

FUNDAMENTAL AND ENVIRONMENTAL FLUID MECHANICS 10-Я
МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ – ШКОЛА МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
ВОЛНЫ И ВИХРИ В СЛОЖНЫХ СРЕДАХ Москва, 4 декабря 2019

WAVES AND VORTICES IN COMPLEX MEDIA

**Компактные разностные схемы для аппроксимации
дифференциальных соотношений**

В.А.Гордин vagordin@mail.ru

НИУ-ВШЭ & Гидрометцентр России

Москва

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 $\frac{1}{2}$, 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.

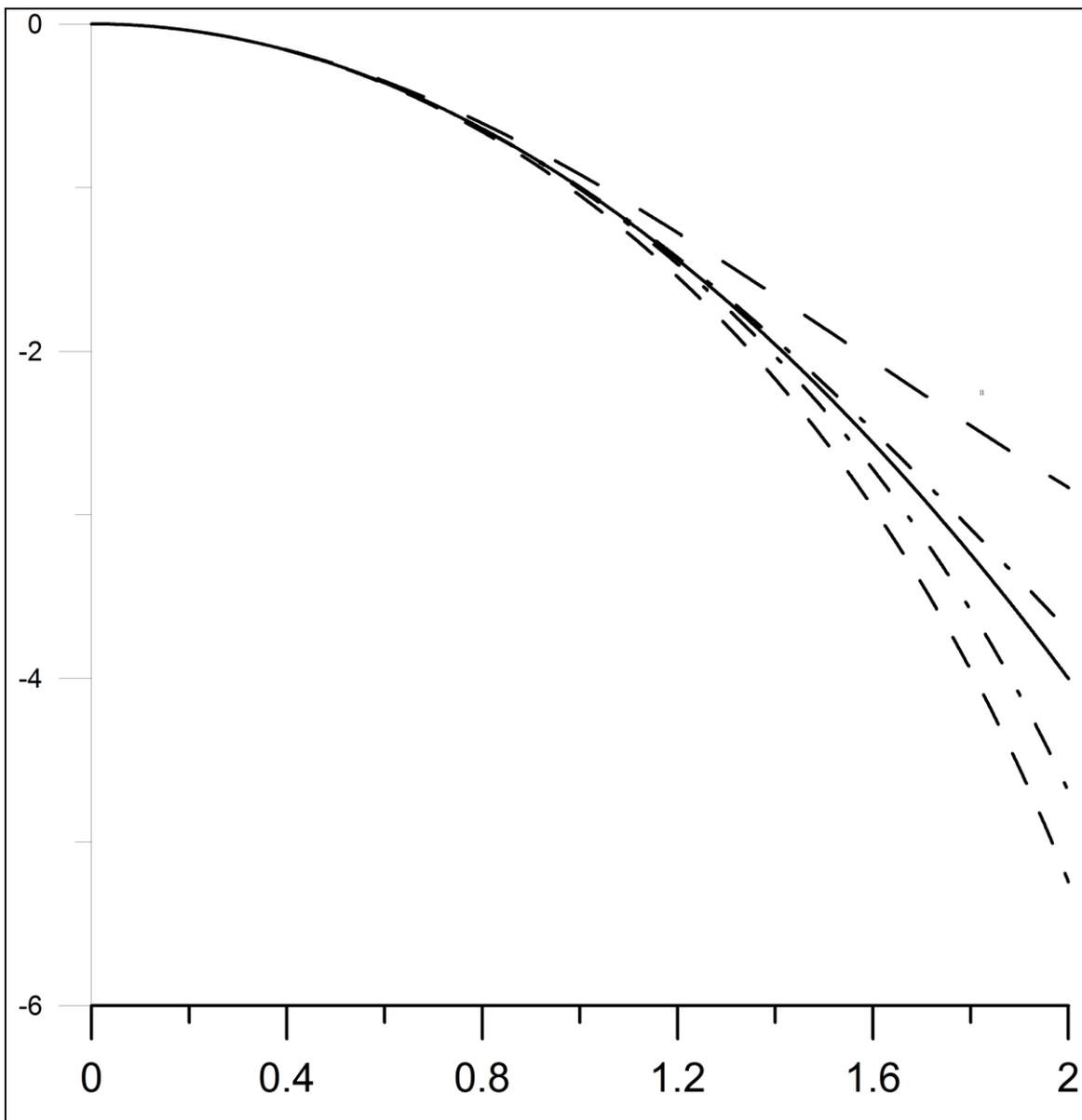


Рис.1. Символы операторов как функции от безразмерного параметра

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.

