

Компактные разностные схемы для аппроксимации дифференциальных соотношений

В.А.Гордин НИУ ВШЭ & Гидрометцентр России, Москва

1. Постановка задачи

Большинство вычислительных задач математической физики связано с применением численных алгоритмов: дифференцирования, решения краевых или смешанных задач для дифференциальных уравнений (включая аппроксимацию высокого порядка точности сложных граничных условий), сглаживания, интерполяции. Во многих сложных вычислительных задачах применяется последовательно несколько таких блоков. Иногда и правая часть уравнения f , и неизвестная функция u входят в соотношение $P_1[u] = P_2[f]$, где P_1, P_2 - дифференциальные операторы.

Во многих случаях аппроксимация соотношения с помощью компактной конечно-разностной схемы оказывается весьма эффективной, позволяя увеличить (по сравнению с классической схемой) порядок точности почти без увеличения числа арифметических операций. Обычно основным вычислительным приемом реализации такой схемы в одномерных задачах является классическая прогонка.

Для увеличения эффективности вычислений можно использовать одновременную аппроксимацию двух (или более) вычислительных блоков. Например, если нужно численно функцию и продифференцировать и переинтерполировать на другую сетку. Или решить дифференциальное уравнение, в котором правая часть – производная известной функции.

Для рассмотрения задач такого рода оказывается полезным ввести в рассмотрение так называемые псевдодифференциальные операторы – класс, включающий в себя и дифференциальные, и разностные операторы, как и обратные к ним.

2. Основные определения

Линейный псевдодифференциальный оператор с постоянными коэффициентами действует на функции на прямой (или на окружности) по формуле

$$P[\varphi] = F_{\xi \rightarrow x}^{-1} \left[\sigma_P(\xi) F_{x \rightarrow \xi} \varphi(x) \right],$$

где F – преобразование Фурье. Функция $\sigma_P(\xi)$ называется символом оператора P . Свойства этого линейного оператора определяются свойствами его символа. Если и только если символ

$\sigma_P(\xi)$ – многочлен, то оператор P – дифференциальный. Символ разностного оператора

$P[\varphi(x)] = \sum_{j=-N}^M a_j \varphi(x + jh)$ – тригонометрический многочлен $\sigma_P(\xi) = \sum_{j=-N}^M a_j \exp(ijh\xi)$. Набор из $N+M+1$

точек сетки от $x-Nh$ до $x+Mh$ называется шаблоном оператора P в точке x .

Интегральный оператор, который по правой части дифференциального уравнения $P[u] = f$ определяет решение u (не уточняем здесь граничные условия), – псевдодифференциальный. Более общая задача получается, если также и правая часть получается применением к заданной функции f дифференциального оператора, т. е. если решается задача $P_1[u] = P_2[f]$.

В этом случае разрешающий оператор также псевдодифференциальный. В обоих этих случаях его символ – рациональная функция независимой переменной ξ .

Разностную аппроксимацию дифференциального уравнения $P[u]=f$ или более общего дифференциального соотношения

$$P_1[u] = P_2[f], \quad (1)$$

где $f(x)$ – заданная функция, где P_1, P_2 - дифференциальные операторы, будем осуществлять по компактной схеме, т. е. соотношением

$$Q_1[u] = Q_2[f], \quad (2)$$

где $Q_{1,2}$ - разностные операторы (их символы – тригонометрические многочлены).

Наша цель – аппроксимация дифференциальной задачи разностной при заданных шаблонах – поиск наилучшей пары разностных операторов $Q_{1,2}$. Разумеется, можно отдельно определить эти операторы, так чтобы Q_1 аппроксимировал P_1 , а Q_2 - оператор P_2 , потом применить к сеточной функции f оператор Q_2 , а затем обращать оператор Q_1 . Но такому «классическому» подходу присущи недостатки: или увеличивается шаблон, на котором аппроксимируется дифференциальная задача, или ухудшается порядок аппроксимации. Обычно еще и увеличивается число арифметических операций на узел сетки.

Расширение шаблона приводит к увеличению числа ненулевых диагоналей матрицы, которую нужно обращать для получения решения u , увеличению числа граничных условий по сравнению с исходной физической дифференциальной задачей.

