

Вычислительная среда 4 декабря 2019г.

Компактные разностные схемы

В.А.Гордин vagordin@mail.ru

НИУ-ВШЭ & Гидрометцентр России

1. Компактные разностные схемы для обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами.
2. Компактная схема 4 порядка для краевой задачи 2 порядка с переменными гладкими правой частью и коэффициентом
3. Компактная схема 4 порядка для краевой задачи 2 порядка с разрывными правой частью и коэффициентом
4. Компактная схема 4 порядка для дифференциальных соотношений 1 и 2 порядка
5. Компактная схема 4 порядка для уравнения Пуассона
6. Компактная схема 4 порядка для уравнения диффузии с переменным коэффициентом и ур. Леонтовича – Левина (Шрёдингер с переменным коэфф.)
7. Компактная схема 4 порядка для квазилинейных параболических уравнений

I. Для аппроксимации производной – уравнения $d_x u = f$ известна компактная схема на трехточечном шаблоне:

$$\frac{1}{2h} u_{j+1} - \frac{1}{2h} u_{j-1} = \frac{1}{6} f_{j+1} + \frac{4}{6} f_j + \frac{1}{6} f_{j-1}. \quad (1)$$

Если решение $\{u_j\}$ ищем при периодических условиях, то матрица системы линейных алгебраических уравнений для определения решения вырождена.

Для разрешимости исходной задачи необходимо условие $\int_0^{2\pi} f(x) dx = 0$.

Если число точек сетки G на окружности нечетно, то решение существует при выполнении условия на правую часть: $\sum_{j=1}^G f_j = 0$. Оно определяется с точностью до константы. Если же число точек G сетки четно, то потребуется два условия на правую часть (суммы по четным j и по нечетным j должны обе обращаться в нуль). И семейство решений в этом случае имеет две свободных константы: для четных j и для нечетных j .

При аппроксимации дифференциального уравнения на отрезке возникают еще большие проблемы: для дифференциальной задачи здесь требуется одно граничное условие, а для разностной – два.

II. Дифференциальное уравнение $d_x u + \alpha u = f$. При $\alpha \in \mathbb{R} \setminus 0$ периодическое решение задачи $u(x)$ существует и единственно. Компактная схема на трехточечном шаблоне: перенесем в (1) слагаемое нулевого порядка в правую часть: $d_x u = f - \alpha u$, и используем предыдущую схему. Слагаемые с неизвестной функцией обратно в левую часть равенства:

$$\left(\frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6}\right)u_{j+1} + \frac{4\alpha}{6}u_j + \left(\frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6}\right)u_{j-1} = \frac{1}{6}f_{j+1} + \frac{4}{6}f_j + \frac{1}{6}f_{j-1}. \quad (2)$$

Трехдиагональная «большая» матрица A для определения решения \vec{u} разностного уравнения (2):

$A = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \frac{4\alpha}{6} & \frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \frac{4\alpha}{6} & \frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \frac{4\alpha}{6} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \frac{4\alpha}{6} & \frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$	<p>должна быть дополнена первой и последней строкой описывающими граничные (например, периодические) условия. Преобразование Фурье показывает, что в случае периодических граничных условий спектр матрицы A содержится во множестве</p> $\Lambda = \left\{ \lambda = \frac{2\alpha}{3} + \frac{\alpha \cos(\xi h)}{3} + i \frac{\sin(\xi h)}{h} \right\} \subset \mathbb{C},$ <p>где $\xi \in \mathbb{R}$. При $\alpha \neq 0$ матрица A невырождена</p>
---	---

Для аппроксимации второй производной или решения уравнения $d_x^2 u = f$ известна компактная разностная схема на трехточечном шаблоне:

$$\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = \frac{1}{12} f_{j+1} + \frac{10}{12} f_j + \frac{1}{12} f_{j-1}. \quad (3)$$

Если для компактной схемы используется шахматная сетка и шаблон для f из двух точек, то веса в них равны $1/2$, и порядок погрешности у нее такой же, как и у классической: $\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = f_j$. Но константа в асимптотике погрешности компактной

шахматной схемы вдвое меньше. Если же для f используется шаблон из четырех точек, то

компактная шахматная схема $\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = B(f_{j-3/2} + f_{j+3/2}) + A(f_{j-1/2} + f_{j+1/2})$ при

$A=25/48, B=-1/48$ имеет четвертый порядок аппроксимации.

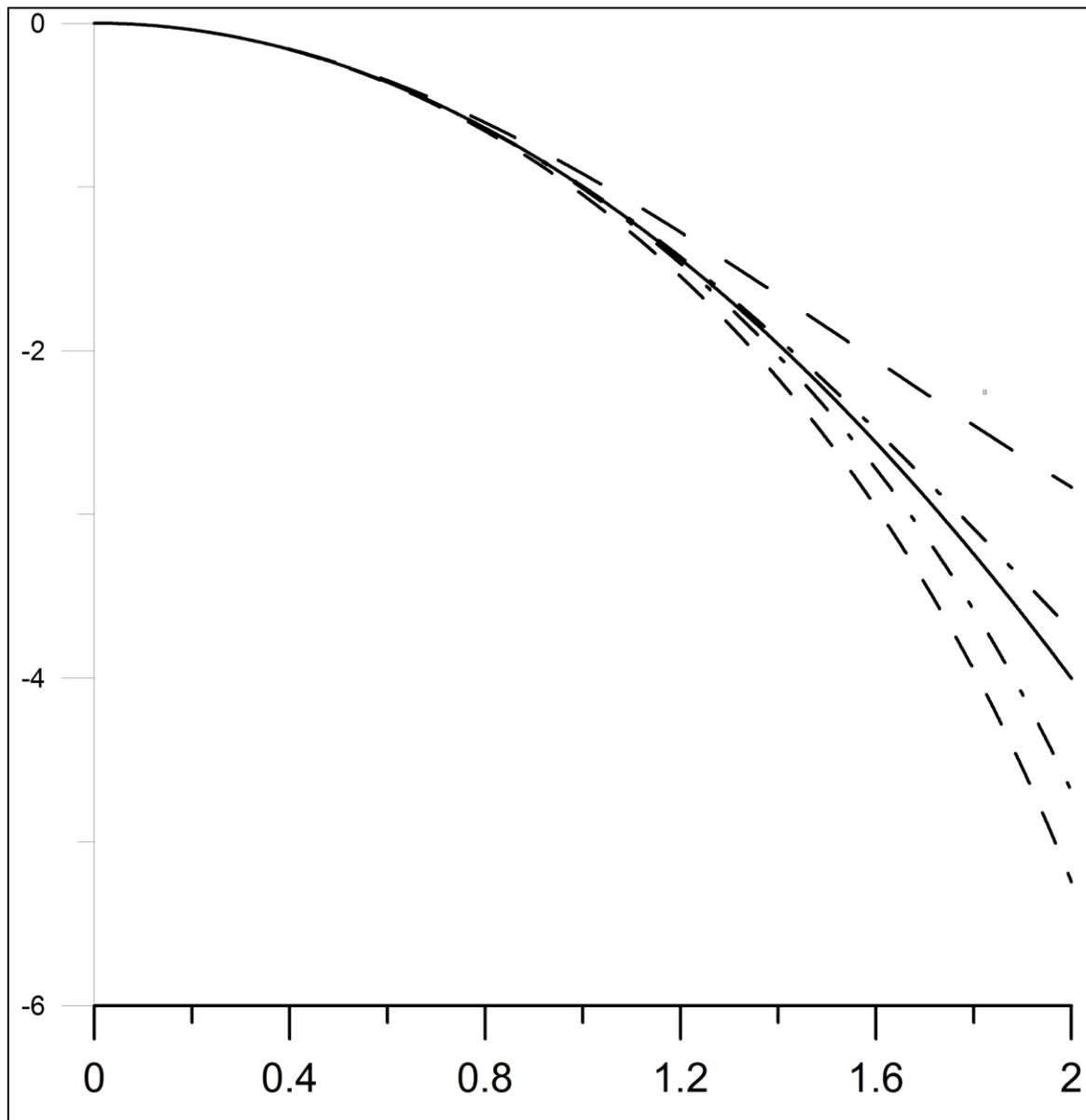


Рис.1. Символы операторов как функции от безразмерного параметра

Сплошная линия - символ $-\xi^2$ эталонного оператора $d_x^2 u = f$, а остальные символы показаны пунктирами. Верхняя линия - символ классического оператора вторых центральных разностей. Вторая - символ компактной аппроксимации на совмещенной сетке. Четвертая - символ компактной аппроксимации на шахматной сетке. Пятая - символ простейшей аппроксимации на шахматной сетке.

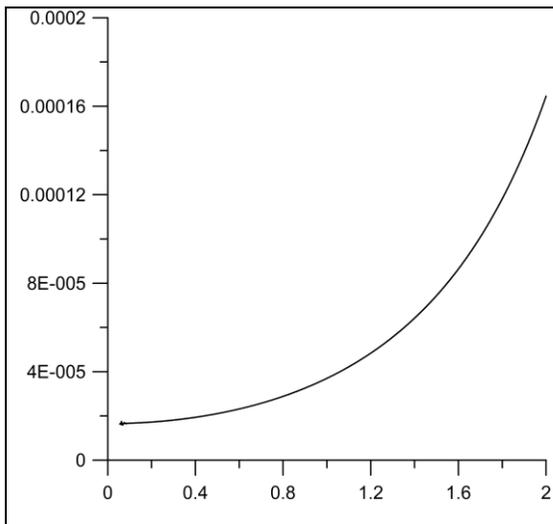
Помимо задач дифференцирования и решения диффузов можно еще и интерполяцию!

Компактная аппроксимация третьей производной $d_x^3 u = f$. Символ $\sigma_3 = -i\xi^3 = -ih^{-3}\omega^3$. На трехточечном шаблоне для u этот оператор аппроксимировать невозможно. На пятиточечных шаблонах 5-5 можно обеспечить 6-й порядок аппроксимации:

$$a[u_{n+2} - u_{n-2}] + b[u_{n+1} - u_{n-1}] = p[f_{n+2} - f_{n-2}] + q[f_{n+1} - f_{n-1}] + rf_n.$$

Такая схема точна на четных степенях $u_k = x^k$, $f_k = k(k-1)(k-2)x^{k-3}$. Из условий точности при $k=1, 3, 5, 7$ получаем четыре уравнения на четыре коэффициента. Решение:

$$a=120h^{-3}, b=-240h^{-3}, p=1, q=56, r=126.$$



Для символа компактного разностного оператора (он чисто мнимый) можно оценить длинноволновую (или при $h \rightarrow 0$) асимптотику невязки:

$$R(\omega) = \frac{120 \sin(2\omega) - 240 \sin(\omega)}{\cos(2\omega) + 56 \cos(\omega) + 63} + \omega^3 = O(\omega^9).$$

На Рис. показана невязка R , деленная на ω^9

Для существования решения периодической задачи необходимо условие $\int_0^{2\pi} f(x) dx = 0$.

Гордин В.А., Цымбалов Е.А. Разностная схема 4-го порядка точности для дифференциального уравнения с переменными коэффициентами. Математическое моделирование 2017, т.29, №7, стр.3-14.

Компактная схема обеспечивает 4-й порядок точности для дифф уравнения

$$-d_x \theta(x) d_x u + \rho(x) u = f(x). \quad (4)$$

Выбираем аппроксимацию дифференциального уравнения вида:

$$P_j u_{j+1} + Q_j u_j + R_j u_{j-1} = p_j f_{j+1} + q_j f_j + r_j f_{j-1}, \quad j = 1 \dots N - 1, \quad N - \text{число точек сетки}. \quad (5)$$

Коэффициенты $P_j, Q_j, R_j, p_j, q_j, r_j, j = 1 \dots N - 1$ определяем из условий точности на тестовых решениях $\langle u, f \rangle$ уравнения (4).

Для решения (5) используется прогонка. Обращаемая матрица не симметрична, но близка к таковым. С уменьшением шага асимметрия быстро убывает. Спектр вещественен всегда.

Для краевых условий Дирихле замыкание (5) очевидно, а для построения компактных аппроксимаций условий Неймана и Робена требуется учесть само уравнение (4). Иначе потеряем порядок точности.

Представление положительного коэффициента $\mathcal{G}(y) \approx A \exp(ay + by^2 + cy^3 + dy^4)$.

Из условия интерполяции при $y=0$ следует, что $A = \mathcal{G}(0)$, а для вычисления остальных четырех коэффициентов, поскольку $\ln \mathcal{G}(y) \approx \ln A + (ay + by^2 + cy^3 + dy^4)$, используем интерполяционные условия: $\ln[\mathcal{G}(y_j) / \mathcal{G}(0)] = ay_j + by_j^2 + cy_j^3 + dy_j^4$, $y_j = jh/2$, $j = -2, -1, 1, 2$.

Из этой системы четырех линейных алгебраических уравнений:

$$\ln[\mathcal{G}(-h) / \mathcal{G}(0)] = a(-h) + b(-h)^2 + c(-h)^3 + d(-h)^4$$

$$\ln[\mathcal{G}(-h/2) / \mathcal{G}(0)] = a(-h/2) + b(-h/2)^2 + c(-h/2)^3 + d(-h/2)^4$$

$$\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)] = a(h/2) + b(h/2)^2 + c(h/2)^3 + d(h/2)^4$$

находим коэффициенты a, b, c, d :

$$\ln[\mathcal{G}(h) / \mathcal{G}(0)] = a(h) + b(h)^2 + c(h)^3 + d(h)^4$$

$$a = 6h^{-1}(-\ln[\mathcal{G}(h) / \mathcal{G}(0)] + 8\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)] + \ln[\mathcal{G}(-h) / \mathcal{G}(0)] - 8\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)])$$

$$b = 6h^{-2}(-\ln[\mathcal{G}(h) / \mathcal{G}(0)] + 16\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)] - \ln[\mathcal{G}(-h) / \mathcal{G}(0)] + 16\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)])$$

$$c = 3h^{-3}(2\ln[\mathcal{G}(h) / \mathcal{G}(0)] - 4\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)] - 2\ln[\mathcal{G}(-h) / \mathcal{G}(0)] + 4\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)])$$

$$d = 6h^{-4}(2\ln[\mathcal{G}(h) / \mathcal{G}(0)] - 8\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)] + 2\ln[\mathcal{G}(-h) / \mathcal{G}(0)] - 8\ln[\mathcal{G}(h/2) / \mathcal{G}(0)])$$

В частном случае $\mathcal{G}(x) = const$ получаем $a = b = c = d = 0$.

