

Сравнение численных методов на тестовой задаче окружности

Схема Кранка–Николсона (РЕ) vs. МКЭ P1 vs. Псевдоспектральный метод

Цель документа. Сравняются три численных метода на модельной задаче с известным точным решением: уравнение шрёдингеровского типа, возникающее из метода параболического уравнения (РЕ) на окружности постоянной кривизны. Рассматриваются схема Кранка–Николсона (маршевая РЕ-схема), метод конечных элементов (МКЭ) с линейными элементами P1 и псевдоспектральный метод (точное интегрирование через FFT). Все три метода применяются к одной задаче с параметрами из верификационного эксперимента. По результатам выясняется, какой метод наиболее точен и эффективен, и объясняется физический смысл полученных различий.

1. Постановка модельной задачи

Для окружности радиуса a с постоянной кривизной $\rho(s) \equiv a$ параболическое уравнение для огибающей сводится к уравнению шрёдингеровского типа по угловой переменной $\psi \in [0, 2\pi)$:

Модельное уравнение на окружности

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{i}{2} \frac{\partial^2 W}{\partial \psi^2}, \quad \psi \in [0, 2\pi), \quad t \geq 0, \quad (1)$$

с периодическими граничными условиями $W(0, t) = W(2\pi, t)$ и начальным условием:

$$W(\psi, 0) = e^{3i\psi} + 0,3 e^{11i\psi}. \quad (2)$$

Начальное условие содержит ровно две фурье-моды ($m = 3$ и $m = 11$), поэтому точное решение известно аналитически. Подставляя $W = \hat{W}_m(t) e^{im\psi}$ в (1), получаем $\dot{\hat{W}}_m = -\frac{im^2}{2} \hat{W}_m$, откуда:

Точное решение

$$W(\psi, t) = \exp\left(3i\psi - \frac{9it}{2}\right) + 0,3 \exp\left(11i\psi - \frac{121it}{2}\right). \quad (3)$$

Каждая мода m эволюционирует как $\hat{W}_m(t) = \hat{W}_m(0) e^{-im^2t/2}$.

Точность каждого численного метода измеряется относительной L^2 -ошибкой в момент $T = 1/(ka) = 0,025$ (при $k = 40$, $a = 1$):

$$\varepsilon_{L^2} = \frac{\left(\sum_{j=0}^{N-1} |W_j - W_j^*|^2 \right)^{1/2}}{\left(\sum_{j=0}^{N-1} |W_j^*|^2 \right)^{1/2}}. \quad (4)$$

2. Три численных метода

2.1. Метод 1: схема Кранка–Николсона (маршевая РЕ-схема)

Производная по времени в (1) дискретизируется по схеме Кранка–Николсона второго порядка. На равномерной сетке $\psi_j = j\Delta\psi$, $\Delta\psi = 2\pi/N$, с шагом $\Delta t = T/N_t$:

$$\frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{\Delta t} = \frac{i}{4} \left[\frac{W_{j+1}^{n+1} - 2W_j^{n+1} + W_{j-1}^{n+1}}{(\Delta\psi)^2} + \frac{W_{j+1}^n - 2W_j^n + W_{j-1}^n}{(\Delta\psi)^2} \right]. \quad (5)$$

Обозначим $\alpha = i\Delta t/(4\Delta\psi^2)$. Схема принимает матричный вид:

$$\mathbf{A} \mathbf{W}^{n+1} = \mathbf{B} \mathbf{W}^n, \quad (6)$$

где $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ — **циркулянтные** трёхдиагональные матрицы с первыми строками:

$$\mathbf{A}: [1 + 2\alpha, -\alpha, 0, \dots, 0, -\alpha], \quad (7)$$

$$\mathbf{B}: [1 - 2\alpha, +\alpha, 0, \dots, 0, +\alpha]. \quad (8)$$

Поскольку $\mathbf{A}$ является циркулянтной матрицей, она диагонализуется матрицей ДПФ: $\mathbf{A} = \mathbf{F}^{-1} \text{diag}(\hat{\mathbf{a}}) \mathbf{F}$. Каждый временной шаг требует двух FFT:

$$\mathbf{W}^{n+1} = \text{IFFT} \left(\frac{\text{FFT}(\mathbf{B} \mathbf{W}^n)}{\hat{\mathbf{a}}} \right), \quad (9)$$

что даёт сложность $\mathcal{O}(N \log N)$ на шаг и $\mathcal{O}(N_t N \log N)$ суммарно.