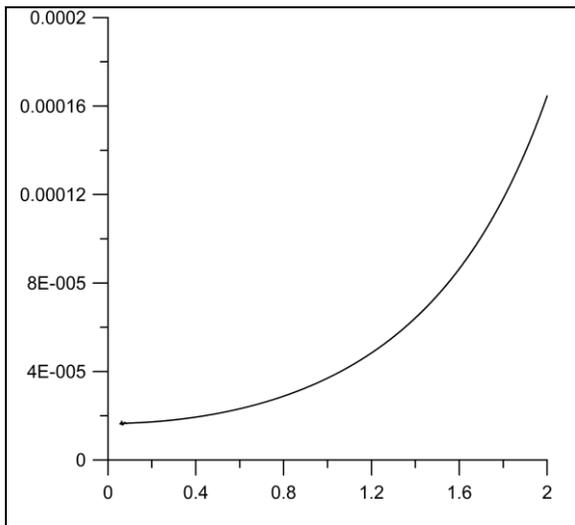
Помимо задач дифференцирования и решения диффузов можно еще и интерполяцию!

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:

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

(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 таковой. 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 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.

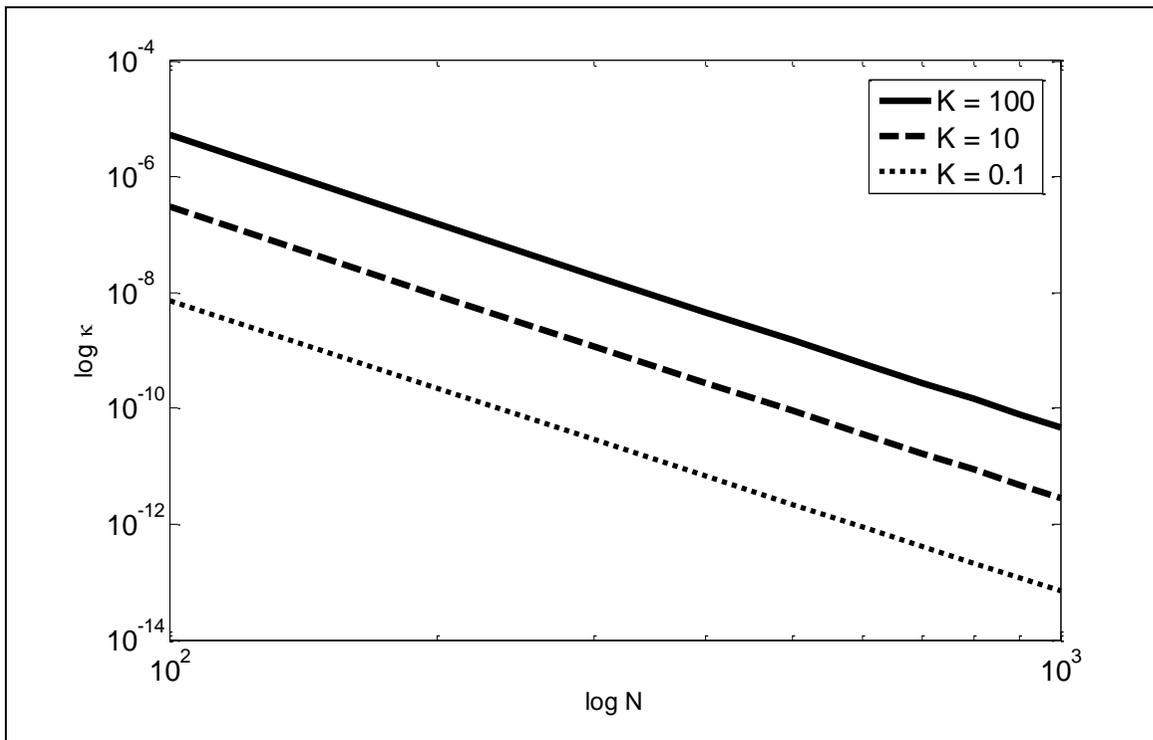


Рис. 3.5. Зависимость величины κ , показывающей отличие разностного оператора от самосопряженного от количества узлов сетки N . Билогарифмическая шкала. Видно, что $\kappa = O(h^5)$, т. е. имеет место «почти самосопряженность». K характеризует «извилистость» коэффициента \mathcal{G} .

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	(3.1)	K = 100	K = 10	K = 0.1	K=0.0001
Погрешность в норме С при N = 100	Кл	1.31-3	1.20-3	7.65-4	7.93-4	7.99-4
	Комп	1.68-6	4.38-5	8.43-6	1.75-6	1.38-6
Погрешность в норме С при N = 1000	Кл	1.29-5	1.16-5	7.49-6	7.78-6	7.83-6
	Комп	1.71-10	4.23-9	8.04-10	1.69-10	2.25-10
Порядок	Кл	2.0080	2.0147	2.0089	2.0082	2.0086
	Комп	3.9912	4.0151	4.0204	4.0149	3.7869
Отношение погрешностей при N = 1000 (класс/ компакт)		75272	2750	9315	45919	34802

