

1 В. Практическая применимость и связь с существующими методами

1.1 В1. Общая область применимости параболических волновых моделей

Параболические волновые модели применяются в задачах, где полное эллиптическое уравнение Гельмгольца

$$\Delta E + k^2 E = 0$$

заменяется маршевой задачей вдоль выделенного направления распространения. Такая замена особенно эффективна в высокочастотном режиме, когда поле распространяется преимущественно в одном направлении, а обратное рассеяние либо отсутствует, либо является малой поправкой.

Главное преимущество параболического подхода состоит в том, что двумерная или трёхмерная краевая задача заменяется последовательным продвижением решения по одной координате. Вместо одновременного решения во всей области вычислительный алгоритм строит поле пошагово:

$$x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots$$

Это резко снижает вычислительную сложность и делает метод особенно полезным для задач дальнего распространения волн.

Классическая структура такого подхода имеет вид:

$$\begin{aligned} \text{Full wave model} &\rightarrow \text{One-way factorization} \\ &\rightarrow \text{Parabolic equation} \rightarrow \text{Marching scheme} \end{aligned}$$

В рассматриваемой работе эта идея переносится в естественные координаты около гладкого контура. В отличие от стандартной декартовой постановки, здесь выделенное направление связано не с фиксированной осью, а с геометрией контура. Поэтому геометрические коэффициенты, зависящие от кривизны, входят в оператор явно:

$$\rho(s), \quad \rho_s(s), \quad \frac{\rho(s)}{\rho(s) + \xi}.$$

Таким образом, метод относится к классу геометрически согласованных параболических моделей, предназначенных для эффективного описания волнового поля вблизи криволинейных границ.

1.2 В2. Подводная акустика

Одной из наиболее развитых областей применения параболических уравнений является подводная акустика [1].

Параболическое уравнение удобно тем, что задача дальнего распространения звука становится начально-краевой задачей: поле известно вблизи источника и далее продвигается по дальности. Такой подход позволяет эффективно учитывать:

- неоднородный профиль скорости звука;
- волноводные эффекты;

- взаимодействие с дном и поверхностью;
- распространение на большие расстояния;
- зависимость среды от дальности.

В подводной акустике особенно важны два варианта численного решения:

split-step Fourier method,

Padé wide-angle method.

Первый вариант использует спектральную обработку поперечного оператора и хорошо работает для гладких сред. Второй расширяет область применимости метода на более широкие углы распространения.

Для рассматриваемого проекта подводная акустика является важной аналогией, поскольку в ней уже давно используется та же основная идея: полная волновая задача заменяется эффективной маршевой моделью с контролируемой областью применимости.

1.3 ВЗ. Электромагнитное и радиоволновое распространение

Параболические уравнения широко используются также в электромагнитном распространении, особенно при моделировании радиоволн над земной поверхностью, морем и в тропосфере. В таких задачах необходимо учитывать:

- атмосферную рефракцию;
- рельеф;
- морскую поверхность;
- ducting effects;
- дальнейшее распространение radar и communication signals.

В электромагнитной постановке параболическое уравнение получается из уравнения Гельмгольца после выделения главной фазы:

$$E(x, z) = u(x, z)e^{ikx}.$$

Если огибающая u меняется по x медленнее, чем фазовый множитель e^{ikx} , то член u_{xx} отбрасывается или аппроксимируется более точной wide-angle формой. Это приводит к one-way модели, пригодной для маршевого счёта.

Особенно важны задачи радиолокации, где требуется быстро рассчитывать поле в больших областях. Полная задача Гельмгольца в таких областях слишком дорогая, тогда как PE-подход позволяет строить поле последовательно по дальности.

Для настоящей работы эта область важна по двум причинам. Во-первых, электромагнитные PE-модели показывают, что параболизация не ограничена акустикой. Во-вторых, именно в EM-задачах особенно развиты hybrid approaches, где PE соединяется с FEM, boundary conditions и terrain-following coordinates. ... используются также в электромагнитном распространении [3].

1.4 В4. Оптика и параксиальное приближение

В оптике параболическое приближение появляется в форме параксиального волнового уравнения. Если поле записывается как

$$E(x, y, z) = A(x, y, z)e^{ikz},$$

то после подстановки в уравнение Гельмгольца и отбрасывания второй производной A_{zz} получается параксиальная модель:

$$2ikA_z + A_{xx} + A_{yy} = 0.$$

Эта модель лежит в основе описания гауссовых пучков, лазерной оптики и beam propagation methods. В отличие от лучевой оптики, параксиальная модель сохраняет дифракционные эффекты, но остаётся значительно дешевле полного решения уравнения Гельмгольца или уравнений Максвелла.

Оптическая аналогия особенно важна для настоящей работы, поскольку математическая структура совпадает с уже полученным уравнением для огибающей:

$$u_{\xi\xi} + 2iku_{\xi} + \text{transverse terms} = 0.$$

Параболизация в обоих случаях состоит в удалении второго производного члена по направлению распространения.

1.5 В5. Сейсмология и геофизика

В геофизике one-way и parabolic equation методы применяются для моделирования сейсмических волн в неоднородных средах. Полное моделирование волнового поля в больших геологических областях является вычислительно дорогим, особенно при высоких частотах и сложной структуре среды.