Пример задачи, когда в правой части уравнения стоит не заданная функция, а некий оператор от нее (возможно, нелинейный): уравнение Джоуля – Ленца. В правой части уравнения теплопроводности учитывается ток, пропорциональный градиенту напряженности, полученной из предыдущей, электромагнитной задачи. Другой (линейный) пример: оценка истинных значений измеряемой величины, изменяющейся со временем, если известны показания измерительного прибора (с известной инерцией).

Во многих примерах компактных схем, аппроксимирующих дифференциальное уравнение, оператор Q_2 – подходящий оператор сглаживания, в то время как Q_1 - совпадает со своим классическим аналогом. Такие аппроксимации впервые, видимо, рассмотрели Кауэлл и Кромелен. Эти схемы использовал потом Б.В.Нумеров. Однако его ужасная, трагическая судьба на несколько десятилетий затормозила внедрение компактных схем в СССР, а также запутала и вопрос авторства.

Часто рассматриваются схемы, в которых шаблоны для искомых разностных операторов $Q_{1,2}$ совпадают, причем порядок обоих дифференциальных операторов не больше двух. Похожим образом можно рассмотреть и другой вариант: шаблоны для функций u и f сдвинуты друг относительно друга на $h/2$, а число точек в этих шаблонах отличается на 1. Соответствующие сетки называются иногда шахматными. Такие схемы применяются, в частности, в задачах интерполяции и сглаживания функций (подавления высоких частот).

3. Порядок аппроксимации

Анализируется не близость оператора $Q_1^{-1}Q_2$ к оператору $P_1^{-1}P_2$ в какой-то норме, но только асимптотическая близость символов этих псевдодифференциальных операторов при $\xi \rightarrow 0$. Это приближение длинных волн или частот, или предположение о гладкости функций u, f .

Задача сводится к подбору коэффициентов разностных операторов Q_1, Q_2 при заданном шаблоне. Распространенный случай: $N=M=1$, т. е. трехточечные шаблоны, где применима обыкновенная прогонка, и стандартная цель – обеспечение 4-го порядка аппроксимации.

Ищем такие шесть коэффициентов a, b, c, p, q, r , что разность символов аппроксимируемого и аппроксимирующего операторов $\frac{\sigma_{P_2}(\xi)}{\sigma_{P_1}(\xi)} - \frac{p \exp(-i\xi h) + q + r \exp(i\xi h)}{a \exp(-i\xi h) + b + c \exp(i\xi h)} = O((\xi h)^4)$ асимптотически мала.

Поскольку при одновременном умножении всех коэффициентов на ненулевую константу символ – рациональная функция от $\exp(i\xi h)$ - не меняется, эта задача имеет не шесть, а пять степеней свободы.

Условие аппроксимации: $p \exp(-i\xi h) + q + r \exp(i\xi h) - \frac{\sigma_{P_2}(\xi)}{\sigma_{P_1}(\xi)} [a \exp(-i\xi h) + b + c \exp(i\xi h)] = O((\xi h)^4)$.

Положим $\omega = \exp(i\xi h) \rightarrow 1$, $\Rightarrow p + q\omega + r\omega^2 - \frac{\sigma_{P_2}(\ln(\omega)/ih)}{\sigma_{P_1}(\ln(\omega)/ih)} [a + b\omega + c\omega^2] = O((\omega - 1)^4)$.

Ищем коэффициенты компактной разностной схемы \Leftrightarrow строим рациональную аппроксимацию Эрмита - Паде для функции $\sigma_{P_2}(\ln(\omega)/ih)\sigma_{P_1}^{-1}(\ln(\omega)/ih)$ в точке $\omega = 1$.

