УДК 519.6

Классификация разностных схем максимально возможной точности на расширенных симметричных шаблонах для уравнения Шредингера и уравнения теплопроводности*

В.И. Паасонен[1,2]

[1]Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

[2]Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ), ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090

E-mail: paas@ict.nsc.ru

Английская версия этой статьи печатается в журнале "Numerical Analysis and Applications" № 1, Vol. 13, 2020.

Паасонен В.И. Классификация разностных схем максимально возможной точности на расширенных симметричных шаблонах для уравнения Шредингера и уравнения теплопроводности // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2020. — Т. 23, № 1. — С. 99–114.

Для уравнения Шредингера и уравнения теплопроводности рассматриваются всевозможные симметричные двухслойные разностные схемы на произвольных расширенных шаблонах. Коэффициенты схем определяются из условий, при которых достигается максимально возможный порядок аппроксимации по основной переменной. Из множества максимально точных схем выделяется класс абсолютно устойчивых схем. Для исследования устойчивости схем численно и аналитически проверяется выполнение критерия Неймана.

Показано, что свойство схем быть абсолютно устойчивыми или неустойчивыми существенно зависит от порядка точности по эволюционной переменной. В результате классификации построены абсолютно устойчивые схемы до десятого порядка точности по основной переменной.

DOI: 10.15372/SJNM20200107

Ключевые слова: *симметричная разностная схема, компактная схема, симметричный шаблон, схема максимального порядка точности, многоточечная схема, многоточечный шаблон.*

Paasonen V.I. Classification of difference schemes of the maximum possible accuracy on extended symmetric stencils for the Schrödinger equation and the heat transfer equation // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2020. — Vol. 23, № 1. — P. 99–114.

We study all possible symmetric two-level difference schemes on arbitrary extended stencils for the Schrödinger equation and for the heat conductivity equation. We find the coefficients of the schemes from the conditions under which a maximum possible order of approximation on the main variable is attained. From a set of maximally exact schemes, a class of absolutely stable schemes is isolated. To investigate the stability of the schemes, the Neumann criterion is numerically and analytically verified.

It is proved that the property of schemes to be absolutely stable or unstable significantly depends on the order of approximation on the evolution variable. As a result of the classification it was possible to construct absolutely stable schemes up to the tenth order of accuracy on the main variable.

*Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 17-72-30006).

Keywords: *symmetric difference scheme, compact scheme, symmetric stencil, scheme of maximal order of accuracy, multi-point scheme, multi-point stencil.*

Введение

Приемлемое по точности численное решение задач волоконной оптики [1, 2] требует применения методов высокой точности. Таковыми являются спектральные методы [3], но они, к сожалению, сложны для распараллеливания. Традиционные разностные схемы лишены этого недостатка, но требуют весьма существенных ограничений на размеры шагов сетки, что отражается на объеме вычислительных ресурсов — времени счета и памяти. Использование таких компактных разностных схем, как в [4–6], существенно смягчает эти ограничения, однако их порядок точности не превышает второго по эволюционной и четвертого по конфигурационной переменной, и это ограничение связано с желанием оставаться в рамках простых трехточечных шаблонов. Попытка повысить порядок по эволюционной переменной до третьего или четвертого за счет трехслойности схемы наталкивается на проблемы с устойчивостью [7]. Поэтому с целью более существенного повышения точности расчетов представляется необходимым выйти за рамки трехточечных шаблонов и искать устойчивые схемы более высоких порядков точности в классе многоточечных схем.

В данной работе исследуется устойчивость в линейном приближении схем максимально возможного порядка аппроксимации на расширенных симметричных шаблонах. Разумеется, такие схемы, явные и неявные, требуют постановки дополнительных граничных условий, что в общем случае не всегда возможно. Однако для класса задач с заранее известной асимптотикой на бесконечности они вполне применимы. В частности, для многих задач нелинейной волновой оптики решения являются финитными или периодическими, что облегчает корректную постановку дополнительных условий на границах расчетной области.

Итак, решается задача для нелинейного уравнения Шредингера

$$\pm i\, u_t + du_{xx} + s|u|^2\, u = 0, \quad 0 < t < T, \;\; x_1 < x < x_2,$$

где i — мнимая единица, t и x — эволюционная и конфигурационная переменные, d и s — вещественные коэффициенты; знак d зависит от того, нормальна или аномальна дисперсия. Знак $\pm$ в левой части уравнения зависит от направления вычислений — от источника в направлении распространения или в обратном направлении от места регистрации к источнику. В правой части могут быть дополнительные слагаемые, например вызывающие затухание сигнала. При $t = 0$ задается начальное данное $u(x, 0) = u_0(x)$.

Умножив уравнение на $\mp i$, приведем его к виду, совпадающему по форме с уравнением теплопроводности:

$$u_t = cu_{xx} - f. \tag{1}$$

Основное отличие состоит в том, что в уравнении теплопроводности коэффициент c вещественный положительный, а в уравнении Шредингера $c = \pm id$ — величина мнимая. Кроме того, правая часть имеет специальный вид, и наименования независимых переменных различны: в уравнении теплопроводности t — время, а x — пространственная переменная.

Однако с точки зрения аппроксимации различия между уравнениями носят лишь формальный характер. И дисперсионные соотношения схем в обоих случаях также идентичны, хотя вытекающие из них условия невозрастания гармоник зависят от того, вещественное c или мнимое.

1. Симметричные схемы на шаблонах с нечетным числом узлов

Введем равномерную сетку с шагом τ по t и шагом h по x и будем рассматривать двухслойные симметричные схемы, т. е. схемы на симметричных шаблонах, обладающие симметрией также и в коэффициентах. Возможны два типа таких схем: схемы с нечетным числом узлов на слоях и, наоборот, схемы с четным числом узлов на каждом слое.

Рассмотрим двухслойную схему первого типа в канонической форме:

$$A\frac{u^{n+1}-u^n}{\tau} = cBu^n - g^n. \tag{2}$$

Очевидно, в силу симметрии операторы A и B представляются в виде полиномов от обычного трехточечного разностного аналога Λ оператора двойного дифференцирования по x. Для удобства запишем их в виде полиномов от $L = h^2\Lambda$:

$$A = E + \sum_{i=1}^{p} a_i L^i, \qquad B = \Lambda\left(E + \sum_{j=1}^{q-1} b_j L^j\right), \qquad L = h^2\Lambda = T_h - 2E + T_h^{-1},$$

где E — тождественный оператор, T_h — оператор сдвига аргумента на h, а числа p и q определяют “габариты” шаблонов, на которых определены разностные операторы схемы. Коэффициенты схемы a_i и b_j будем определять из системы условий аппроксимации с максимально возможным порядком относительно h и с заданным порядком относительно τ. Полученные в результате схемы будем условно называть p/q-схемами. Построение можно осуществить по технологии [8, 9] или путем непосредственного использования продолженной системы.