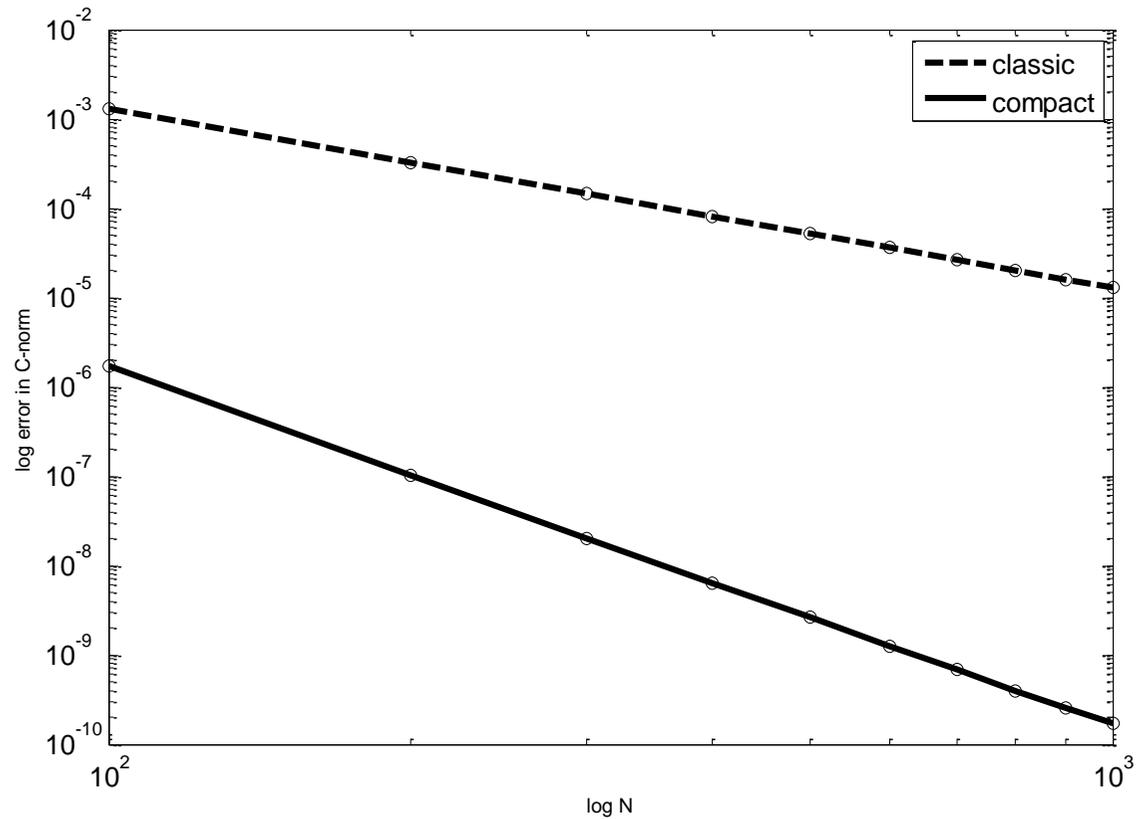


Рис. 3.1. Зависимость чебышевской нормы C погрешности схем от числа узлов сетки на решении. Билогарифическая шкала. Классическая схема имеет второй порядок аппроксимации, компактная – четвертый и меньшую погрешность.

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.