4. Примеры аппроксимации соотношений первого порядка

I. Для аппроксимации производной – соотношения $d_x u = f$, где $P_1 = d_x, P_2 = E$, - хорошо известна аппроксимирующая компактная схема на трехточечном шаблоне:

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

При периодических условиях матрица A для СЛАУ порядка N $A\vec{u} = B\vec{f}$ вырождена. Здесь

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2h} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & -\frac{1}{2h} \\ \frac{-1}{2h} & 0 & \frac{1}{2h} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \frac{-1}{2h} & 0 & \frac{1}{2h} & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \frac{-1}{2h} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & 0 & \frac{-1}{2h} & 0 & \frac{1}{2h} & \cdot \\ \frac{1}{2h} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & -\frac{1}{2h} & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \frac{4}{6} & \frac{1}{6} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{4}{6} & \frac{1}{6} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{4}{6} & \frac{1}{6} & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{4}{6} & \frac{1}{6} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & 0 & \frac{1}{6} & \frac{4}{6} & \frac{1}{6} & \cdot \\ \frac{1}{6} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{1}{6} & \frac{4}{6} \end{pmatrix},$$

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 число

точек G сетки четно, то потребуется даже 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: отдельно для четных j и для нечетных j .

Напротив, если функция u задана, а неизвестна функция f , т. е. при решении задачи дифференцирования, неизвестная функция определяется однозначно. У матрицы B доминирует диагональ.

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

II. Рассмотрим дифференциальное уравнение $d_x u + \alpha u = f$. При $\alpha \in \mathbb{R} \setminus 0$ периодическое решение задачи $u(x)$ существует и единственно. Для аппроксимации уравнения компактная схема на трехточечном шаблоне строится следующим образом: перенесем слагаемое нулевого порядка в правую часть: $d_x u = f - \alpha u$, и используем предыдущую схему. Затем слагаемые с неизвестной функцией переносим обратно в левую часть равенства:

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

Трехдиагональная матрица A для решения \vec{u} разностного уравнения $A\vec{u} = B\vec{f}$ должна быть дополнена первой и последней строкой описывающими граничные (например, периодические) условия. В случае периодических граничных условий спектр матрицы A

содержится во множестве $\Lambda = \left\{ \lambda = \frac{2\alpha}{3} + \frac{\alpha \cos(\xi h)}{3} + i \frac{\sin(\xi h)}{h} \right\} \subset \mathbb{C}$, $\xi \in \mathbb{R}$. При $\alpha \neq 0$ нуля среди этих комплексных чисел нет:

$$A = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \frac{4\alpha}{6} & \frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \frac{4\alpha}{6} & \frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \frac{4\alpha}{6} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{6} & \frac{4\alpha}{6} & \frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{6} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

III. Для более общего ДС $d_x u + \alpha u = d_x f + \beta f \Leftrightarrow d_x(u - f) + \alpha(u - f) = (\beta - \alpha) f$ (3)

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 $R(\omega) = \frac{2\beta + \beta \cos \omega + \frac{3i}{h} \sin \omega}{2\alpha + \alpha \cos \omega + \frac{3i}{h} \sin \omega} = \frac{2\tilde{\beta} + \tilde{\beta} \cos \omega + 3i \sin \omega}{2\tilde{\alpha} + \tilde{\alpha} \cos \omega + 3i \sin \omega}$, тильда – умножение коэффициентов на h .