Завершающий этап – обращение трехдиагональной матрицы G порядка N . Отличие «большой» матрицы G от симметричной оценивалось величиной $\kappa = \frac{\|G - G^*\|_F}{N}$, где норма Фробениуса матрицы – корень из суммы квадратов ее элементов. Зависимость ее от числа точек (а значит и от шага сетки h) $\kappa = O(h^5)$, т. е. «почти самосопряженность» имеет место.

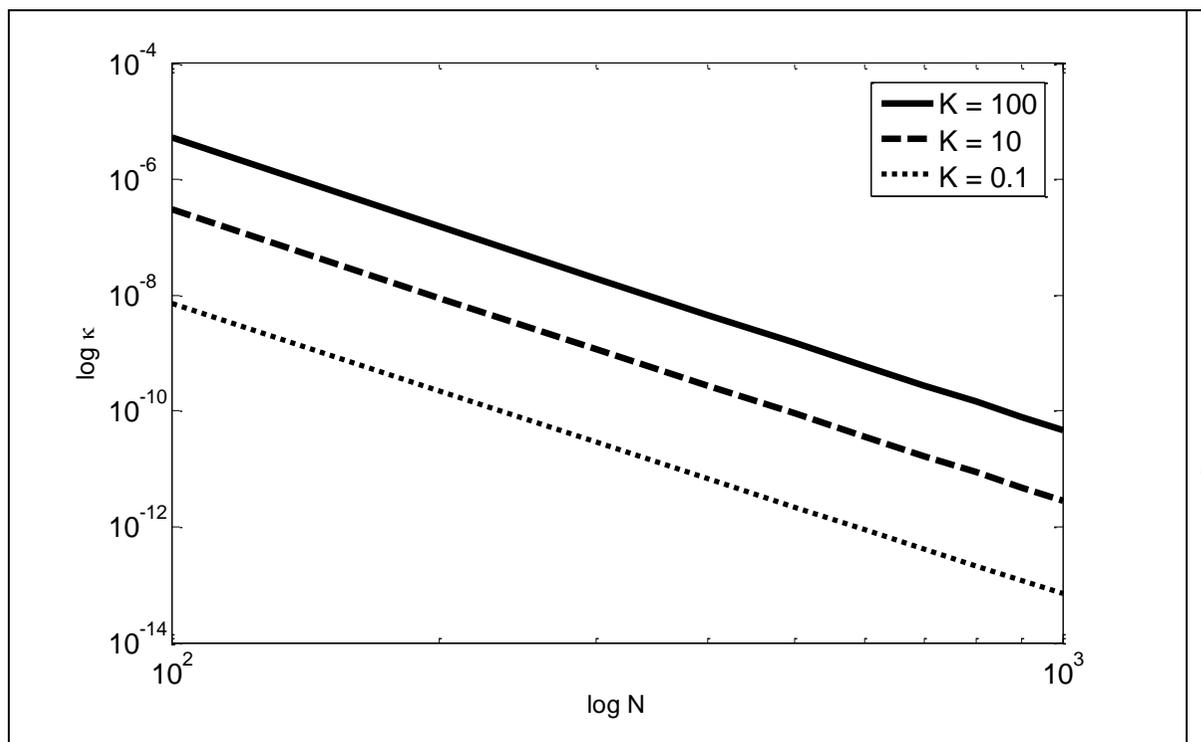


Рис. 3.5. Зависимость величины κ , показывающей отличие разностного оператора от самосопряженного от количества узлов сетки N . Билогарифмическая шкала. Видно, что $\kappa = O(h^5)$, т. е. имеет место «почти самосопряженность». Число K характеризует «извилистость» коэффициента $\mathcal{I}(x)$.

Также компьютерные эксперименты показали, что все собственные числа матрицы G с машинной точностью вещественны.

На численных экспериментах классическая дивергентная схема показала второй порядок точности, в то время как компактная схема демонстрирует четвертый порядок и меньшую погрешность, см. Табл. 3.1. Норма невязки компактной схемы меньше на несколько порядков.

Таблица 3.1. Погрешности дивергентной схемы и компактной схемы на решениях

$$u = \sin(x)\cos^2(x); \theta(x) = K\cos^2(x) + 1;$$

$$f = -\sin(x)[9K - 24K\sin^2(x) + 15K\sin^4(x) - 9\sin^2(x) + 7]. \quad (3.2).$$

	Тест	K = 100	K = 10	K = 0.1	K=0.0001
Погрешность в норме C при N = 100	Кл	1.20-3	7.65-4	7.93-4	7.99-4
	Комп	4.38-5	8.43-6	1.75-6	1.38-6
Погрешность в норме C при N = 1000	Кл	1.16-5	7.49-6	7.78-6	7.83-6
	Комп	4.23-9	8.04-10	1.69-10	2.25-10
Порядок	Кл	2.0147	2.0089	2.0082	2.0086
	Комп	4.0151	4.0204	4.0149	3.7869
Отношение погрешностей при N = 1000 (класс/ компакт)		2750	9315	45919	34802

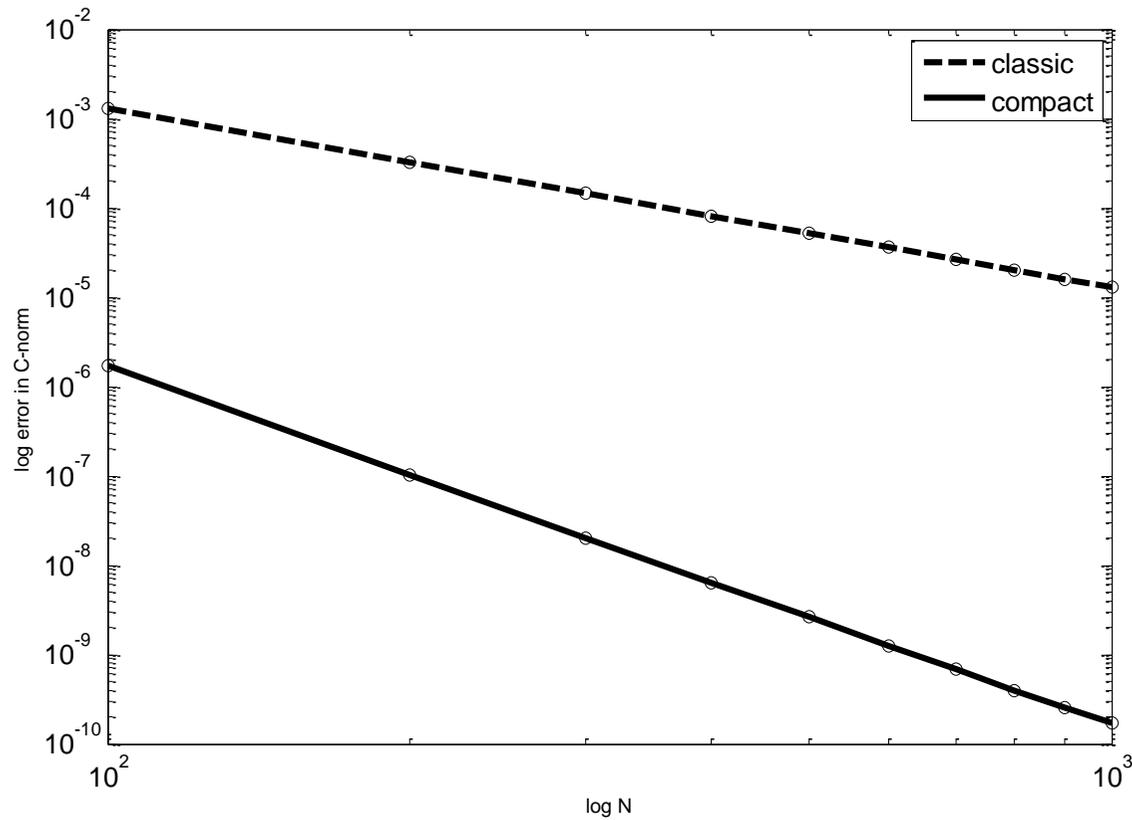


Рис. 3.1. Зависимость чебышевской нормы C погрешности схем от числа узлов сетки на решении. Билогарифическая шкала. Классическая схема имеет второй порядок аппроксимации, компактная – четвертый и меньшую погрешность.

Классическая дивергентная схема обеспечивает лишь 2 порядок, компактная – 4-й. Порядок в обоих случаях выдерживается, что позволяет применять **экстраполяцию Ричардсона**. Порядок поднимается у компактной до 6-го, а у классической – до 4-го.

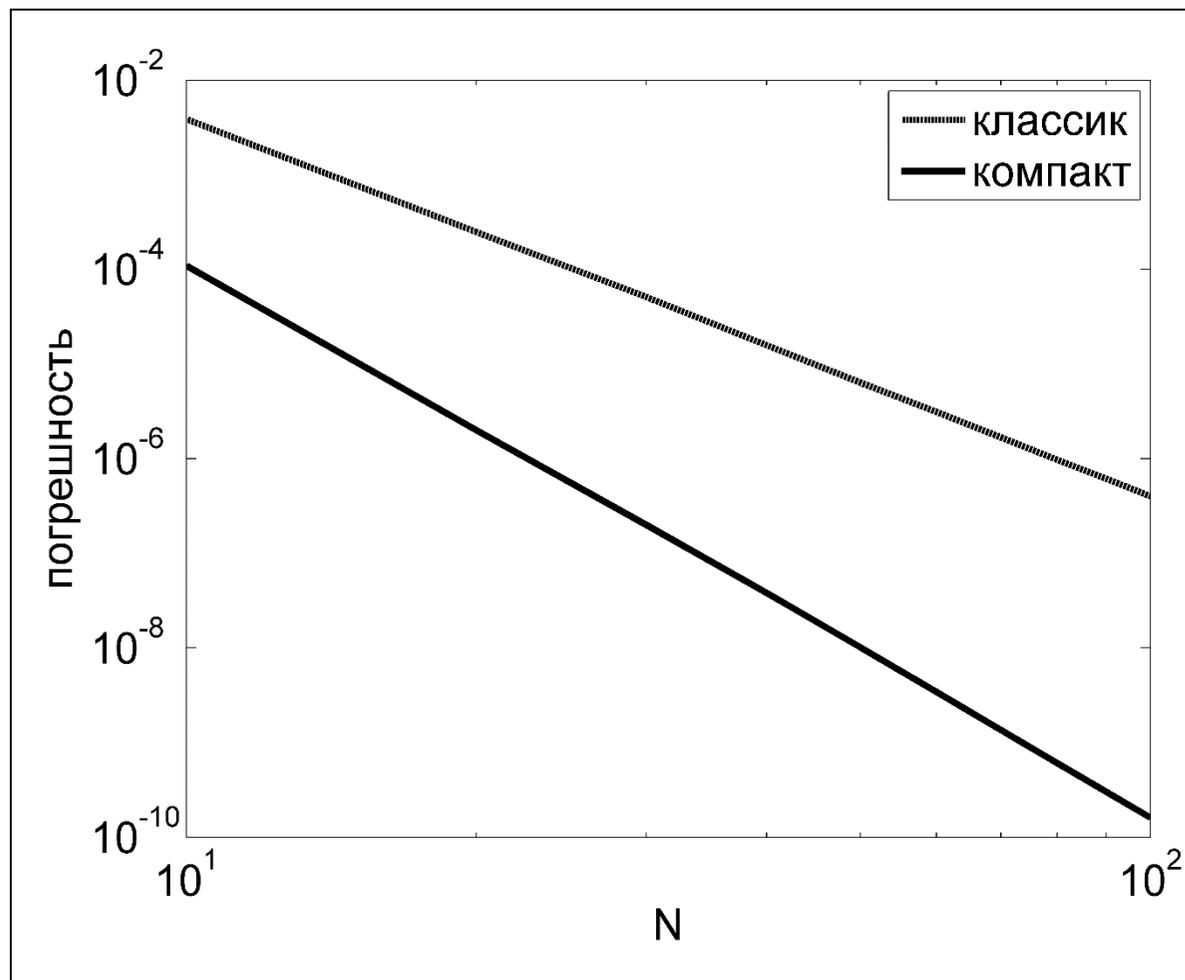


Рис. 2. Зависимость чебышевской нормы погрешности решения для обеих схем от числа узлов сетки на решении, при использовании экстраполяции Ричардсона. Билогарифмическая шкала. **Классическая схема при использовании экстраполяции Ричардсона показывает четвертый порядок точности вместо второго, компактная – шестой и существенно меньшую погрешность.**

С таким же порядком точности оцениваются собственные числа задачи Штурма – Лиувилля.

Гордин В.А., Цымбалов Е.А. Компактная разностная схема для дифференциального уравнения с кусочно-постоянным коэффициентом. Математическое моделирование 2017, т.29, №12, стр.16-28.

Аналогичный алгоритм для случая кусочно-постоянного коэффициента. Решительное преимущество компактной схемы по сравнению с классической дивергентной. В случае кусочно-постоянного коэффициента аналитически определяются собственные числа и функции. Кроме того, можно оценить «энергию» собственной функции, сосредоточенную на каждом из подотрезков.

Эксперименты проводились со скачком коэффициента $r_\theta = \theta_+ / \theta_-$ до 1000. Но можно и больше. Важно также, терпит ли разрыв правая часть f в точке разрыва коэффициента. Тогда используются значения правой части не в точке разрыва. Строим специальную аппроксимацию в точках, соседних со скачком.