Для разностной производной по t справедливо разложение

$$U_t := \frac{u^{n+1}-u^n}{\tau} = u_t + \frac{\tau}{2!}u_{tt} + \frac{\tau^2}{3!}u_{ttt} + \frac{\tau^3}{4!}u_{tttt} + \cdots,$$

поэтому в случае однородного уравнения ($f \equiv 0$ и, соответственно, $g^n \equiv 0$) в силу уравнений продолженной системы имеем разложение по “пространственным” производным четного порядка

$$U_t = cD^2\left(E + \frac{R}{2!}P + \frac{R^2}{3!}P^2 + \frac{R^3}{4!}P^4 + \cdots\right)u, \tag{3}$$

где

$$D = \frac{\partial}{\partial x}, \qquad P = h^2D^2, \qquad R = \frac{c\tau}{h^2}.$$

От числа учтенных членов разложения в (3) зависит порядок аппроксимации схемы по τ.

В случае неоднородного дифференциального уравнения (1) с привлечением продолженной системы представим погрешность аппроксимации схемы (2) на достаточно гладких решениях в виде разложения по степеням шага τ:

$$
\begin{aligned}
\Psi &= A\left(u_t + \frac{\tau}{2}u_{tt} + \frac{\tau^2}{6}u_{ttt} + \cdots\right) - cBu + g^n \\
&= c\left\{AD^2\left(E + \frac{R}{2}P + \frac{R^2}{6}P^2\right) - Bu + O(\tau^3)\right\} + \\
&\quad \left\{g^n - A\left(f + \frac{\tau}{2}(f_t + cf_{xx}) + \frac{\tau^2}{6}(f_{tt} + cf_{xxt} + c^2 f_{xxxx}) + O(\tau^3)\right)\right\}.
\end{aligned} \tag{4}
$$

В данном случае удержаны слагаемые до $O(\tau^2)$ включительно, при этом погрешность схемы составляет величину $O(\tau^3)$. Обратим внимание на то, что разложение в первой скобке погрешности не зависит от того, однородное уравнение или нет. Оно завит только от выбранного порядка точности по τ. Вторая скобка с ростом порядка точности по τ усложняется, пополняясь слагаемыми со старшими производными функции f. Заменяя затем операторы A и B их разложениями в ряд по четным степеням h и требуя обращения в нуль каждой из скобок с некоторой точностью, получим после приведения подобных с производными одинакового порядка из первой скобки (4) систему уравнений для определения коэффициентов схемы, а из второй — правую часть g^n как функционал, зависящий от правой части f исходного дифференциального уравнения.

Заметим, что в представленном разложении с погрешностью $O(\tau^3)$ требуются сеточные значения вторых производных f_{tt}, и если они не заданы, то в рамках двухслойной схемы их аппроксимация по заданным значениям f в узлах невозможна, для этого потребовалось бы по меньшей мере три слоя по t. Как вариант можно рассматривать привлечение для этой цели значений f с предыдущего слоя или понижение порядка аппроксимации отбрасыванием в обеих скобках или только во второй величин $O(\tau^2)$.

Из разложения

$$
\Lambda = D^2 + \frac{h^2}{12}D^4 + \frac{2h^4}{6!}D^6 + \frac{2h^6}{8!}D^8 + \cdots
$$

путем операции умножения полиномов (вручную, а проще с привлечением какой-нибудь операционной системы символьных вычислений) легко получить разложения любых степеней оператора L с произвольным порядком точности. В частности, с погрешностью $O(h^{12})$ имеем

$$
\begin{aligned}
&L \simeq P + \frac{1}{12}P^2 + \frac{1}{360}P^3 + \frac{1}{20160}P^4 + \frac{1}{1814400}P^5, \\
&L^2 \simeq P^2 + \frac{1}{6}P^3 + \frac{1}{80}P^4 + \frac{17}{30240}P^5, \\
&L^3 \simeq P^3 + \frac{1}{4}P^4 + \frac{7}{240}P^5, \qquad L^4 \simeq P^4 + \frac{1}{3}P^5, \qquad L^5 \simeq P^5.
\end{aligned} \tag{5}
$$

Отсюда следует разложение оператора A с такой же точностью:

$$
\begin{aligned}
A \simeq \hat{A}(P) = E + a_1 P + \left(a_2 + \frac{a_1}{12}\right)P^2 + \left(a_3 + \frac{a_2}{6} + \frac{a_1}{360}\right)P^3 + \\
\left(a_4 + \frac{a_3}{4} + \frac{a_2}{80} + \frac{a_1}{20160}\right)P^4 + \left(a_5 + \frac{a_4}{3} + \frac{7a_3}{240} + \frac{17a_2}{30240} + \frac{a_1}{1814400}\right)P^5.
\end{aligned}
$$

Аналогично разложим оператор B, выделив из него в качестве сомножителя оператор двойного дифференцирования, т. е. представим его в форме $B \simeq D^2\,\hat{B}(P)$, где

$$\hat{B}(P) = E + \left(b_1 + \frac{1}{12}\right) P + \left(b_2 + \frac{b_1}{6} + \frac{1}{360}\right) P^2 + \left(b_3 + \frac{b_2}{4} + \frac{b_1}{80} + \frac{1}{20160}\right) P^3 + \left(b_4 + \frac{b_3}{3} + \frac{7b_2}{240} + \frac{17b_1}{30240} + \frac{1}{1814400}\right) P^4.$$

Ясно, что порядок погрешности схемы для однородного уравнения определяется степенью первого ненулевого члена разложения полинома

$$\hat{A}(P)\left(E + \frac{R}{2}P + \frac{R^2}{6}P^2 + \frac{R^3}{24}P^4 + \frac{R^4}{120}P^4 + \cdots\right) - \hat{B}(P).$$

Однако в такой постановке имеется неоднозначность, связанная с неопределенностью порядка погрешности по τ, поэтому рассмотрим несколько вариантов, вводя коэффициенты d_k $(k = 2, 3, 4)$ при R^k, которые могут принимать значения 0 и 1 в зависимости от того, учитывается в погрешности данная степень τ или нет. Иначе говоря, будем определять условия аппроксимации схемы, требуя обращения в нуль ряда первых коэффициентов полинома

$$\hat{A}(P)\left(E + \frac{R}{2}P + d_2\frac{R^2}{6}P^2 + d_3\frac{R^3}{24}P^4 + d_4\frac{R^4}{120}P^4\right) - \hat{B}(P).$$