Параболические модели используются как компромисс между:

полным волновым моделированием

и

лучевой асимптотикой.

Лучевые методы эффективны, но плохо описывают дифракцию, каустики и интерференционные эффекты. Полное волновое моделирование точнее, но значительно дороже. Параболическое уравнение занимает промежуточное положение: оно сохраняет волновую природу поля, но допускает эффективное маршевое решение.

Для рассматриваемой задачи это особенно важно, поскольку метод около гладкого контура также занимает промежуточное положение между полной задачей Гельмгольца и чисто асимптотическим описанием.

1.6 В6. Медицинский ультразвук

Параболические модели применяются и в медицинском ультразвуке, особенно для описания сфокусированных ультразвуковых пучков. Такие задачи возникают в:

- ultrasound imaging;
- hyperthermia treatment;

- focused ultrasound therapy;
- acoustic field planning.

В медицинском ультразвуке требуется рассчитывать поле, создаваемое фокусирующими излучателями, в неоднородной биологической среде. Полный волновой расчёт может быть слишком дорогим, тогда как параболическое приближение позволяет эффективно моделировать распространение пучка с учётом дифракции.

Особенно важны wide-angle параболические модели, поскольку медицинские ультразвуковые пучки могут иметь заметное угловое распространение. Это показывает, что простая narrow-angle параболизация часто является только первым приближением, а для практических задач требуется более точная факторизация оператора.

1.7 В7. Поверхностные волны и coastal engineering

Параболические уравнения применяются также в задачах распространения поверхностных волн на воде. В coastal engineering такие модели используются для описания:

- shoaling;
- refraction;
- diffraction;
- распространения волн над неоднородным дном;
- взаимодействия волн с береговыми структурами.

В этой области параболическое приближение позволяет заменить полную reduced wave equation более дешёвой маршевой моделью. Особенно важным является тот факт, что параболические модели сохраняют дифракционные эффекты, которые отсутствуют в простейшей геометрической оптике.

Для настоящей работы это направление важно потому, что оно показывает применимость РЕ-идеи к волнам, не являющимся ни электромагнитными, ни акустическими. Следовательно, рассматриваемая методология относится к универсальному классу волновых вычислительных методов.

1.8 В8. Возможные гибридные методы

Разрабатываемый подход естественно соединяется с несколькими классами численных и асимптотических методов.

1.8.1 В8.1. Связь с full Helmholtz solvers

В ближней зоне, где геометрия сложна или присутствует сильное обратное рассеяние, может решаться полная задача Гельмгольца:

$$\Delta E + k^2 E = 0.$$

После этого поле на искусственной границе используется как начальное условие для параболического продолжения:

$$E|_{\Gamma_0} \longrightarrow u(0, s).$$

Такой hybrid approach имеет вид:

$$\text{FEM/BEM/full Helmholtz near field} + \text{PE far-field continuation}.$$

Это особенно перспективно для задач, где полная волновая модель нужна только в небольшой области, а дальнейшее распространение может быть рассчитано более дешёвым маршевым методом.

1.8.2 B8.2. Связь с FEM

Finite element method может использоваться в двух вариантах:

1. для решения полной задачи Гельмгольца в ближней области;
2. для дискретизации поперечного оператора внутри PE-модели.

Во втором случае параболическая модель сохраняет маршевый характер по одной координате, но поперечная дискретизация становится более гибкой. Это полезно для сложных сечений, переменных коэффициентов и неоднородных сред.

1.8.3 B8.3. Связь с split-step Fourier

Если поперечная координата периодична или область достаточно регулярна, поперечный оператор можно обрабатывать спектрально. Тогда один шаг PE-метода имеет структуру:

$$u(x + \Delta x) = e^{\Delta x A} u(x),$$

где оператор A раскладывается на части:

$$A = A_{\text{diff}} + A_{\text{medium}}.$$

Split-step Fourier method использует чередование:

$$\text{FFT} \rightarrow \text{умножение в спектральной области} \rightarrow \text{IFFT}.$$

Для теста окружности такой подход особенно естественен, поскольку угловая координата является периодической.

1.8.4 B8.4. Связь с Padé и wide-angle approximations

Базовая параболизация основана на narrow-angle approximation. Для расширения угловой области применимости используются Padé-аппроксимации оператора square-root.

Формально факторизация уравнения Гельмгольца приводит к оператору:

$$\partial_x \approx ik \left(\sqrt{1 + Q} - 1 \right),$$

где Q содержит поперечные производные и неоднородность среды.

Narrow-angle approximation использует:

$$\sqrt{1 + Q} \approx 1 + \frac{1}{2}Q.$$

Wide-angle approximation заменяет корень рациональной аппроксимацией:

$$\sqrt{1 + Q} \approx \frac{1 + aQ}{1 + bQ}.$$

Это приводит к более точным PE-моделям, применимым при больших углах распространения.