Компактную разностную схему в точке скачка $x = 0$ будем искать в виде:

$$au(h) + bu(0) + cu(-h) = p_2 f(2h) + pf(h) + rf(-h) + r_2 f(-2h), \quad (4)$$

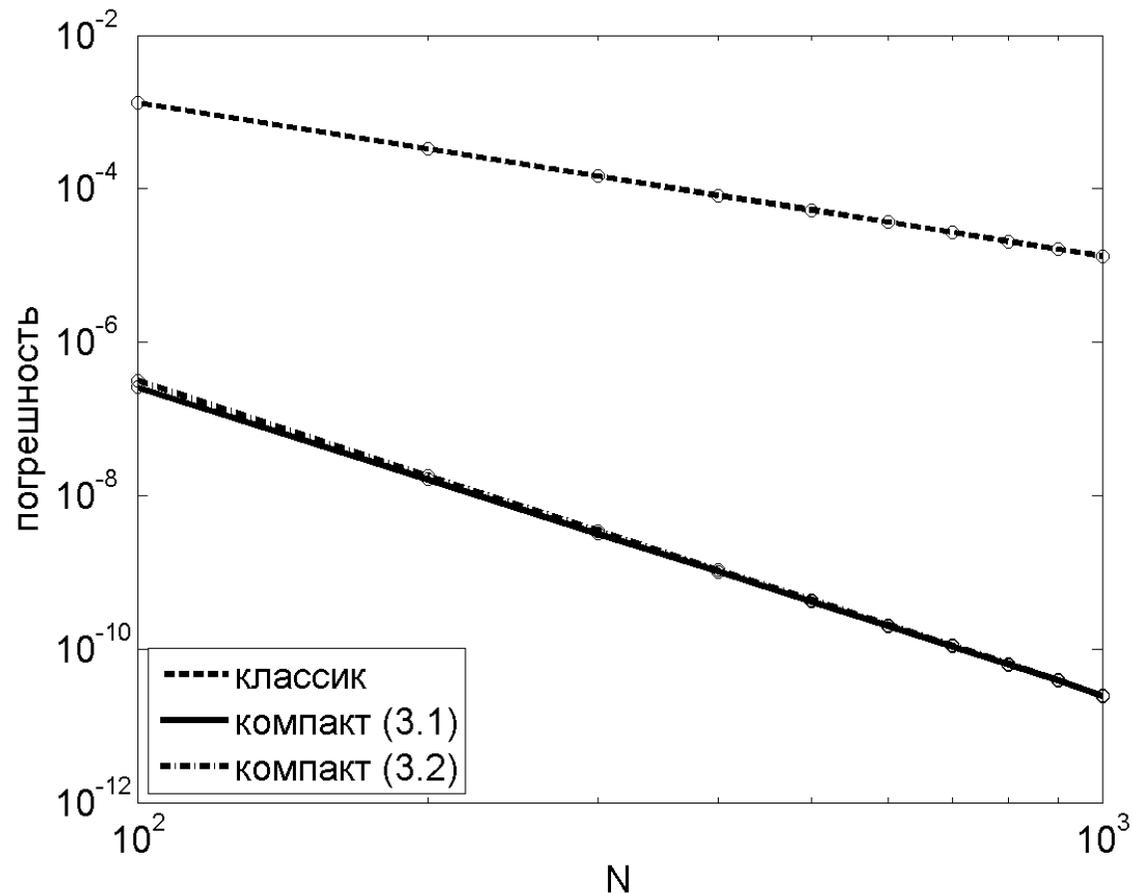
где a, b, c, p_2, p, r, r_2 – коэффициенты, определяемые с точностью до общего множителя. Здесь для неизвестной функции u , как и в остальных точках, предлагаемая аппроксимация использует лишь трехточечный шаблон, расширение шаблона производится только для известной правой части дифференциального уравнения f .

Выберем в качестве нормировки этого набора коэффициентов условие $b = -(\theta_+ + \theta_-)$. В точках $x \neq 0$ будем использовать стандартную компактную разностную схему 4-го порядка аппроксимации. Для определения остальных шести коэффициентов в уравнении (4) потребуем выполнение равенства (4) на следующих шести тестовых функциях:

#	u	f	Уравнение на коэффициенты (2.4)
(5)	1	0	$a + b + c = 0$
(6)	$\theta_+ x \leftarrow x < 0$ $\theta_- x \leftarrow x \geq 0$	0	$a\theta_- h - c\theta_+ h = 0$
(7)	x^2	$-2\theta_- \leftarrow x < 0$ $-2\theta_+ \leftarrow x > 0$	$(a + c)h^2 = -2[(p_2 + p)\theta_+ + (r_2 + r)\theta_-]$
(8)	$x^2 \text{sign}(x)$	$2\theta_- \leftarrow x < 0$ $-2\theta_+ \leftarrow x > 0$	$(a - c)h^2 = -2[(p_2 + p)\theta_+ - (r_2 + r)\theta_-]$
(9)	x^3	$-6\theta_- x \leftarrow x \leq 0$ $-6\theta_+ x \leftarrow x \geq 0$	$(a - c)h^3 = -6h[(2p_2 + p)\theta_+ - (2r_2 + r)\theta_-]$
(10)	$x^3 \text{sign}(x)$	$6\theta_- x \leftarrow x \leq 0$ $-6\theta_+ x \leftarrow x \geq 0$	$(a + c)h^3 = -6h[(2p_2 + p)\theta_+ + (2r_2 + r)\theta_-]$

Решение системы линейных алгебраических уравнений (2.5-2.10) следующее:
 $a = \mathcal{G}_+, c = \mathcal{G}_-, p = r = 5h^2 / 6, p_2 = r_2 = -h^2 / 3.$

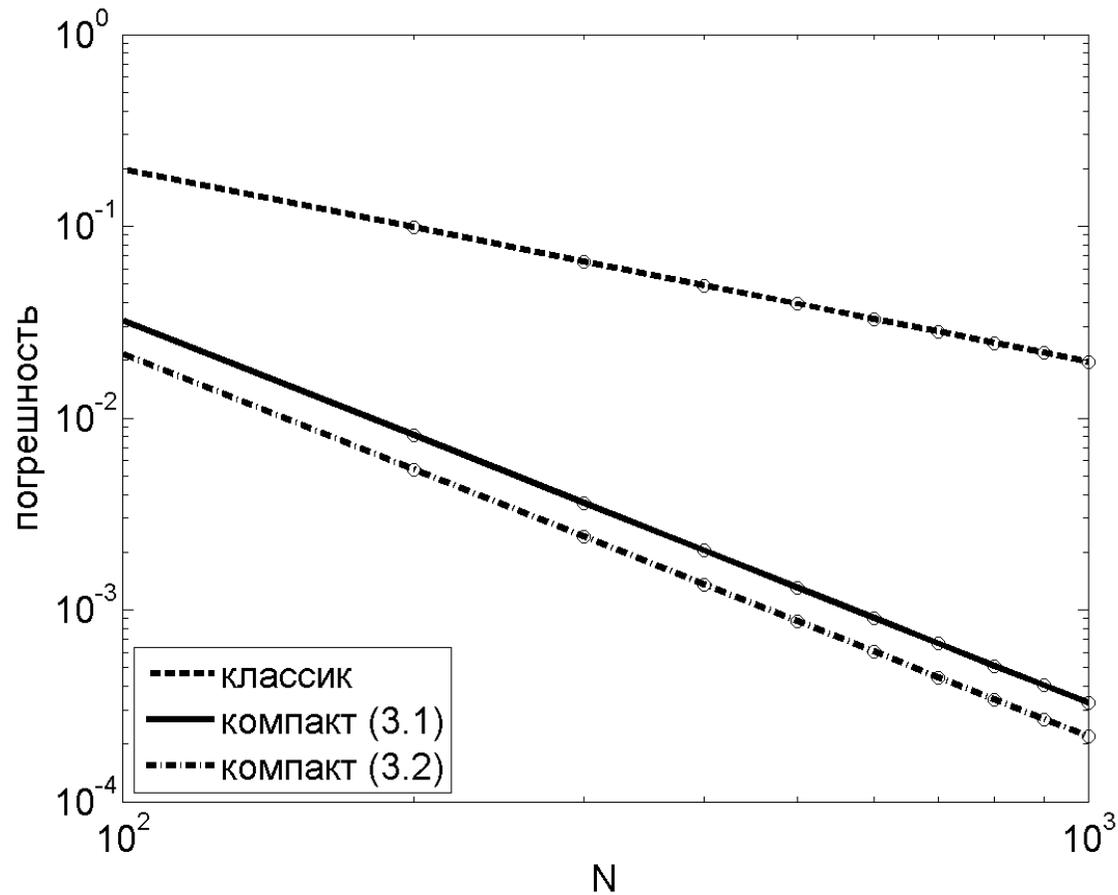
Полученная компактная схема в численных экспериментах будет сравниваться с классической дивергентной схемой: $\theta(x_{j-1/2})u(x_{j-1}) - [\theta(x_{j-1/2}) + \theta(x_{j+1/2})]u(x_j) + \theta(x_{j+1/2})u(x_{j+1}) = f(x_j)h^2$.



Коэффициент и правая часть разрывны. Здесь показана зависимость чебышевской нормы погрешности схем от числа узлов сетки на решении. Билогарифмическая шкала. Классическая схема имеет второй порядок аппроксимации, компактные – четвертый и меньшую погрешность. На графике кривые для обеих (разная аппроксимация разрыва в правой части задачи) компактных схем очень близки и визуально совпадают. Здесь $r_\theta = 10$.

Результаты численных экспериментов для решения (4.3). Для схем (3.2) и (3.1) они совпадают с машинной точностью.

	Схема	$r_\theta = 2$	$r_\theta = 10$	$r_\theta = 100$	$r_\theta = 1000$
Норма погрешности при $N = 100$	Классик (2.11)	1.13-3	2.96-4	3.21-5	3.24-6
	Компакт (3.1)	1.52-4	4.13-5	4.50-6	4.54-7
Норма погрешности при $N = 1000$	Классик (2.11)	1.13-5	2.96-6	3.21-7	3.24-8
	Компакт (3.1)	1.52-7	4.13-8	4.50-9	4.54-10
Порядок	Классик (2.11)	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000
	Компакт (3.1)	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000
Отношение погрешностей при $N = 1000$ (Классик / Компакт)		86.8	83.5	83.3	83.3



Зависимость чебышевской нормы погрешности схем от числа узлов сетки. Билогарифическая шкала. Компактные схемы имеют меньшую погрешность и больший порядок. $r_\theta = 100$, $f_- = 1$, $f_+ = 200$.

Для повышения точности вычислений можно использовать метод экстраполяции Ричардсона

Решаем первую краевую задачу Штурма – Лиувилля для дифференциального уравнения $-d_x \mathcal{G} d_x u = \lambda u$, где $\mathcal{G} = \begin{cases} \mathcal{G}_- \Leftarrow x < 0 \\ \mathcal{G}_+ \Leftarrow x > 0 \end{cases}$.

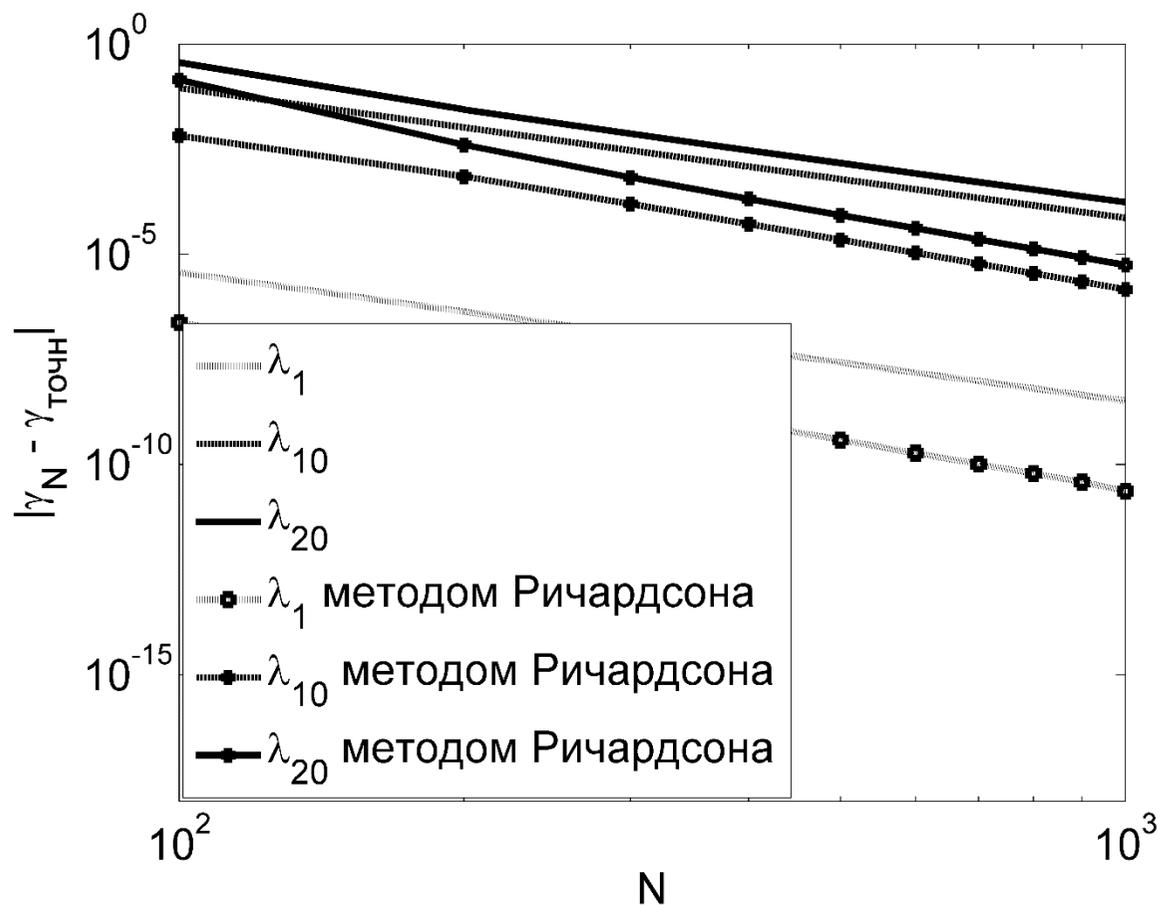
Напомним, что коэффициент \mathcal{G} - положительная функция, а поэтому и собственные числа краевой задачи Дирихле также положительны. Поэтому можно использовать представление для обеих величин:

$$\mathcal{G}_{\pm} = k_{\pm}^2 > 0, \quad \lambda = \mu^2 > 0.$$

Собственная функция должна удовлетворять условиям стыковки.

