

Конкретные задачи диссертации (структура по главам/пакетам)

А. Теория и постановка (2D) Формализовать преобразования координат около гладкого контура и вывод ПУ из Гельмгольца; явно выделить модельный остаток (то, что отбрасывается при параболизации).

А1.1. Геометрия: гладкий контур, натуральный параметр и репер Френе

Рассматривается гладкий контур (кривая) $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$, заданный натуральной параметризацией

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(s), \quad 0 \leq s \leq L,$$

где s — длина дуги, L — длина контура. Натуральная параметризация означает

$$|\mathbf{r}'(s)| = 1.$$

Вводятся единичные векторы касательной и нормали (репер Френе):

$$\boldsymbol{\tau}(s) = \mathbf{r}'(s), \quad \mathbf{n}(s) \text{ — единичная нормаль, } \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad |\mathbf{n}| = 1.$$

Кривизна $\kappa(s)$ и радиус кривизны $\rho(s)$ связаны соотношением

$$\kappa(s) = \frac{1}{\rho(s)}.$$

Формулы Френе–Серре в плоскости имеют вид

$$\boldsymbol{\tau}'(s) = \kappa(s) \mathbf{n}(s) = \frac{1}{\rho(s)} \mathbf{n}(s), \quad \mathbf{n}'(s) = -\kappa(s) \boldsymbol{\tau}(s) = -\frac{1}{\rho(s)} \boldsymbol{\tau}(s).$$

Эти формулы являются ключевыми при вычислении метрических коэффициентов и оператора Лапласа в криволинейных координатах, связанных с контуром.

А1.2. Естественные координаты (ξ, s) : отображение и область корректности

В окрестности контура вводятся естественные координаты (ξ, s) :

$$\mathbf{x}(\xi, s) = \mathbf{r}(s) + \xi \mathbf{n}(s), \tag{1}$$

где ξ — координата вдоль нормали (подписанное расстояние до контура). Геометрический смысл:

$\xi = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} \in \Gamma$, $\xi > 0$ — по направлению $\mathbf{n}(s)$, $\xi < 0$ — в противоположную сторону.

Для корректности координат необходимо отсутствие самопересечений нормальных лучей. Практически используется условие существования трубчатой окрестности:

$$|\xi| < \rho_{\min}, \quad \rho_{\min} := \min_{s \in [0, L]} \rho(s),$$

то есть величина $|\xi|$ должна быть меньше минимального радиуса кривизны. В этом случае отображение (1) локально взаимно-однозначно.

A1.3. Коэффициенты Ламе и метрика в координатах (ξ, s)

Вычисляются базисные векторы координатных линий:

$$\mathbf{x}_\xi = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi} = \mathbf{n}(s), \quad \mathbf{x}_s = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial s} = \mathbf{r}'(s) + \xi \mathbf{n}'(s) = \boldsymbol{\tau}(s) - \xi \kappa(s) \boldsymbol{\tau}(s) = \left(1 - \xi \kappa(s)\right) \boldsymbol{\tau}(s).$$

При фиксированном выборе ориентации нормали знак может меняться; в системе обозначений удобно фиксировать коэффициент Ламе вдоль s в виде

$$h_s(\xi, s) = |\mathbf{x}_s| = 1 + \frac{\xi}{\rho(s)} = \frac{\rho(s) + \xi}{\rho(s)}. \quad (2)$$

(Именно форма $h_s = 1 + \xi/\rho(s)$ приводит к стандартным коэффициентам вида $(\rho/(\rho + \xi))^2$ в уравнениях.)

Вдоль ξ коэффициент Ламе равен

$$h_\xi(\xi, s) = |\mathbf{x}_\xi| = 1.$$

Ортогональность координат следует из

$$\mathbf{x}_\xi \cdot \mathbf{x}_s = \mathbf{n} \cdot (h_s \boldsymbol{\tau}) = 0.$$