Если все $d_i = 0$, то речь идет о схеме $O(\tau^2)$, если $d_2 = 1$, а остальные нули, то имеем схему с погрешностью на порядок выше и т. д. Выполнив умножение, приведя подобные и приравняв нулю последовательно полученные коэффициенты полинома, получим систему уравнений для определения коэффициентов схемы a_i, b_j:

$$a_1 + \frac{R}{2} = b_1 + \frac{1}{12}, \tag{6}$$

$$\left(a_2 + \frac{a_1}{12}\right) + \frac{R}{2}a_1 + d_2\frac{R^2}{6} = b_2 + \frac{b_1}{6} + \frac{1}{360}, \tag{7}$$

$$\left(a_3 + \frac{a_2}{6} + \frac{a_1}{360}\right) + \frac{R}{2}\left(a_2 + \frac{a_1}{12}\right) + d_2\frac{R^2}{6}a_1 + d_3\frac{R^3}{24} = b_3 + \frac{b_2}{4} + \frac{b_1}{80} + \frac{1}{20160}, \tag{8}$$

$$\left(a_4 + \frac{a_3}{4} + \frac{a_2}{80} + \frac{a_1}{20160}\right) + \frac{R}{2}\left(a_3 + \frac{a_2}{6} + \frac{a_1}{360}\right) + d_2\frac{R^2}{6}\left(a_2 + \frac{a_1}{12}\right) + d_3\frac{R^3}{24}a_1 + d_4\frac{R^4}{120} = b_4 + \frac{b_3}{3} + \frac{7b_2}{240} + \frac{17b_1}{30240} + \frac{1}{1814400}. \tag{9}$$

Выполнение условия (6) гарантирует погрешность аппроксимации схемы $O(h^4)$, добавление каждого последующего уравнения улучшает погрешность на два порядка. Если выполняются все четыре уравнения системы (6)–(9), погрешность составит величину $O(h^{10})$. Систему можно оборвать на любой строке, задавшись меньшим порядком аппроксимации. Систему можно также и продолжить, зануляя очередные коэффициенты разложения погрешности. В частности, в данном случае в системе восемь неизвестных коэффициентов схемы a_i, b_i $(1 \le i \le 4)$, и этот набор позволил бы удовлетворить еще четырем уравнениям, повысив порядок до $O(h^{18})$. Однако для этого нужно было заранее опираться на более длинные разложения степеней оператора L, что и делалось в действительности с применением машинных вычислений, но следующие уравнения системы слишком громоздки, чтобы их здесь приводить. Заметим, что при заданных габаритах шаблонов коэффициенты схем максимально возможных порядков аппроксимации зависят только от параметра $R = c\tau/h^2$.

Представленная здесь “укороченная” система уравнений (6)–(9) охватывает все частные p/q-схемы 4–10 порядков аппроксимации по x и 2–4 порядков по t. Например, полагая $a_3 = a_4 = b_3 = b_4 = 0$, получим схему $O(h^{10})$ с параметрами $p = 2$, $q = 3$, однозначно определяемую из системы. Полагая равными нулю все b_i, а также все a_i, кроме a_1, получим схему Микеладзе [10] с погрешностью $O(h^4)$, имеющую по три узла на обоих слоях.

2. Схемы на шаблонах с четным числом узлов

Пусть C — симметричный разностный оператор на произвольном конечном симметричном шаблоне с четным числом узлов $2(p+1)$ равномерной сетки, и пусть X означает координату точки симметрии шаблона. Точка X не является узлом сетки, а лежит посередине между узлами, а узлы шаблона имеют координаты $X \pm h/2$, $X \pm 3h/2$, $\ldots$. В силу симметрии

$$Cu(X) = \sum_{k=1}^{p+1} \Big[u\big(X - (k-1/2)h\big) + u\big(X + (k-1/2)h\big) \Big].$$

Утверждается, что найдется симметричный оператор D на шаблоне с нечетным множеством узлов $2K + 1$ такой, что

$$C = SD, \qquad S = \frac{T_{h/2} + T_{-h/2}}{2}.$$

Здесь S — оператор осреднения (полусумма операторов сдвига на полшага влево и вправо).

Действительно, пусть

$$D\, u_i = \sum_{k=-p}^{p} D_k\, u_{i+k}, \quad D_{-k} = D_k \ \ \forall\, k = 1, \ldots, p.$$

Тогда разностные выражения $D\,T_{-h/2}u(X)$ и $D\,T_{h/2}u(X)$ имеют одинаковые с оператором D коэффициенты, но индексы в суммах смещены на единицу относительно друг друга. Но, согласно доказываемому утверждению, сумма этих выражений должна совпадать с $2Cu(X)$. Из этого условия получаем линейную систему уравнений для определения коэффициентов:

$$D_p = 2C_{p+1}, \quad D_{k-1} + D_k = 2C_k \ (k = 1, \ldots, p).$$

Матрица данной системы уравнений двухдиагональная, на главной и на соседней с нею диагонали стоят единицы. Ее определитель, очевидно, равен единице, поэтому решение существует и единственно. Следовательно, из любого симметричного разностного оператора, записанного на шаблоне с четным числом узлов равномерной сетки, можно выделить операторный множитель S.

Таким образом, в нашем случае из симметричных операторов A и B схемы выделяется множитель S. В силу симметрии схемы правая часть g^n симметричным образом аппроксимируется по двум слоям, поэтому из правой части g^n схемы также выделяется операторный множитель S. Сокращая на него все операторы схемы, получим симметричную схему на шаблоне с нечетным числом узлов на каждом слое.

Из сказанного прямо следует, что порядок аппроксимации исходной схемы будет таким же, как для схемы с на единицу меньшим нечетным числом узлов в операторах, полученной после сокращения на S. На практике это означает, что добавление к шаблону схемы первого типа по одному узлу на оператор не приводит к повышению максимально возможного порядка аппроксимации. Так, например, хорошо известная компактная трехточечная схема [10] ($p = q = 1$) аппроксимирует с четвертым порядком относительно шага h, но и симметричная схема с четырьмя узлами на каждом из слоев также будет аппроксимировать максимум с четвертым порядком, а не с шестым. Схемы с пятью и шестью узлами на обоих слоях также имеют одинаковый максимально возможный порядок $O(h^8)$. Таким образом, в классе симметричных максимально точных схем нет смысла рассматривать схемы с четным числом узлов в операторах, так как они эквивалентны по точности более компактным схемам с меньшим числом узлов.

3. Численное исследования устойчивости схем

Определение выражений коэффициентов схемы из системы типа (6)–(9) при небольших габаритах шаблона не представляет труда. С привлечением машинных символьных вычислений можно получить выражения коэффициентов практически для любой схемы, однако при больших габаритах шаблона громоздкие выражения коэффициентов схемы вряд ли могут оказаться полезными. С другой стороны, схемы на очень больших шаблонах не представляют и практической ценности. Интересны именно схемы с умеренными значениями габаритов (до пяти, семи, максимум девяти узлов на слое). Важно отбраковать из этого множества неустойчивые схемы, а это можно сделать, воспользовавшись необходимым критерием Неймана невозрастания гармоник в линейном приближении.

Эту задачу представляется возможным решить численно, так как собственные значения операторов A и B, соответствующие гармонике $\exp(i\,\omega x)$, имеют вид

$$\lambda_A = 1 + \sum_{i=1}^{p} a_i(-\kappa)^i, \quad \lambda_B = \frac{\lambda_1}{h^2}, \qquad \lambda_1 = -\kappa\left(1 + \sum_{j=1}^{q-1} b_j(-\kappa)^j\right),\ \kappa = 4\sin^2\frac{\psi}{2},\ \psi = \omega h.$$

Так как коэффициенты схемы a_i и b_j зависят только от R, то модуль коэффициента возрастания гармоники зависит только от соотношения шагов R и частоты ψ:

$$|\rho| = \left|1 - c\tau\frac{\lambda_B}{\lambda_A}\right| = \left|1 - R\frac{\lambda_1}{\lambda_A}\right| = G\big(|R|, \psi\big), \quad 0 \le |R| \le R_{\max},\ 0 \le \psi \le 2\pi.$$

При этом ввиду симметрии операторов поверхность $G(|R|, \psi)$ симметрична относительно плоскости $\psi = \pi$.

