

# КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ И ШРЁДИНГЕРА<sup>1</sup>

Гордин В.А., Цымбалов Е.А.

*Национальный исследовательский университет "Высшая Школа Экономики", Гидрометцентр России, Москва*

Сравниваются свойства (устойчивость, порядок сходимости, эффективность, монотонность, сохранение первого интеграла) классических и компактных схем для решения линейных уравнений диффузии и Шрёдингера. Излагается общий подход к построению различных компактных схем. Этот подход может быть применен для компактной аппроксимации различных задач математической физики.

## Введение

Рассматриваются компактные разностные схемы для решения задачи Коши на окружности

- для уравнения диффузии:

$$\partial_t u = D \partial_x^2 u + f, \quad (1)$$

где  $u = u(t, x)$  – концентрация,  $f = f(t, x)$  – источник,  $D > 0$  – коэффициент диффузии,

- для уравнения Шрёдингера:

$$\partial_t u = iD \partial_x^2 u + f, \quad (2)$$

где  $D = \hbar/2m > 0$ ,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m$  – масса.

Все приведенные компактные схемы имеют при фиксированном параметре Куранта  $\nu = D\tau h^{-2}$ , где  $\tau$  – шаг разностной схемы по времени,  $h$  – ее шаг по пространству, четвертый порядок аппроксимации по  $h$ .

## Компактные разностные схемы

Аналитические и численные оценки получены для перечисленных ниже разностных (не только компактных) схем при периодических граничных условиях. Компактная разностная схема на заданном шаблоне должна быть точна на парах функций  $(u_{km}, f_{km})$ , где  $u_{km} = t^k x^{2m}$ ,  $f_{km} = (\partial_t - A) u_{km}$ , множество  $\langle k, m \rangle$  задается диаграммой

<sup>1</sup>Работа была выполнена при поддержке исследовательского гранта Научно-исследовательского университета – Высшая школа экономики № 13-09-0124 и гранта РФФИ № 13-01-00703

Ньютона. Здесь  $A$  – пространственный линейный дифференциальный оператор в абстрактном дифференциальном уравнении  $\frac{du}{dt} = Au + f$ . При сравнении рассматривались следующие схемы, аппроксимирующие уравнения (1) и (2).

- **Е3:** Явная трехточечная схема Эйлера для уравнения теплопроводности (2-й порядок аппроксимации по  $h$  при постоянном параметре Куранта  $\nu$ ; устойчива при  $\nu \leq 1/2$ ):

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = h^{-2}[u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n] + f_j^n.$$

- **Е5:** Явная пятиточечная схема Эйлера для уравнения теплопроводности (2-й порядок аппроксимации по  $h$  при  $\nu = const$ ; устойчива при  $\nu \leq 3/8$ ):

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = h^{-2} \left[ \frac{-1}{12}u_{j-2}^n + \frac{4}{3}u_{j-1}^n - \frac{5}{2}u_j^n + \frac{4}{3}u_{j+1}^n - \frac{1}{12}u_{j+2}^n \right] + f_j^n.$$

- **СЕ5.** Компактная разностная схема

$$\begin{aligned} a_0(u_{-2h,0} + u_{2h,0}) + b_0(u_{-h,0} + u_{h,0}) + c_0u_{0,0} + u_{0,\tau} = \\ = p_0(f_{-2h,0} + f_{2h,0}) + q_0(f_{-h,0} + f_{h,0}) + r_0f_{0,0} + \\ + p_1(f_{-2h,\tau} + f_{2h,\tau}) + q_1(f_{-h,\tau} + f_{h,\tau}) + r_1f_{0,\tau} \end{aligned} \quad (3)$$

явная и однослойная (точки шаблона отвечают двум соседним моментам времени).