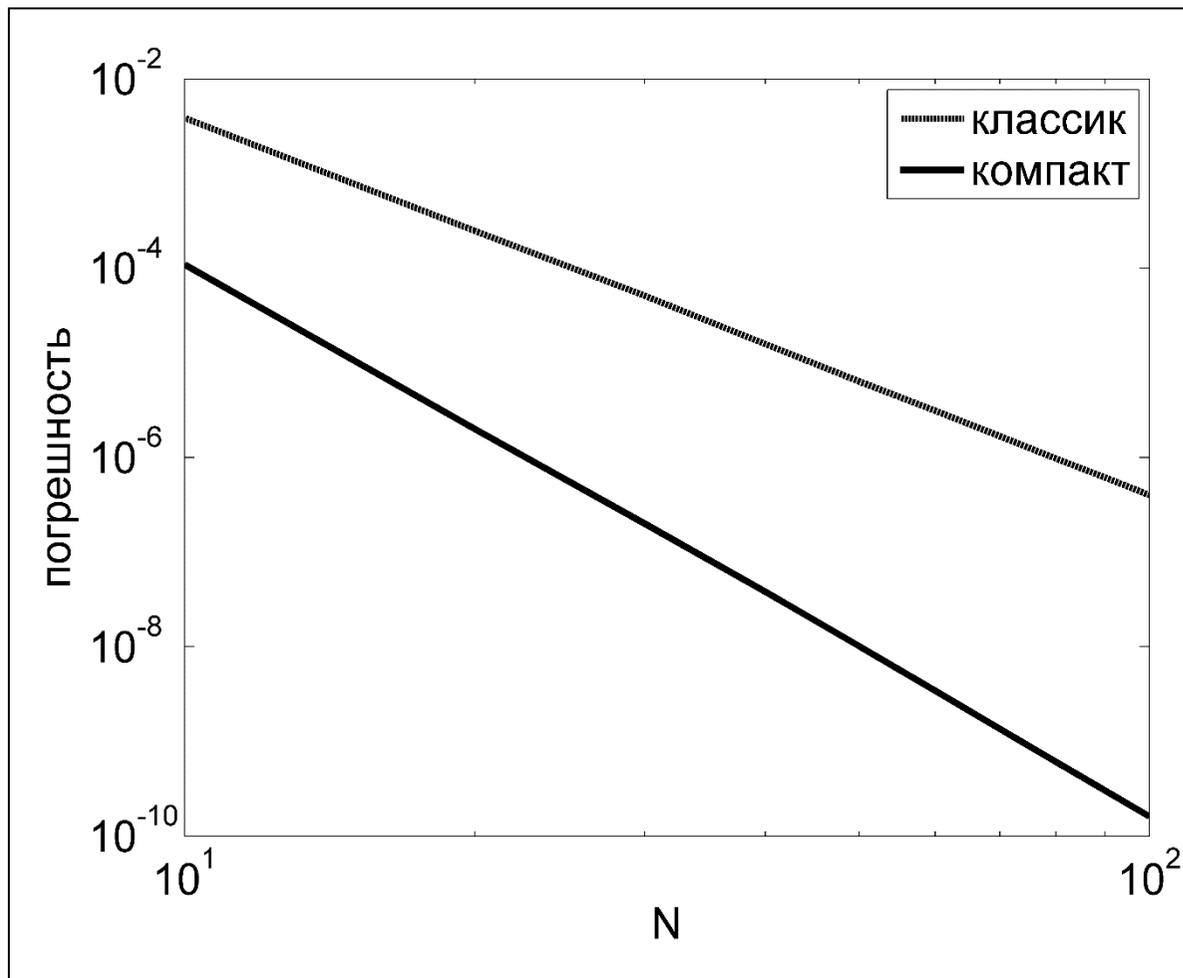


Рис. 2. Зависимость чебышевской нормы погрешности решения для обеих схем от числа узлов сетки на решении, при использовании экстраполяции Ричардсона. Билогарифическая шкала. **Классическая схема при использовании экстраполяции Ричардсона показывает четвертый порядок точности вместо второго, компактная – 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, терпит ли разрыв правая часть 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 .

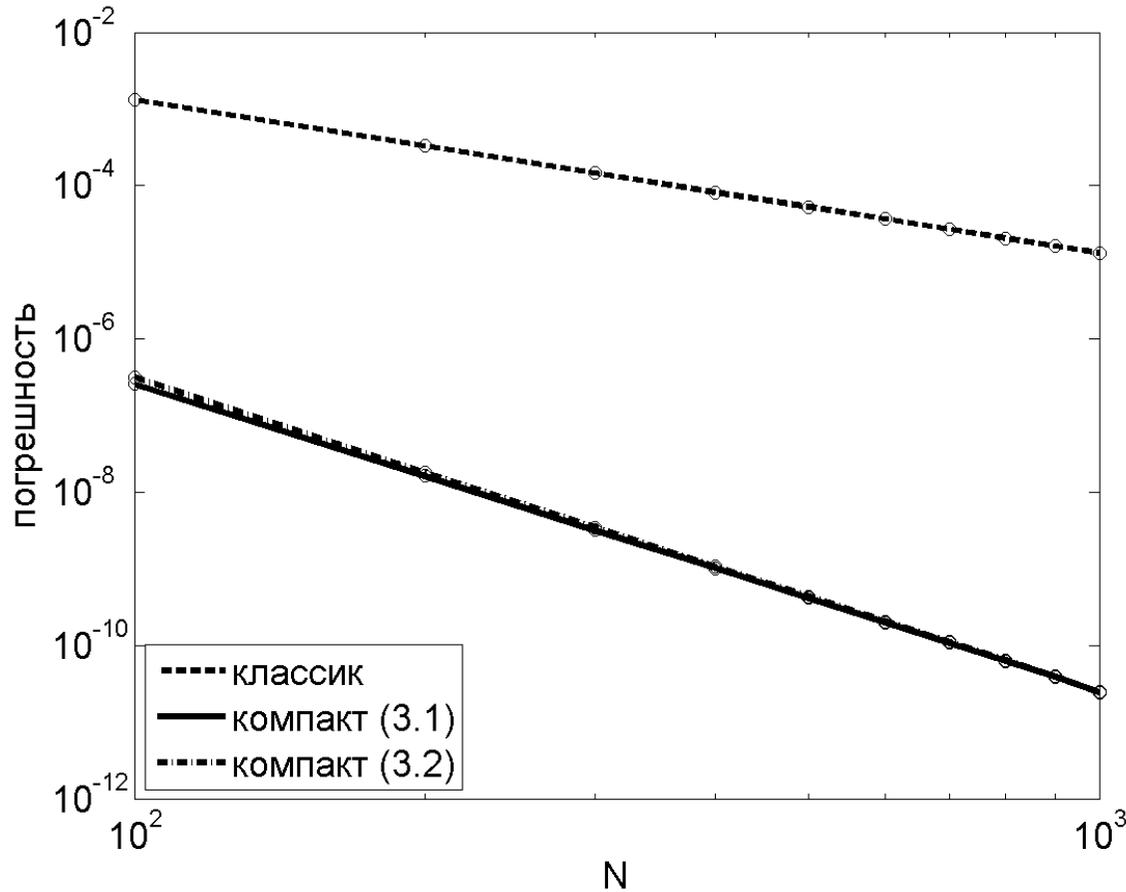
Выберем в качестве нормировки этого набора коэффициентов условие $b = -(\theta_+ + \theta_-)$. В точках $x \neq 0$ будем использовать стандартную компактную разностную схему 4-го порядка аппроксимации. Для определения остальных шести коэффициентов в уравнении (4) потребуем выполнение равенства (4) на 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:
 $a = \vartheta_+, c = \vartheta_-, p = r = 5h^2 / 6, p_2 = r_2 = -h^2 / 3.$