1.8.5 B8.5. Связь с ray tracing и Gaussian beams

Ray tracing описывает высокочастотное распространение через траектории лучей. Gaussian beam methods улучшают ray tracing, добавляя локальную информацию о ширине пучка и фазе. PE-подход может рассматриваться как более волновой метод: он сохраняет дифракцию и интерференцию, но остаётся дешевле полного wave solver.

Возможная гибридная схема:

$$\text{ray / Gaussian beam initialization} + \text{PE propagation.}$$

Такая связь особенно естественна для высокочастотных задач около гладких границ.

1.9 B9. Значение для настоящей работы

Обзор существующих применений показывает, что параболические волновые модели образуют широкий класс методов, используемых в акустике, электромагнитном распространении, оптике, сейсмологии, медицинском ультразвуке и моделировании поверхностных волн.

Новизна рассматриваемого подхода заключается не в самом факте параболизации, а в следующем:

1. параболическая модель строится в естественных координатах, связанных с гладким контуром;
2. кривизна контура входит в оператор явно;
3. сохраняется связь между полной моделью Гельмгольца и параболическим остатком;
4. вводится протокол верификации через эталонные решения, нормы ошибки, невязки и анализ сходимости;
5. метод естественно расширяется до гибридной схемы:

$$\text{local full-wave solver} + \text{curvature-aware PE continuation.}$$

Таким образом, разрабатываемый метод может рассматриваться как геометрически адаптированное расширение classical parabolic equation methods для задач волнового распространения около гладких криволинейных границ.

1.10 B10. Связь с выполненным анализом статей

Рассмотренные источники охватывают основные области применения параболических методов: подводную акустику [1], электромагнитное распространение [3] и математические расширения в виде широкоугольных моделей [4].

Проведённый анализ показывает, что параболическое приближение является универсальным инструментом, применяемым к различным типам волн, и может быть расширено с использованием более точных аппроксимаций оператора.

2 С. Верификация численной схемы на тесте окружности

2.1 С1. Цель верификационного эксперимента

В данном разделе проводится верификация численной схемы Кранка–Николсона для модельной задачи, возникающей в случае окружности, то есть при постоянной кривизне контура. Такой тест является базовым, поскольку геометрические коэффициенты становятся независимыми от продольной координаты, а соответствующая эволюционная задача допускает точное спектральное решение.

Основная цель верификации состоит в проверке следующих свойств:

1. корректности дискретизации оператора по угловой переменной;
2. порядка сходимости численной схемы;
3. зависимости ошибки от числа угловых узлов N ;
4. зависимости ошибки от числа шагов N_t ;
5. вычислительной сложности алгоритма;
6. наличия или отсутствия режима насыщения ошибки.

Тестовая задача выбирается таким образом, чтобы точное решение могло быть вычислено независимо от схемы Кранка–Николсона. Это необходимо для того, чтобы ошибка численного решения измерялась относительно внешнего эталона, а не относительно решения, полученного тем же численным методом.

2.2 С2. Модельная задача на окружности

Для окружности радиус кривизны постоянен:

$$\rho(s) \equiv R, \quad \rho_s(s) = 0.$$

В этом случае геометрический член, содержащий производную радиуса кривизны, исчезает. После перехода к угловой переменной ψ и после стандартных преобразований задача сводится к уравнению шрёдингеровского типа:

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

Поскольку переменная ψ является угловой, на функцию W накладываются периодические граничные условия:

$$W(0, t) = W(2\pi, t), \quad W_\psi(0, t) = W_\psi(2\pi, t).$$

В вычислительном эксперименте используется начальное условие:

$$W(\psi, 0) = W_0(\psi) = e^{3i\psi} + 0.3e^{11i\psi}.$$

Такой выбор удобен по двум причинам. Во-первых, начальное условие является гладким и периодическим. Во-вторых, оно содержит только две гармоники, поэтому точное решение имеет простой спектральный вид и может быть использовано как эталон.

2.3 СЗ. Точное спектральное решение

Пусть функция $W(\psi, t)$ представляется рядом Фурье:

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

Тогда:

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \psi^2} = \sum_{m \in \mathbb{Z}} (-m^2) \widehat{W}_m(t) e^{im\psi}.$$

Подстановка в уравнение

$$W_t = \frac{i}{2} W_{\psi\psi}$$

даёт:

$$\sum_{m \in \mathbb{Z}} \widehat{W}'_m(t) e^{im\psi} = \frac{i}{2} \sum_{m \in \mathbb{Z}} (-m^2) \widehat{W}_m(t) e^{im\psi}.$$

Из единственности коэффициентов Фурье следует:

$$\widehat{W}'_m(t) = -\frac{im^2}{2} \widehat{W}_m(t).$$

Это обыкновенное дифференциальное уравнение имеет решение:

$$\widehat{W}_m(t) = \widehat{W}_m(0) \exp\left(-\frac{im^2 t}{2}\right).$$

Следовательно, точное решение записывается как:

$$W_{\text{ex}}(\psi, t) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \widehat{W}_m(0) \exp\left(-\frac{im^2 t}{2}\right) e^{im\psi}.$$

Для выбранного начального условия:

$$W_0(\psi) = e^{3i\psi} + 0.3e^{11i\psi},$$

ненулевыми являются только коэффициенты:

$$\widehat{W}_3(0) = 1, \quad \widehat{W}_{11}(0) = 0.3.$$

Поэтому точное решение имеет вид:

$$W_{\text{ex}}(\psi, t) = \exp\left(3i\psi - \frac{9it}{2}\right) + 0.3 \exp\left(11i\psi - \frac{121it}{2}\right).$$

Эта формула используется как эталон для проверки численного решения.