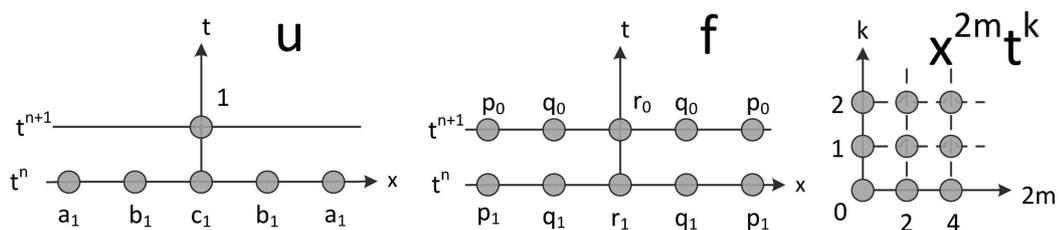


Рис. 1. Компактная схема **С5Е**; шаблоны для функций  $u$  и  $f$  и диаграмма Ньютона мономов  $u_{km} = t^k x^{2m}$

Используются шаблоны и диаграмма Ньютона, показанные на Рис.1. Из условия точности на указанных на Рис.1 парах функций, получаем систему из 9 линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов схемы, решая которую получаем следующее решение:

$$\begin{aligned} a_1 = \frac{\nu(6\nu-1)}{12}; b_1 = -\frac{2\nu(3\nu-2)}{3}; c_0 = 3\nu^2 - 5\nu/2 + 1; p_0 = p_1 = \frac{\tau\nu(6\nu-1)}{48}, \\ q_0 = q_1 = -\frac{\tau\nu(3\nu-2)}{6}; r_0 = r_1 = \frac{\tau}{2} + \frac{3\tau\nu^2}{4} - \frac{5\tau\nu}{8}. \end{aligned}$$

Нетрудно убедиться, что схема (3) имеет 4-й порядок аппроксимации по  $h$  при  $\nu = const$ , устойчива для уравнения (1) при  $\nu \leq 2/3$  и абсолютно неустойчива для уравнения (2).

- **C5x2E**: пятипараметрическое семейство явных двухслойных пятиточечных компактных схем (шаблоны и диаграмма Ньютона см. Рис.2)

$$\begin{aligned}
 & a_2(u_{-2h,0} + u_{2h,0}) + b_2(u_{-h,0} + u_{h,0}) + c_2u_{0,0} + \\
 & + a_1(u_{-2h,\tau} + u_{2h,\tau}) + b_1(u_{-h,\tau} + u_{h,\tau}) + c_1u_{0,\tau} + u_{0,2\tau} = \\
 & = p_2(f_{-2h,0} + f_{2h,0}) + q_2(f_{-h,0} + f_{h,0}) + r_2f_{0,0} + \\
 & + p_1(f_{-2h,\tau} + f_{2h,\tau}) + q_1(f_{-h,\tau} + f_{h,\tau}) + r_1f_{0,\tau} + \\
 & + p_0(f_{-2h,2\tau} + f_{2h,2\tau}) + q_0(f_{-h,2\tau} + f_{h,2\tau}) + r_0f_{0,2\tau},
 \end{aligned} \tag{4}$$

где можно выбрать  $q_1, q_2, r_0, r_1, r_2$  в качестве свободных параметров, через которые линейно выражаются остальные коэффициенты схемы (4). Область устойчивости зависит от выбора этих параметров.

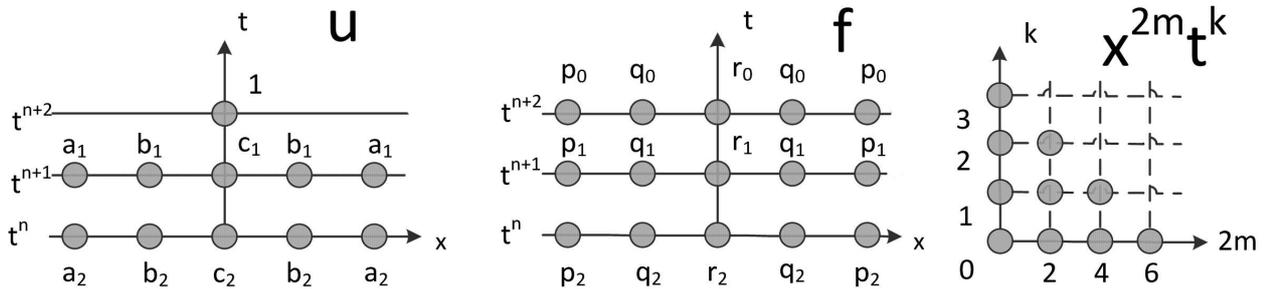


Рис. 2. Компактная схема **C5x2E**; шаблоны для функций  $u$  и  $f$  и диаграмма Ньютона мономов  $u_{km} = t^k x^{2m}$