Полученная компактная схема в численных экспериментах будет сравниваться с классической дивергентной схемой:

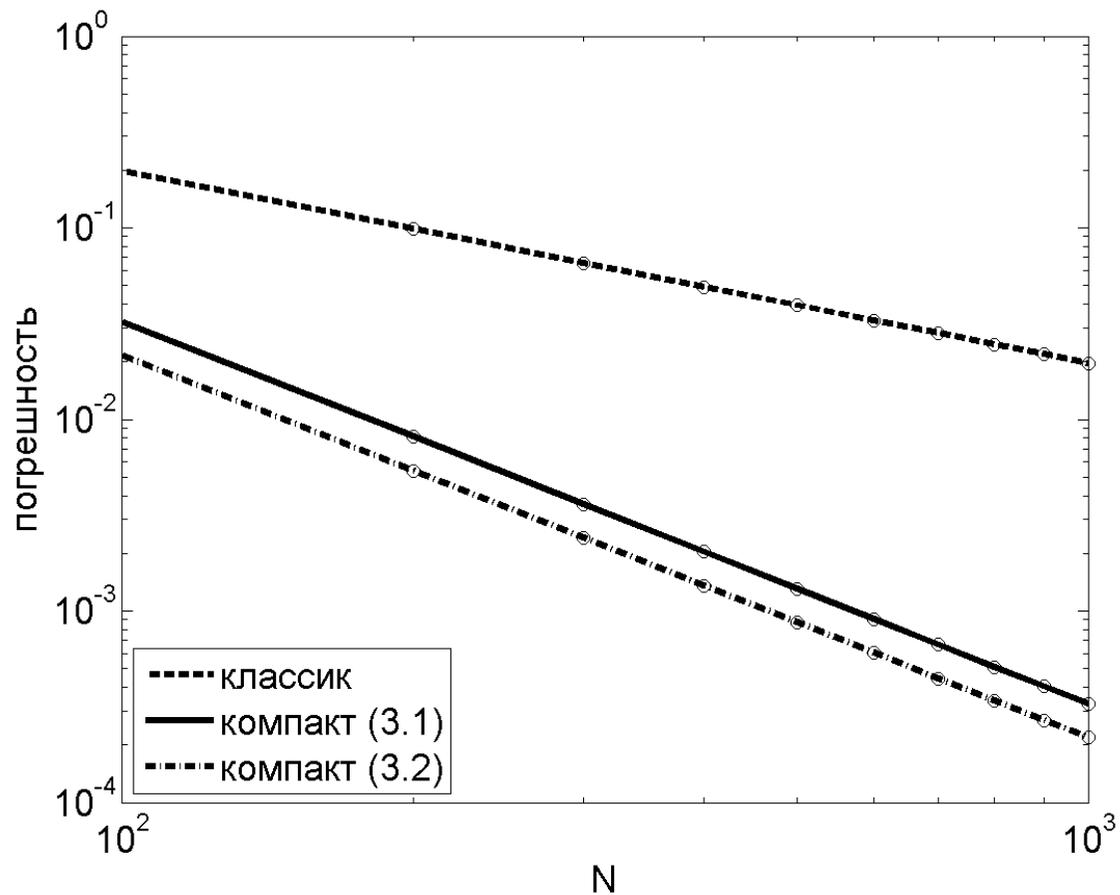
$$\theta(x_{j-1/2})u(x_{j-1}) - [\theta(x_{j-1/2}) + \theta(x_{j+1/2})]u(x_j) + \theta(x_{j+1/2})u(x_{j+1}) = f(x_j)h^2.$$



Коэффициент и правая часть разрывны. Здесь показана зависимость чебышевской нормы погрешности схем от числа узлов сетки на решении. Билогарифическая 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. Билогарифмическая 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 $\mathcal{G} = \begin{cases} \mathcal{G}_- \Leftarrow x < 0 \\ \mathcal{G}_+ \Leftarrow x > 0 \end{cases}$.