В расчетах ψ и $|R|$ пробегают дискретные значения, а промежуток $[0, R_{\max}]$ изменения $|R|$ подбирался, начиная с единичного, индивидуально для каждой схемы, с тем чтобы найти наиболее широкую область устойчивости, если таковая есть. Там, где значения $|\rho|$ превышали единицу, значения обрезались до значения единица плюс некоторое малое ϵ. В этом случае плато $|\rho| = 1 + \epsilon$ на поверхности $G\big(|R|, \psi\big)$ соответствовали областям, где нарушался критерий устойчивости Неймана. В случае их отсутствия в рассматриваемом диапазоне изменения $|R|$ схема оказывалась устойчивой, и тогда в следующем расчете диапазон по R расширялся с целью обнаружить область неустойчивости или убедиться в устойчивости также и в расширенном диапазоне. Если область неустойчивости не обнаруживалась в диапазоне до $R_{\max} = 1000$, схема предположительно относилась к абсолютно устойчивым.

Расчеты проводились как для уравнения теплопроводности, когда число $R = c\tau/h^2$ положительное, так и для уравнения Шредингера, когда $R = \pm i d\tau/h^2$ мнимое. Параметры шаблона схемы при этом варьировались в пределах $0 \le p \le 4$ и $1 \le q \le 4$. Этого более чем достаточно с практической точки зрения, так как в этот класс попадают все явные и неявные максимально точные 3-х, 5-ти, 7-ми и 9-ти точечные схемы, аппроксимирующие с порядками от второго до шестнадцатого относительно x.

Для симметричных схем, аппроксимирующих уравнение теплопроводности, типичная поверхность $|\rho| = G\big(|R|, \psi\big)$ приведена на рисунке 1. По направлению от трех границ $\psi = 0$, $\psi = 2\pi$ и $R = 0$, где $|\rho| = 1$, внутрь области значение $|\rho|$ падает, образуя "яму", симметричную относительно плоскости $\psi = \pi$, а с ее "дна" за пределами некоторого промежутка изменения $|R|$, примыкающего к нулю, возникает "гора", также симметричная, с "хребтом" в плоскости симметрии. Для условно устойчивых схем при некотором $|R| = R_{\max}$ возникает плато неустойчивости (где амплитуда обрезается сверху до значения $1 + \varepsilon$), как изображено на рис. 1 справа, а абсолютно устойчивые схемы характеризуются тем, что "гора" асимптотически приближается к единичному значению снизу при $|R| \to \infty$ (левый рисунок), и плато не образуется.

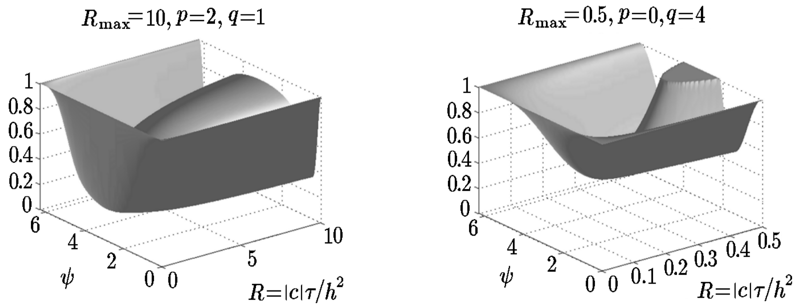

Рис. 1. Типичная зависимость модуля коэффициента возрастания гармоник от частоты и параметра R для p/q-схем, аппроксимирующих уравнение теплопроводности

Кроме того, поверхность описанного вида для ряда схем с $q > 1$ усложнена дополнительными локальными возмущениями (см. рис. 2). Их происхождение связано с наличием полюсов в выражениях коэффициентов схем при некоторых значениях R, в которых система условий аппроксимации локально вырождается. При детализации сетки по R полюса легче обнаруживаются (возмущения поверхностей на рис. 2 и пики на рис. 3 становятся более отчетливыми, вырастая по амплитуде).

В таблице 1 приведены пороги устойчивости $R_{\max}$ для исследуемого класса симметричных p/q-схем для уравнения теплопроводности. В табл. 1 p изменяется по горизонтали, а q — по вертикали. Из табл. 1 видно, что класс абсолютно устойчивых p/q-схем составляют неявные схемы с любым нечетным числом узлов на верхнем слое и ровно тремя узлами на нижнем слое. Все другие рассмотренные схемы условно устойчивы, причем для неявных схем (столбцы, где $p \geq 1$) условие устойчивости неожиданно оказывается более жестким, чем условие устойчивости явных схем (столбец с параметром $p = 0$).

Таблица 1. Порог устойчивости p/q-схем для уравнения теплопроводности

q \ p	0	1	2	3	4
1	1.0000	∞	∞	∞	∞
2	1.1647	0.21992	0.27889	0.27112	0.26374
3	0.9076	0.15427	0.12200	0.26158	0.23839
4	0.8422	0.27141	0.30287	0.24020	0.23957

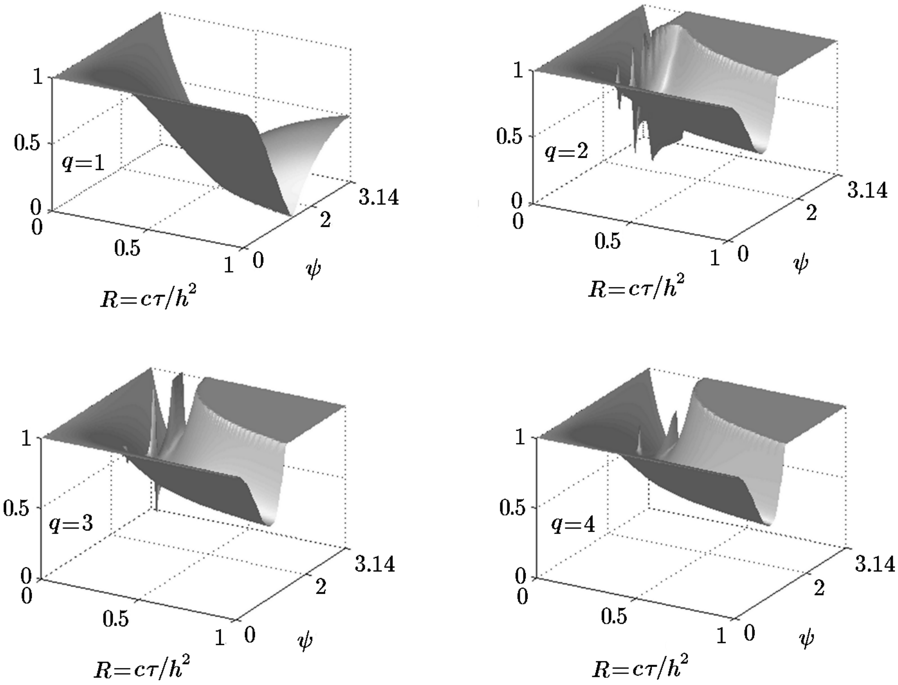

Рис. 2. Иллюстрация условной устойчивости (модуль возрастания гармоник) p/q-схем для уравнения теплопроводности ($p = 1$)