Следовательно, (ξ, s) — ортогональная система координат с коэффициентами Ламе

$$h_\xi = 1, \quad h_s = 1 + \frac{\xi}{\rho(s)}.$$

Якобиан перехода (элемент площади) равен

$$dA = h_\xi h_s d\xi ds = h_s d\xi ds.$$

A1.4. Градиент и Лапласиан в ортогональных координатах

Для ортогональных координат (q_1, q_2) с коэффициентами Ламе h_1, h_2 справедливо:

$$\nabla f = \frac{1}{h_1} \frac{\partial f}{\partial q_1} \mathbf{e}_1 + \frac{1}{h_2} \frac{\partial f}{\partial q_2} \mathbf{e}_2,$$

$$\Delta f = \frac{1}{h_1 h_2} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2}{h_1} \frac{\partial f}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1}{h_2} \frac{\partial f}{\partial q_2} \right) \right].$$

В координатах (ξ, s) имеем $h_\xi = 1$, $h_s = h_s(\xi, s)$, поэтому

$$\Delta f = \frac{1}{h_s} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(h_s \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{h_s} \frac{\partial f}{\partial s} \right) \right]. \quad (3)$$

1) Нормальная часть. Так как $h_s = 1 + \xi/\rho(s)$, то

$$\frac{\partial h_s}{\partial \xi} = \frac{1}{\rho(s)}.$$

Следовательно,

$$\frac{1}{h_s} \frac{\partial}{\partial \xi} (h_s f_\xi) = \frac{1}{h_s} (h_s f_{\xi\xi} + h_{s,\xi} f_\xi) = f_{\xi\xi} + \frac{h_{s,\xi}}{h_s} f_\xi = f_{\xi\xi} + \frac{1/\rho(s)}{1 + \xi/\rho(s)} f_\xi = f_{\xi\xi} + \frac{1}{\rho(s) + \xi} f_\xi.$$

2) Тангенциальная часть. Второй член:

$$\frac{1}{h_s} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{h_s} f_s \right) = \frac{1}{h_s} \left(\left(\frac{1}{h_s} \right)_s f_s + \frac{1}{h_s} f_{ss} \right) = \frac{1}{h_s^2} f_{ss} + \frac{1}{h_s} \left(\frac{1}{h_s} \right)_s f_s.$$

Так как

$$\left(\frac{1}{h_s} \right)_s = -\frac{h_{s,s}}{h_s^2},$$

то

$$\frac{1}{h_s} \left(\frac{1}{h_s} \right)_s f_s = -\frac{h_{s,s}}{h_s^3} f_s.$$

Остаётся вычислить $h_{s,s}$:

$$h_s(\xi, s) = 1 + \frac{\xi}{\rho(s)} \Rightarrow h_{s,s} = \xi \left(\frac{1}{\rho(s)} \right)_s = \xi \left(-\frac{\rho_s}{\rho^2} \right) = -\xi \frac{\rho_s}{\rho^2}.$$

Подстановка даёт

$$-\frac{h_{s,s}}{h_s^3} f_s = -\frac{-\xi \rho_s / \rho^2}{((\rho + \xi)/\rho)^3} f_s = \frac{\xi \rho_s}{\rho^2} \cdot \frac{\rho^3}{(\rho + \xi)^3} f_s = \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3} f_s.$$

Кроме того,

$$\frac{1}{h_s^2} = \left(\frac{\rho}{\rho + \xi} \right)^2.$$

Получается, тангенциальная часть:

$$\frac{1}{h_s} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{h_s} f_s \right) = \left(\frac{\rho}{\rho + \xi} \right)^2 f_{ss} + \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3} f_s.$$

Итоговая формула Лапласиана. Суммируя нормальную и тангенциальную части, получаем явный вид:

$$\Delta f = f_{\xi\xi} + \frac{1}{\rho + \xi} f_{\xi} + \left(\frac{\rho}{\rho + \xi} \right)^2 f_{ss} + \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3} f_s. \quad (4)$$

A1.5. Уравнение Гельмгольца в координатах (ξ, s)

Рассматривается уравнение Гельмгольца

$$\Delta E + k^2 E = 0, \quad (5)$$

где $E(\xi, s)$ — комплексное поле, $k > 0$ — волновое число (высокочастотный режим: $k \gg 1$).

Подставляется явный вид Лапласиана (4):

$$E_{\xi\xi} + \frac{1}{\rho + \xi} E_{\xi} + \left(\frac{\rho}{\rho + \xi} \right)^2 E_{ss} + \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3} E_s + k^2 E = 0.$$

Это уравнение является “точной” (непараболизированной) постановкой в естественных координатах в окрестности гладкого контура.