В численных экспериментах по свободным параметрам схемы была произведена минимизация погрешности решения в евклидовой норме.

- **CN**: классическая неявная однослойная схема Кранка-Николсон:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = [A_h (u^{n+1} + u^n) + f^{n+1} + f^n] / 2, \quad (A_h u)_j = h^{-2} [u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}]$$

имеет 2-й порядок аппроксимации при  $\nu = const$ ; она абсолютно устойчива для (1) и (2).

- **C3I**: неявная трехточечная однослойная компактная схема (см. Рис.3).

При решении соответствующей СЛАУ 8-го порядка получаем коэффициенты:

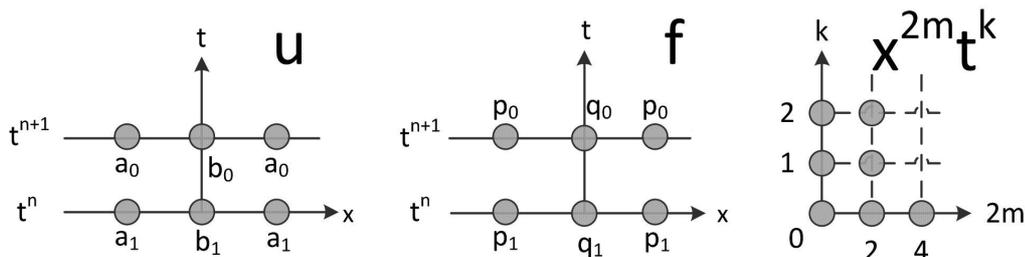


Рис. 3. Компактная схема **C3I**; шаблоны для функций  $u$  и  $f$  и диаграмма Ньютона мономов  $u_{km} = t^k x^{2m}$

$$a_0 = 2(6\nu - 1); a_1 = 2(6\nu + 1); b_0 = -4(6\nu + 5); b_1 = -4(6\nu - 5);$$

$$p_0 = p_1 = -\tau; q_0 = q_1 = -10\tau.$$

Можно доказать, что схема **C3I** абсолютно устойчива для уравнений (1) и (2).

- **C3x3I**: двухпараметрическое семейство неявных трехточечных двухслойных (т. е. участвуют значения неизвестной функции  $u$  в 3 момента времени) компактных схем (см. Рис.4).

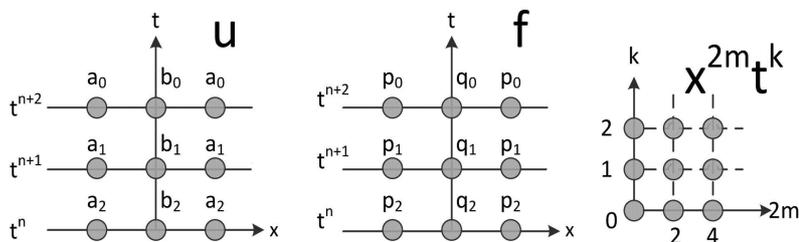


Рис. 4. Компактная схема **C3x3I**; шаблоны для функций  $u$  и  $f$  и диаграмма Ньютона мономов  $u_{km} = t^k x^{2m}$

Для **C3x3I**, аппроксимирующей для уравнения (1) и (2), найдены значения свободных параметров, при которых эта схема абсолютно устойчива.

- **C5I**: неявная пятиточечная однослойная компактная схема (см. Рис.5) Схема абсолютно устойчива для уравнений (1) и (2).