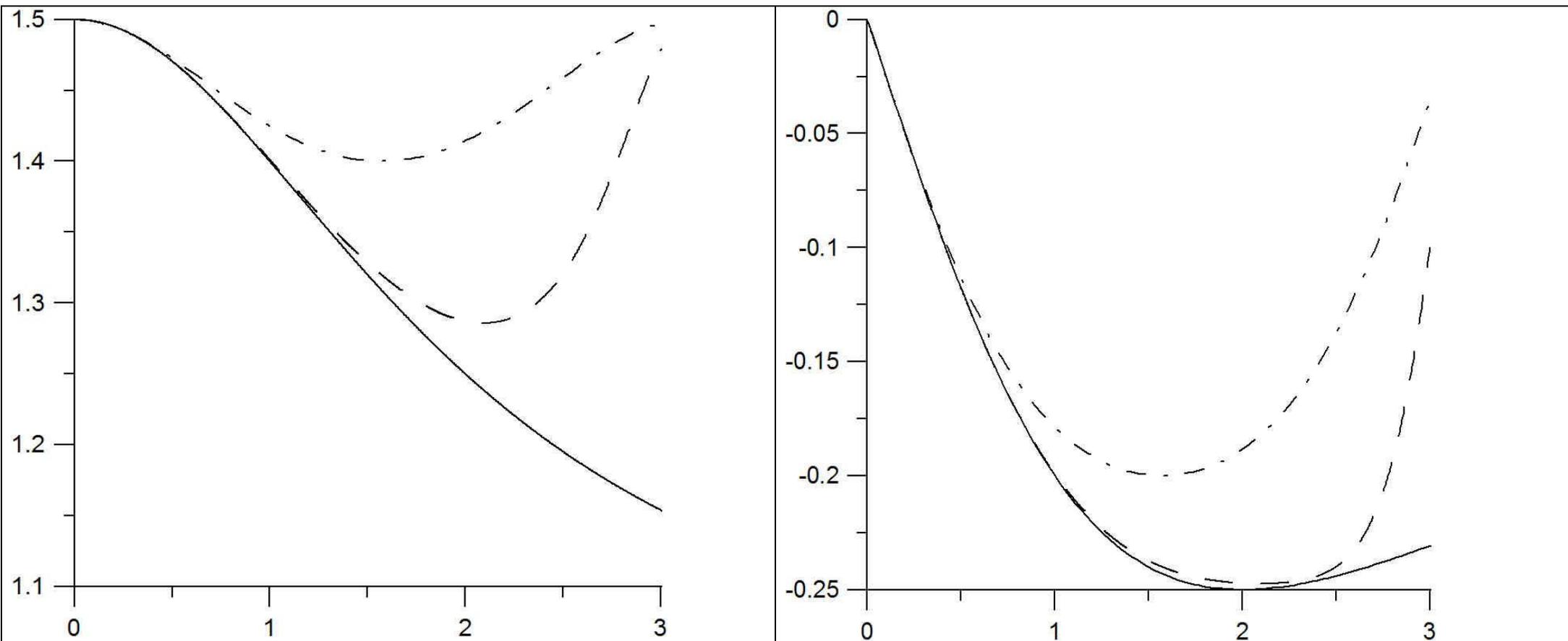


Рис.1. Вещественная и мнимая части символа псевдодифференциального оператора (4) при $\alpha = 2$, $\beta = 3$ – сплошная линия, компактного оператора – пунктир, классического оператора – штрих-пунктир. Точность компактной аппроксимации не только на малых, но и на средних волнах имеет подавляющее преимущество по сравнению с точностью классической

5. Варианты расширения шаблона

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

рац. тригоном. 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,

умножив на знаменатель, получаем $p_0 + p_1 + p_2 = 1$, $p_1 + 4p_2 = 1/3$, $p_1 + 16p_2 = 1/5$. 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 и компактной аппроксимации на шаблоне 3+5 все чисто мнимые. Компактная схема в этом случае

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

Погрешности (разности символов разностных операторов и эталонного) см. **Рис.2.**