Приведем собственные значения первой краевой задачи, а также ошибку аппроксимации собственных чисел разностными операторами при $N = 1000$. Компактный оператор демонстрирует большую точность, нежели классический. Точность обеих схем ухудшается с ростом и номера собственного числа, и, как правило, параметра r_θ .

r_θ	2			20			200		
j	λ_j	$ \lambda_j^* - \lambda_j $	$ \lambda_j^* - \lambda_j $	λ_j	$ \lambda_j^* - \lambda_j $	$ \lambda_j^* - \lambda_j $	λ_j	$ \lambda_j^* - \lambda_j $	$ \lambda_j^* - \lambda_j $
1	3.6319-1	4.207-9	6.708-4	8.9281-1	1.103-9	9.619-5	9.8991-1	2.25e-11	2.1645-6
2	1.3080+0	1.400-8	6.197-4	3.2508+0	1.278-7	3.168-3	3.9575+0	1.5301-9	3.2814-5
3	3.2020+0	1.597-7	2.837-3	5.6243+0	6.941-7	1.023-2	8.8951+0	1.9592-8	1.4674-4
5	8.6577+0	1.198-7	5.389-4	1.6186+1	6.699-8	5.070-4	2.4562+1	7.3744-7	7.0726-5
10	3.4603+1	7.439-6	8.321-3	6.4821+1	4.930-6	6.908-3	1.0058+2	1.8724+1	1.8739+1
20	1.3800+2	4.067-4	1.099-1	2.6145+2	6.261-4	3.561-2	3.9700+2	3.7556+1	3.7947+1
30	3.0935+2	3.270-3	3.426-1	6.0261+2	9.475-3	5.426-1	8.4079+2	5.6716+1	5.8723+1



Для всякой собственной функции можно оценить, какая часть энергии сосредоточена на левом подотрезке, а какая на правом. Обозначим отношение γ .

Рис. 3. Зависимость чебышевской нормы погрешности аппроксимации собственных значений от числа узлов сетки N компактной схемой с использованием экстраполяции Ричардсона. Билогарифмическая шкала. Использование метода Ричардсона повышает порядок точности аппроксимации собственных значений с третьего до четвертого. $r_\theta = 10$. Применение метода экстраполяции Ричардсона существенно повышает точность и для задачи Штурма – Лиувилля. На Рис.3 это продемонстрировано для собственных чисел, а на Рис.4 - для величины γ .

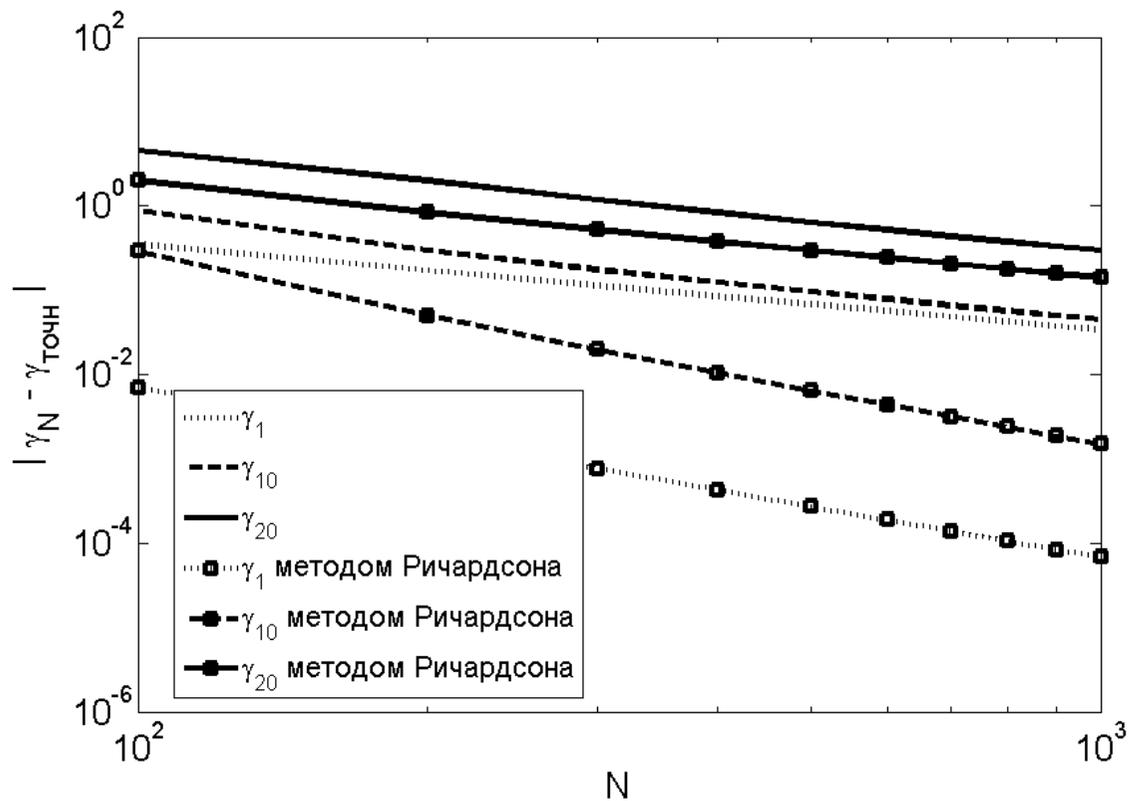


Рис.4. Зависимость погрешности аппроксимации величины $\gamma = E_l / E_r$ от числа узлов сетки N классической дивергентной схемой с использованием экстраполяции Ричардсона. Билогарифмическая шкала. **Использование метода Ричардсона повышает порядок точности аппроксимации γ дивергентной схемой с первого до второго. Здесь $r_\theta = 10$.**

3. Компактная схема 4 порядка для дифференциальных соотношений 1 и 2 порядка

Пусть задано дифференциальное соотношение

$$Au = Bf, \quad (1)$$

где A, B – дифференциальные операторы по x , f – известная функция, u – неизвестная. Самый частый случай: $B=E$ – дифференциальные уравнения. Иногда нужно численно продифференцировать – тогда $A=E$. Общий случай можно разложить в комбинацию этих двух частных случаев, но в таком алгоритме погрешность увеличится.

Пусть задана сетка $\{x_j\}_{j=0}^N$. Аппроксимируем (1) парой разностных операторов:

$$Pu = Qf. \quad (2)$$

Функции здесь уже не на отрезке, а на сетке (сетках). Шаблоны для P, Q заданы. Даже в случае, когда B – единичный оператор, использование $Q \neq E$ позволяет существенно повысить порядок разностной схемы практически без увеличения вычислительных затрат.

Примеры.

I. Для дифференциального соотношения

$$d_x u + \alpha u = d_x f + \beta f \Leftrightarrow d_x(u - f) + \alpha(u - f) = (\beta - \alpha) f \quad (5)$$

компактная схема на трехточечном шаблоне следующая:

$$\left(\frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6}\right)(u_{j+1} - f_{j+1}) + \frac{4\alpha}{6}(u_j - f_j) + \left(\frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6}\right)(u_{j-1} - f_{j-1}) = (\beta - \alpha) \left[\frac{1}{6}f_{j+1} + \frac{4}{6}f_j + \frac{1}{6}f_{j-1}\right],$$

или
$$\left(\frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6}\right)u_{j+1} + \frac{4\alpha}{6}u_j + \left(\frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6}\right)u_{j-1} = \left(\frac{1}{2h} + \frac{\beta}{6}\right)f_{j+1} + \frac{4\beta}{6}f_j + \left(\frac{-1}{2h} + \frac{\beta}{6}\right)f_{j-1}.$$

<p>Символ разностного оператора для схемы где тильда – умножение коэффициентов на h:</p>	$R(\omega) = \frac{2\beta + \beta \cos \omega + \frac{3i}{h} \sin \omega}{2\alpha + \alpha \cos \omega + \frac{3i}{h} \sin \omega} = \frac{2\tilde{\beta} + \tilde{\beta} \cos \omega + 3i \sin \omega}{2\tilde{\alpha} + \tilde{\alpha} \cos \omega + 3i \sin \omega}$
---	---

Разделим вещественную и мнимую часть этой функции:

$$\frac{2\tilde{\beta} + \tilde{\beta} \cos \omega + 3i \sin \omega}{2\tilde{\alpha} + \tilde{\alpha} \cos \omega + 3i \sin \omega} = \frac{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}[2 + \cos \omega]^2 + 9 \sin^2 \omega + 3i(\tilde{\alpha} - \tilde{\beta}) \sin \omega [2 + \cos \omega]}{\tilde{\alpha}^2 [2 + \cos \omega]^2 + 9 \sin^2 \omega}.$$

Символ разрешающего оператора для дифференциального соотношения (5) равен

$$S(i\xi) = \frac{i\xi + \beta}{i\xi + \alpha} = \frac{(i\xi + \beta)(-i\xi + \alpha)}{\alpha^2 + \xi^2} = \frac{\alpha\beta + \xi^2 + i\xi(-\beta + \alpha)}{\alpha^2 + \xi^2} = \frac{\alpha\beta + \xi^2}{\alpha^2 + \xi^2} + i \frac{\xi(-\beta + \alpha)}{\alpha^2 + \xi^2} =$$

$$= \frac{\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + \omega^2}{\tilde{\alpha}^2 + \omega^2} + i \frac{\omega(-\tilde{\beta} + \tilde{\alpha})}{\tilde{\alpha}^2 + \omega^2}.$$

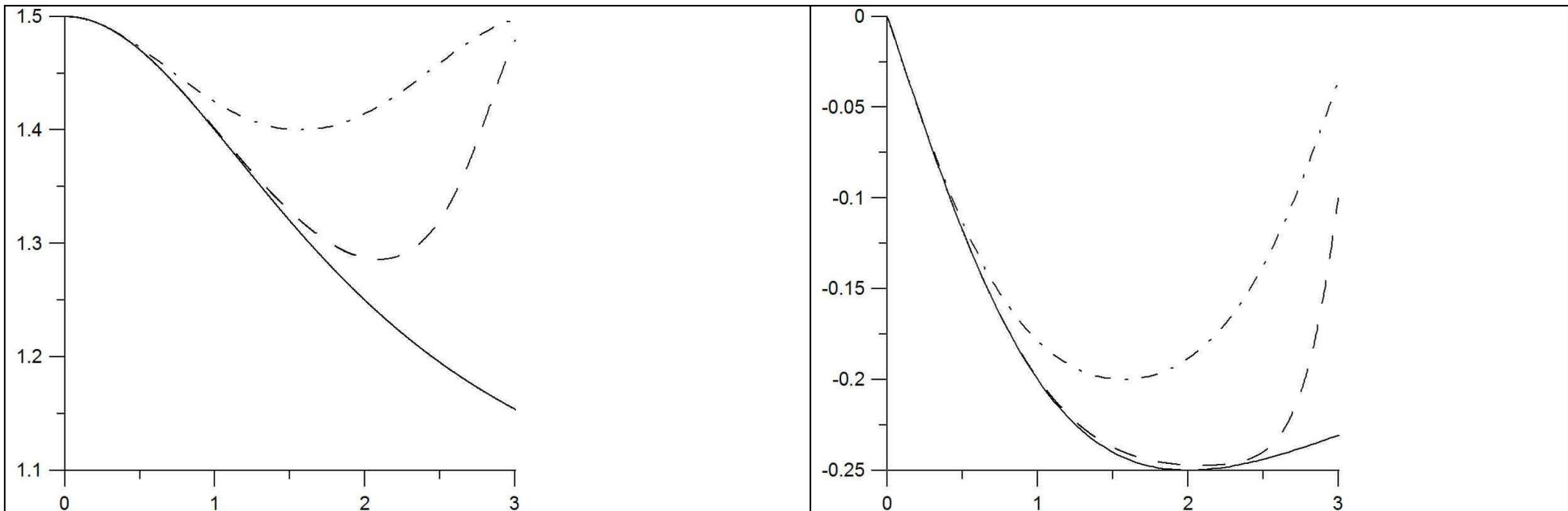


Рис.5. Вещественная и мнимая части символа псевдодифференциального оператора (5) (эталон) при $\alpha = 2$, $\beta = 3$ – сплошная линия, компактного оператора – пунктир, классического оператора – штрих-пунктир. Видно, что точность компактной аппроксимации на длинных и средних волнах имеет подавляющее преимущество по сравнению с точностью классической

II. Если для функции f по условиям задачи **шаблон** может быть расширен до **пятиточечного**, то порядок точности можно увеличить на два. Рассмотрим простейший вариант пункта **I**. Вместо символа разностного оператора

$$i \frac{3 \sin \omega}{2 + \cos \omega} = i \frac{3(\omega - \omega^3 / 6)}{2 + 1 - \omega^2 / 6} + O(\omega^5) = i\omega + O(\omega^5)$$

получаем рациональную тригонометрическую функцию

$$i \frac{\sin \omega}{p_0 + p_1 \cos \omega + p_2 \cos 2\omega} \approx i \frac{(\omega - \omega^3 / 6 + \omega^5 / 120)}{(p_0 + p_1 + p_2) - (p_1 + 4p_2)\omega^2 / 2 + (p_1 + 16p_2)\omega^4 / 24} \approx i\omega,$$

откуда $p_0 + p_1 + p_2 = 1$, $p_1 + 4p_2 = 1/3$, $p_1 + 16p_2 = 1/5$. Решение этой системы трех линейных алгебраических уравнений: $p_0 = \frac{57}{90}$, $p_1 = \frac{34}{90}$, $p_2 = \frac{-1}{90}$. Символы эталонного оператора, классической аппроксимации по схеме центральных разностей, компактной аппроксимации на трехточечном шаблоне (см. **I**) и компактной аппроксимации на шаблоне 3+5 все чисто мнимые.

Компактная схема в этом случае

$$\frac{1}{2h} u_{j+1} - \frac{1}{2h} u_{j-1} = \frac{-1}{180} f_{j+2} + \frac{17}{90} f_{j+1} + \frac{57}{90} f_j + \frac{17}{90} f_{j-1} + \frac{-1}{180} f_{j-2} .$$

Напротив, если допускается расширение шаблона для функции u , а не f , то ищем оператор с символом $i \frac{a \sin \omega + b \sin(2\omega)}{1 + p \cos \omega}$. Из условия асимптотической близости к функции $i\omega$ находим коэффициенты $a = 14/9$, $b = 1/18$, $p = 2/3$. График Г) на Рис.6 показывает, что при том же порядке точности, что и схема В) на шаблоне 3+5, но невязка немного меньше.