Для компактных схем **C5x2E**, **C3x3I**, **C5I** коэффициенты получены, но формулы здесь не приводятся ввиду громоздкости.

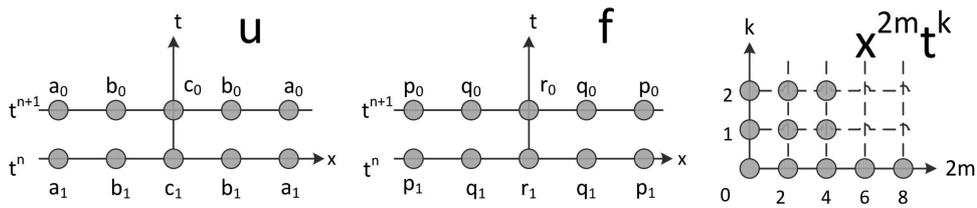


Рис. 5. Компактная схема **C5I**; шаблоны для функций  $u$  и  $f$  и диаграмма Ньютона мономов  $u_{km} = t^k x^{2m}$

### Порядок эффективности

Традиционно сравнение разностных схем происходит по порядку сходимости при  $\nu = \text{const}$ . Наши эксперименты подтвердили 4-й порядок приведенных компактных схем.

На практике необходимо найти (а это требует численных экспериментов) оптимальное значение  $\nu$  для каждой разностной схемы. Поэтому в нашей работе используется также иной критерий для сравнения эффективности схем. Зафиксируем  $Q$  – количество арифметических операций (умножений и делений) и произведем минимизацию нормы погрешности по количеству шагов пространственно-временной сетки (где  $N$  – количество узлов по пространственной переменной,  $M$  – по времени). Необходимо учесть, что разные схемы используют разное количество  $Q_*$  арифметических операций на узел сетки. Тогда выполняется следующее соотношение:

$$Q = MNQ_* \tag{5}$$

**Таблица 1.** Количество арифметических операций  $Q_*$ , приходящихся на вычисление одного узла пространственно-временной сетки для различных разностных схем.

Схема	<b>E3</b>	<b>E5</b>	<b>C5E</b>	<b>C5x2E</b>	<b>C3I</b>	<b>C5I</b>	<b>CN</b>	<b>C3x3I</b>
Однородное уравнение	3	5	5	10	6	15	6	12
Неоднородное уравнение	4	6	15	25	12	21	6	18

Рассмотрим разностную схему для уравнения (1). Пусть  $\tilde{u}(t)$  – численное решение задачи Коши для некоторых начального условия и правой части уравнения. Пусть  $E(t) = \|u(t) - \tilde{u}(t)\|$  – норма погрешности. Число  $d$  назовем порядком эффективности разностной схемы, если выполняется следующее условие:  $E(T) = O(Q^{-d})$  при  $Q \rightarrow \infty$ . Порядок эффективности зависит от выбора нормы, от свойств аналитического решения  $u(t)$  и от времени интегрирования  $T$ . Порядок эффективности является, возможно, более адекватной численной характеристикой разностной схемы, чем порядок аппроксимации и порядок погрешности, потому что (как показывают численные эксперименты) оптимальный по эффективности параметр Куранта для

разностной схемы не постоянен, а зависит от  $Q$ .

В численных экспериментах были использованы следующие тестовые решения на отрезке  $x \in [0, 2\pi]$  для однородного и неоднородного уравнения, соответственно:

- i)  $\tilde{u}_k(0, x) = \sin^k(x) \exp(x)$ ,  $\tilde{f}_k(t, x) \equiv 0$ ,  $k=0, 2$  для уравнения (1) и  $k=2, 4$  для уравнения (2).
- ii)  $u_k^*(t, x) = \sin(t) \sin^k(x) \exp(x)$ ,  $f_k^*(t, x) = [\partial_t - D\partial_x^2] u_k^*(t, x)$ ,  $k = 2, 4$  для уравнения (1) и  $f_k^*(t, x) = [\partial_t - iD\partial_x^2] u_k^*(t, x)$  для уравнения (2).