A1.6. Выделение быстро осциллирующей фазы и огибающей

Для высокочастотного поля вводится стандартное выделение фазы вдоль нормали:

$$E(\xi, s) = u(\xi, s) e^{ik\xi}, \quad (6)$$

где $u(\xi, s)$ — комплексная огибающая (медленно меняющаяся по ξ по сравнению с $e^{ik\xi}$).

Вычисляются производные:

$$\begin{aligned} E_{\xi} &= (u_{\xi} + iku) e^{ik\xi}, \\ E_{\xi\xi} &= (u_{\xi\xi} + 2iku_{\xi} - k^2 u) e^{ik\xi}, \\ E_s &= u_s e^{ik\xi}, \quad E_{ss} = u_{ss} e^{ik\xi}. \end{aligned}$$

Подстановка в уравнение Гельмгольца приводит к (после сокращения общего множителя $e^{ik\xi}$):

$$(u_{\xi\xi} + 2iku_{\xi} - k^2u) + \frac{1}{\rho + \xi}(u_{\xi} + iku) + \left(\frac{\rho}{\rho + \xi}\right)^2 u_{ss} + \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3} u_s + k^2u = 0.$$

Слагаемые $-k^2u$ и $+k^2u$ взаимно уничтожаются, остаётся:

$$u_{\xi\xi} + 2iku_{\xi} + \frac{1}{\rho + \xi}u_{\xi} + ik\frac{1}{\rho + \xi}u + \left(\frac{\rho}{\rho + \xi}\right)^2 u_{ss} + \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3}u_s = 0. \quad (7)$$

Формула (7) является полной (до параболизации) моделью для огибающей $u(\xi, s)$. Она содержит:

- главный “маршевый” член $2iku_{\xi}$;
- отброшенный в РЕ член $u_{\xi\xi}$;
- геометрические поправки через $\rho(s)$ и $\rho_s(s)$;
- тангенциальную диффузию/дисперсию через u_{ss} с коэффициентом $(\rho/(\rho + \xi))^2$.

A1.7. Параболизация: малый параметр и переход к параболической модели

Высокочастотное масштабирование. Пусть характерная длина изменения огибающей по ξ равна L_{ξ} . Тогда оценки порядков:

$$u_{\xi} \sim \frac{u}{L_{\xi}}, \quad u_{\xi\xi} \sim \frac{u}{L_{\xi}^2}.$$

Сравним $u_{\xi\xi}$ и $2iku_{\xi}$:

$$\frac{|u_{\xi\xi}|}{|2ku_{\xi}|} \sim \frac{u/L_{\xi}^2}{k u/L_{\xi}} = \frac{1}{kL_{\xi}}.$$

Вводится малый параметр

$$\varepsilon := \frac{1}{kL_{\xi}} \ll 1.$$

Тогда $u_{\xi\xi}$ является величиной порядка ε по сравнению с $2iku_{\xi}$. Это и является обоснованием параболизации (в первом приближении).

Параболическая модель (уравнение Малюжинца). Параболическая модель получается из (7) отбрасыванием члена $u_{\xi\xi}$:

$$2iku_{\xi} + \frac{1}{\rho + \xi}u_{\xi} + ik\frac{1}{\rho + \xi}u + \left(\frac{\rho}{\rho + \xi}\right)^2 u_{ss} + \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3}u_s = 0. \quad (8)$$

Уравнение (8) является параболическим по ξ (маршевым): при фиксированном ξ оно содержит производные по s , а эволюция происходит при увеличении ξ .

A1.8. Модельный остаток: точное определение и операторная форма

Определение полной и параболической моделей. Определяются два оператора, действующие на огибающую $u(\xi, s)$:

$$L_{\text{full}}[u] := u_{\xi\xi} + 2iku_{\xi} + \frac{1}{\rho + \xi}u_{\xi} + ik\frac{1}{\rho + \xi}u + \left(\frac{\rho}{\rho + \xi}\right)^2 u_{ss} + \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3}u_s,$$

$$L_{\text{PE}}[u] := 2iku_{\xi} + \frac{1}{\rho + \xi}u_{\xi} + ik\frac{1}{\rho + \xi}u + \left(\frac{\rho}{\rho + \xi}\right)^2 u_{ss} + \frac{\xi \rho \rho_s}{(\rho + \xi)^3}u_s.$$

Тогда полная модель имеет вид $L_{\text{full}}[u] = 0$, а параболическая — $L_{\text{PE}}[u] = 0$.