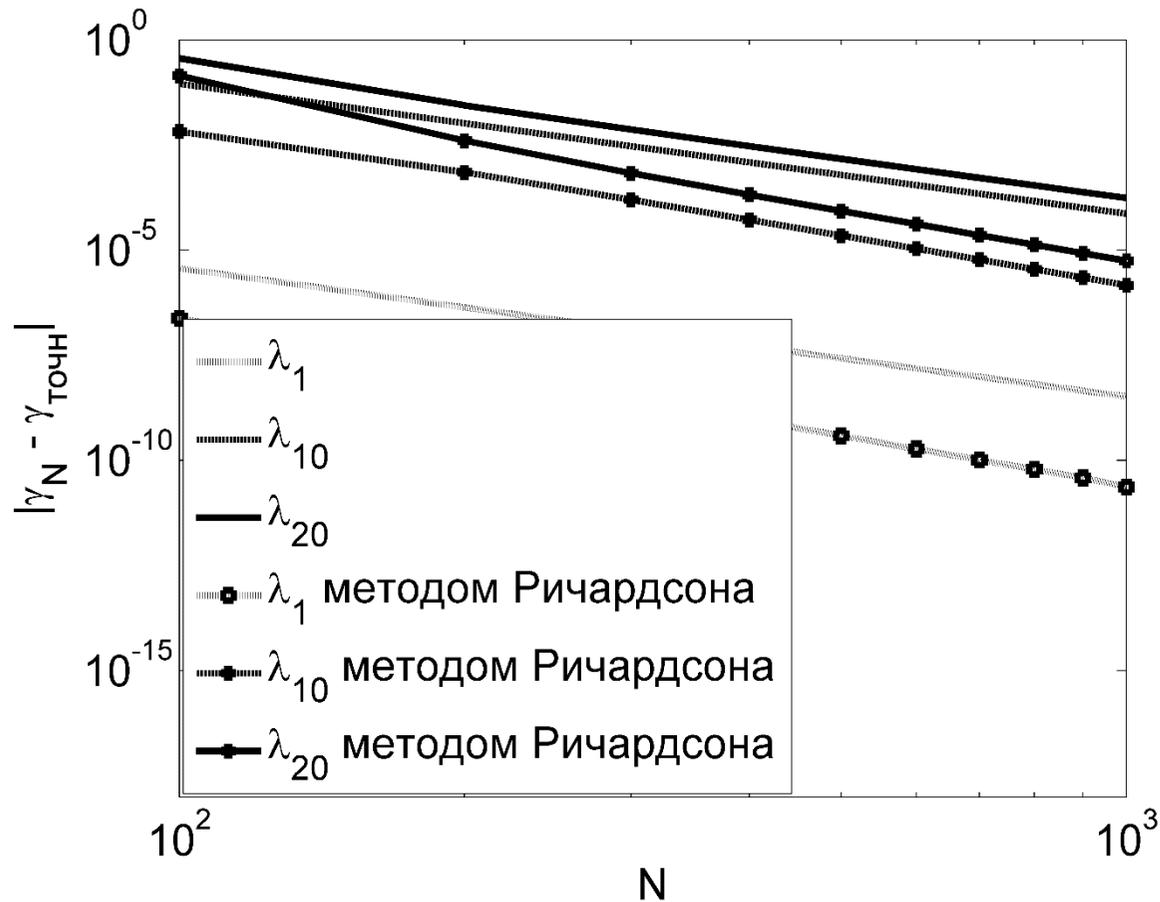
Напомним, что коэффициент \mathcal{G} - положительная функция, а поэтому и собственные числа краевой задачи Дирихле также положительны. Поэтому можно использовать представление для обеих величин:

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

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 .