**Таблица 2.** Порядок эффективности для различных разностных схем в зависимости от нормы и гладкости тестового решения для неоднородного уравнения (1).

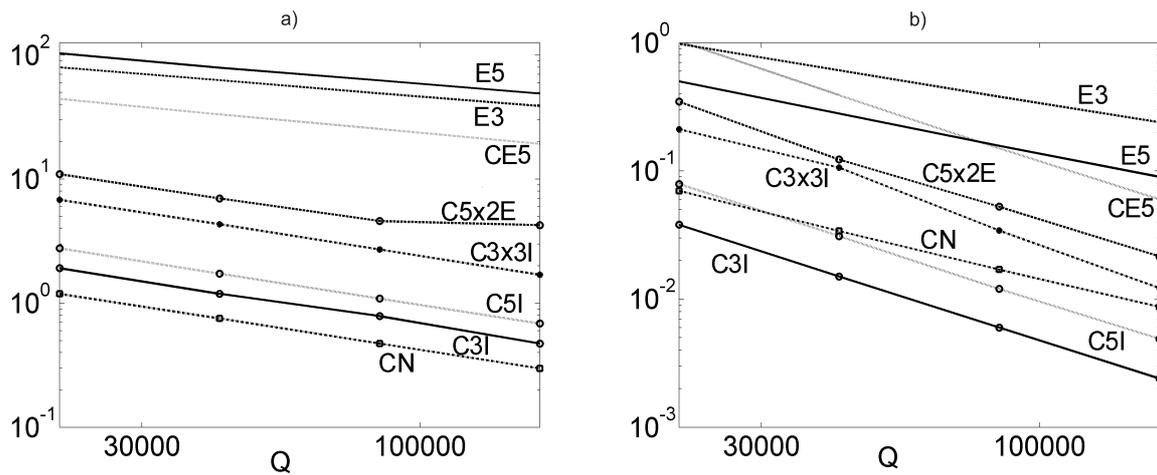
$k$	2		4	
	С	$L^2$	С	$L^2$
<b>Е3</b>	0.3426	0.3452	0.6315	0.6767
<b>Е5</b>	0.3592	0.3600	0.9311	0.8248
<b>С5Е</b>	0.4003	0.4002	<b>1.3613</b>	<b>1.3676</b>
<b>С5x2Е</b>	<b>1.7498</b>	<b>0.9703</b>	<b>1.3490</b>	<b>1.3417</b>
<b>С3I</b>	0.6705	0.6749	<b>1.3486</b>	<b>1.3283</b>
<b>С5I</b>	0.6602	0.6717	<b>1.3483</b>	<b>1.3374</b>
<b>С3x3I</b>	0.7538	0.6683	<b>1.3578</b>	<b>1.3985</b>
<b>CN</b>	0.6638	0.6647	1.0057	1.0032

Из Табл.2 следует, что вне зависимости от гладкости решения, компактные схемы имеют больший порядок эффективности, нежели классические явные схемы и схема Кранка-Николсон. Победитель среди негладких решений – схема **С5x2Е** – была оптимизирована по свободным параметрам (5 параметров схемы и число  $N$  в условии (5)).

