

## КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СООТНОШЕНИЙ

© 2019 г. *В.А. Гордин*

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)

ФГБУ «Гидрометцентр России»

vagordin@mail.ru

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.

DOI: 10.1134/S0234087919070049

Дифференциальные соотношения включают в себя как дифференциальные операторы, так и солверы для краевых задач. Получены формулы компактных разностных аппроксимаций дифференциальных соотношений первого и второго порядка вида  $P_1[u] = P_2[f]$ . Аппроксимация производится на трехточечных шаблонах. Для реализации, как и в случае классических разностных схем, требуется обращение трехдиагональной матрицы, однако компактные схемы обеспечивают существенно более высокую точность и 4-й порядок аппроксимации вместо 2-го.

Ключевые слова: компактная разностная схема, порядок аппроксимации, символ оператора, шаблон.

### COMPACT FINITE-DIFFERENCE SCHEME FOR DIFFERENTIAL RELATIONS' APPROXIMATION

*V.A. Gordin*

National Research University "Higher School of Economics", Moscow  
Hydrometeorological Centre of Russia, Moscow

Differential relations include both differential operators and solvers of boundary value problems. The formulas of compact finite-difference approximations for differential relations of the first and second orders are obtained. Three-point stencils are used. Like clas-

sical finite difference schemes, the tridiagonal matrix is inverted to implement the scheme. However, compact schemes provide significantly higher accuracy and order of the 4th approximation instead of the 2nd.

Key words: compact finite-difference scheme, approximation order, operator's symbol, stencil.

## 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 (соответствующие примеры будут рассмотрены ниже) 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, см., например, [1]. 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.

Основные понятия, используемые в статье, вводятся в разделах 2 и 3. В разделе 4 строится компактная аппроксимация (4-го порядка) для дифференциальных соотношений первого порядка (т.е. одновременно приближенно производится и дифференцирование, и обращение дифференциального оператора первого порядка) на трехточечном шаблоне. В разделе 5 эта же задача решается, но для компактных схем более высокого порядка, когда один или оба шаблона содержат большее число точек. В разделе 6 построена компактная аппроксимация для дифференциальных соотношений второ-

го порядка. В разделе 7 рассмотрены дифференциальные соотношения еще более высокого порядка. Такая задача возникает, например, при построении начальных условий для уравнения упругих поперечных колебаний стержня. Здесь также кратко описан аналогичный алгоритм для уравнений в частных производных, когда описанный в данной работе подход позволяет применять компактную аппроксимацию к сложным нелинейным уравнениям в частных производных.

## 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. В частности, если и только если символ  $\sigma_P(\xi)$  – многочлен, то оператор  $P$  – дифференциальный.

Из простейших свойств преобразования Фурье следует, что символ оператора сдвига аргумента  $T: \varphi(x) \mapsto \varphi(x+h)$  равен  $\exp(i\xi h)$ . Поэтому для разностного оператора на равномерной сетке с шагом  $h$ , т.е. для оператора  $P[\varphi(x)] = \sum_{j=-N}^M a_j \varphi(x+jh)$ , символ – 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 случаях его символ – рациональная функция независимой переменной  $\xi$ .

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

$$P_1[u] = P_2[f], \tag{1}$$

где  $f(x)$  – заданная функция,  $P_1, P_2$  – 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) [2, 3].

Наша цель – аппроксимация дифференциальной задачи разностной при заданных шаблонах – поиск наилучшей пары разностных операторов  $Q_{1,2}$ . Разумеется, можно раздельно 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 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) [4, 5].

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 [6], см. также [7]. Эти схемы использовал потом Б.В.Нумеров [8, 9]. Однако его ужасная, трагическая судьба на несколько десятилетий затормозила внедрение компактных схем в СССР, а также запутала и вопрос авторства.

Здесь будут рассматриваться примеры схем, в которых шаблоны для искомого разностного оператора  $Q_{1,2}$  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

В данной работе 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  $\xi \rightarrow 0$ . Другими словами, это приближение длинных волн или длинных частот, или предположение о гладкости функций  $u, f$ .

Задача компактной аппроксимации сводится к подбору коэффициентов в разностных операторах  $Q_1, Q_2$ . В примерах разделов 4 и 6 рассматривается только самый распространенный случай  $N=M=1$ , т.е. трехточечные шаблоны, где применима обыкновенная прогонка, и стандартная цель – обеспечение 4-го порядка аппроксимации.