Модельный остаток. Модельный остаток определяется разностью:

$$R_{\text{model}}[u] := L_{\text{full}}[u] - L_{\text{PE}}[u]. \quad (\text{A1.1})$$

Из явных формул следует

$$R_{\text{model}}[u] = u_{\xi\xi}. \quad (\text{A1.2})$$

То есть в базовой параболизации единственным отброшенным членом является вторая производная по ξ .

Смысл R_{model} . Если u является решением параболической модели, то величина $R_{\text{model}}[u] = u_{\xi\xi}$ характеризует, насколько далеко это решение от удовлетворения полной модели:

$$L_{\text{full}}[u] = R_{\text{model}}[u].$$

Следовательно, норма R_{model} (или норма полной невязки $L_{\text{full}}[u_h]$) является прямой метрикой модельной ошибки параболизации.

A1.9. Нормы модельного остатка и практический протокол контроля

Пусть u_h — численное решение параболической модели (8) на сетке (ξ_i, s_j) .

1) Невязка полной модели. Определяется дискретная невязка полной модели:

$$\mathcal{R}_{\text{full}}(i, j) := \left(L_{\text{full}}[u_h] \right)_{i,j}.$$

Это вычисление требует аппроксимации $u_{\xi\xi}$, u_{ξ} , u_s , u_{ss} на сетке. Для оценки порядка модельности важно использовать согласованную аппроксимацию производных.

2) Нормы. Оцениваются нормы:

$$\|\mathcal{R}_{\text{full}}\|_{\infty} = \max_{i,j} |\mathcal{R}_{\text{full}}(i, j)|,$$

$$\|\mathcal{R}_{\text{full}}\|_2 \approx \left(\sum_{i,j} |\mathcal{R}_{\text{full}}(i, j)|^2 h_s(\xi_i, s_j) \Delta\xi \Delta s \right)^{1/2}.$$

Вес h_s появляется из элемента площади $dA = h_s d\xi ds$.

3) Отдельная оценка R_{model} . Так как $R_{\text{model}}[u] = u_{\xi\xi}$, можно отдельно оценивать

$$\|R_{\text{model}}[u_h]\| = \|u_{\xi\xi,h}\|.$$

Если $\|u_{\xi\xi,h}\|$ не убывает при уточнении сетки по s и повышении точности решения РЕ, то модельная ошибка является доминирующей (предел применимости параболизации).

4) Разделение модельной и дискретизационной ошибок.

- фиксируется достаточно точная дискретизация РЕ по s и по маршевой координате (так, чтобы дискретизационная ошибка стала малой);
- вычисляется $\|\mathcal{R}_{\text{full}}\|$ и/или $\|u_{\xi\xi}\|$;
- затем уточнение сетки продолжается: если ошибка решения перестаёт убывать, а $\|\mathcal{R}_{\text{full}}\|$ стабилизируется, то достигнут режим, где модельная ошибка параболизации ограничивает точность.

A1.10. Границы применимости параболического приближения (качественные критерии)

1) Трубочатая окрестность. Требуется $|\xi| < \rho_{\min}$ для корректности координат и отсутствия вырождения h_s .

2) Высокочастотность и “медленность” огибающей. Требуется малость $\varepsilon = 1/(kL_{\xi}) \ll 1$, то есть огибающая должна меняться по ξ на масштабе существенно большем, чем длина волны $1/k$.

3) Геометрическая гладкость. Функции $\rho(s)$ и $\rho_s(s)$ должны быть ограничены и достаточно гладки, так как они входят в коэффициенты уравнения и в невязку полной модели.

4) Верификационный критерий. Критерием применимости РЕ служит малая невязка полной модели:

$\|L_{\text{full}}[u_h]\|$ мала и не доминирует над дискретизационной ошибкой.

Именно поэтому модельный остаток (A1.2) включается как отдельная контролируемая величина.

A.2. Разложение общей ошибки

Для комбинированного метода (точная модель \rightarrow параболизация \rightarrow дискретизация) общая ошибка представляется суммой трёх основных вкладов:

$$E_{\text{total}} \approx E_{\text{model}} + E_{\text{disc}} + E_{\text{round}}. \quad (\text{A.3})$$

Здесь:

- E_{model} — модельная ошибка параболизации (связана с R_{model});
- E_{disc} — дискретизационная ошибка схем/сеток;
- E_{round} — ошибки округления и накопления.