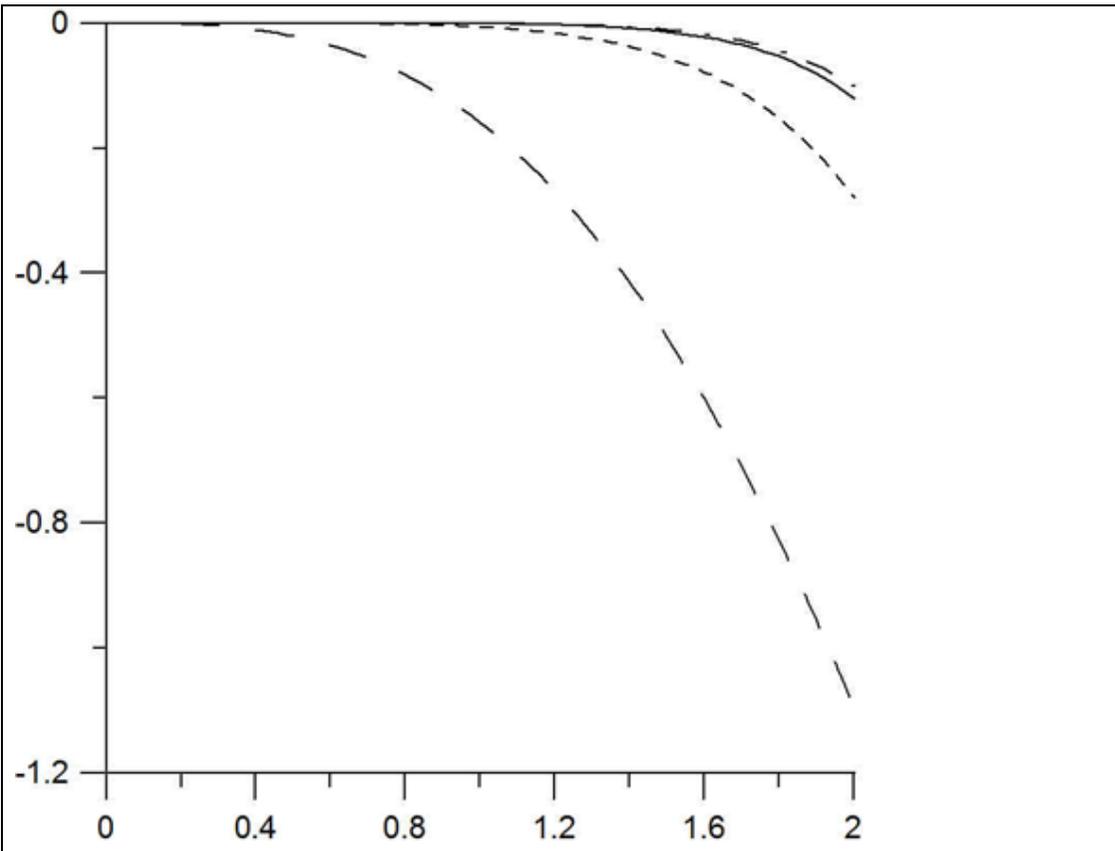


Рис.2. Погрешности разностных аппроксимаций оператора дифференцирования (нумерация кривых снизу вверх). А) погрешность классической схемы центральных разностей; Б) погрешность компактной схемы 4-го порядка на шаблоне 3+3; В) погрешность компактной схемы 6-го порядка на шаблоне 3+5; Г) погрешность компактной схемы 6-го порядка на шаблоне 5+3.

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.2 показывает, что при том же порядке точности, что и схема В) на шаблоне 3+5, 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. Если ставятся периодические граничные условия, то матрица A вырождена.

Если же нужно определять из полученного разностного соотношения сеточную функцию $\{f_j\}_{j=0}^N$, то и тут вырожденность, но уже матрицы задачи B зависит от граничных условий. При периодических условиях в случаях В), Г) доминирует диагональ, а значит, B обратима.

6. Примеры аппроксимации соотношений второго порядка

I. Для компактной аппроксимации уравнения $d_x^2 u = f$ на трехточечном шаблоне стандартно:

$$\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = \frac{1}{12} f_{j+1} + \frac{10}{12} f_j + \frac{1}{12} f_{j-1}. \quad (4)$$

II. Для аппроксимации дифференциального соотношения $d_x^2 u = d_x f$ компактную схему на трехточечном шаблоне $au_{j-1} + bu_j + cu_{j+1} = pf_{j-1} + qf_j + rf_{j+1}$ стандартно: 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 пропорционально следующему: $r=1$, $p=-1$, $q=0$, $a=c=2h^{-2}$, $b=-4h^{-2}$. В данном случае компактная схема при надлежащей нормировке (все ее коэффициенты нужно поделить на 2) совпадает с классической схемой: для правой части используется первая центральная разность, для левой – вторая:

$$\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2h}. \quad (5)$$

Компактная разностная схема, аппроксимирующая соотношение $d_x^2 u = d_x f + \alpha f$:

$$\frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} = \left(\frac{-1}{2h} + \frac{\alpha}{12} \right) f_{j-1} + \frac{10\alpha}{12} f_j + \left(\frac{1}{2h} + \frac{\alpha}{12} \right) f_{j+1}. \quad (6)$$

III. Используем схему (6) 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

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

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

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

трехдиагональной матрицы A , 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 A комплексный, и мнимая часть собственных чисел равна нулю только при $\sin(\xi h) = 0$, а значит, при $\cos(\xi h) = \pm 1$. Матрица A вырождена при $\left(\frac{-2}{h^2} + \frac{10\gamma}{12} \right) = \pm 2 \left(\frac{1}{h^2} + \frac{\gamma}{12} \right)$.