2.4 С4. Сетка и дискретизация по угловой переменной

Вводится равномерная сетка по угловой переменной:

$$\psi_j = j\Delta\psi, \quad j = 0, 1, \dots, N-1, \quad \Delta\psi = \frac{2\pi}{N}.$$

Обозначим:

$$W_j^n \approx W(\psi_j, t_n), \quad t_n = n\Delta t, \quad \Delta t = \frac{T}{N_t}.$$

Вторая производная по ψ аппроксимируется центральной разностью:

$$W_{\psi\psi}(\psi_j, t_n) \approx \frac{W_{j+1}^n - 2W_j^n + W_{j-1}^n}{(\Delta\psi)^2}.$$

Из-за периодичности:

$$W_{-1}^n = W_{N-1}^n, \quad W_N^n = W_0^n.$$

Следовательно, дискретный оператор второй производной является циклическим трёхдиагональным оператором.

2.5 С5. Схема Кранка–Николсона

Для уравнения

$$W_t = \frac{i}{2}W_{\psi\psi}$$

схема Кранка–Николсона имеет вид:

$$\frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{\Delta t} = \frac{i}{4} \left[(D_{\psi\psi}W^{n+1})_j + (D_{\psi\psi}W^n)_j \right],$$

где

$$(D_{\psi\psi}W^n)_j = \frac{W_{j+1}^n - 2W_j^n + W_{j-1}^n}{(\Delta\psi)^2}.$$

Вводится параметр

$$\alpha = \frac{i\Delta t}{4(\Delta\psi)^2}.$$

Тогда схема переписывается как:

$$W_j^{n+1} - \alpha (W_{j+1}^{n+1} - 2W_j^{n+1} + W_{j-1}^{n+1}) = W_j^n + \alpha (W_{j+1}^n - 2W_j^n + W_{j-1}^n).$$

После группировки членов:

$$-\alpha W_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\alpha)W_j^{n+1} - \alpha W_{j+1}^{n+1} = \alpha W_{j-1}^n + (1 - 2\alpha)W_j^n + \alpha W_{j+1}^n.$$

В матричной форме:

$$AW^{n+1} = BW^n,$$

где матрицы A и B являются циклическими трёхдиагональными матрицами:

$$A = \begin{pmatrix} 1 + 2\alpha & -\alpha & 0 & \cdots & -\alpha \\ -\alpha & 1 + 2\alpha & -\alpha & \cdots & 0 \\ 0 & -\alpha & 1 + 2\alpha & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -\alpha \\ -\alpha & 0 & 0 & -\alpha & 1 + 2\alpha \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} 1-2\alpha & \alpha & 0 & \cdots & \alpha \\ \alpha & 1-2\alpha & \alpha & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha & 1-2\alpha & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha & 0 & 0 & \alpha & 1-2\alpha \end{pmatrix}.$$

Таким образом, на каждом шаге по времени требуется решение циклической трёх-диагональной системы.

2.6 С6. Норма ошибки

Для сравнения численного и точного решений используется относительная дискретная L_2 -ошибка:

$$\varepsilon_{L_2} = \frac{\left(\sum_{j=0}^{N-1} |W_j^{\text{num}} - W_j^{\text{ex}}|^2\right)^{1/2}}{\left(\sum_{j=0}^{N-1} |W_j^{\text{ex}}|^2\right)^{1/2}}.$$

Так как сетка равномерная, множитель $\Delta\psi$ сокращается в числителе и знаменателе. Поэтому эта формула эквивалентна относительной дискретной L_2 -норме.

2.7 С7. Параметры численного эксперимента

Используются параметры:

$$a = 1, \quad k = 40, \quad T = t_0 = \frac{1}{ka} = 0.025.$$

Расчёты выполняются для:

$$N \in \{128, 256, 512, 1024\},$$

$$N_t \in \{250, 500, 1000, 2000, 4000\}.$$

Для каждого набора параметров сохраняются:

$$N, \quad N_t, \quad T, \quad \text{runtime}, \quad \varepsilon_{L_2}.$$

2.8 С8. Численные результаты при фиксированном $N_t = 4000$

При фиксированном числе временных шагов $N_t = 4000$ получены следующие значения ошибки.

Таблица 1: Относительная L_2 -ошибка при $N_t = 4000$.