Практическая диагностика.

- E_{disc} видна как сходимость при уменьшении шага.
- E_{round} даёт плато на графиках “ошибка vs шаг” и усиливается при больших N, N_t .
- E_{model} оценивается через $\|L_{\text{full}}[u_h]\|$ при достаточно точном решении РЕ.

A.3. Нормы и метрики качества

Пусть u_* — эталон (точное/высокоточное) решение, u_h — численное решение. Вводятся:

- L_2 -ошибка:

$$\varepsilon_2 = \frac{\|u_h - u_*\|_2}{\|u_*\|_2}, \quad \|v\|_2 = \left(\int |v|^2 ds \right)^{1/2}.$$

- L_∞ -ошибка:

$$\varepsilon_\infty = \|u_h - u_*\|_\infty, \quad \|v\|_\infty = \max |v|.$$

- Фазовая ошибка: сравнение $\arg(u_h)$ и $\arg(u_*)$ там, где $|u_*|$ достаточно велико.
- Инварианты/энергия: например, контроль $\|W(t, \cdot)\|_2$ для канонической задачи.

- Невязка уравнения: для канонической задачи

$$r = \left\| 2i W_t + W_{\psi\psi} \right\|,$$

а для контроля модельности — $\|L_{\text{full}}[u_h]\|$.

II. Переход к канонической задаче: подробный вывод (1.4.15), (1.4.18), (1.4.19)

После замены $s \rightarrow \sigma$ и введения функций

$$\Gamma(\xi, \sigma) = \gamma(s(\xi, \sigma)), \quad R(\xi, \sigma) = \rho(s(\xi, \sigma)), \quad U(\xi, \sigma) = u(\xi, s),$$

получается уравнение вида

$$ik \left(2U_\xi + 2\Gamma U_\sigma + \frac{U}{R + \xi} \right) + U_{\sigma\sigma} = 0, \quad U(0, \sigma) = u_0(\sigma). \quad (\text{II.0.1})$$

Здесь:

- ξ — нормальная координата (расстояние от контура);
- s — натуральная длина дуги;
- $\sigma = s + \xi \gamma(s)$ — преобразованная продольная координата;
- $\rho(s)$ — радиус кривизны, $\gamma(s)$ — функция, связанная с кривизной (в дипломе используется как первообразная от $1/\rho$);
- $R(\xi, \sigma) = \rho(s(\xi, \sigma))$ и $\Gamma(\xi, \sigma) = \gamma(s(\xi, \sigma))$ — перенос этих функций в новые координаты.

II.1. Подстановка, убирающая конвективный член: вывод (1.4.15)

Шаг 1: подстановка $U = V \exp(-ik\Phi)$. Введём фазовую функцию

$$\Phi(\xi, \sigma) = \int_0^\sigma \Gamma(\xi, \sigma') d\sigma', \quad \Phi_\sigma = \Gamma,$$

и сделаем подстановку

$$U(\xi, \sigma) = V(\xi, \sigma) e^{-ik\Phi(\xi, \sigma)}. \quad (\text{II.1.1})$$

Смысл: множитель $e^{-ik\Phi}$ подбирается так, чтобы убрать “конвективный” член с U_σ .

Шаг 2: выписать производные. Так как $U = V e^{-ik\Phi}$, то

$$U_\xi = V_\xi e^{-ik\Phi} + V \cdot (e^{-ik\Phi})_\xi = e^{-ik\Phi} (V_\xi - ik\Phi_\xi V),$$

и

$$U_\sigma = e^{-ik\Phi} \left(V_\sigma - ik\Phi_\sigma V \right) = e^{-ik\Phi} \left(V_\sigma - ik\Gamma V \right).$$

Вторая производная:

$$U_{\sigma\sigma} = \frac{\partial}{\partial\sigma} \left(e^{-ik\Phi} (V_\sigma - ik\Gamma V) \right) = e^{-ik\Phi} \left(V_{\sigma\sigma} - 2ik\Gamma V_\sigma - (ik\Gamma_\sigma + k^2\Gamma^2) V \right).$$

Шаг 3: подставить в (II.0.1) и сократить множитель $e^{-ik\Phi}$. Подстановка даёт:

$$ik \left(2(V_\xi - ik\Phi_\xi V) + 2\Gamma(V_\sigma - ik\Gamma V) + \frac{V}{R + \xi} \right) + V_{\sigma\sigma} - 2ik\Gamma V_\sigma - (ik\Gamma_\sigma + k^2\Gamma^2)V = 0.$$

члены с V_σ :

$$ik \cdot 2\Gamma V_\sigma - 2ik\Gamma V_\sigma = 0$$

взаимно уничтожаются.