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

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

Полагая  $\omega = \exp(i\xi h) \rightarrow 1$ , перепишем

$$p + q\omega + r\omega^2 - \frac{\sigma_{P_2}(\ln(\omega)/ih)}{\sigma_{P_1}(\ln(\omega)/ih)} [a + b\omega + c\omega^2] = O((\omega - 1)^4).$$

Таким образом, задача отыскания коэффициентов компактной разностной схемы эквивалентна (см. [11]) построению рациональной аппроксимации 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 [1-4] аппроксимирующая компактная схема на трехточечном шаблоне:

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

Если решение  $\{u_j\}_{j=1}^N$  ищем здесь при периодических условиях, то матрица  $A$  системы  $N$  линейных алгебраических уравнений  $Au = Bf$ , где

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

вырождена. 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 (обе суммы по четным  $j$  и по нечетным  $j$  должны 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 определения решения  $\mathbf{u}$  разностного уравнения  $A\mathbf{u} = B\mathbf{f}$ :

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

должна быть дополнена первой и последней строкой описывающими граничные (например, периодические) условия. Техника преобразования Фурье позволяет сделать вывод о том, что в случае периодических граничных условий спектр матрицы  $A$  содержится во множестве

$$\Lambda = \left\{ \lambda = \frac{2\alpha}{3} + \frac{\alpha \cos(\xi h)}{3} + i \frac{\sin(\xi h)}{h} \right\} \subset \mathbb{C}, \quad \xi \in \mathbb{R}.$$

При  $\alpha \neq 0$  нуля среди этих комплексных чисел нет.

**III.** Для более общего дифференциального соотношения

$$d_x u + \alpha u = d_x f + \beta f \Leftrightarrow d_x(u - f) + \alpha(u - f) = (\beta - \alpha)f \quad (3)$$

компактная схема на трехточечном шаблоне следующая:

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

или

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

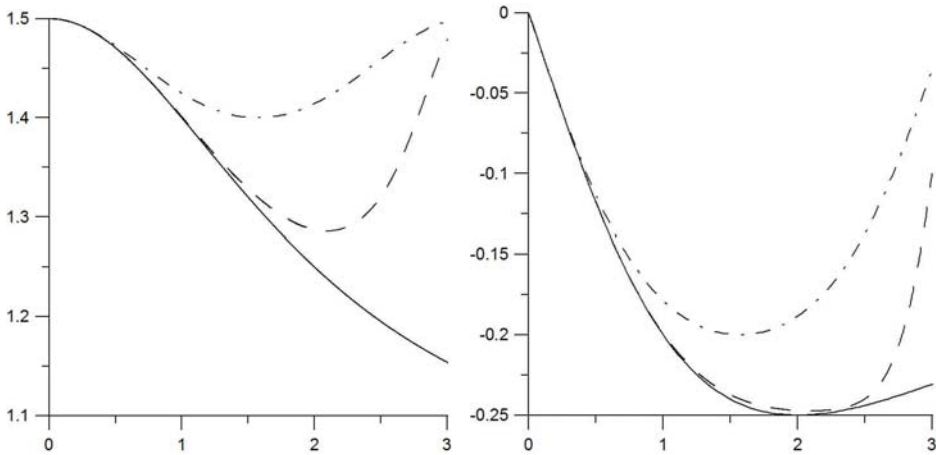
Символ разностного оператора для этой схемы

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

где тильда – умножение коэффициентов на  $h$ .

Разделим вещественную и мнимую часть этой функции:

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



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

Символ разрешающего оператора для дифференциального соотношения (3) равен

$$\begin{aligned} S(i\xi) &= \frac{i\xi + \beta}{i\xi + \alpha} = \frac{(i\xi + \beta)(-i\xi + \alpha)}{\alpha^2 + \xi^2} = \frac{\alpha\beta + \xi^2 + i\xi(-\beta + \alpha)}{\alpha^2 + \xi^2} = \frac{\alpha\beta + \xi^2}{\alpha^2 + \xi^2} + i \frac{\xi(-\beta + \alpha)}{\alpha^2 + \xi^2} = \\ &= \frac{\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + \omega^2}{\tilde{\alpha}^2 + \omega^2} + i \frac{\omega(-\tilde{\beta} + \tilde{\alpha})}{\tilde{\alpha}^2 + \omega^2}. \end{aligned}$$



Символы дифференциального и разностного соотношений при  $\omega \rightarrow 0$  асимптотически близки. Они расходятся с увеличением  $|\omega|$  - соответствующие графики приведены на рис.1.