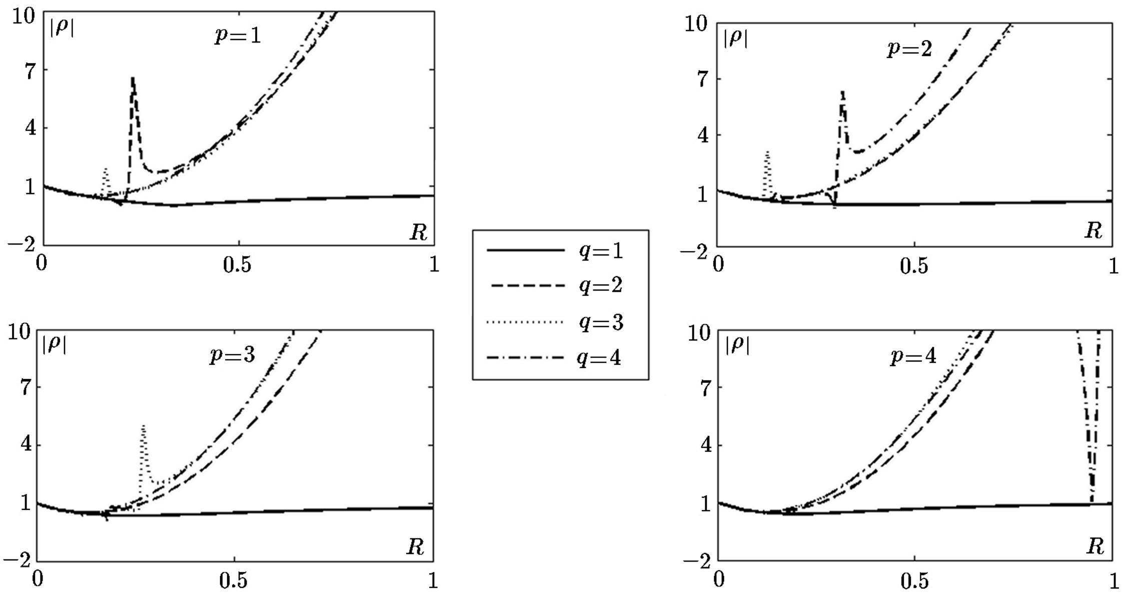

Рис. 3. Анализ устойчивости (модуль возрастания гармоник) двухслойных неявных p/q-схем для уравнения теплопроводности

На рис. 2 изображена зависимость $|\rho| = G(|R|, \psi)$ для p/q-схем с тремя узлами на верхнем слое (т. е. с $p = 1$) в случае уравнения теплопроводности, причем приведены половинки симметричных картинок, так как $\Psi = \pi$ представляет собой плоскость симметрии поверхности. Порог устойчивости определяется наименьшим значением $|R|$, при котором модуль ρ становится больше единицы хотя бы для одной гармоники. При $q = 1$ (верхний левый рисунок) область неустойчивости отсутствует, причем расчеты на более широких диапазонах изменения R также не выявили неустойчивости схемы.

На простом примере подтвердим возможность возникновения полюсов в коэффициентах схемы для уравнения теплопроводности при $q > 1$. Пусть, например, $p = 1$ и $q = 2$. В этом случае в системе уравнений (6)–(9) $a_2 = a_3 = \dots = 0$ и $b_2 = b_3 = \dots = 0$, а коэффициенты a_1, b_1 удовлетворяют первым двум уравнениям системы, в данном случае имеющим вид

$$a_1 + \frac{R}{2} = b_1 + \frac{1}{12}, \tag{10}$$

$$\frac{a_1}{12} + \frac{R}{2}a_1 + d_2\frac{R^2}{6} = \frac{b_1}{6} + \frac{1}{360}. \tag{11}$$

Решая систему, находим

$$a_1 = \frac{2/15 - R + 2d_2R^2}{1 - 6R}, \qquad b_1 = \frac{1/20 + (2d_2 - 3)R^2}{1 - 6R}.$$

Отсюда следует вырождение коэффициентов схемы при $R = 1/6$, замеченное выше при численном исследовании устойчивости.

Схемам для уравнения Шредингера соответствует иной характер поведения функции $G(|R|, \psi)$, чем для уравнения теплопроводности. А именно, для всех рассмотренных схем, кроме двух исключений, в непосредственной окрестности трех упомянутых выше границ ($\psi = 0$, $\psi = 2\pi$ и $R = 0$) модуль ρ возрастает, начиная с единицы, и, таким образом, критерий устойчивости Неймана не выполняется даже в малой окрестности $|R| = 0$, причем для всего спектра гармоник. Рисунок 4 иллюстрирует различие зависимостей $|\rho|$ от параметра $|R|$ в плоскости симметрии $\psi = \pi$ для четырех явных p/q-схем, аппроксимирующих уравнение теплопроводности (левый рисунок) и уравнение Шредингера (правый рисунок). Порог устойчивости определяется R-координатами точек пересечения графиков зависимостей с горизонтальной линией $|\rho| = 1$. В случае уравнения теплопроводности промежутки устойчивости соответствуют данным, приведенным в столбце $p = 0$ табл. 1, а для уравнения Шредингера промежутки устойчивости пустые — графики зависимостей модуля ρ от R лежат полностью выше единицы, и схемы абсолютно неустойчивы.

Рис. 4. Условная устойчивость (множители возрастания гармоник) явных p/q-схем ($p = 0$) для уравнения теплопроводности (левый рисунок) и их абсолютная неустойчивость для уравнения Шредингера (правый рисунок)

Далее приведены зависимости модуля возрастания гармоники от $|R|$ в плоскости симметрии $\psi = \pi$ для неявных p/q-схем для уравнения теплопроводности (рис. 3) и для уравнения Шредингера (рис. 5). Из рис. 3 видно, что все графики, изображенные сплошными линиями, расположены полностью ниже единицы, что свидетельствует об абсолютной устойчивости схем с $q = 1$. Для всех других схем ($q \neq 1$) имеет место условная устойчивость в промежутках $0 < R < R_{\max}$, значения $R_{\max}$ приведены в табл. 1. Из рис. 5 следует, что в случае уравнения Шредингера все p/q-схемы, кроме двух, абсолютно неустойчивы, поскольку соответствующие графики лежат выше единицы. Исключение составляют только две схемы, для которых во всем спектре $|\rho| \equiv 1$ (см. зависимости, изображенные сплошным линиям $|\rho| = 1$ на двух верхних графиках рис. 5). Это классическая схема Микеладзе четвертого порядка точности ($p = q = 1$) и схема шестого порядка точности ($p = 2$, $q = 1$). Первая схема имеет по три узла на каждом слое, а для второй оператор A пятиточечный.