Оставшиеся члены собираются в:

$$2ikV_\xi + V_{\sigma\sigma} + \left(2k^2\Phi_\xi + k^2\Gamma^2 - ik\Gamma_\sigma + ik\frac{1}{R + \xi} \right) V = 0.$$

В дипломе далее показано, что комбинация потенциальных членов сводится к простому виду, и получается уравнение

$$2ikV_\xi + V_{\sigma\sigma} = 0, \tag{1.4.15}$$

II.2. Переход к $W(t, \psi)$: вывод (1.4.18)

Далее вводятся обозначения, согласованные с дипломом:

$$\tilde{\xi} = \xi + \frac{L}{\gamma(L)}. \tag{II.2.1}$$

Определяется новая переменная

$$\psi = \frac{\sigma}{\tilde{\xi}} = \frac{s + \xi\gamma(s)}{\xi + \frac{L}{\gamma(L)}}, \tag{II.2.2}$$

и вводится “параболическое время”

$$t = t_0 - \frac{1}{k\tilde{\xi}}, \quad t_0 = \frac{\gamma(L)}{kL}. \tag{II.2.3}$$

Зачем нужна нормировка. Чтобы привести уравнение (1.4.15) к стандартной форме по переменным (t, ψ) , вводится связь между V и W вида

$$V(\xi, \sigma) = \frac{\exp\left(ik\frac{\sigma^2}{2\tilde{\xi}}\right)}{\sqrt{\frac{\gamma(L)}{L}\tilde{\xi}}} W(t, \psi). \tag{II.2.4}$$

Здесь:

- экспонента $\exp\left(ik\frac{\sigma^2}{2\xi}\right)$ убирает квадратичную фазу, возникающую при переходе от σ к $\psi = \sigma/\tilde{\xi}$;
- нормировка $\left(\sqrt{\frac{\gamma(L)}{L}\tilde{\xi}}\right)^{-1}$ согласует изменение “масштаба” и обеспечивает корректное поведение решения при эволюции.

Результат. После стандартных вычислений (подстановка (II.2.4) и переход к (t, ψ)) получается каноническая задача

$$2iW_t + W_{\psi\psi} = 0, \quad 0 < t < t_0, \quad 0 < \psi < \gamma(L). \quad (1.4.18)$$

II.3. Восстановление $u(\xi, s)$: вывод (1.4.19)

Итоговое восстановление огибающей $u(\xi, s)$ через $W(t, \psi)$ записывается в виде:

$$u(\xi, s) = \frac{W(t, \psi)}{\sqrt{1 + \frac{\xi}{L}\gamma(L)}} \exp(ikP(\xi, s)), \quad (1.4.19a)$$

где фазовая функция

$$P(\xi, s) = \frac{(s + \xi\gamma(s))^2}{2\left(\xi + \frac{L}{\gamma(L)}\right)} - \int_0^s \gamma(s') \left(1 + \frac{\xi}{\rho(s')}\right) ds'. \quad (1.4.19b)$$

Пояснение каждого множителя в (1.4.19a).

- $W(t, \psi)$ — решение канонической задачи (1.4.18).
- Делитель $\sqrt{1 + \frac{\xi}{L}\gamma(L)}$ — нормировка, возникающая из замены переменных и масштабирования.
- $\exp(ikP)$ — совокупная фаза, аккумулирующая квадратичную фазу от перехода $(\sigma, \tilde{\xi}) \rightarrow \psi$ и интегральный вклад вдоль контура (через γ и ρ).

V. Численный метод (2D)

V.4. Схемы для канонической задачи

Каноническая задача

$$2iW_t + W_{\psi\psi} = 0$$

на периодическом интервале по ψ допускает несколько естественных методов.