### 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 п.1. 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:  $p_0 = 57/90$ ,  $p_1 = 34/90$ ,  $p_2 = -1/90$ . Символы эталонного оператора, классической аппроксимации по схеме центральных разностей, компактной аппроксимации на трехточечном шаблоне (см.1) 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 (отклонения символов разностных операторов от символа эталонного) показаны на рис.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  $a = 14/9$ ,  $b = 1/18$ ,

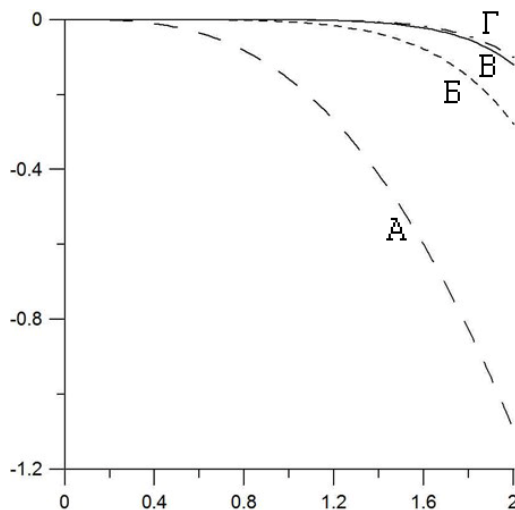
$p = 2/3$ . График Г) на рис.2 показывает, что при том же порядке точности, что и в схеме В), на шаблоне 3+5 невязка немного меньше.

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 се-

точной функции  $\{u_j\}_{j=0}^N$  зависит от граничных условий. Если ставятся периодические граничные условия, то матрица эта вырождена.



**Рис.2.** 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 же нужно определять из полученного разностного соотношения сеточную функцию  $\{f_j\}_{j=0}^N$ , то и тут вырожденность матрицы задачи зависит от граничных условий. В случае периодических условий в обоих случаях получаем матрицы с доминирующей диагональю, а значит, обратимые.

## 6. Примеры аппроксимации соотношений второго порядка

**I.** Для аппроксимации производной — уравнения  $d_x^2 u = f$  известна [1–4] компактная разностная схема на трехточечном шаблоне:

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

**II.** Для аппроксимации дифференциального соотношения  $d_x^2 u = d_x f$  компактную схему на трехточечном шаблоне  $au_{j-1} + bu_j + cu_{j+1} = pf_{j-1} + qf_j + rf_{j+1}$  будем строить стандартным образом: рассмотрим набор из пяти пар тестовых функций — точность на этих тестовых функциях 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:

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

Поскольку левые части в схемах (4) и (3) совпадают, можно воспользоваться линейностью задачи и построить компактную разностную схему, аппроксимирующую дифференциальное соотношение  $d_x^2 u = d_x f + \alpha f$ :

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

**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

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

Соответствующая компактная схема (5) имеет вид

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

или после переноса слагаемых с неизвестной функцией  $u$  в левую часть

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

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 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.

## 7. 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,  $\rho$  – его плотность. При постановке задачи Коши для этого дифференциального уравнения задаются начальные условия:  $u(0, x) = f_0(x)$ ,  $\partial_t u(0, x) = f_1(x)$  [12, 13]. 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  $P_2 = E$ , см., например, [14-16]).

**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:

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

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 (9) содержит 24 свободных коэффициента. С учетом двух нормировочных соотношений на эти коэффициенты, нужно составить еще 22 линейных алгебраических уравнения, т.е. нужно использовать по 11 вещественных тестовых функций  $f(t,x)$  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). Подробнее о таких системах см. [15, 16].

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 метод Ньютона – Рафсона или, что оказывается эффективнее, релаксационные методы, см. [17].

**Пример 2.** Система дифференциальных комплексных уравнений Копа – Ньюэла:

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

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

Оба примера квазилинейных систем в частных производных рассмотрены в [18], где указаны дальнейшие ссылки на приложения и построены аналитические решения солитонного типа, весьма полезные для отработки разностных схем.

## Заключение

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

Линейные дифференциальные соотношения 1-го и 2-го порядка могут быть аппроксимированы компактной схемой с 4-м порядком точности на 3-точечном шаблоне – получены соответствующие формулы. Показано существенное преимущество этих формул по сравнению с классическими на том же шаблоне. Для аппроксимации соотношений более высоких порядков нужны более обширные шаблоны. При 3-точечном шаблоне реализация сводится к решению трехдиагональной системы (методом прогонки). Также показаны примеры расширения шаблонов для дальнейшего увеличения точности аппроксимации.

Применение метода экстраполяции Ричардсона обычно позволяет еще более увеличить порядок аппроксимации компактной схемы [16, 19, 20].

Указаны достаточные условия невырожденности матрицы для задачи на окружности. В задаче на отрезке следует также учесть граничные условия. В рассмотренных соотношениях функции  $u$  и  $f$  равноправны, и первая здесь полагается неизвестной лишь для определенности – для вычисления же сеточной функции  $f$  по сеточной функции  $u$  нужно обратить другую (также трехдиагональную с константами на диагонали) матрицу. Аналогичные формулы могут быть получены в случае, когда сетки (а значит, все шаблоны) для функций  $u$  и  $f$  сдвинуты друг относительно друга на полшага (см., например, [1, 2]).

Здесь были подробно рассмотрены случаи компактной аппроксимации дифференциальных соотношений только для линейных операторов с постоянными коэффициентами, однако, возможно обобщение и на случай переменных коэффициентов (для уравнений, когда  $P_2 = E$ , см., например, [13, 15, 19, 20]).