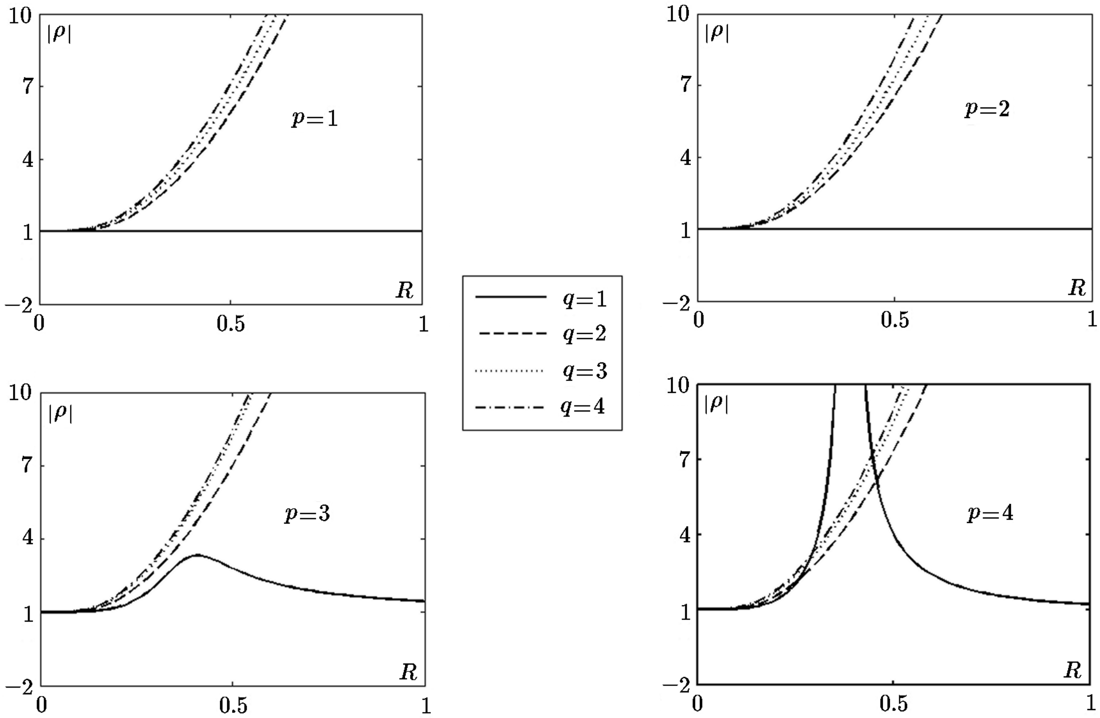

Рис. 5. Анализ устойчивости (модуль возрастания гармоник) двухслойных неявных p/q-схем для уравнения Шредингера

4. Анализ схем с трехточечным оператором B

Из проведенного численного анализа устойчивости следует, что наиболее интересными p/q-схемами являются схемы с трехточечным оператором $B = \Lambda$. Согласно табл. 1, именно эти схемы для уравнения теплопроводности при $p > 0$ оказались абсолютно устойчивыми, и, согласно рис. 5, именно в этом классе схем нашлись две абсолютно устойчивые схемы для уравнения Шредингера. Поэтому при теоретических оценках остановимся только на таких схемах, распространив, однако, исследование на варианты с различными порядками аппроксимации по эволюционной переменной. Итак, для однородного уравнения рассмотрим схемы вида

$$A\frac{u^{n+1}-u^n}{\tau} = c\Lambda u^n, \qquad A = E + \sum_{i=1}^{p} a_i h^{2i}\Lambda^i. \tag{12}$$

В системе уравнений (6)–(9) следует положить $b_1 = b_2 = b_3 = 0$, при этом матрица системы оказывается треугольной. Используя специфику системы, коэффициенты схемы можно находить последовательно:

$$a_1 = \frac{1}{12} - \frac{R}{2}, \tag{13}$$

$$a_2 = -\frac{3}{6!} + \frac{R^2}{12}\left(3 - 2d_2\right), \tag{14}$$

$$a_3 = \frac{62}{8!\,3} + \frac{R^2}{144}\left(2d_2 - 3\right) + \frac{R^3}{24}\left(4d_2 - 3 - d_3\right), \tag{15}$$

$$a_4 = -\frac{562}{10!} + \frac{R^2}{6!\,3} - \frac{R^3}{144}\left(4d_2 - 3 - d_3\right) + \frac{R^4}{24}\left(d_3 - 3d_2 + \frac{2}{3}{d_2}^2 - \frac{1}{5}d_4 + \frac{3}{2}\right). \tag{16}$$

Ясно, что последовательность коэффициентов можно оборвать на любом номере, полагая остальные коэффициенты равными нулю, тем самым ограничивая порядок аппроксимации по h. Таким образом, рассмотрим для уравнения Шредингера ($c = \pm\, d\, i$) схемы различных порядков.

В первом случае положим $a_2 = a_3 = \cdots = 0$. При специальном параметре a_1, определяемом формулой (13), получим схему Микеладзе, имеющую погрешность $O(\tau^2 + h^4)$. Заметим, что a_1 является комплексным, так как $R = ir = \pm id\tau/h^2$.

Во втором случае первые два коэффициента определим по формулам (13) и (14), а следующие положим равными нулю, тогда погрешность улучшится до $O(\tau^{2+d_2} + h^6)$, где d_2 принимает значения ноль или единица. Важно отметить, что при обоих значениях d_2 выражение α_2 является вещественным, поскольку оно зависит только от квадрата мнимого числа R.

Проведем гармонический анализ схемы при $a_3 = a_4 = \cdots = 0$. Для гармоники $\exp(i\omega x)$ из дисперсионного соотношения

$$(1 - a_1\kappa + a_2\kappa^2)(\rho - 1) = -R\kappa, \quad \kappa = 4\sin^2\frac{\omega h}{2},$$

находим множитель возрастания

$$\rho = \frac{1 - (a_1 + R)\kappa + a_2\kappa^2}{1 - a_1\kappa + a_2\kappa^2} = \frac{(1 - u_1\kappa + a_2\kappa^2) - i(v_1 + r)\kappa}{(1 - u_1\kappa + a_2\kappa^2) - iv_1\kappa},$$

где $u_1 = 1/12$ и $v_1 = -r/2$ — вещественная и мнимая части a_1, а r — мнимая часть R. В представленной дроби вещественные части числителя и знаменателя одинаковы вне зависимости от значения параметра a_2, и условие устойчивости $|\rho| \le 1$ эквивалентно неравенству $(v_1)^2 \ge (v_1 + r)^2$, которое оказывается равенством, так как $v_1 = -r/2$. Следовательно, для обеих схем $|\rho| \equiv 1$, т. е. схемы абсолютно устойчивы, но не диссипативны. Таким образом, анализ подтверждает выполнение критерия Неймана для двух p/q-схем ($p = q = 1$ и $p = 2q = 2$). Попутно из проведенного анализа устойчивости вытекает важное следствие.