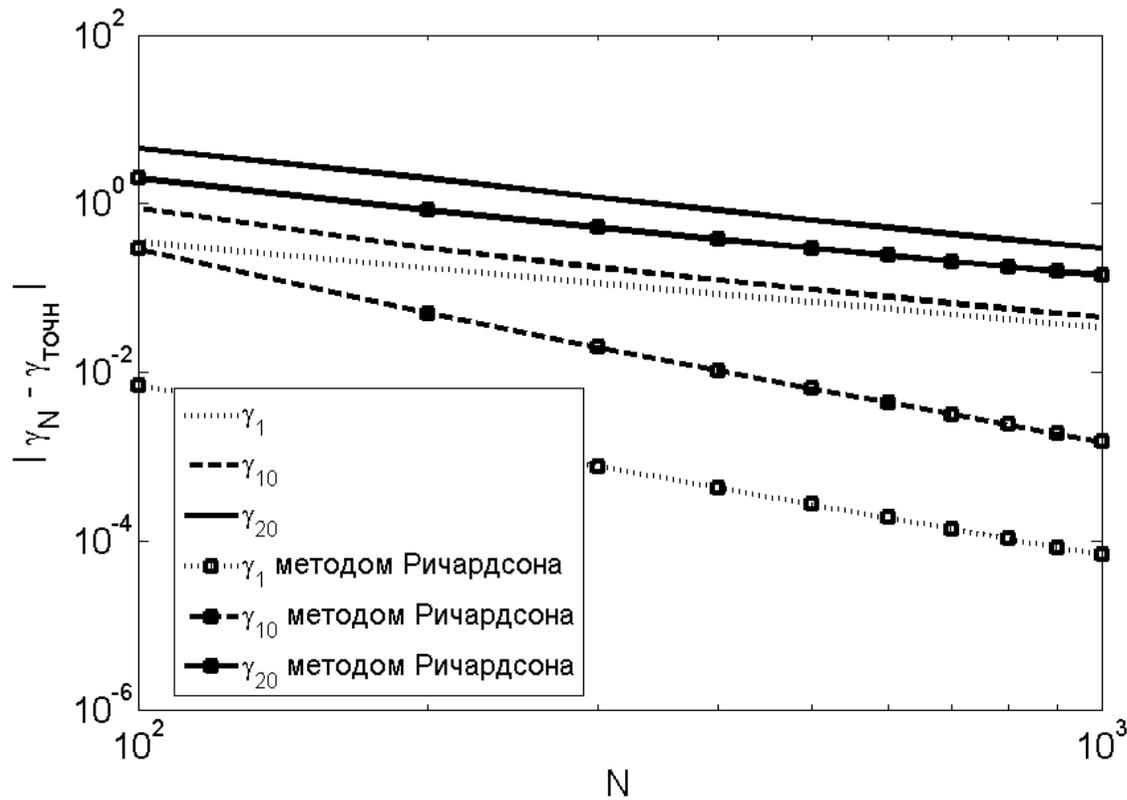


Рис.4. Зависимость погрешности аппроксимации величины $\gamma = E_l / E_r$ от числа узлов сетки N классической дивергентной схемой с использованием экстраполяции Ричардсона. Билогарифмическая шкала. **Использование метода Ричардсона повышает порядок точности аппроксимации γ дивергентной схемой с первого 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
$$\left(\frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6}\right)u_{j+1} + \frac{4\alpha}{6}u_j + \left(\frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6}\right)u_{j-1} = \left(\frac{1}{2h} + \frac{\beta}{6}\right)f_{j+1} + \frac{4\beta}{6}f_j + \left(\frac{-1}{2h} + \frac{\beta}{6}\right)f_{j-1}.$$

Символ разностного оператора для схемы где тильда – умножение коэффициентов на h :

$$R(\omega) = \frac{2\beta + \beta \cos \omega + \frac{3i}{h} \sin \omega}{2\alpha + \alpha \cos \omega + \frac{3i}{h} \sin \omega} = \frac{2\tilde{\beta} + \tilde{\beta} \cos \omega + 3i \sin \omega}{2\tilde{\alpha} + \tilde{\alpha} \cos \omega + 3i \sin \omega}$$