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 $d_x^2 u + \beta d_x u + \gamma u = d_x^2 f + \alpha d_x f + \delta f$.

Компактная аппроксимация дифференциальных соотношений третьего порядка и выше на трехточечном шаблоне невозможна. Для аппроксимации соотношений, содержащих производные третьего и четвертого порядков нужен пятиточечный шаблон.

7. Соотношения высокого порядка и уравнения в частных производных

Пример аппроксимации ДС: 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. В задаче Коши для этого уравнения задаются начальные условия: $u(0, x) = f_0(x)$, $\partial_t u(0, x) = f_1(x)$. Для старта 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.

Пример 1. Нелинейное уравнение Шрёдингера ``с производной``:

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

Представим 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 однослойная по t аппроксимация такой системы имеет вид

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

Система (9) содержит 24 свободных коэффициента. 2 нормировочных соотношения на эти коэффициенты, т.е. нужно составить еще 22 линейных алгебраических уравнения.

Тестовые функции – четверки $\langle p, q, f, g \rangle$. Считаем: функции вида $\langle 0, 0, 1, 0 \rangle$, $\langle 0, 0, t, 0 \rangle$, $\langle 0, 0, 0, 1 \rangle$, $\langle 0, 0, 0, s \rangle$.

По пять функций $\langle x^k, 0, *, * \rangle$, $k = 0, \dots, 4$, $\langle 0, x^k, *, * \rangle$, $k = 0, \dots, 4$, по три функции $\langle tx^k, 0, *, * \rangle$, $k = 0, 1, 2$, $\langle 0, tx^k, *, * \rangle$, $k = 0, 1, 2$, и пара функций $\langle t^2, 0, 2tx, 0 \rangle$, $\langle 0, t^2, 0, 2tx \rangle$, где $*$ определяются дифференцированием компоненты p или q , а затем интегрированием по x обоих уравнений.

Решение СЛАУ 24 порядка. Нужно 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 через p и q 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 метод Ньютона – Рафсона или, что оказывается эффективнее, релаксационные методы.

Пример 2. Система дифференциальных комплексных уравнений Копа – Ньюэла:

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

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

Для обоих примеров известны аналитические решения солитонного типа.

8. Полуявные компактные схемы

Чтобы не решать системы нелинейных уравнений можно использовать полуявные схемы, неявность только для линейных членов дифференциального уравнения. Впервые эта идея встречается у И.А.Кибеля, а затем его ученики улучшили схему – до второго порядка. Через несколько лет независимо ее предложил Робер. По его имени и закрепилось название.

Например, уравнение Бюргерса можно записать в виде $[\partial_t - D\partial_x^2]u = \partial_x f$, $f = -u^2 / 2$.

Будем строить компактную схему вида

$$\sum_{k=0}^2 [a_k u_{j-1}^{n+k} + b_k u_j^{n+k} + c_k u_{j+1}^{n+k}] = \sum_{k=0}^1 [A_k f_{j-1}^{n+k} + B_k f_j^{n+k} + C_k f_{j+1}^{n+k}].$$

У схемы 15 коэффициентов. Уравнения: 1 условие нормировки, две тестовых функции $\langle 0,1 \rangle$, $\langle 0,t \rangle$. Решения вида $u = t^k x^m$, где $0 \leq 2k + m \leq 4$. Обеспечен 4 порядок точности + две степени свободы для обеспечения устойчивости схемы. Линеаризуем уравнение около нулевого решения. Тогда слагаемые с f не влияют на устойчивость.

Перепишем левую часть: $P_2 \vec{u}_{n+2} + P_1 \vec{u}_{n+1} + P_0 \vec{u}_n = 0$, где все матрицы трехдиагональны.

Устойчивость определяется спектром блочной матрицы $\begin{pmatrix} -P_2^{-1}P_1 & -P_2^{-1}P_0 \\ E & 0 \end{pmatrix}$ или, что то

же самое, спектрального пучка $\det [P_2 \lambda^2 + P_1 \lambda + P_0] = 0 : |\lambda_j| \leq 1$. Преобразование Фурье.