N	ε_{L_2}	runtime, s
128	$1.0459 \cdot 10^{-2}$	0.315484
256	$2.6340 \cdot 10^{-3}$	0.580787
512	$6.6000 \cdot 10^{-4}$	1.158539
1024	$1.6500 \cdot 10^{-4}$	2.303975

При увеличении N в два раза ошибка уменьшается приблизительно в четыре раза:

$$\frac{\varepsilon_{128}}{\varepsilon_{256}} \approx \frac{1.0459 \cdot 10^{-2}}{2.6340 \cdot 10^{-3}} \approx 3.97,$$

$$\frac{\varepsilon_{256}}{\varepsilon_{512}} \approx \frac{2.6340 \cdot 10^{-3}}{6.6000 \cdot 10^{-4}} \approx 3.99,$$

$$\frac{\varepsilon_{512}}{\varepsilon_{1024}} \approx \frac{6.6000 \cdot 10^{-4}}{1.6500 \cdot 10^{-4}} \approx 4.00.$$

Следовательно, наблюдаемая ошибка удовлетворяет закону:

$$\varepsilon_{L_2}(N) \sim CN^{-2}.$$

2.9 С9. Оценка порядка сходимости

Порядок сходимости между двумя соседними сетками определяется формулой:

$$p_N = \frac{\log(\varepsilon_N/\varepsilon_{2N})}{\log 2}.$$

По экспериментальным данным получаются значения:

Таблица 2: Наблюдаемый порядок сходимости.

Переход	Формула	p_N
128 $\rightarrow$ 256	$\log(\varepsilon_{128}/\varepsilon_{256})/\log 2$	1.989
256 $\rightarrow$ 512	$\log(\varepsilon_{256}/\varepsilon_{512})/\log 2$	1.997
512 $\rightarrow$ 1024	$\log(\varepsilon_{512}/\varepsilon_{1024})/\log 2$	1.999

Таким образом, экспериментальный порядок сходимости практически совпадает со вторым порядком:

$$p \approx 2.$$

Это согласуется с использованием центральной разностной аппроксимации второй производной по ψ и схемы Кранка–Николсона второго порядка.

2.10 С10. Анализ графика ошибки по N

На графике зависимости ε_{L_2} от N в логарифмических координатах наблюдается почти линейное убывание.

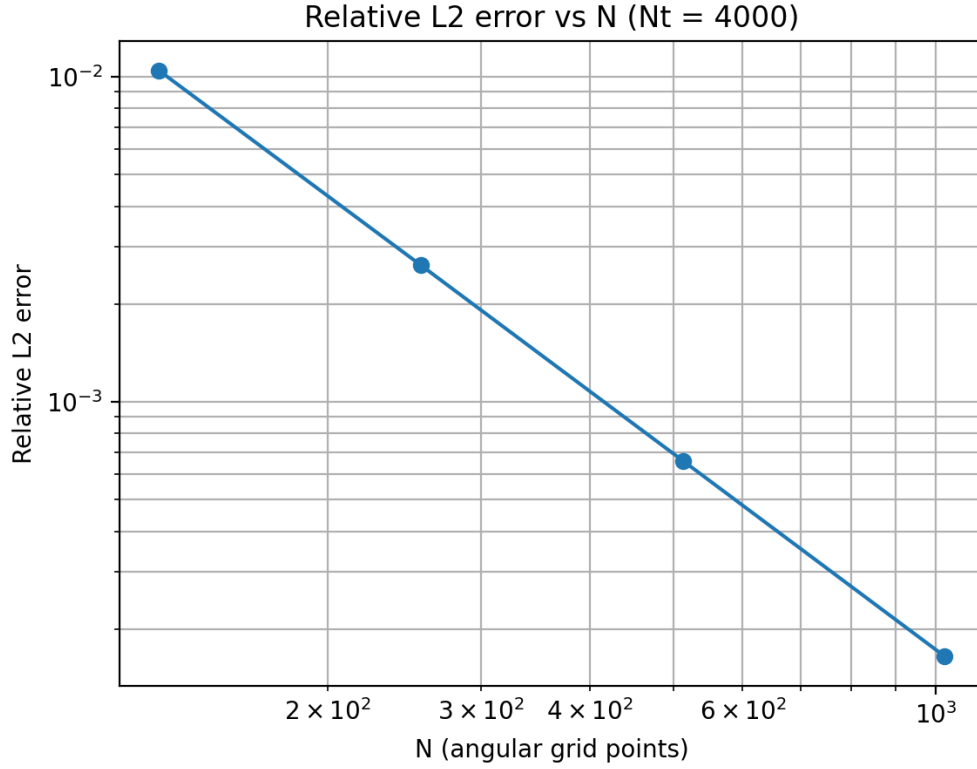


Рис. 1: Относительная L_2 -ошибка в зависимости от числа угловых узлов N при $N_t = 4000$.

Линейность графика в координатах $\log \varepsilon_{L_2}$ против $\log N$ означает степенную сходимость:

$$\varepsilon_{L_2}(N) = O(N^{-p}).$$

Наклон прямой близок к -2 , поэтому:

$$\varepsilon_{L_2}(N) = O(N^{-2}).$$

Данный результат важен по двум причинам. Во-первых, он подтверждает корректность реализации дискретного оператора. Во-вторых, он показывает, что на данном диапазоне параметров ошибка определяется именно пространственной дискретизацией, а не временным шагом или ошибками округления.

2.11 C11. Зависимость ошибки от числа временных шагов

Для каждого фиксированного N изменение N_t от 250 до 4000 приводит к крайне слабому изменению ошибки.