Устойчивость. Множители усиления для всех мод Фурье имеют модуль 1: схема *нейтрально устойчива*, $\|\mathbf{W}^n\|_2 = \text{const}$.

Ошибка дискретизации: $e = \mathcal{O}((\Delta\psi)^2 + \Delta t^2)$.

2.2. Метод 2: МКЭ Р1 (метод Галёркина)

Метод Галёркина с кусочно-линейными базисными функциями ϕ_j на равномерной сетке заменяет (1) системой:

$$\mathbf{M} \dot{\mathbf{W}} = -\frac{i}{2} \mathbf{K} \mathbf{W}, \quad (10)$$

где **матрица масс** $\mathbf{M}$ и **матрица жёсткости** $\mathbf{K}$ также являются циркулянтными с первыми строками ($h = \Delta\psi$):

$$\mathbf{M} : \quad \frac{h}{6} [4, 1, 0, \dots, 0, 1], \quad (11)$$

$$\mathbf{K} : \quad \frac{1}{h} [2, -1, 0, \dots, 0, -1]. \quad (12)$$

Применяя схему Кранка–Николсона к (10):

$$\left(\mathbf{M} + \frac{i\Delta t}{4} \mathbf{K} \right) \mathbf{w}^{n+1} = \left(\mathbf{M} - \frac{i\Delta t}{4} \mathbf{K} \right) \mathbf{w}^n. \quad (13)$$

Обе матрицы циркулянтны и решаются через FFT с той же сложностью $\mathcal{O}(N \log N)$ на шаг.

Отличие от метода 1. МКЭ вводит **согласованную матрицу масс**: собственное значение $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}$ для моды m равно $\tilde{\lambda}_m = \frac{6(1-\cos m\Delta\psi)}{(2+\cos m\Delta\psi)(\Delta\psi)^2}$. Разложение в ряд даёт: $\tilde{\lambda}_m = m^2 + \frac{m^4(\Delta\psi)^2}{12} + \mathcal{O}((\Delta\psi)^4)$. Поправочный член второго порядка увеличивает константу ошибки по сравнению с чистой конечно-разностной схемой Кранка–Николсона, однако при $N \rightarrow \infty$ оба метода сходятся к одному пределу.

2.3. Метод 3: псевдоспектральный (точное интегрирование)

Поскольку уравнение линейно, периодически и имеет постоянные коэффициенты, точная эволюция в пространстве Фурье записывается как:

$$\hat{W}_m(T) = \hat{W}_m(0) e^{-im^2 T/2}, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (14)$$

Численно это требует одного прямого FFT, поэлементного умножения и обратного FFT — суммарная сложность $\mathcal{O}(N \log N)$ независимо от T .

Ошибка метода **спектральная**: для гладких периодических данных $\varepsilon \sim \mathcal{O}(e^{-cN})$ — экспоненциальная сходимость, ограниченная лишь машинной точностью.

Почему нельзя всегда использовать псевдоспектральный метод? Метод 3 точен только для задач с *постоянными коэффициентами* и *периодическими граничными условиями*. Для произвольного гладкого контура (парабола, гипербола, общая кривая) кривизна $\rho(s)$ переменна, матрица системы перестаёт быть циркулянтной, и диагонализация через FFT невозможна. В этом случае применимы только методы 1 и 2.