Соответствующая компактная схема имеет вид:

$$h^{-1} \left[u_{j+2} + 28u_{j+1} - 28u_{j-1} - u_{j-2} \right] = 12f_{j+1} + 36f_j + 12f_{j-1}.$$

Вырожденность матриц, которые нужно обращать для определения сеточной функции $\{u_j\}_{j=0}^N$ зависит от граничных условий. Например, если ставятся периодические граничные условия, то матрица эта вырождена.

Погрешности (отклонения символов разностных операторов от символа эталонного) показаны на **Рис.6**.

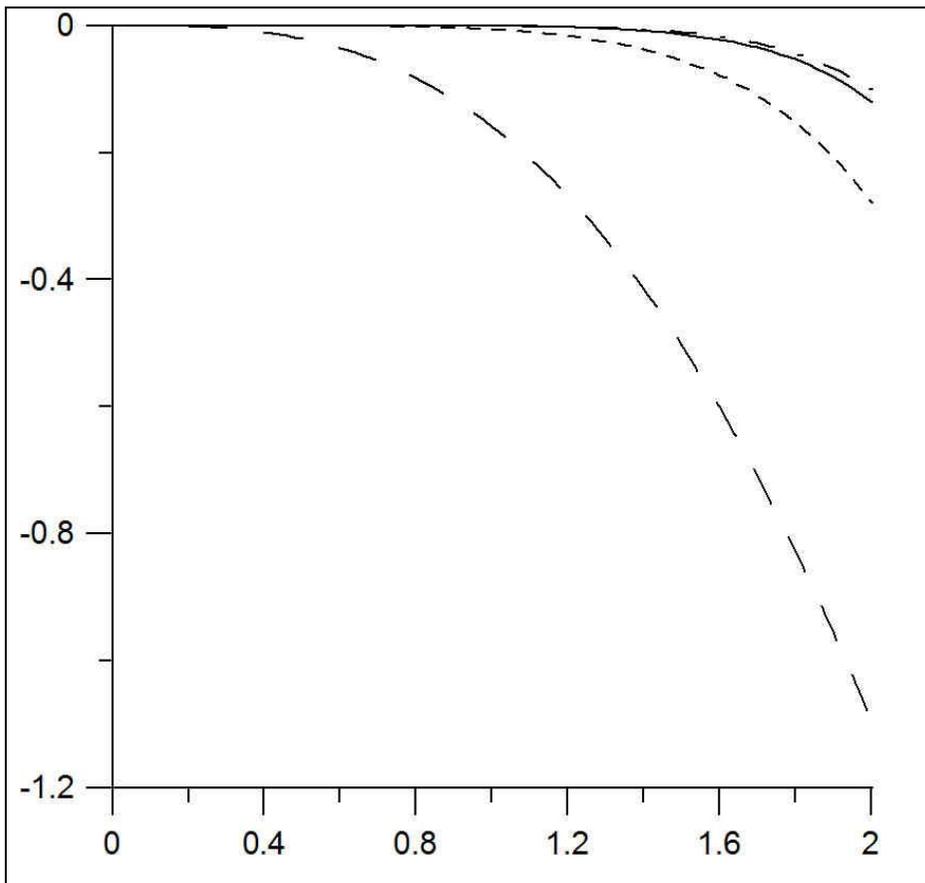


Рис.6. Погрешности разностных аппроксимаций оператора дифференцирования. А) погрешность классической схемы центральных разностей; Б) погрешность компактной схемы 4-го порядка на шаблоне 3+3; В) погрешность компактной схемы 6-го порядка на шаблоне 3+5; Г) погрешность компактной схемы 6-го порядка на шаблоне 5+3.

Если определять из полученного разностного соотношения сеточную функцию $\{f_j\}_{j=0}^N$, то и тут вырожденность матрицы задачи зависит от граничных условий.

Примеры аппроксимации дифференциальных соотношений второго порядка

II. Для аппроксимации дифференциального соотношения $d_x^2 u = d_x f$ компактную схему на трехточечном шаблоне $au_{j-1} + bu_j + cu_{j+1} = pf_{j-1} + qf_j + rf_{j+1}$ будем строить стандартным образом: рассмотрим набор из пяти пар тестовых функций – точность на этих тестовых функций компактной схемы дает пять линейных алгебраических уравнений для ее коэффициентов:

№	1	2	3	4	5
u	1	0	x	x^2	x^3
f	0	1	0	$2x$	$3x^2$
Уравнение	$a + b + c = 0$	$p + q + r = 0$	$-a + c = 0$	$h(a + c) = 2(r - p)$	$h(c - a) = 3(r + p)$

Решение системы: $r=1$, $p=-1$, $q=0$, $a=c=2h^{-2}$, $b=-4h^{-2}$. Компактная схема при нормировке (коэффициенты делим на 2) совпадает с классической схемой: для правой части используется первая центральная разность, для левой – вторая:

$$\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2h}. \quad (6)$$

Поскольку левые части в схемах (5) и (6) совпадают, можно воспользоваться линейностью задачи и построить компактную разностную схему, аппроксимирующую дифференциальное соотношение $d_x^2 u = d_x f + \alpha f$:

$$\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = \left(\frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{12} \right) f_{j-1} + \frac{10\alpha}{12} f_j + \left(\frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{12} \right) f_{j+1}. \quad (7)$$

III. Используем схему (7) для построения компактной разностной схемы, аппроксимирующей дифференциальное соотношение $d_x^2 u + \beta d_x u + \gamma u = d_x f + \alpha f$, которое можно переписать в виде

$$d_x^2 u = d_x (f - \beta u) + (\alpha f - \gamma u).$$

Соответствующая компактная схема имеет вид:

$$\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = \frac{-1}{2h} (f_{j-1} - \beta u_{j-1}) + \frac{1}{2h} (f_{j+1} - \beta u_{j+1}) + \frac{(\alpha f_{j-1} - \gamma u_{j-1}) + 10(\alpha f_j - \gamma u_j) + (\alpha f_{j+1} - \gamma u_{j+1})}{12}$$

или, перенося слагаемые с неизвестной функцией u в левую часть,

$$u_{j-1} \left(\frac{1}{h^2} - \frac{\beta}{2h} + \frac{\gamma}{12} \right) + u_j \left(\frac{-2}{h^2} + \frac{10\gamma}{12} \right) + u_{j+1} \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\beta}{2h} + \frac{\gamma}{12} \right) = f_{j-1} \left(-\frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{12} \right) + f_j \frac{10\alpha}{12} + f_{j+1} \left(\frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{12} \right).$$

Спектр «большой» трехдиагональной матрицы, отвечающей левой части этой системы, у которой на каждой диагонали (главной и соседних) стоят константы, удобно оценивать с помощью преобразования Фурье:

$$R(\xi) = \left(\frac{-2}{h^2} + \frac{10\gamma}{12} \right) + 2 \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\gamma}{12} \right) \cos(\xi h) + \frac{i\beta}{h} \sin(\xi h).$$

При $\beta \neq 0$ спектр трехдиагональной вещественной матрицы комплексный, и мнимая часть собственных чисел равна нулю только при $\sin(\xi h) = 0$, а значит, при $\cos(\xi h) = \pm 1$. Таким образом, матрица может быть вырождена лишь при условиях $\left(\frac{-2}{h^2} + \frac{10\gamma}{12} \right) = \pm 2 \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\gamma}{12} \right)$.

В случае знака “+” получаем $\gamma h^2 = 6$, а в случае “-” получаем $\gamma = 0$. В случае $\beta = 0$ невырожденность матрицы гарантирована при $\gamma < 0$.

IV. Аналогично вычисляются коэффициенты компактной разностной схемы, аппроксимирующей на трехточечном шаблоне дифференциальное соотношение $d_x^2 u + \beta d_x u + \gamma u = d_x^2 f + \alpha d_x f + \delta f$.

Нетрудно доказать, что компактная аппроксимация дифференциальных соотношений третьего (и более высокого) порядка на трехточечном шаблоне невозможна. Для аппроксимации соотношений, содержащих производные третьего и четвертого порядков может быть использован пятиточечный шаблон.

Соотношения высокого порядка и уравнения в частных производных

Пример подобной задачи: подготовка начальных условий для разностной аппроксимации уравнения поперечных колебаний стержня постоянного круглого сечения:

$$\partial_{tt}^2 u - R^2 \partial_{ttxx}^4 u + ER^2 \rho^{-1} \partial_{xxxx}^4 u = 0,$$

где R – радиус стержня, E – его модуль Юнга, ρ – его плотность. Компактная схема аппроксимации: V.A. Gordin, E.A. Tsymbalov. Compact Difference Schemes for Rod Lateral Vibrations Equation. Numerical Algebra with Applications. Proceedings of Fourth China - Russia Conference. Rostov-on-Don: Southern Federal University Publishing, 2015, p. 110-113.

При постановке задачи Коши для этого дифференциального уравнения задаются начальные условия: $u(0, x) = f_0(x)$, $\partial_t u(0, x) = f_1(x)$. Если аппроксимировать это уравнение разностями по времени (значения в момент времени $n\tau$ вычисляются по значениям в моменты $(n-1)\tau$ и $(n-2)\tau$), то нужны значения функции в моменты $t=0$ и $t=\tau$ – через один шаг по времени.

Начальное условие для разностной схемы при $t=0$ известно, а второе можно оценить по формуле Тейлора: $u(\tau, x) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x) \frac{\tau^j}{j!}$, и если точность $O(\tau^2)$ достаточна для

последующей эксплуатации разностной схемы, то можно здесь оставить только нулевое и первое слагаемое. Если же нужно оценивать решения, а значит и начальное условие, с большим порядком точности, то нужно знать еще и следующий коэффициент Тейлора - функцию $f_2(x)$.

Подставив этот ряд Тейлора в уравнение колебаний, получим обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка по переменной x относительно функции f_2 :

$$f_2 - R^2 d_{xx}^2 f_2 + ER^2 \rho^{-1} d_{xxxx}^4 f_0 = 0, \quad (7)$$

т.е. здесь операторы $Q_1[f_2] = [1 - R^2 d_{xx}^2]$, $Q_2[f_0] = -R^2 E \rho^{-1} d_{xxxx}^4 f_0$.

Здесь четвертая производная известной функции f_0 аппроксимируется на пятиточечном шаблоне, а искомая функция f_2 - на трехточечном, т. е. при реализации алгоритма четвертого порядка точности придется обращаться всего лишь трехдиагональную матрицу. Аналогично определяется коэффициент f_3 и т. д., если нужен еще более высокий порядок аппроксимации по времени точного решения решением разностного уравнения.

Выше были рассмотрены примеры дифференциальных соотношений обыкновенных, но можно получить компактные формулы также для дифференциальных соотношений в частных производных (для таких задач, где $P_2 = E$).

Пример 1. Нелинейное уравнение Шрёдингера с производной:

$$i\partial_t \Psi - \partial_{xx}^2 \Psi + i\partial_x (\Psi^2 \bar{\Psi}) = 0; \quad \Psi = p + iq. \quad (8)$$

Это уравнение для одной комплекснозначной функции можно представить в виде системы двух уравнений для двух вещественнозначных функций:

$$\begin{aligned} \partial_t p - \partial_{xx}^2 q &= \partial_x f, \quad f = -(p^2 + q^2)p, \\ \partial_t q + \partial_{xx}^2 p &= \partial_x g, \quad g = -(p^2 + q^2)p. \end{aligned}$$

Компактная разностная аппроксимация такой системы имеет вид

$$\begin{aligned} &a_1^{1,1} p_{j-1}^{n+1} + b_1^{1,1} p_j^{n+1} + c_1^{1,1} p_{j+1}^{n+1} + a_2^{1,1} q_{j-1}^{n+1} + b_2^{1,1} q_j^{n+1} + c_2^{1,1} q_{j+1}^{n+1} + \\ &+ a_1^{1,0} p_{j-1}^n + b_1^{1,0} p_j^n + c_1^{1,0} p_{j+1}^n + a_2^{1,0} q_{j-1}^n + b_2^{1,0} q_j^n + c_2^{1,0} q_{j+1}^n = \\ &A^{1,1} f_{j-1}^{n+1} + B^{1,1} f_j^{n+1} + C^{1,1} f_{j+1}^{n+1} + A^{1,0} f_{j-1}^n + B^{1,0} f_j^n + C^{1,0} f_{j+1}^n, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& a_1^{2,1} p_{j-1}^{n+1} + b_1^{2,1} p_j^{n+1} + c_1^{2,1} p_{j+1}^{n+1} + a_2^{2,1} q_{j-1}^{n+1} + b_2^{2,1} q_j^{n+1} + c_2^{2,1} q_{j+1}^{n+1} + \\
& + a_1^{2,0} p_{j-1}^n + b_1^{2,0} p_j^n + c_1^{2,0} p_{j+1}^n + a_2^{2,0} q_{j-1}^n + b_2^{2,0} q_j^n + c_2^{2,0} q_{j+1}^n = \\
& A^{2,1} g_{j-1}^{n+1} + B^{2,1} g_j^{n+1} + C^{2,1} g_{j+1}^{n+1} + A^{2,0} g_{j-1}^n + B^{2,0} g_j^n + C^{2,0} g_{j+1}^n.
\end{aligned} \tag{9}$$

Система содержит 24 коэффициента. С учетом двух нормировочных соотношений на эти коэффициенты, нужно составить еще 22 линейных алгебраических уравнения, т. е. нужно использовать по 11 вещественных тестовых функции $f(t,x)$ и $g(t,x)$. Из них по 10 тестовых функций $\langle u_{k,m}, 0 \rangle$, $\langle 0, u_{k,m} \rangle$, $u_{k,m} = t^k x^m$, $0 \leq k + m \leq 4$ и еще одна с $k + m = 5$. Последние два уравнения не увеличивают порядок аппроксимации, но обеспечивают единственность решения и могут несколько улучшить константу в оценке погрешности. Выбор одной из 5 функций с $k + m = 5$ производится аналогично.

Решение систем 24 порядка невозможен вручную, но не представляет проблем для компьютерного решения. При решении необходимо проверять хорошую обусловленность таких систем, а также устойчивость неявной разностной схемы (9). После того как определены все коэффициенты системы (9), вместо функций f и g подставляем их выражения и получаем для перехода к следующему шагу по времени систему нелинейных алгебраических уравнений. Простейшие подходы для ее решения: сделать сначала шаг по времени по какой-то дешевой явной схеме второго порядка, а для подавления невязок, оставшихся после этого в системе (9) применить релаксационные методы.