Таблица 3: Относительная L_2 -ошибка для разных N и N_t .

N_t	$N = 128$	$N = 256$	$N = 512$	$N = 1024$
250	$1.0460 \cdot 10^{-2}$	$2.6350 \cdot 10^{-3}$	$6.6100 \cdot 10^{-4}$	$1.6600 \cdot 10^{-4}$
500	$1.0459 \cdot 10^{-2}$	$2.6340 \cdot 10^{-3}$	$6.6000 \cdot 10^{-4}$	$1.6500 \cdot 10^{-4}$
1000	$1.0459 \cdot 10^{-2}$	$2.6340 \cdot 10^{-3}$	$6.6000 \cdot 10^{-4}$	$1.6500 \cdot 10^{-4}$
2000	$1.0459 \cdot 10^{-2}$	$2.6340 \cdot 10^{-3}$	$6.6000 \cdot 10^{-4}$	$1.6500 \cdot 10^{-4}$
4000	$1.0459 \cdot 10^{-2}$	$2.6340 \cdot 10^{-3}$	$6.6000 \cdot 10^{-4}$	$1.6500 \cdot 10^{-4}$

Из таблицы видно, что при фиксированном N ошибка почти не зависит от N_t . Следовательно, в данном эксперименте доминирует пространственная ошибка:

$$\varepsilon_{L_2} \approx C(\Delta\psi)^2.$$

Временная ошибка имеет меньший порядок величины:

$$\varepsilon_t \ll \varepsilon_\psi.$$

Это означает, что дальнейшее увеличение N_t нецелесообразно до тех пор, пока не увеличивается пространственное разрешение N .

2.12 C12. Ошибка как функция вычислительного времени

Зависимость ошибки от времени выполнения показана на Рис. 2.

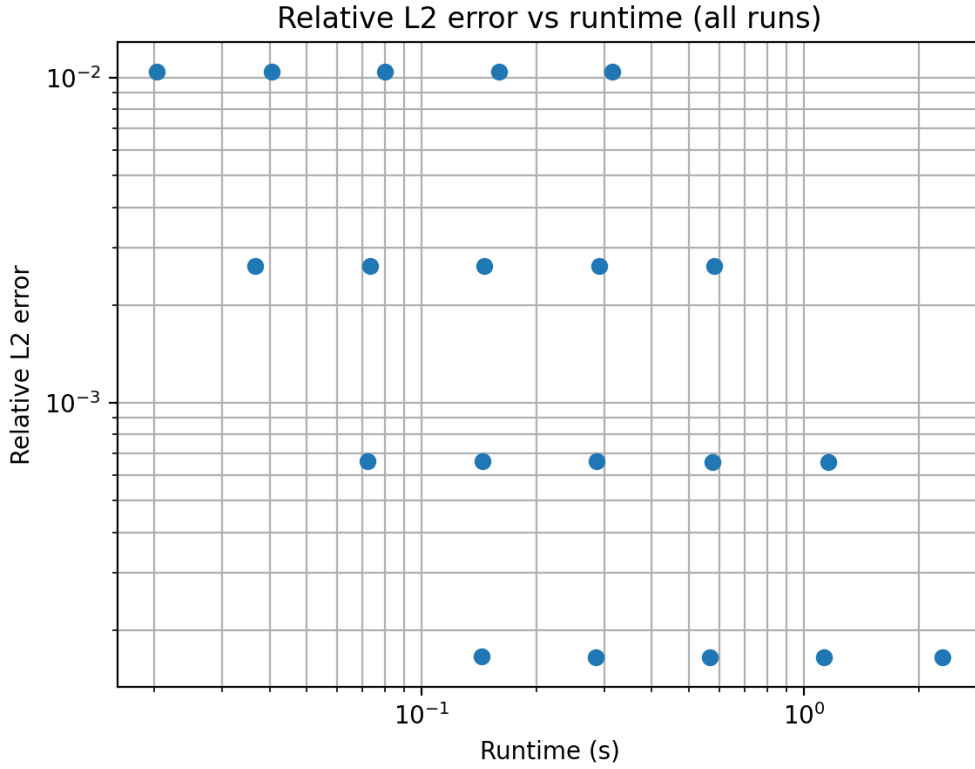


Рис. 2: Относительная L_2 -ошибка в зависимости от времени выполнения для всех запусков.

Каждый горизонтальный уровень ошибки соответствует фиксированному N . Увеличение N_t при фиксированном N увеличивает время вычисления, но почти не уменьшает ошибку. Поэтому точки для одного и того же N располагаются приблизительно на одной горизонтальной линии.

Это показывает, что вычислительная стратегия с большим N_t при малом N неэффективна: время растёт, но точность практически не улучшается.

Оптимизация должна выполняться в следующем порядке:

N_t выбирается достаточно большим для подавления временной ошибки,

N затем увеличивается для уменьшения доминирующей пространственной ошибки.

2.13 C13. Интерпретация результата

Полученные результаты показывают, что реализованная схема находится в режиме пространственной сходимости:

$$\varepsilon_{L_2} = O(N^{-2}).$$

Режим машинного насыщения на текущем диапазоне N ещё не достигнут, поскольку ошибка продолжает убывать почти точно в четыре раза при удвоении N .