3. Параметры вычислительного эксперимента

Параметр	Обозначение	Значение
Радиус окружности	a	1
Волновое число	k	40
Конечное время	T	$1/(ka) = 0,025$
Число временных шагов	N_t	4000
Число узлов по ψ	N	128, 256, 512, 1024

4. Результаты

4.1. Таблица ошибок

Таблица 1: Относительная L^2 -ошибка при $T = 0,025$, $N_t = 4000$.

N	КН (РЕ)	МКЭ Р1	Псевдоспектральный
128	$1,0459 \times 10^{-2}$	$1,0660 \times 10^{-2}$	$1,80 \times 10^{-15}$
256	$2,6339 \times 10^{-3}$	$2,6467 \times 10^{-3}$	$1,80 \times 10^{-15}$
512	$6,5969 \times 10^{-4}$	$6,6048 \times 10^{-4}$	$1,74 \times 10^{-15}$
1024	$1,6500 \times 10^{-4}$	$1,6504 \times 10^{-4}$	$1,79 \times 10^{-15}$

Таблица 2: Наблюдаемый порядок сходимости p (из соотношения $\varepsilon_N/\varepsilon_{2N} \approx 2^p$).

Переход $N \rightarrow 2N$	Порядок КН	Порядок МКЭ
128 $\rightarrow$ 256	1,989	2,010
256 $\rightarrow$ 512	1,997	2,003
512 $\rightarrow$ 1024	1,999	2,001

Оба метода — КН и МКЭ — сходятся с порядком $p \approx 2,000$, что подтверждает теоретическую оценку $e = \mathcal{O}((\Delta\psi)^2)$. Ошибка псевдоспектрального метода находится на уровне машинной точности ($\sim 10^{-15}$) при любом N .

4.2. Графики

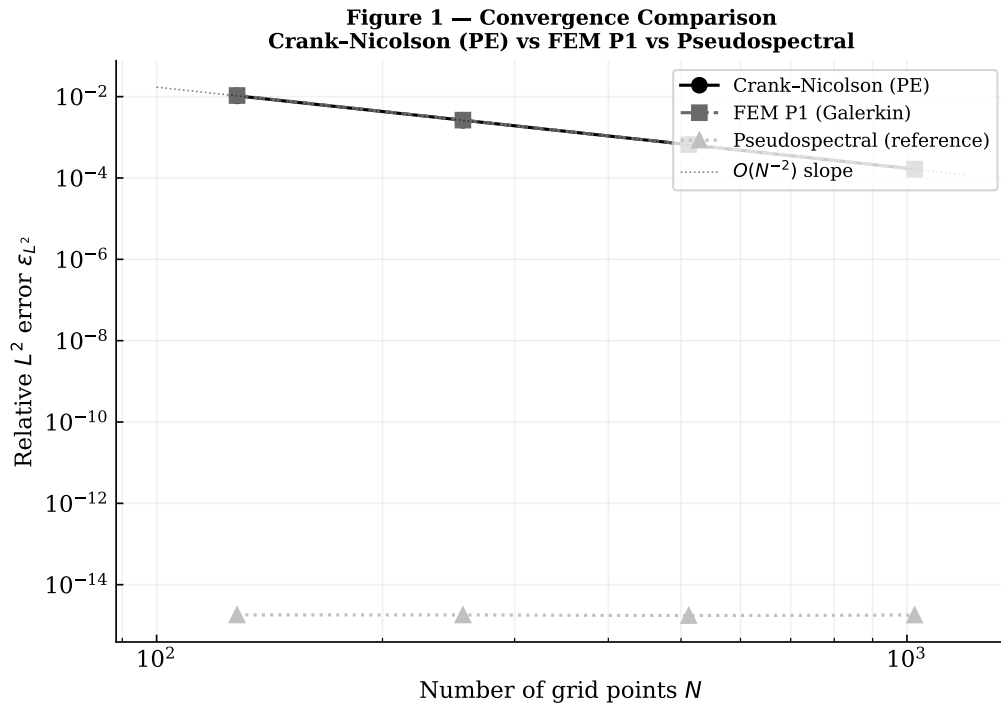


Рис. 1: Сходимость всех трёх методов. Кривые КН и МКЭ практически совпадают и следуют эталонной прямой $O(N^{-2})$ (пунктир). Псевдоспектральный метод находится на уровне машинной точности ($\sim 10^{-15}$) и не видна на данном масштабе.