Пример 2. Система дифференциальных комплексных уравнений Каупа – Ньюэла:

$$i\partial_t \Phi - \partial_{xx}^2 \Phi - \partial_x (\Phi^2 \Psi) = 0,$$

$$i\partial_t \Psi + \partial_{xx}^2 \Psi - \partial_x (\Psi^2 \Phi) = 0.$$

В отличие от системы (8) здесь нет комплексного сопряжения и нет необходимости переходить к вещественной и мнимой частям. Неизвестные коэффициенты можно принять комплексными.

4. Компактная схема 4 порядка для уравнения диффузии с переменным коэффициентом и ур. Леонтовича – Левина (Шрёдингер с переменным коэфф.)

V.A.Gordin, E.A.Tsymbalov. *Compact difference schemes for the diffusion and Schrodinger equations. Approximation, stability, convergence, effectiveness, monotony* // Journal of Computational Mathematics, Vol. 32, №3, 2014, pp. 348-370.

V.A.Gordin, E.A.Tsymbalov. *Compact difference scheme for parabolic and Schrodinger-type equations with variable coefficients*. J. Comp. Phys. 2018, V.375, pp.1451-1468.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Pu + f, \quad Pu = \frac{\partial}{\partial x} \theta(x) \frac{\partial u}{\partial x} \qquad i \frac{\partial u}{\partial t} = Pu + f.$$

Аппроксимируем положительный гладкий коэффициент около точки сетки:

$$\theta(x) \approx \theta(x_j) \exp(c_1 y + c_2 y^2 + c_3 y^3 + c_4 y^4), \quad (6)$$

где $y = x - x_j$, и определим коэффициенты c_1, c_2, c_3, c_4 из условий интерполяции коэффициента на соседних точках густой сетки $y = -h, -h/2, h/2, h$:

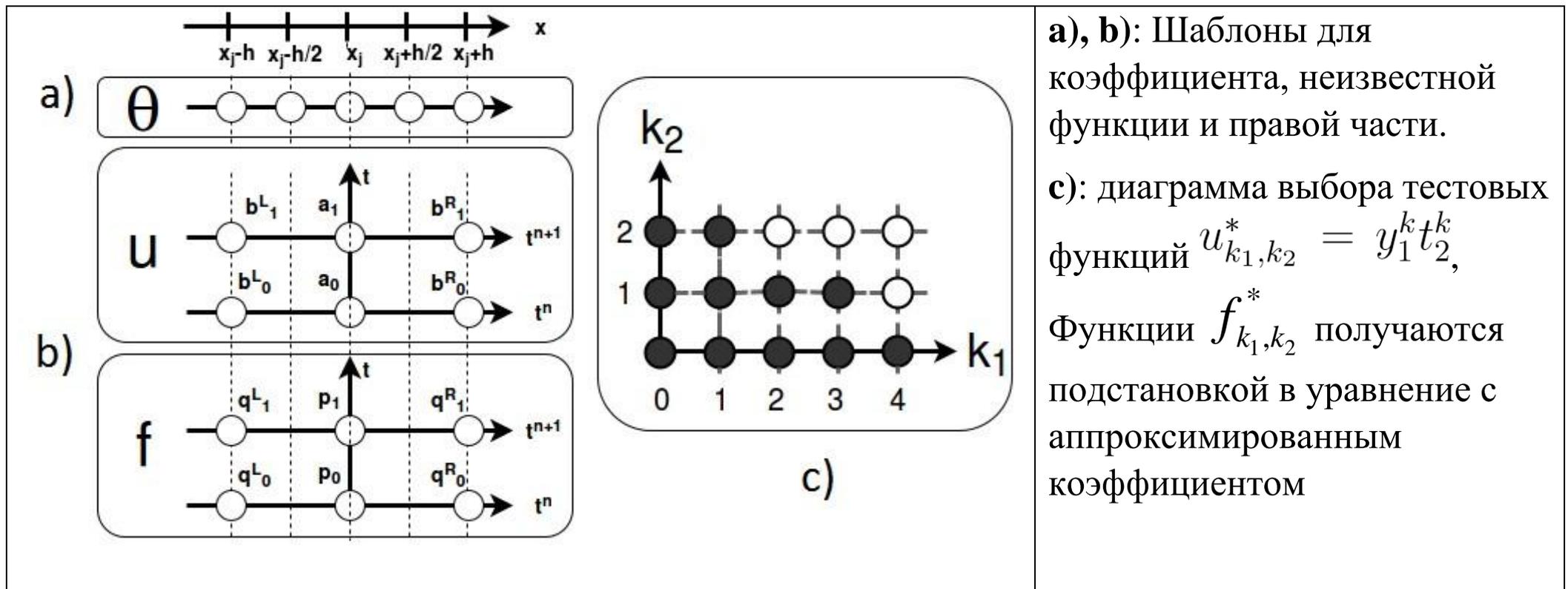
$$c_1 = -[8 \ln \left(\theta_{j-\frac{1}{2}} / \theta_j \right) - 8 \ln \left(\theta_{j+\frac{1}{2}} / \theta_j \right) - \ln (\theta_{j-1} / \theta_j) + \ln (\theta_{j+1} / \theta_j)] / 6h$$

$$c_2 = [16 \ln \left(\theta_{j-\frac{1}{2}} / \theta_j \right) + 16 \ln \left(\theta_{j+\frac{1}{2}} / \theta_j \right) - \ln (\theta_{j-1} / \theta_j) - \ln (\theta_{j+1} / \theta_j)] / 6h^2$$

$$c_3 = 2 [2 \ln \left(\theta_{j-\frac{1}{2}} / \theta_j \right) - 2 \ln \left(\theta_{j+\frac{1}{2}} / \theta_j \right) - \ln (\theta_{j-1} / \theta_j) + \ln (\theta_{j+1} / \theta_j)] / 3h^3$$

$$c_4 = -2 [4 \ln \left(\theta_{j-\frac{1}{2}} / \theta_j \right) + 4 \ln \left(\theta_{j+\frac{1}{2}} / \theta_j \right) - \ln (\theta_{j-1} / \theta_j) - \ln (\theta_{j+1} / \theta_j)] / 3h^4$$

В простейшем случае $\theta(x) = \text{const}$ получаем тривиальное решение: $c_1 = c_2 = c_3 = c_4 = 0$.



a), b): Шаблоны для коэффициента, неизвестной функции и правой части.

c): диаграмма выбора тестовых функций $u_{k_1, k_2}^* = y_1^k t_2^k$,

Функции f_{k_1, k_2}^* получаются подстановкой в уравнение с аппроксимированным коэффициентом

Компактную схему строим в виде

$$b_{0,j}^L u_{n,j-1} + a_{0,j} u_{n,j} + b_{0,j}^R u_{n,j+1} + b_{1,j}^L u_{n+1,j-1} + a_{1,j} u_{n+1,j} + b_{1,j}^R u_{n+1,j+1} = p_{0,j}^L f_{n,j-1} + q_{0,j} f_{n,j} + p_{0,j}^R f_{n,j+1} + p_{1,j}^L f_{n+1,j-1} + q_{1,j} f_{n+1,j} + p_{1,j}^R f_{n+1,j+1}.$$

Схема должна быть точна на всех парах тестовых функций, помеченных черным кружком. Находим коэффициенты с точностью до общего ненулевого множителя. На тестовых функциях с белым кружком тогда тоже выполняется – бонус!

Table 1: Коэффициенты в левой части компактной схемы разложены по степеням h .

Здесь $r_- = \theta(x_j)/\theta(x_j - h)$, $r_+ = \theta(x_j)/\theta(x_j + h)$.

-	$a_{0,j}$	$b_{0,j}^L$		$b_{0,j}^R$		$a_{1,j}$	$b_{1,j}^L$		$b_{1,j}^R$
1	$144v_j$ -120	$-72v_j$ $12r_-$	-	$-72v_j$ $12r_+$	-	$144v_j$ $+120$	$12r_- - 72v_j$		$-72v_j$ $12r_+$
h	0	$36c_1v_j$ $6c_1r_-$	+	$-36c_1v_j$ $6c_1r_+$	-	0	$36c_1v_j$ $6c_1r_-$	-	$6c_1r_+$ $36c_1v_j$
h^2	$8c_2$ $128c_2$ $192c_2v_j$	$2r_-c_2$ $96c_2v_j$ $8c_2r_-$	-	$2r_+c_2$ $96c_2v_j$ $8c_2r_+$	-	$-8c_2$ $128c_2$ $192c_2v_j$	$-2r_-c_2$ $96c_2v_j$ $8c_2r_-$	- +	$-2r_+c_2$ $96c_2v_j$ $8c_2r_+$
h^3	0	$18c_3v_j$ $12c_3r_-$ $3c_3v_j$	-	$12c_3r_+$ $18c_3v_j$ $3c_3v_j$	-	0	$18c_3v_j$ $12c_3r_-$ $3c_3v_j$	+ - + -	$3c_3v_j$ $12c_3r_+$ $18c_3v_j$

		$42c_1c_2v_j +$ $4c_1c_2r^-$	$42c_1c_2v_j -$ $4c_1c_2r^+$		$42c_1c_2v_j$ $4c_1c_2r^-$	$42c_1c_2v_j +$ $4c_1c_2r^+$
h_4	$48c_1c_3 -$ $256c_4 +$ $384c_4v_j +$ $64c_22v_j -$ $32c_22 -$ $48c_1c_3v_j$	$-32vjc_22 -$ $192c_4v_j +$ $16c_4r^- +$ $24c_1c_3v_j$ $6c_1c_3r^-$	$-32vjc_22 -$ $192c_4v_j +$ $16c_4r^+ +$ $24c_1c_3v_j$ $6c_1c_3r^+$	$256c_4 -$ $48c_1c_3 +$ $384c_4v_j +$ $64c_22v_j +$ $32c_22 -$ $48c_1c_3v_j$	$-32vjc_22 -$ $192c_4v_j +$ $16c_4r^- -$ $24c_1c_3v_j$ $6c_1c_3r^-$	$-32vjc_22 +$ $192c_4v_j +$ $16c_4r^+ -$ $24c_1c_3v_j$ $6c_1c_3r^+$
h_5	0	$84c_1c_4v_j +$ $8c_1c_4r^- +$ $12c_1c_22v_j -$ $18c_21c_3v_j$	$18c_21c_3v_j -$ $8c_1c_4r^+ -$ $12c_1c_22v_j -$ $84c_1c_4v_j$	0	$84c_1c_4v_j -$ $8c_1c_4r^- +$ $12c_1c_22v_j -$ $18c_21c_3v_j$	$8c_1c_4r^+ -$ $84c_1c_4v_j -$ $12c_1c_22v_j^+$ $18c_21c_3v_j$
h_6	$72c_3^2 -$ $144c_3^2v_j -$ $128c_2c_4 +$ $256c_2c_4v_j$	$72vjc_23$ $128c_2c_4v_j$	$72c_23v_j$ $128c_2c_4v_j$	$128c_2c_4 -$ $144c_23v_j -$ $72c_23 +$ $256c_2c_4v_j$	$72vjc_23$ $128c_2c_4v_j$	$72c_23v_j -$ $128c_2c_4v_j$
h_7	0	$-27c_1vjc_23 +$ $48c_1c_2c_4v_j$	$27c_1c_23v_j -$ $48c_1c_2c_4v_j$	0	$-27c_1vjc_23 +$ $48c_1c_2c_4v_j$	$27c_1c_23v_j -$ $48c_1c_2c_4v_j$
h_8	$256c_4^2v_j -$ $128c_4^2$	$-128c_4^2\nu_j$	$-128c_4^2\nu_j$	$256c_4^2v_j +$ $128c_4^2$	$-128c_4^2\nu_j$	$-128c_4^2\nu_j$
h_9	0	$48c_1c_4^2v_j$	$-48c_1c_4^2\nu_j$	0	$48c_1c_4^2v_j$	$-48c_1c_4^2\nu_j$

Table 2: Коэффициенты для правой части схемы, разложенные по степеням h .

-	$p_{0,j} = p_{1,j}$	$q_{0,j}^L = q_{1,j}^L$	$q_{0,j}^R = q_{1,j}^R$
1	60	$6r_-$	$6r_+$
h	0	$-3c_1r_-$	$3c_1r_+$
h^2	$4(-c_1^2 + 16c_2)$	$r_-(4c_2 - c_1^2)$	$r_+(4c_2 - c_1^2)$
h^3	0	$r_-(6c_3 - 2c_1c_2)$	$-r_+(6c_3 - 2c_1c_2)$
h^4	$4(4c_2^2 + 32c_4 - 6c_1c_3)$	$r_-(8c_4 - 3c_1c_3)$	$r_+(8c_4 - 3c_1c_3)$
h^5	0	$-4c_1c_4r_-$	$4c_1c_4r_+$
h^6	$4(-9c_3^2 + 16c_2c_4)$ 0 0	0	0
h^7	0	0	0
h^8	$64c_4^2$	0	0

Угадать такие громоздкие формулы затруднительно.

Компактная аппроксимация граничного условия Неймана

Для граничного условия Неймана $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0,L} = 0$ строим компактную аппроксимацию:

$$\sum_{j=0}^2 \alpha_j^1 u_{jh}^{n+1} + \sum_{j=0}^2 \alpha_j^0 u_{jh}^n = \sum_{j=0}^2 \beta_j^1 f_{jh}^{n+1} + \sum_{j=0}^2 \beta_j^0 f_{jh}^n$$

где коэффициенты $\alpha_j^k, \beta_j^k, j = 0, 1, 2; k = 0, 1$ определяются на базисе тестовых функций $\langle u_{k_1, k_2}^{**}, f_{k_1, k_2}^{**} \rangle: u_{k_1, k_2}^{**} \in \{1, t, t^2, x^2, x^2 t, x^2 t^2, x^3, x^3 t, x^3 t^2, x^4\}; f_{k_1, k_2}^{**} = \frac{\partial u_{k_1, k_2}^{**}}{\partial t} - P u_{k_1, k_2}^{**}$. Это часть базиса на диаграмме k_1, k_2 на Fig. 1.