Следовательно, для поиска предела машинной точности необходимо продолжить расчёты на более широком диапазоне:

$$N = 2048, 4096, 8192, \dots$$

и одновременно контролировать:

$$\varepsilon_{L_2}, \quad \varepsilon_{L^\infty}, \quad \|R_{\text{PE}}\|, \quad \|R_{\text{full}}\|.$$

Если при дальнейшем увеличении N зависимость перестанет следовать закону N^{-2} и выйдет на плато, то это будет означать переход от дискретизационного режима к режиму насыщения, связанному либо с ошибкой округления, либо с ограничением эталонного решения.

2.14 C14. Вывод по разделу C

Верификационный эксперимент на окружности показывает:

1. схема Кранка–Николсона корректно воспроизводит точное спектральное решение;
2. наблюдаемый порядок сходимости равен приблизительно двум:

$$p \approx 2;$$

3. ошибка определяется преимущественно пространственной дискретизацией;
4. увеличение N_t при фиксированном N почти не влияет на точность;
5. вычислительное время растёт почти линейно с N_t ;
6. для дальнейшего исследования машинной точности требуется расширение диапазона N .

Таким образом, тест окружности подтверждает корректность численного ядра и даёт базовый протокол для последующей верификации на более сложных геометриях.

3 D. Численный алгоритм, линейная алгебра и вычислительная эффективность

3.1 D1. Цель раздела

В данном разделе анализируется вычислительный алгоритм, реализующий схему Кранка–Николсона для периодической задачи по угловой переменной. Основное внимание уделяется структуре линейной системы, циклическому трёхдиагональному решателю, вычислительной сложности и практическим ограничениям реализации.

3.2 D2. Дискретный оператор второй производной

Определим вектор значений:

$$W^n = \begin{pmatrix} W_0^n \\ W_1^n \\ \vdots \\ W_{N-1}^n \end{pmatrix}.$$

Дискретный оператор второй производной D_2 задаётся формулой:

$$(D_2 W)_j = \frac{W_{j+1} - 2W_j + W_{j-1}}{(\Delta\psi)^2}.$$

С учётом периодичности матрица D_2 имеет вид:

$$D_2 = \frac{1}{(\Delta\psi)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

Это циклическая трёхдиагональная матрица. Наличие элементов в углах связано исключительно с периодическими граничными условиями:

$$W_{-1} = W_{N-1}, \quad W_N = W_0.$$

3.3 D3. Операторная форма схемы Кранка–Николсона

Полудискретная задача имеет вид:

$$\frac{dW}{dt} = \frac{i}{2} D_2 W.$$

Обозначим:

$$L = \frac{i}{2} D_2.$$

Тогда:

$$\frac{dW}{dt} = LW.$$

Схема Кранка–Николсона для линейной задачи $W_t = LW$ записывается как:

$$\frac{W^{n+1} - W^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} L (W^{n+1} + W^n).$$

После переноса членов:

$$\left(I - \frac{\Delta t}{2} L \right) W^{n+1} = \left(I + \frac{\Delta t}{2} L \right) W^n.$$

Следовательно:

$$A = I - \frac{\Delta t}{2} L, \quad B = I + \frac{\Delta t}{2} L.$$

Так как L пропорционален D_2 , матрицы A и B сохраняют циклическую трёхдиагональную структуру.

3.4 D4. Спектральная устойчивость схемы

Для анализа устойчивости рассмотрим одну гармонику:

$$W_j^n = g^n e^{im\psi_j}.$$

Для дискретного оператора второй производной:

$$D_2 e^{im\psi_j} = \lambda_m e^{im\psi_j},$$

где

$$\lambda_m = \frac{e^{im\Delta\psi} - 2 + e^{-im\Delta\psi}}{(\Delta\psi)^2} = -\frac{4}{(\Delta\psi)^2} \sin^2\left(\frac{m\Delta\psi}{2}\right).$$

Следовательно:

$$Le^{im\psi_j} = \mu_m e^{im\psi_j}, \quad \mu_m = \frac{i}{2} \lambda_m.$$

Так как λ_m вещественно и неположительно, μ_m является чисто мнимым числом. Для схемы Кранка–Николсона множитель усиления равен:

$$G_m = \frac{1 + \frac{\Delta t}{2} \mu_m}{1 - \frac{\Delta t}{2} \mu_m}.$$

Если $\mu_m = i\omega_m$, где $\omega_m \in \mathbb{R}$, то:

$$G_m = \frac{1 + i\frac{\Delta t}{2}\omega_m}{1 - i\frac{\Delta t}{2}\omega_m}.$$

Тогда:

$$|G_m| = 1.$$

Следовательно, схема Кранка–Николсона является нейтрально устойчивой для данной дисперсионной задачи:

$$\|W^{n+1}\|_2 = \|W^n\|_2$$

на уровне мод Фурье.