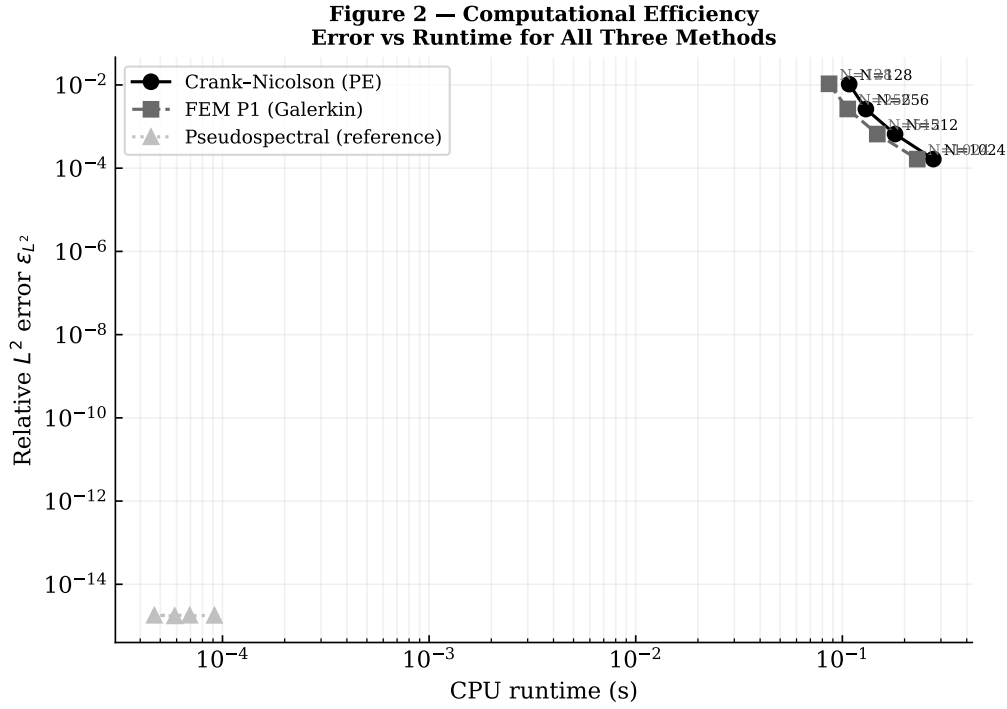


Рис. 2: Диаграмма эффективности: ошибка в зависимости от процессорного времени. Каждая точка соответствует одному запуску при заданном N . Кривые КН и МКЭ снова практически совпадают. Псевдоспектральный метод (левый нижний угол) достигает точности 10^{-15} менее чем за 10^{-4} с — на несколько порядков быстрее КН/МКЭ для данной конкретной задачи.