Следствие 1. *Для всех схем точности $O(\tau^2 + h^4)$ параметрического семейства* (12) *с параметром $a_1 = 1/12 - R/2$, $a_3 = a_4 = \cdots = 0$ и произвольным вещественным параметром a_2 при любом соотношении шагов выполняется критерий устойчивости Неймана, причем для всех гармоник имеет место равенство $|\rho| \equiv 1$.*

Справедливость утверждения очевидна, так как для доказательства невозрастания гармоник конкретное выражение коэффициента a_2 не потребовалось, важна была лишь его вещественность.

Представляет интерес вопрос о возможности расширения области изменения свободного параметра a_2 на комплексную плоскость. Если положить $a_2 = u_2 + v_2 i$, тогда, действуя аналогично, получим

$$\rho = \frac{\left(1 - u_1\kappa + u_2\kappa^2\right) - i\kappa\left(v_1 + r - v_2\kappa\right)}{\left(1 - u_1\kappa + u_2\kappa^2\right) - i\left(v_1 - v_2\kappa\right)\kappa},$$

и условием невозрастания гармоник в этом случае будет неравенство $(v_1 - v_2\kappa)^2 \geq (v_1 + r - v_2\kappa)$, эквивалентное ограничению $rv_2 \geq 0$ на знак мнимой части параметра a_2.

Таким образом, справедливо

Следствие 2. *Если $a_1 = 1/12 - R/2$, $a_3 = a_4 = \cdots = 0$, а $a_2 = u_2 + v_2 i$, где u_2 и v_2 — произвольные вещественные числа, то* (12) *представляет собой двухпараметрическое семейство схем с погрешностью $O(\tau^2 + h^4)$, при $\pm dv_2 \geq 0$ абсолютно устойчивых в смысле критерия Неймана. При этом, если $v_2 \neq 0$, то неравенство становится строгим, и схемы оказываются диссипативными, т. е. для них $|\rho| < 1$.*

Далее, пусть также и a_3 задано согласно (15), а $a_4 = 0$. Тогда схема имеет погрешность $O(\tau^k + h^8)$, где $k = 2 + d_2 + d_3$. При этом очевидно, что если $d_2 = d_3 = 1$, то коэффициент при R^3 в (15), равный $T = 4d_2 - 3 - d_3$, обращается в нуль, поэтому a_3 так же, как и a_2, зависит только от квадрата мнимого числа R и, следовательно, является вещественным. Поэтому по соображениям, изложенным выше, схема $O(\tau^4 + h^8)$ также является абсолютно устойчивой. Очевидно, что если a_3 сделать свободным вещественным параметром, получим, как и в случае схем четвертого порядка точности, семейство абсолютно устойчивых схем $O(h^6)$, а добавив в него мнимую часть с нужным знаком, получим семейство диссипативных схем той же точности.

Заметим, что в выражении (16) при R^3 стоит тот же множитель T, поэтому при $d_2 = d_3 = 1$ коэффициент a_4 также вещественный вне зависимости от того, $d_4 = 0$ или 1, поэтому схемы $O(\tau^4 + h^{10})$ и $O(\tau^5 + h^{10})$ также абсолютно устойчивы. И здесь также возникают параметрические семейства абсолютно устойчивых схем $O(h^8)$ с произвольным вещественным или комплексным параметром a_4, но с мнимой частью нужного знака.

Причина, по которой при численном исследовании модуля возрастания гармоник к разряду абсолютно устойчивых были отнесены только две p/q-схемы (четвертого и шестого порядка по h), заключается в использовании в расчете более короткого разложения разностной производной по времени, при котором схемы имели лишь второй порядок по τ, т. е. рассматривались схемы с $d_2 = d_3 = 0$. В этом случае $T = -3 \neq 0$, поэтому коэффициенты схемы a_3 и a_4 комплексные, и устойчивость, как и в рассмотренных выше схемах, могла бы достигаться при “правильном” знаке их мнимых частей. Очевидно, благоприятное согласование знаков в рассчитываемых вариантах не имело места, и поэтому соответствующие схемы оказались абсолютно неустойчивыми. Подтвердим данное предположение выкладками.

Для этого рассмотрим две схемы. В первом случае $d_2 = d_3 = 0$, и тогда $T = -3 < 0$, а во втором $d_2 = 1$, $d_3 = 0$, и тогда $T = 1 > 0$. С точки зрения порядка точности по h также имеем два варианта: при $a_4 = 0$ имеем восьмой порядок, а при задании a_4 по формуле (16) — десятый. Условие, означающее невозрастание гармоник, имеет для этих вариантов вид

$$-\frac{r}{2} + v_3\kappa^2 - \gamma v_4\kappa^3 \geq \frac{r}{2} + v_3\kappa^2 - \gamma v_4\kappa^3,$$

$$v_3 = \operatorname{Im}(a_3) = -\frac{r^3}{24}T, \quad v_4 = \operatorname{Im}(a_4) = \frac{r^3}{144}T.$$

Здесь параметр γ введен для того, чтобы обойтись одним неравенством при исследовании обеих схем: $\gamma = 0$ в случае схемы $O(h^8)$ и $\gamma = 1$ для схемы $O(h^{10})$. Упрощая неравенство и сокращая на положительные множители, получим эквивалентное условие $T(6+\gamma\kappa) \geq 0$. Для обоих значений γ оно справедливо лишь при неотрицательном T. Отсюда следует, что обе рассматриваемые схемы абсолютно устойчивы в смысле выполнения критерия Неймана при $d_2 = 1$, $d_3 = 0$, но абсолютно неустойчивы при $d_2 = d_3 = 0$.

Исследовалась также устойчивость p/q-схем точности $O(h^8)$ с пятиточечными операторами A и B при различном числе удержанных членов разложения по τ. Коэффициенты схемы a_1, a_2 и b_1 определялись из системы трех линейных уравнений (6)–(8), остальные коэффициенты полагались равными нулю. Опуская за недостатком места громоздкие подробности, сформулируем лишь окончательный результат: при $d_2 = d_3 = 1$ соответствующая схема $O(\tau^4 + h^8)$ оказалась абсолютно устойчивой с $|\rho| = 1$, а схема $O(\tau^3 + h^8)$ с параметрами $d_2 = 1$, $d_3 = 0$ оказалась даже диссипативной ($|\rho| < 1$). Заметим, что частный вариант схемы восьмого порядка предложен в [11].

Из проведенного анализа вытекает рекомендация к построению устойчивых схем: система условий на коэффициенты схемы должна опираться на разложение разностной производной по τ такой длины, которая обеспечивала бы линейную устойчивость, а функционал правой части с той точностью, которую допускает шаблон. Порядок аппроксимации в целом по τ определится как минимум из порядков аппроксимации однородного уравнения и функционала правой части. На порядке аппроксимации по h такой подход никак не отражается.