1) **Кранк–Николсон (CN)**. CN имеет второй порядок по t и требует решения циклической трёхдиагональной СЛАУ на каждом шаге.

2) **Спектральный метод (FFT)**. При периодичности удобно перейти в Фурье-пространство:

$$W(t, \psi) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \widehat{W}_m(t) e^{im\psi}, \quad W_{\psi\psi} \leftrightarrow -m^2 \widehat{W}_m.$$

Производные вычисляются через FFT за $O(N \log N)$.

3) **Split-step**. При добавлении локальных членов (потенциала) применимо операторное расщепление (Strang splitting).

4) **Высокие порядки по t** . Используются embedded-пары/Ричардсон, экспоненциальные интеграторы и/или многозначные методы.

В.5. Апостериорный контроль шага (Ричардсон)

Пусть $W^n \rightarrow W^{n+1}$ вычислено одним шагом Δt методом CN (порядок $p = 2$), а $W_{(1/2)}^{n+1}$ — двумя шагами $\Delta t/2$. Тогда

$$\text{err}_{\text{loc}} \approx \frac{\|W_{(1/2)}^{n+1} - W^{n+1}\|}{2^p - 1} = \frac{\|W_{(1/2)}^{n+1} - W^{n+1}\|}{3}. \quad (\text{B.1})$$

Обновление шага:

$$\Delta t_{\text{new}} = \Delta t \cdot \theta \left(\frac{\text{tol}}{\text{err}_{\text{loc}}} \right)^{\frac{1}{p+1}}, \quad p = 2. \quad (\text{B.2})$$

В.6. Быстрый линейный “сердечник”

На каждом шаге CN возникает циклическая трёхдиагональная система $Ax = b$. Специализированный решатель обеспечивает сложность $O(N)$ на один шаг. Для батч-режима применимы SIMD и параллельные прогоны, а для спектральной части - FFTW ($O(N \log N)$).

С. Верификация и “машинная точность”

С.7. “Золотые” эталоны и протокол

Для окружности эталон строится аналитически (ряд/FFT) либо в повышенной точности с контролем невязки и сохраняется таблицей (npz/hdf5) с метаданными.

С.8. Оптимальный шаг: пересечение дискретизации и округления

Строятся log–log графики $\varepsilon(N)$ и $\varepsilon(N_t)$ в L_2 и L_∞ . Оптимум выбирается по принципу “пересечения”: уменьшение шага прекращается, когда дискретизационная ошибка становится сравнимой с округлительной (плато).

Д. Инструмент (software engineering)

Д.9. API “геометрия → постановка → расчёт → отчёт”

Вводится конвейер:

Geometry → Problem setup → Solver → Verification report.

Геометрия даёт $\mathbf{r}(s)$, $\rho(s)$, $\gamma(s)$; постановка формирует РЕ/каноническую задачу; решатель возвращает W/u и ресурсы; отчёт содержит ошибки/невязки/графики и метаданные.

Д.10. Профилирование, параллелизм, C++-ядро, CI

Профилирование выявляет “горячие” места (СЛАУ/FFT/циклы). Серии прогонов распараллеливаются. Критическое переносится в C++ (циклическая СЛАУ, FFTW, SIMD), Python управляет экспериментами и отчётами. Регрессионные тесты в CI фиксируют параметры/версии и защищают точность.

Е. Переход к 3D

Е.11. Координаты у поверхности и оператор

Для поверхности $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$:

$$\mathbf{x}(\xi, u^1, u^2) = \mathbf{r}(u^1, u^2) + \xi \mathbf{n}(u^1, u^2).$$

Оператор Лапласа раскладывается на нормальную часть и Δ_Σ (Лаплас–Бельтрами):

$$\Delta_\Sigma f = \frac{1}{\sqrt{\det g}} \frac{\partial}{\partial u^i} \left(\sqrt{\det g} g^{ij} \frac{\partial f}{\partial u^j} \right).$$

Е.12. Эффективность в 3D: патчи и согласование

Поверхность покрывается патчами $\{\Sigma_\alpha\}$; на стыках выполняется перенос решения (интерполяция, контроль согласованности), а устойчивость обеспечивается адаптивным шагом, контролем невязки и (при необходимости) фильтрацией высоких мод.