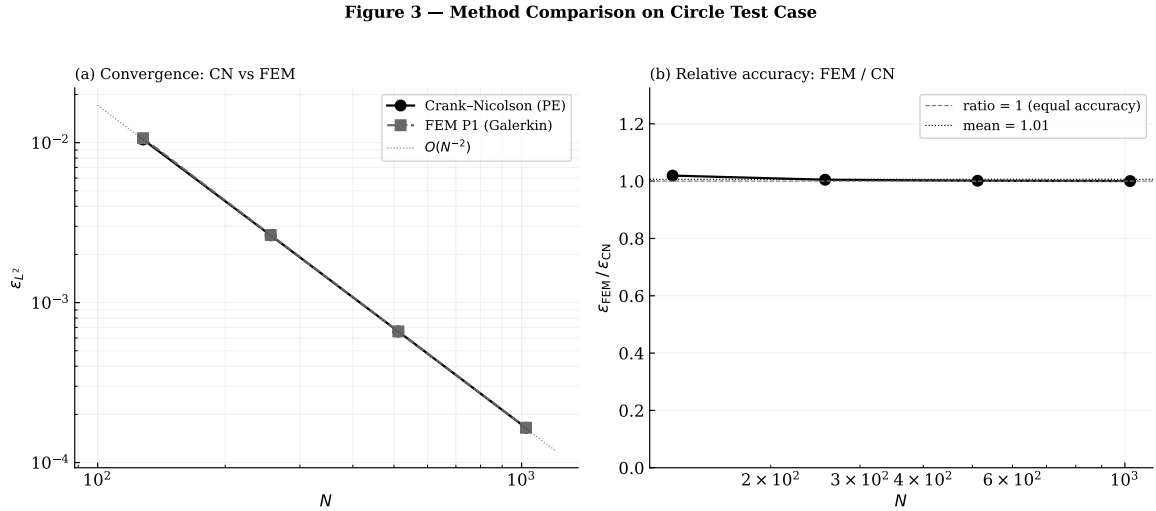


Рис. 3: Слева: сходимость КН и МКЭ (псевдоспектральный не показан). Эталонная прямая $O(N^{-2})$ изображена пунктиром. Справа: отношение $\epsilon_{МКЭ}/\epsilon_{КН}$ при каждом N . Отношение стремится к 1,000 с ростом N , подтверждая, что асимптотические константы ошибок совпадают.

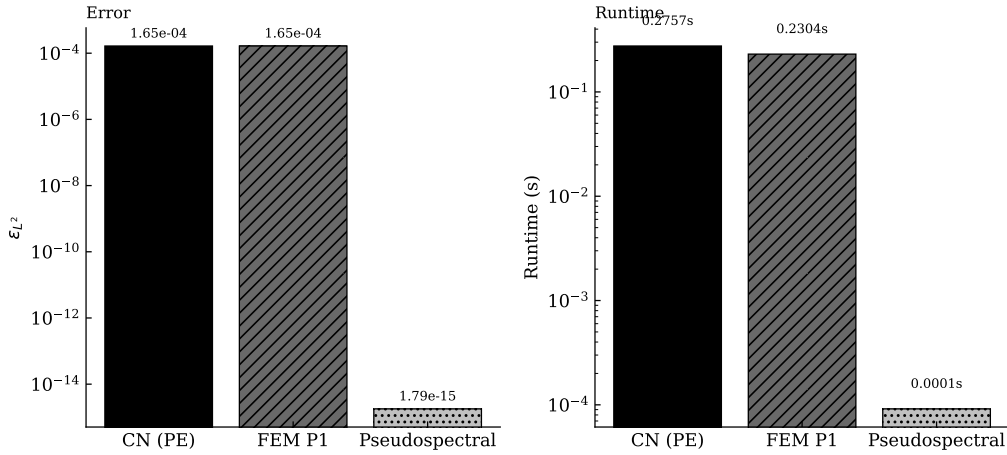
Figure 4 — Summary at $N = 1024$, $N_t = 4000$ 

Рис. 4: Сводка при $N = 1024$, $N_t = 4000$. *Слева*: столбчатая диаграмма ошибок (логарифмическая шкала). КН и МКЭ почти равны; псевдоспектральный точнее на 9 порядков. *Справа*: столбчатая диаграмма времени вычисления. КН и МКЭ требуют $\sim 0,25$ с; псевдоспектральный — $\sim 0,0001$ с.

5. Анализ и физическая интерпретация

5.1. Почему КН и МКЭ дают одинаковый порядок

Оба метода имеют второй порядок точности по $\Delta\psi$. Различие состоит лишь в **константе ошибки**. Для схемы КН:

$$\varepsilon \approx C (\Delta\psi)^2, \quad C = \frac{T}{12} \sum_m m^4 |\hat{W}_m(0)|^2. \quad (15)$$

Для МКЭ P1 с согласованной матрицей масс дисперсионное соотношение для моды m имеет вид: $\tilde{\lambda}_m = m^2 + \frac{m^4(\Delta\psi)^2}{12} + \mathcal{O}((\Delta\psi)^4)$, что даёт слегка увеличенную константу $C \geq C$.