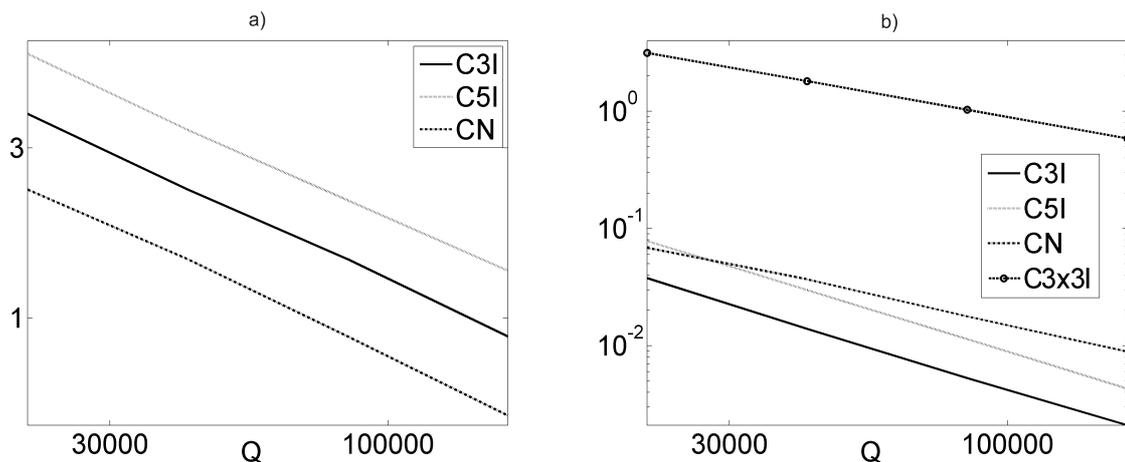
**Таблица 3.** Порядок эффективности для различных разностных схем в зависимости от нормы и гладкости тестового решения для неоднородного уравнения (2).

$k$	2		4	
	С	$L^2$	С	$L^2$
<b>С3I</b>	0.5925	<b>0.6923</b>	<b>1.3185</b>	<b>1.3893</b>
<b>С5I</b>	<b>0.6772</b>	<b>0.6740</b>	<b>1.3520</b>	<b>1.3949</b>
<b>С3x3I</b>	<b>0.6857</b>	0.6465	0.8121	0.8077
<b>CN</b>	0.5728	<b>0.7033</b>	0.9886	0.9836

Из Табл.3 следует, что на гладких решениях уравнения (2) предпочтительны схемы **С3I** и **С5I**, в то время как для негладких решений практически все рассмотренные схемы эффективны одинаково.



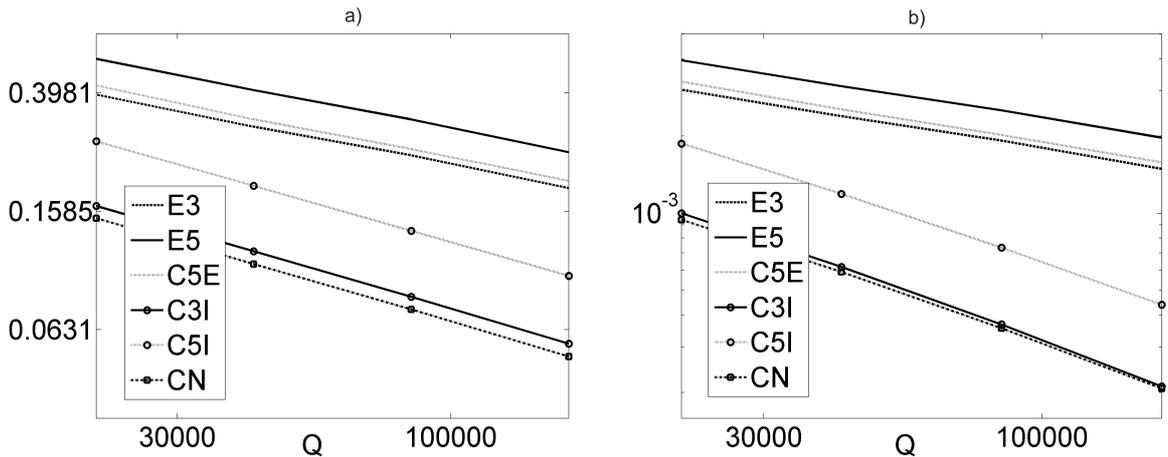
**Рис.6.** Зависимость евклидовой нормы погрешности решения задачи Коши для неоднородного уравнения (1) от количества арифметических операций  $Q$ . Тестовое решение  $i$ ). а)  $k=2$  б)  $k=4$ . Для каждой схемы в эксперименте использовался свой оптимальный параметр Куранта  $\nu$ . Билогарифмическая система координат.