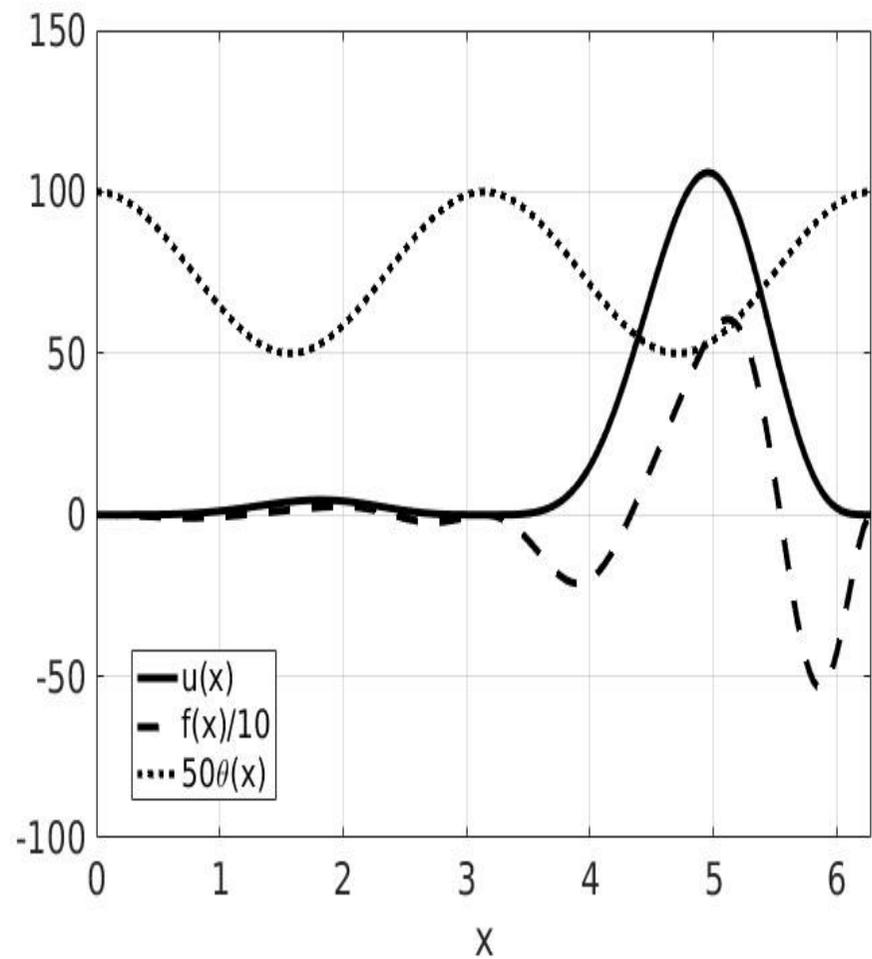
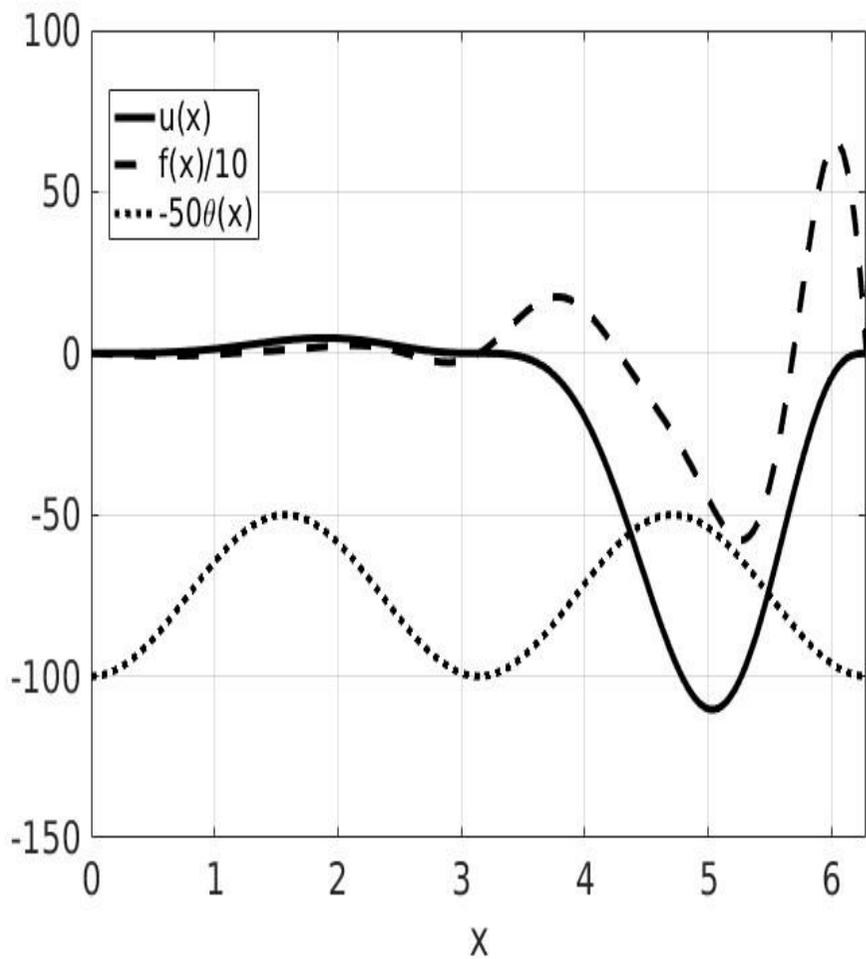
Не используются функции $u_{k_1, k_2}^{**} \in \{x, xt, xt^2\}$ т.к. они не удовлетворяют граничному условию Неймана. Например, если $u^{**} = x$, то

$$\frac{\partial u^{**}}{\partial x} \Big|_{x=0} = 1 \neq 0.$$

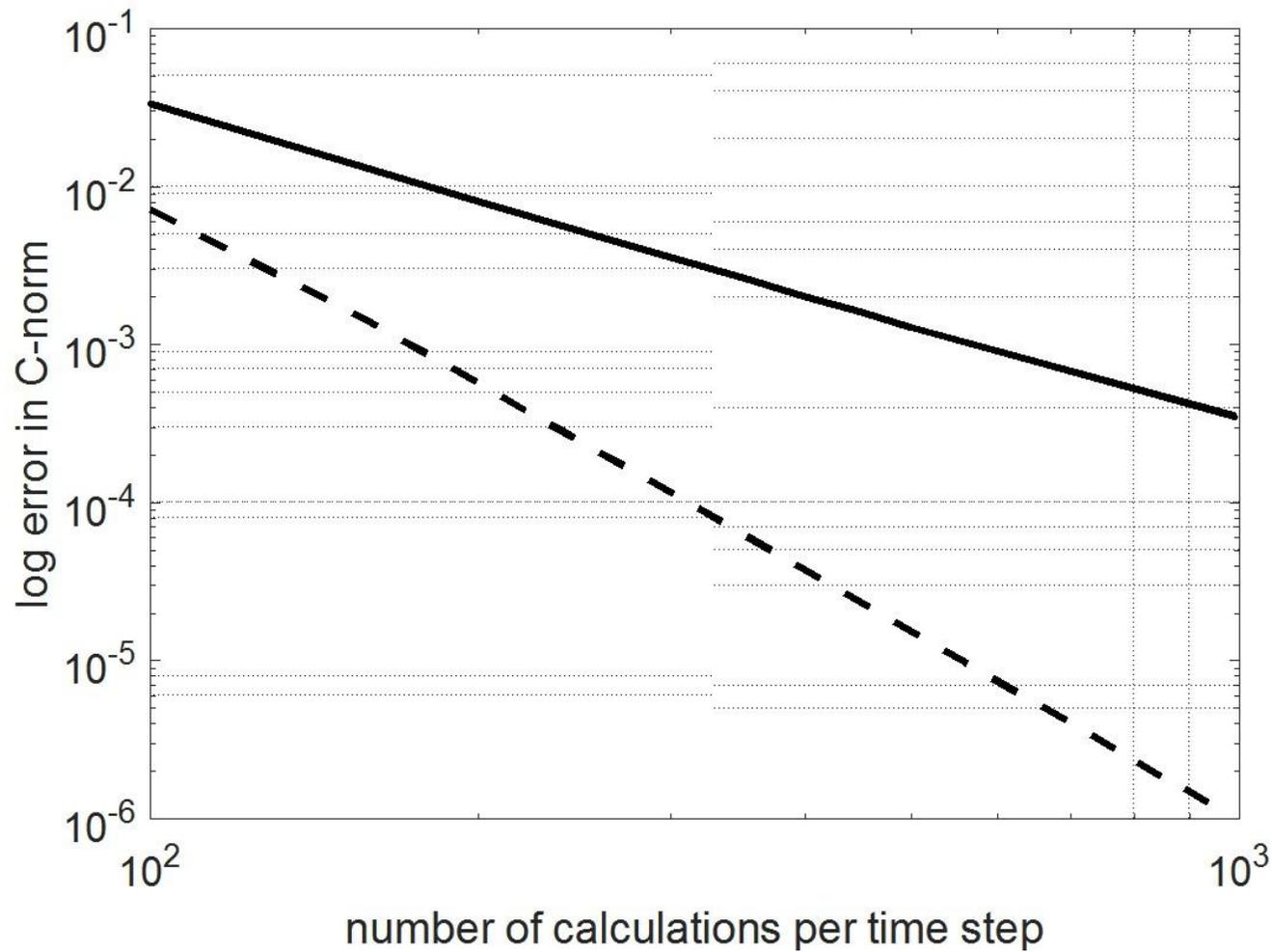
Снова строим систему линейных алгебраических уравнений и получаем:

- $\alpha_0^1 = 6\nu_0 + 4ah + 8bh^2 + 12ch^3 + 16dh^4 + 17ah\nu_0 + 34bh^2\nu_0 + 51ch^3\nu_0 + 68dh^4\nu_0 + 8$;
- $\alpha_1^1 = 16exp(-ah - bh^2 - ch^3 - dh^4) - 32bh^3\nu_0 - 48ch^3\nu_0 - 64dh^4\nu_0 - 16ah\nu_0$
 - $\alpha_2^1 = -\nu_0(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 6)$;
- $\alpha_0^0 = 6\nu_0 - 4ah - 8bh^2 - 12ch^3 - 16dh^4 + 17ah\nu_0 + 34bh^2\nu_0 + 51ch^3\nu_0 + 68dh^4\nu_0 - 8$;
 - $\alpha_1^0 = -16ah\nu_0 - 32bh^2\nu_0 - 48ch^3\nu_0 - 64dh^4\nu_0 - 16exp(-ah - bh^2 - ch^3 - dh^4)$;
 - $\alpha_2^0 = -\nu_0(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 6)$;
 - $\beta_0^0 = \beta_0^1 = 2\tau\nu_0(4dh^4 + 3ch^3 + 2bh^2 + ah + 2)$;
- $\beta_1^0 = \beta_1^1 = 8\tau\nu_0exp(-dh^4 - ch^3 - bh^2 - ah)$; • $\beta_2^0 = \beta_2^1 = 0$.

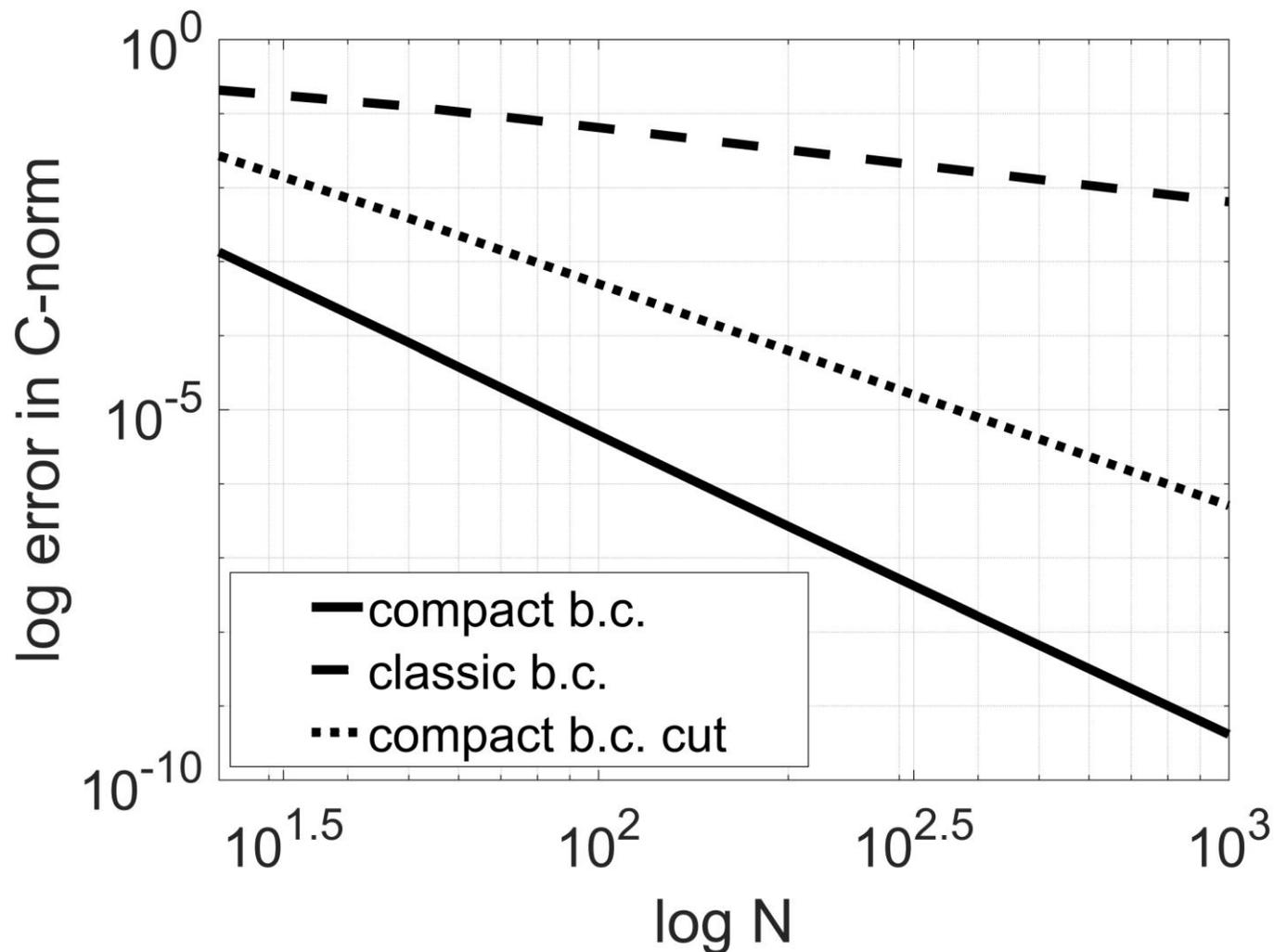
Аналогично получаем для правой части граничного условия. На двухточечном шаблоне по x для условия Неймана **нельзя** получить 4 порядок схемы!