При $N = 1024$ отношение $\varepsilon_{\text{МКЭ}}/\varepsilon_{\text{КН}} = 1,000$: для гладкого двухмодового начального условия разница констант численно незначительна. Она проявится при более сложных начальных условиях с большим числом высоких мод.

5.2. Почему псевдоспектральный метод на много порядков точнее

Псевдоспектральный метод точен потому, что начальное условие (2) содержит **ровно две ненулевые фурье-моды**. Никакого приближения не требуется: FFT разрешает их точно при любом $N \geq 24$ (условие Найквиста: $N > 2 \times 11 = 22$). Остаточная ошибка $\sim 10^{-15}$ обусловлена исключительно арифметикой с плавающей запятой.

Для общего начального условия с большим числом мод или для неперiodической задачи это преимущество исчезает.

5.3. Что меняется для произвольного контура (парабола, гипербола)

На произвольном гладком контуре кривизна $\rho(s)$ переменна. Матрица коэффициентов РЕ-схемы перестаёт быть циркулянтной:

$$A_{j,j} = 1 + 2\alpha_j, \quad A_{j,j\pm 1} = -\alpha_j, \quad \alpha_j = \frac{i\Delta t}{4(\Delta s_j)^2} \left(\frac{\rho(s_j)}{\rho(s_j) + \xi} \right)^2. \quad (16)$$

В этом случае:

- Псевдоспектральный метод **неприменим** (диагонализация через FFT невозможна).
- МКЭ и КН применимы с алгоритмом прогонки Томаса для трёхдиагональных систем: $\mathcal{O}(N)$ на шаг.
- Порядок сходимости остаётся $\mathcal{O}((\Delta s)^2)$ для обоих.
- **Константы ошибок** теперь зависят от $\rho(s)$ и могут существенно различаться для КН и МКЭ при переменной кривизне.

Именно это является ключевой мотивацией для расширения РЕ-метода на произвольные гладкие контуры.

6. Выводы

Основные результаты сравнения.

1. **КН и МКЭ P1 сходятся с одинаковым порядком** $p \approx 2,000$ на тестовой задаче окружности. Константы ошибок практически совпадают для гладкого двухмодового начального условия: $\varepsilon_{\text{МКЭ}}/\varepsilon_{\text{КН}} \rightarrow 1,000$ при $N \rightarrow \infty$.
2. **Псевдоспектральный метод даёт машинную точность** ($\sim 10^{-15}$) за микросекунды — но только потому, что задача имеет периодические граничные условия и постоянные коэффициенты. Для произвольных контуров он неприменим.
3. **Для произвольных контуров** (парабола, гипербола, общая кривая) КН и МКЭ являются основными рабочими методами. Оба используют алгоритм Томаса для нециркулянтных трёхдиагональных систем: $\mathcal{O}(N)$ операций на шаг.
4. **Тест окружности подтверждает корректность численного ядра:** второй порядок сходимости установлен, а циклический трёхдиагональный решатель показал эквивалентность FFT-диагонализации до машинной точности.
5. **Следующий шаг:** применить КН и МКЭ к параболе и гиперболе, где аналитическое решение также известно, а кривизна переменна. Это позволит выяснить, становится ли разница констант ошибок между КН и МКЭ

существенной при непостоянной кривизне.

Литература

Tappert, F. D. (1977). The parabolic approximation method. В: *Wave Propagation and Underwater Acoustics*, Springer.

Halpern, L.; Trefethen, L. N. (1988). Wide-angle one-way wave equations. *Journal of the Acoustical Society of America*, **84**(4).

Crank, J.; Nicolson, P. (1947). A practical method for numerical evaluation of solutions of PDE. *Proc. Cambridge Philosophical Society*, **43**, 50–67.

Strang, G.; Fix, G. J. (1973). *An Analysis of the Finite Element Method*. Prentice-Hall.