9. Аппроксимация кусочно-постоянного коэффициента

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

Разобьём отрезок $[-\pi; \pi]$ на M частей и аппроксимируем на полученной сетке краевую задачу со скачком в положительном коэффициенте в точке $x = 0$:

$$\begin{aligned} \theta_- &\Leftarrow x < 0, \\ \theta_+ &\Leftarrow x > 0. \end{aligned} \tag{9.1}$$

Коэффициенты компактной схемы вдали от точки разрыва берем стандартные:

$$\mathcal{G}(jh) [u((j+1)h) - 2u(jh) + u((j-1)h)] = h^3 [f((j+1)h) + f((j-1)h) + 10f(jh)] / 12, \quad \text{где } h = 2\pi / M, \quad j = 1, \dots, M-1.$$

Значение коэффициента в единственной точке скачка $\theta(0)$ не влияет на решение дифференциальной задачи (9.1). Зато нужно учесть имеющие ясный физический смысл стыковочные условия при $x = 0$ для решения дифференциального уравнения (9.1):

$$\begin{aligned} u_{-0} &= u_{+0}; \\ \theta_- (d_x u)_- &= \theta_+ (d_x u)_+. \end{aligned} \tag{9.3}$$

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

$$au(h) + bu(0) + cu(-h) = p_2 f(2h) + pf(h) + rf(-h) + r_2 f(-2h), \tag{9.4}$$

где a, b, c, p_2, p, r, r_2 – коэффициенты, определяемые с точностью до общего множителя. Для неизвестной функции u аппроксимация использует лишь трехточечный шаблон, расширяем шаблон только для правой части дифференциального уравнения f .

Нормировка набора коэффициентов: $b = -(\theta_+ + \theta_-)$. При $x \neq 0$ стандартная схема (9.2). Для шести коэффициентов в уравнении (9.4) потребуем выполнение (9.4) на следующих шести тестовых функциях:

Тестовые функции и уравнения на коэффициенты компактной схемы в точке скачка

#	u	f	Уравнение на коэффициенты (9.4)
(9.5)	1	0	$a + b + c = 0$
(9.6)	$\theta_+ x \Leftarrow x < 0, \theta_- x \Leftarrow x \geq 0$	0	$a\theta_- h - c\theta_+ h = 0$
(9.7)	x^2	$-2\theta_- \Leftarrow x < 0, -2\theta_+ \Leftarrow x > 0$	$(a + c)h^2 = -2[(p_2 + p)\theta_+ + (r_2 + r)\theta_-]$
(9.8)	$x^2 \text{sign}(x)$	$2\theta_- \Leftarrow x < 0, -2\theta_+ \Leftarrow x > 0$	$(a - c)h^2 = -2[(p_2 + p)\theta_+ - (r_2 + r)\theta_-]$
(9.9)	x^3	$-6\theta_- x \Leftarrow x \leq 0, -6\theta_+ x \Leftarrow x \geq 0$	$(a - c)h^3 = -6h[(2p_2 + p)\theta_+ - (2r_2 + r)\theta_-]$
(9.10)	$x^3 \text{sign}(x)$	$6\theta_- x \Leftarrow x \leq 0, -6\theta_+ x \Leftarrow x \geq 0$	$(a + c)h^3 = -6h[(2p_2 + p)\theta_+ + (2r_2 + r)\theta_-]$

СЛАУ (2.5-2.10) дает коэффициенты: $a = \mathcal{G}_+, c = \mathcal{G}_-, p = r = 5h^2 / 6, p_2 = r_2 = -h^2 / 3$.

10. Заключение

Линейные дифференциальные соотношения соотносятся с линейными дифференциальными операторами так же, как рациональные функции – с многочленами.

Экстраполяция Ричардсона еще увеличивает порядок аппроксимации компактной схемы.

Здесь были подробно рассмотрены случаи компактной аппроксимации дифференциальных соотношений только для линейных операторов с постоянными коэффициентами, однако, возможно обобщение и на случай переменных коэффициентов.