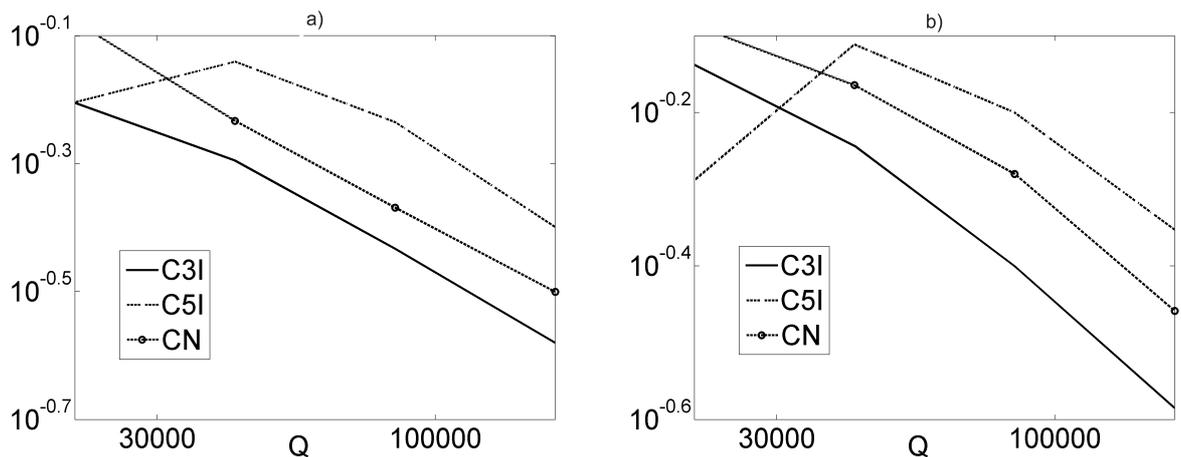
**Рис.7.** То же для уравнения (2). Тестовое решение  $i$ ). а)  $k=2$  б)  $k=4$ . Рассмотрены только неявные схемы, так как явные схемы неустойчивы для уравнения (2).

Рис. 6 и 7 показывают превосходство схемы **C3I** для гладких решений и схемы **CN** для негладких. Схема Кранка-Николсон, однако, для достижения малых погрешностей использует огромные значения параметра Куранта  $\nu$ ; поэтому, если существенно свойство монотонности решения (см. следующий пункт), то победителем в таком соревновании снова будет схема **C3I**.

Из Рис. 8 и 9 видно, что для однородных уравнений (1) и (2) предпочтительны неявные схемы, все имеющие примерно одинаковый порядок эффективности. Схемы **CN** и **C3I** показали наилучшие результаты; однако при небольших параметрах Куранта  $\nu$  среди этих двух схем предпочтительнее схема **C3I**.



**Рис.8.** Зависимость евклидовой нормы погрешности решения задачи Коши для однородного уравнения (1) от количества арифметических операций. Тестовое решение ii). а)  $k=0$  б)  $k=2$ . Для каждой схемы в эксперименте использовался оптимальный параметр Куранта  $\nu$ . Билогарифмическая система координат.



**Рис.9.** То же для уравнения (2). Тестовое решение ii). а)  $k=2$  б)  $k=4$ . Рассмотрены только неявные схемы, так как явные схемы для уравнения (2) неустойчивы.

## Монотонность и сохранение первого интеграла

Решение задачи Коши для уравнения диффузии (1) на прямой при  $t > 0$  принимает лишь значения на отрезке  $\left[ \min_x u_0(x), \max_x u_0(x) \right]$ . В частности, при неотрицательной начальной функции решение также неотрицательно. Схему, аппроксимирующую уравнение (1) назовем монотонной, если она обладает этим свойством.

Функция Грина этой задачи (обобщенное решение задачи Коши с  $\delta$ -функцией в качестве начального условия) имеет максимум по  $x$  в начале координат при всех  $t > 0$ . Будем говорить, что разностная схема физична, если при начальном условии  $\delta_{N/2}^j$  ( $j = 1, \dots, N$ ) решение  $u(\tau, j) = A_h \delta_{N/2}^j$

обладает этим же свойством (единственный максимум при  $j=0$ ). Здесь  $\delta_k^m$  – символ Кронекера.