Примеры проверочных решений. Сплошная – решение, пунктир – правая часть, точки – коэффициент.

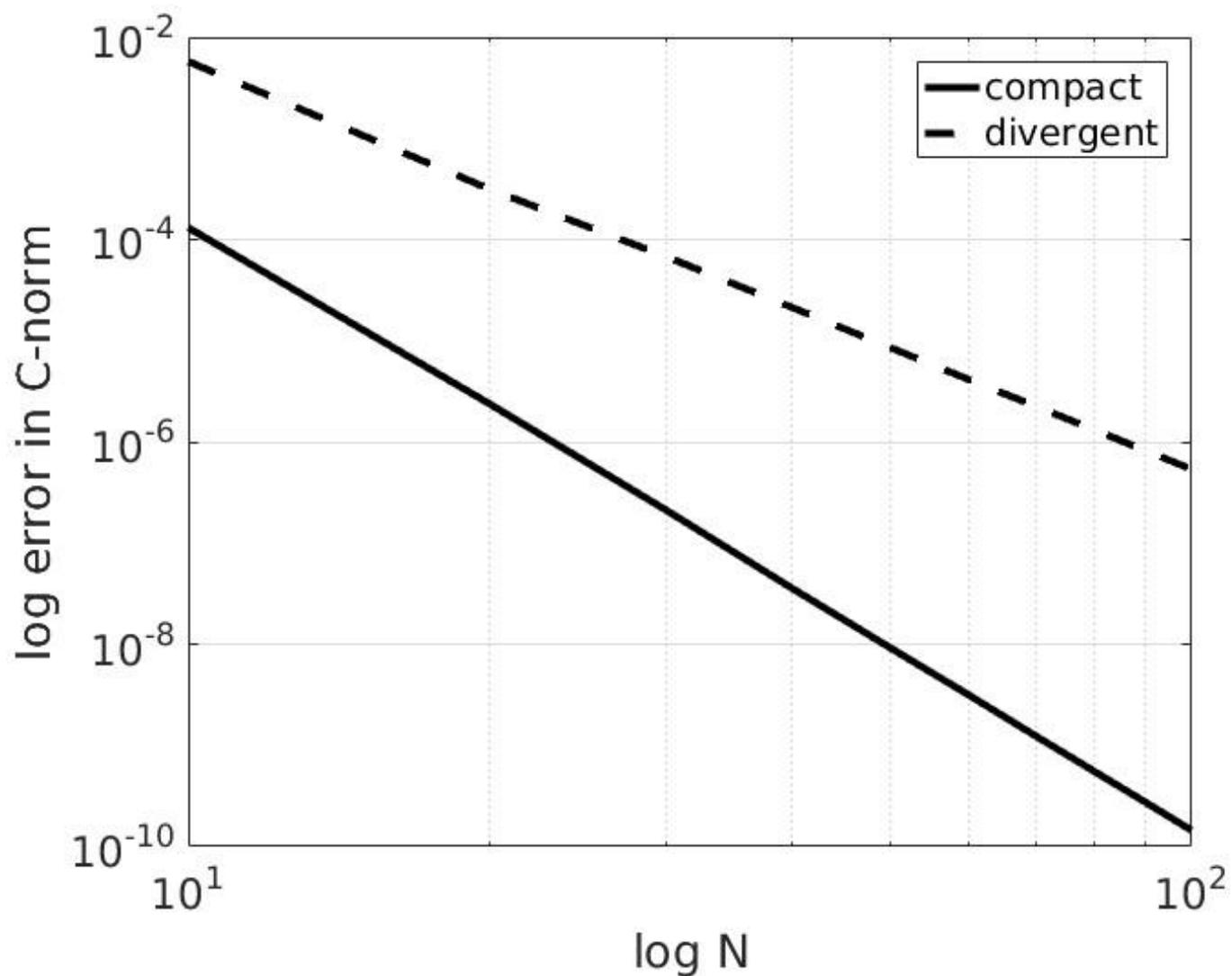


Погрешность, как функция числа арифметических операций для компактной (пунктир) и Кранка – Николсон (сплошная). Билогарифмический масштаб. Компактная схема дает 4 порядок. К-Н – второй порядок точности. Здесь граничные условия Дирихле.



Компактная схема, условие Неймана - по-разному аппроксимируем. Компактно на 3-точечном шаблоне - 4 порядок, Компактно на 2-точечном шаблоне - 3 порядок, классическая аппроксимация – 1 порядок (для схемы Кранка – Николсон получается 2 порядок).

Поскольку у обеих схем четкий порядок сходимости, можно применять экстраполяцию Ричардсона. Кранк – Николсон улучшает порядок до 4-го, а компактная – до 6-го.



Что будет, если в формулах для коэффициентов отбросить высокие порядки по h – насколько увеличится погрешность?

Table 6: Пример вычислений на пробном решении

Отбросим члены	$N = 10$	$N = 20$	$N = 50$	$N = 100$	порядок:
h^5 and greater	1.5659-2	1.7958-3	5.5527-5	3.5936-6	3.95
h^6 and greater	1.6422-2	1.1773-3	3.6297-5	2.3422-6	3.95
h^7 and greater	1.5917-2	1.3402-3	3.7068-5	2.3563-6	3.98
h^8 and greater	1.6026-2	1.3750-3	3.7280-5	2.3594-6	3.98
h^9 and greater	1.5965-2	1.3651-3	3.7272-5	2.3593-6	3.98
Exact scheme	1.5812-2	1.3642-3	3.7271-5	2.3593-6	3.98

Если отбросить еще больше членов в коэффициентах, то 4 порядок точности теряется.

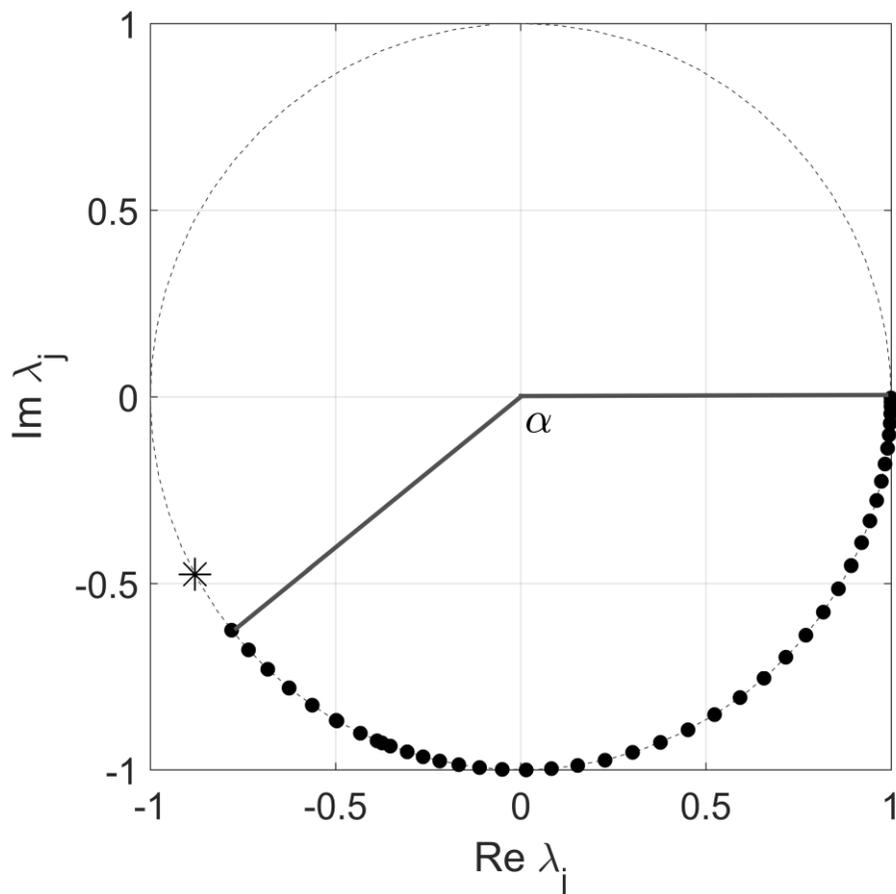
Почти самосопряженность матриц

Нашу разностную схему можно записать в операторной форме:

$$A_{new} u^{n+1} + A_{old} u^n = B_{new} f^{n+1} + B_{old} f^n$$

Положим $M = -A_{new}^{-1}A_{old}$. Эта матрица близка к самосопряженной. При большом числе точек сетки N расстояние от M до подпространства самосопряженных в метрике Фробениуса составляет $O(N^{-4})$. Спектр M вещественный.

Для уравнения Леонтовича – Левина формулы для коэффициентов получаются формальной заменой коэффициента диффузии. Но спектр матрицы перехода M не вещественный, а унимодальный.



Уравнение Леонтовича – Левина. Спектр матрицы перехода M . Если ν фиксировано, а число узлов N растёт, то угол α стабилизируется. Если $\nu \rightarrow 0$, то $\alpha \rightarrow 0$,
 А если $\nu \rightarrow \infty$, то $\alpha \rightarrow \pi$. Звездочка – два доп. собственных числа, отвечающих граничному условию Неймана. Для Дирихле их нет. Те же оценки погрешности собственных чисел.

Контролировали первый интеграл задачи (полную вероятность для Шрёдингера). Получили очень слабые периодические по времени осцилляции. Для ф.Симпсона амплитуда втрое меньше, чем для ф.трапеций. При уменьшении h амплитуда осцилляций убывает как $O(h^3)$.

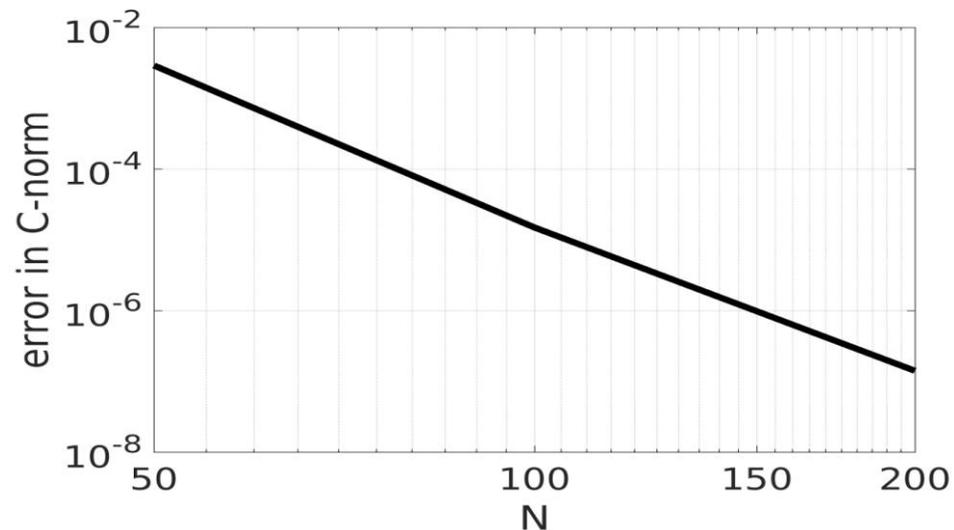
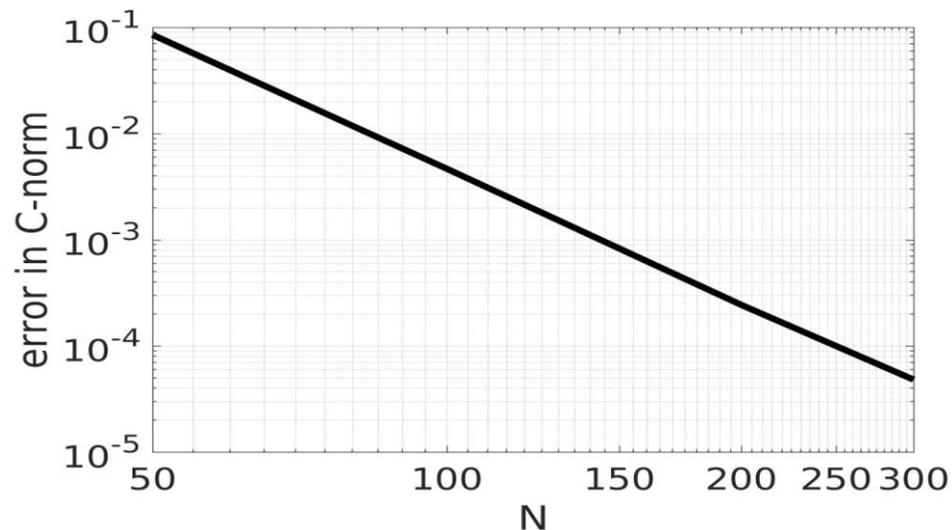
5. Компактная схема 4 порядка для квазилинейных параболических уравнений

V. A. Gordin, E. A. Tsymbalov. Compact difference schemes for weakly-nonlinear parabolic and Schrodinger-type equations and systems. Preprint.

Метод построения компактных схем 4-го порядка можно обобщить на уравнения и системы в частных производных со слабой нелинейностью, например, на уравнение Фишера – Колмогорова – Петровского – Пискунова, нелинейное уравнение Шрёдингера или система Фитцхью – Нагумо. Компактную разностную схему нетрудно построить, но она приводит к нелинейным алгебраическим уравнениям при выполнении шага по времени. Выход: сначала делаем шаг по обычной дешевой явной схеме второго порядка, а потом невязку нелинейного сеточного уравнения убираем итерациями. Для нелинейных задач используются различные итерационные методы и производится их сравнение по быстродействию.

Экстраполяция Ричардсона позволяет повысить порядок схем до 6-го.

Ниже ошибка комп. схемы для НУШ.– 4-й порядок, справа – вместе с Ричардсоном – 6-й.



Работа была поддержана грантами (проекты № 16-05-0069 и № 18-05-0011) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)» 2016 - 2017 гг и в 2018 - 2019 гг., соответственно, и в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".