Однослойные компактные разностные схемы применяются и для квазилинейных законов сохранения. Для эволюционных слабо нелинейных уравнений и систем компактные неявные схемы также строятся, но для их практической реализации приходится применять на каждом шаге по времени сначала явную конечно-разностную схему, а затем релаксационные методы. Другой вариант – полунеявные схемы.

Для реализации компактных схем для систем уравнений и особенно для многих пространственных переменных пользоваться блочной прогонкой, методом переменных направлений или релаксационными методами.

Главным преимуществом компактных конечно-разностных схем является высокая точность при незначительном увеличении необходимого числа арифметических операций. Возможно их построение и на неравномерных сетках, а в многомерном случае и на непрямоугольных сетках.

Работа была поддержана грантом (18-05-0011) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)» в 2016-2017 гг. с использованием средств субсидии на государственную поддержку ведущих университетов Российской Федерации в целях повышения их конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, выделенной НИУ ВШЭ.

Литература

1. S.K.Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution // Journal of Computational Physics. Vol. 103, № 1, 1992, pp. 16-42.
2. В.А.Гордин. *Как это посчитать?* - М.: МЦНМО, 2005, 280с.
3. В.А.Гордин. Математика, компьютер, прогноз погоды и другие сценарии математической физики. - М.: Физматлит, 2010; 2013, 733 с.
4. В.А.Гордин. Дифференциальные и разностные уравнения. Какие явления они описывают и как их решать. «Издательский дом ВШЭ», М., 2016. 530с.
5. V.A.Gordin. About inertia of measurement devices. Research Activities in Atmospheric and Oceanic Modeling, pp. 1.15-1.16, 2018.
6. P.H. Cowell, A.C.D.Crommelin. Investigation of the motion of Halley's comet from 1759 to 1910. Appendix to Greenwich Observations for 1909, Edinburgh (1910) pp.1-84.
7. Э.Хайпер, С.Нёрсетт, Г.Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. - М.: «Мир», 1990.
8. B.V.Noumerov, A Method of Extrapolation of Perturbations, Monthly Notices Royal Astronomical Society 84 (1924) pp 592-601.

9. B.V.Noumerov, A Method of Extrapolation of Perturbations, Monthly Notices Royal Astronomical Society 84 (1924) pp 592-601.
10. Б. В. Рогов, М. Н. Михайловская. Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса. Матем. моделирование, 2011, 23(6), сс. 98–110.
11. В.А.Гордин. Математические задачи гидродинамического прогноза погоды. Вычислительные аспекты. - Л., Гидрометеиздат, 1987, 264с.
12. 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, pp.110 -113.
13. V.A.Gordin, A.A.Shemendyuk. "Transparent" Boundary Conditions for the Rod Transverse Vibrations Equation. ArXiv submitted to Applied Mathematical Modelling.
14. S.Britt, S.Tsynkov, and E.Turkel. Numerical simulation of time-harmonic waves in inhomogeneous media using compact high order schemes, Communications in Computational Physics, vol. 9, no. 3, pp. 520-541, 2011.
15. 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, No.3, 2014, pp. 348-370.
16. V.A.Gordin, E.A.Tsymbalov. Compact difference scheme for parabolic and Schrodinger-type equations with variable coefficients. J. Comp. Phys. V.375, pp.1451-1468, 2018.
17. V.A.Gordin, E.A.Tsymbalov. Compact difference schemes for weakly-nonlinear parabolic and Schrodinger-type equations and systems. ArXiv preprint arXiv: 1712.05185, (2017).
18. Shuwei Xu, Lihong Wang, R.Erdélyi, Jingsong He. Degeneracy in bright-dark solitons of the Derivative Nonlinear Schrödinger equation. Applied Mathematics Letters 87, July 2018, pp. 64-72.

19. В.А.Гордин, Е.А.Цымбалов. Разностная схема 4-го порядка точности для дифференциального уравнения с переменными коэффициентами. Математическое моделирование, 2017, т.29, №7, стр.3-14.
20. В.А.Гордин, Е.А.Цымбалов. *Компактная разностная схема для дифференциального уравнения с кусочно-постоянным коэффициентом.*// Математическое моделирование. 2017, т.29, №12, стр.16-28.

Гидрометцентр РФ предупреждает: вечером начнется шторм