Проведенные расчеты и численные эксперименты дали следующие результаты.

На интервале  $\nu < \nu_1$  некоторые разностные схемы оказываются слабо немонотонны, что выражается в колебании знака функции  $u(\tau, j)$  при больших  $|j-N/2|$ . Этот эффект, однако, практически важен только для негладких решений.

На интервале  $\nu > \nu_2$  разностные схемы теряют физичность.

На интервале  $\nu > \nu_3$  разностные схемы теряют монотонность, т. е. решение  $u(\tau, j)$  принимает отрицательные значения.

**Таблица 4.** Границы различных типов монотонности.

	<b>ЕЗ</b>	<b>СЕ5</b>	<b>СЗІ</b>	<b>С5І</b>	<b>СN</b>
$\nu_1$	0	1/6	1/6	0.69	0
$\nu_2$	1/3	17/30	0.53	0.47	0.71
$\nu_3$	1/2	2/3	1.21	1.13	1.49

Для разностных схем, аппроксимирующих уравнение Шрёдингера (2), существенно сохранение со временем полной вероятности:

$$\forall t \int_0^{2\pi} |u(t, x)|^2 dx = 1$$

Для всех представленных неявных схем: **СN**, **СЗІ**, **С5І** и **СN** дискретный аналог первого интеграла  $\sum_{j=1}^N |u(t, x_j)|^2$  с машинной точностью совпадает с теоретическим значением. Явные схемы для (2) неустойчивы.

## Заключение

Рассмотрены различные типы компактных схем для эволюционных уравнений в частных производных; приведен алгоритм построения схем.

Классический подход к построению разностной схемы: два отдельных алгоритма для аппроксимации по пространству и по времени. Компактный: аппроксимация происходит одновременно, с учетом конкретного дифференциального уравнения. Порядок аппроксимации обычно выше у компактных схем. Подход может быть обобщен на случай переменных коэффициентов, многих пространственных переменных, уравнений и систем более высокого порядка. Эффективность разностных схем может зависеть от гладкости точных решений, на которых схемы сравниваются.

Для разных шаблонов и наборов пар функций, на которых компактная схема точна, найдены коэффициенты компактных схем; проведено сравнение их между собой и с известными классическими схемами. Пользователь может выбрать из перечня наиболее подходящую схему для конкретной краевой задачи. Как правило, компактные схемы имеют значительное преимущество.

Существует несколько видов ограничений из-за монотонности для параметров разностных схем, аппроксимирующих однородное уравнение диффузии. Компактные схемы, однако, предпочтительны и при таких ограничениях.

Неявные компактные схемы сохраняют значение дискретного аналога первого интеграла для однородного уравнения Шрёдингера  $\int_0^{2\pi} |u(t, x)|^2 dx$  с машинной точностью.

Таким образом, компактные схемы предпочтительны для широкого класса прикладных вычислительных задач. Наиболее универсальной схемой, по мнению авторов, является **СЗІ**.

Выражаем нашу признательность Ф.Л.Быкову за полезные обсуждения.

## Литература

1. *В.А.Гордин*. Математические задачи гидродинамического прогноза погоды. Вычислительные аспекты. Л., Гидрометеозидат, 1987.
2. *V.A.Gordin*. Mathematical Problems and Methods in Hydrodynamical Weather Forecasting, Gordon & Breach Publ. House, Amsterdam et al., 2000.
3. *В.А.Гордин*. Математика, компьютер, прогноз погоды и другие сценарии математической физики. М., Физматлит, 2010, 2012.
4. *B.Gustafson, H.Kreiss, and J.Oliger*. Time Dependent Problems and Difference Methods, John Wiley & Sons, New York, 1995.
5. *W. F. Spatz*. High-Order Compact Finite Difference Schemes for Computational Mechanics. PhD thesis, University of Texas at Austin, Austin, TX, 1995.