Компактные разностные схемы применяются и для квазилинейных законов сохранения [10]. 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 явно конечно-разностную схему, а затем релаксационные методы [17].

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

Главным преимуществом компактных конечно-разностных схем явля-

ется высокая точность при незначительном увеличении необходимого числа арифметических операций. Возможно их построение и на неравномерных сетках, а в многомерном случае – и на непрямоугольных сетках.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *S.K. Lele*. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution // *Journal of Computational Physics*, 1992, v.103, № 1, p.16-42.
2. *В.А. Гордин*. Как это посчитать? – М.: МЦНМО, 2005, 280с.;  
*V.A. Gordin*. Как eto poschitat? – М.: MTsNMO, 2005, 280s.
3. *В.А. Гордин*. Математика, компьютер, прогноз погоды и другие сценарии математической физики. – М.: Физматлит, 2010; 2013, 733 с.;  
*V.A. Gordin*. Matematika, kompiuter, prognoz pogody i drugie stsenarii matematicheskoi fiziki. – М.: Fizmatlit, 2010; 2013, 733 s.
4. *В.А. Гордин*. Дифференциальные и разностные уравнения. Какие явления они описывают и как их решать. – М.: Издательский дом ВШЭ, 2016, 530с.;  
*V.A. Gordin*. Differentsialnye i raznostnye uravneniia. Kakie iavleniia oni opisyvaiut i kak ikh reshat. – М.: Izdatelskii dom VShE, 2016, 530с.
5. *V.A. Gordin*. About inertia of measurement devices // *Research Activities in Atmospheric and Oceanic Modeling*, 2018, p.1.15-1.16.
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 p.1-84.
7. *Э. Хайпер, С. Нёрсетт, Г. Ваннер*. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: Мир, 1990, 512 с.;  
*E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner*. Solving Ordinary Differential Equations. I. Nonstiff Problems. – New York: Springer Verlag, 1987, 1993, 480p.
8. *Б.В. Нумеров*. Новый метод определения орбит и вычисления эфемерид с учетом возмущений // *Тр. АО Петрогр. ун-та.*, 1923, 4, 29-39;  
*B.V. Numerov*. Novyi metod opredeleniia orbit i vychisleniia efemerid s uchetom vozmushchenii // *Tr. AO Petrogr. un-ta.*, 1923, 4, 29-39.
9. *B.V. Noumerov*. A Method of Extrapolation of Perturbations // *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, 1924, 84, p.592-601.
10. *Б.В. Rogov, M.N. Mikhailovskaya*. Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса // *Матем. моделирование*, 2011, 23(6), с.98–110;  
*B.V. Rogov and M.N. Mikhailovskaya*. Monotonic Bicomact Schemes for Linear Transport Equations // *Math. Models and Computer Simulations*, 2012, v.4, Issue 1, p.92-100.
11. *В.А. Гордин*. Математические задачи гидродинамического прогноза погоды. Вычислительные аспекты. – Л.: Гидрометеиздат, 1987, 264с.;  
*V.A. Gordin*. Matematicheskie zadachi gidrodinamicheskogo prognoza pogody. Vychislitelnye aspekty. – L.: Gidrometeoizdat, 1987, 264s.
12. *V.A. Gordin, E.A. Tsymbalov*. Compact Difference Schemes for Rod Lateral Vibrations quation. Numerical Algebra with Applications / *Proceedings of Fourth China-Russia Conference*. Rostov-on-Don: Southern Federal University Publishing, 2015, p.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, 2011, v.9, № 3, p.520-541.
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, 2014, v.32, №3, p.348-370.
16. *V.A. Gordin, E.A. Tsymbalov*. Compact difference scheme for parabolic and Schrodinger-type equations with variable coefficients // J. Comp. Phys., 2018, v.375, p.1451-1468.
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, p.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, с.3-14;  
*V.A. Gordin, E.A. Tsymbalov*. A Fourth-Order Accurate Difference Scheme for a Differential Equation with Variable Coefficients // Mathematical Models and Computer Simulations, 2018, v.10, Issue 1, p.79-88.
20. *В.А. Гордин, Е.А. Цымбалов*. Компактная разностная схема для дифференциального уравнения с кусочно-постоянным коэффициентом // Математическое моделирование, 2017, т.29, №12, с.16-28;  
*V.A. Gordin, E.A. Tsymbalov*. Kompaktnaia raznostnaia skhema dlia differentsialnogo uravneniia s kusochno-postoiannym koeffitsientom // Matematicheskoe modelirovanie. 2017, t.29, №12, s.16-28.

Поступила в редакцию 19.11.2018

После доработки 19.11.2018

Принята к публикации 11.03.2019