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

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

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

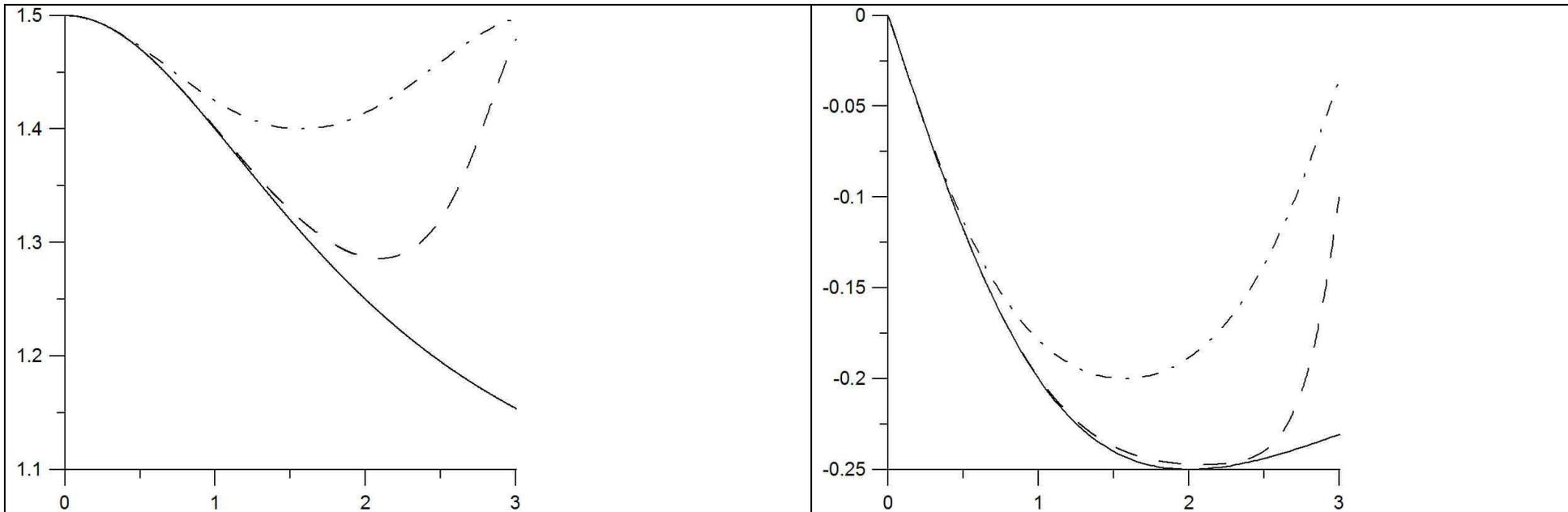


Рис.5. Вещественная и мнимая части символа псевдодифференциального оператора (5) (эталон) при $\alpha = 2$, $\beta = 3$ – сплошная линия, компактного оператора – пунктир, классического оператора – штрих-пунктир. Видно, что точность компактной аппроксимации на длинных и средних волнах имеет подавляющее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

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

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**.

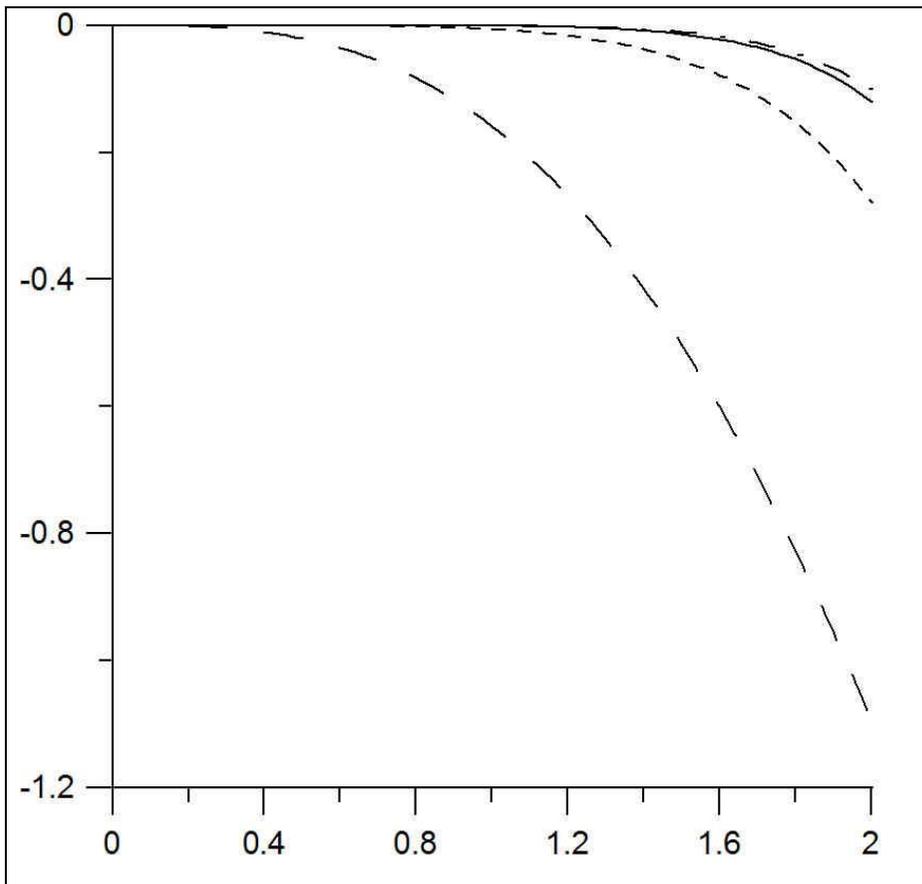


Рис.6. Погрешности разностных аппроксимаций оператора дифференцирования. А) погрешность классической схемы центральных разностей; Б) погрешность компактной схемы 4-го порядка на шаблоне 3+3; В) погрешность компактной схемы 6-го порядка на шаблоне 3+5; Г) погрешность компактной схемы 6-го порядка на шаблоне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

Эти подходы можно применить и к уравнениям с переменными коэффициентами и нелинейным уравнениям в частных производных, - к сожалению, регламент доклада не позволяет об этом подробно рассказывать.

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".