В заключение приведем некоторые результаты расчетов. Тестовая задача для уравнения Шредингера решалась в области $(0 \leq t \leq 5) \times (-40 \leq x \leq 40)$. Точное решение имело вид

$$u(x,t) = \frac{T_0}{\sqrt{w}} \exp\left(-\frac{x^2}{2w}\right), \quad w = T_0^2 + cit,$$

при значениях параметров $c = 1$, $T_0 = 1.8$. Результаты расчетов приведены в табл. 2. Символами N и M обозначены числа шагов сгущающихся сеток по x и t, а δ_l и P_l ($l = 1, 2, 3$) — ошибки решения в равномерной норме и апостериорные оценки порядка точности для схемы Микеладзе $O(\tau^2 + h^4)$, схемы $O(\tau^3 + h^6)$ и схемы $O(\tau^3 + h^8)$. Для первых двух схем практически наблюдаемый порядок соответствует теоретическому, а для третьей он оказался ниже. Это объясняется влиянием погрешности по τ, так как в расчетах $|R| \approx 0.313$, т. е. $\tau \approx h^3$. При уменьшении начального шага по t в 8 раз (столбец M_4) порядок сначала стремится к теоретической восьмерке (см. столбец P_4), а затем начинает снижаться, так как $|R|$ остается при детализации сетки константой, хотя и малой.

Таблица 2. Результаты расчета тестовой задачи по трем различным схемам

N	M	$p = q = 1$		$p = 2q = 2$		$p = q = 2$		$p = q = 2$		
		δ_1	P_1	δ_2	P_2	δ_3	P_3	M_4	δ_4	P_4
80	8	5.9e−03	3.1	1.2e−03	4.6	1.2e−03	4.3	64	7.5e−05	7.4
160	32	3.8e−04	3.9	2.0e−05	5.9	2.1e−05	5.8	256	2.3e−07	8.4
320	128	2.4e−05	4.0	3.1e−07	6.0	3.3e−07	6.0	1024	1.1e−09	7.8

Литература

1. **Akhmediev N.N., Afanasiev V.V.** Singularities and special soliton solutions of the cubic-quintic complex Ginsburg–Landau equation // Physical Review E. — 1996. — Vol. 53, iss. 1. — P. 1190–1201.
2. **Кившарь Ю.С., Агравал Г.П.** Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам. — М: Физматлит, 2005.
3. **Lu S., Lu Q., Twizell E.H.** Fourier spectral approximation to long-time behaviour of the derivative three-dimensional Ginzburg–Landau equation // J. Comput. Appl. Math. — 2007. — Vol. 198, iss. 1. — P. 167–186.
4. **Xie S.-S., Li G.-X., Yi S.** Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrӧdinger equation // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2009. — Vol. 198. — P. 1052–1060.
5. **Паасонен В.И., Федорук М.П.** Компактная диссипативная схема для нелинейного уравнения Шредингера // Вычислительные технологии. — 2011. — Т. 16, № 6. — С. 68–73.
6. **Паасонен В.И., Федорук М.П.** Компактная безытерационная схема с искусственной диссипацией для нелинейного уравнения Шредингера // Вычислительные технологии. — 2012. — Т. 17, № 3. — С. 83–90.
7. **Паасонен В.И., Федорук М.П.** О повышении порядка точности по эволюционной переменной компактных разностных схем, аппроксимирующих уравнения нелинейной волоконной оптики // Вычислительные технологии. — 2017. — Т. 22, № 6. — С. 57–63.
8. **Остапенко В.В.** О построении компактных разностных схем // ДАН. — 2011. — Т. 441, № 5. — С. 588–592.
9. **Остапенко В.В.** О компактных аппроксимациях дивергентных дифференциальных уравнений // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2012. — Т. 15, № 3. — С. 293–306.
10. **Микеладзе Ш.Е.** О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов// Известия АН СССР. Серия матем. — 1941. — Т. 5, № 1. — С. 57–74.
11. **Wang T.** Convergence of an eighth-order compact difference scheme for the nonlinear Shrӧdinger equation // Advances in Numerical Analysis. — 2012. — http://dx.doi.org/10.1155/2012/913429. — (Article ID 913429).

Поступила в редакцию 10 августа 2018 г.
После исправления 12 марта 2019 г.
Принята к печати 15 октября 2019 г.

Литература в транслитерации

1. **Akhmediev N.N., Afanasiev V.V.** Singularities and special soliton solutions of the cubic-quintic complex Ginsburg–Landau equation // Physical Review E. — 1996. — Vol. 53, iss. 1. — P. 1190–1201.

2. **Kivshar' Yu.S., Agraval G.P.** Opticheskie solitony. Ot volokonnyh svetovodov k fotonnym kristallam. — M: Fizmatlit, 2005.

3. **Lu S., Lu Q., Twizell E.H.** Fourier spectral approximation to long-time behaviour of the derivative three-dimensional Ginzburg–Landau equation // J. Comput. Appl. Math. — 2007. — Vol. 198, iss. 1. — P. 167–186.

4. **Xie S.-S., Li G.-X., Yi S.** Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2009. — Vol. 198. — P. 1052–1060.

5. **Paasonen V.I., Fedoruk M.P.** Kompaktnaya dissipativnaya skhema dlya nelinejnogo uravneniya Shredingera // Vychislitel'nye tekhnologii. — 2011. — T. 16, № 6. — S. 68–73.

6. **Paasonen V.I., Fedoruk M.P.** Kompaktnaya bezyteracionnaya skhema s iskusstvennoj dissipaciej dlya nelinejnogo uravneniya Shredingera // Vychislitel'nye tekhnologii. — 2012. — T. 17, № 3. — S. 83–90.

7. **Paasonen V.I., Fedoruk M.P.** O povyshenii poryadka tochnosti po evolyucionnoj peremennoj kompaktnyh raznostnyh skhem, approksimiruyuschih uravneniya nelinejnoj volokonnoj optiki // Vychislitel'nye tekhnologii. — 2017. — T. 22, № 6. — S. 57–63.

8. **Ostapenko V.V.** O postroenii kompaktnyh raznostnyh skhem // DAN. — 2011. — T. 441, № 5. — S. 588–592.

9. **Ostapenko V.V.** O kompaktnyh approksimaciyah divergentnyh differencial'nyh uravnenij // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2012. — T. 15, № 3. — S. 293–306.

10. **Mikeladze SH.E.** O chislennom integrirovanii uravnenij ellipticheskogo i parabolicheskogo tipov// Izvestiya AN SSSR. Seriya matem. — 1941. — T. 5, № 1. — S. 57–74.

11. **Wang T.** Convergence of an eighth-order compact difference scheme for the nonlinear Shrödinger equation // Advances in Numerical Analysis. — 2012. — http://dx.doi.org/10.1155/2012/913429. — (Article ID 913429).