—585.

26. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М., «Наука», 1971.

27. Кучеров А. Б., Николаев Е. С. Попеременно-треугольный итерационный метод решения сеточных эллиптических уравнений в прямоугольнике.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1976, **16**, № 5, 1164—1174.

28. Кучеров А. Б., Николаев Е. С. Попеременно-треугольный метод решения сеточных эллиптических уравнений в произвольной области.— «Журн. вычисл. матем. и матем. физ.», 1977, **17**, № 3, 664—675.