3.5 D5. Дисперсионная ошибка

Хотя схема устойчива, она имеет фазовую ошибку. Точное решение одной моды:

$$\widehat{W}_m(t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{im^2\Delta t}{2}\right) \widehat{W}_m(t).$$

Численная схема даёт множитель:

$$G_m = \frac{1 + \frac{\Delta t}{2} \mu_m}{1 - \frac{\Delta t}{2} \mu_m}.$$

При малых Δt :

$$G_m = \exp\left(\Delta t \mu_m + O(\Delta t^3 \mu_m^3)\right).$$

Поэтому временная ошибка схемы имеет второй порядок:

$$e_t = O(\Delta t^2).$$

Кроме того, дискретный оператор D_2 аппроксимирует непрерывную вторую производную с ошибкой:

$$D_2 W = W_{\psi\psi} + O((\Delta\psi)^2).$$

Следовательно, полная дискретизационная ошибка имеет вид:

$$e_{\text{disc}} = O((\Delta\psi)^2 + \Delta t^2).$$

В проведённом эксперименте наблюдается доминирование пространственной части:

$$O((\Delta\psi)^2) \gg O(\Delta t^2).$$

3.6 D6. Циклическая трёхдиагональная система

На каждом шаге требуется решить систему:

$$AW^{n+1} = r^n,$$

где:

$$r^n = BW^n.$$

Матрица A имеет вид:

$$A = \begin{pmatrix} b & c & 0 & \cdots & \alpha_c \\ a & b & c & \cdots & 0 \\ 0 & a & b & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & c \\ \beta_c & 0 & 0 & a & b \end{pmatrix},$$

где для данной задачи:

$$a = c = -\alpha, \quad b = 1 + 2\alpha, \quad \alpha_c = \beta_c = -\alpha.$$

Если бы угловые элементы α_c и β_c отсутствовали, система была бы обычной трёхдиагональной и решалась бы методом Томаса. Однако периодичность делает систему циклической.

3.7 D7. Сведение циклической системы к трёхдиагональной

Циклическая матрица представляется как малое ранговое возмущение обычной трёхдиагональной матрицы:

$$A = T + uv^T,$$

где T является нециклической трёхдиагональной матрицей, а произведение uv^T восстанавливает угловые элементы.

Тогда используется формула Шермана–Моррисона:

$$A^{-1} = (T + uv^T)^{-1} = T^{-1} - \frac{T^{-1}uv^T T^{-1}}{1 + v^T T^{-1}u}.$$

Для решения системы $Ax = r$ сначала решаются две трёхдиагональные системы:

$$Ty = r, \quad Tz = u.$$

После этого:

$$x = y - \frac{v^T y}{1 + v^T z} z.$$

Именно такая структура позволяет свести решение циклической системы к двум решениям обычных трёхдиагональных систем.

3.8 D8. Метод Томаса

Для трёхдиагональной системы:

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i,$$

метод Томаса состоит из прямого и обратного хода.

Прямой ход:

$$c'_i = \frac{c_i}{b_i - a_i c'_{i-1}},$$

$$d'_i = \frac{d_i - a_i d'_{i-1}}{b_i - a_i c'_{i-1}}.$$

Обратный ход:

$$x_N = d'_N,$$

$$x_i = d'_i - c'_i x_{i+1}.$$

Число операций пропорционально числу неизвестных:

$$\text{Cost}_{\text{Thomas}} = O(N).$$

Так как коэффициенты матрицы A не меняются по времени для фиксированных N и Δt , факторизация может быть выполнена один раз до временного цикла. После этого на каждом шаге используется уже подготовленная структура.

3.9 D9. Вычислительная сложность полного алгоритма

Один шаг схемы включает:

1. построение правой части $r^n = BW^n$;
2. решение циклической трёхдиагональной системы;
3. переход к следующему слою W^{n+1} .

Построение правой части требует:

$$O(N)$$

операций.

Решение циклической трёхдиагональной системы также требует:

$$O(N)$$

операций.

Следовательно, один временной шаг имеет сложность:

$$O(N).$$

Для N_t шагов:

$$\text{Cost} = O(NN_t).$$

Эта оценка согласуется с экспериментальными временами выполнения: при фиксированном N_t увеличение N примерно в два раза увеличивает время примерно в два раза; при фиксированном N увеличение N_t также почти линейно увеличивает время.

3.10 D10. Анализ времени выполнения

Для $N_t = 4000$ получены времена:

Таблица 4: Время выполнения при $N_t = 4000$.

N	runtime, s	Отношение к предыдущему
128	0.315484	—
256	0.580787	1.84
512	1.158539	1.99
1024	2.303975	1.99

Начиная с $N = 256$, удвоение N почти удваивает время выполнения:

$$T(2N) \approx 2T(N).$$

Это подтверждает линейную сложность по числу узлов:

$$T(N) \sim O(N).$$

3.11 D11. Практический вывод об эффективности

Поскольку ошибка убывает как:

$$\varepsilon_{L_2} \sim N^{-2},$$

а время растёт как:

$$T_{\text{cpu}} \sim N,$$

получается связь между ошибкой и временем:

$$\varepsilon_{L_2} \sim T_{\text{cpu}}^{-2}$$

при фиксированном N_t .

Это означает, что в рассматриваемом диапазоне увеличение вычислительного времени даёт квадратичное улучшение точности. Такой режим является вычислительно благоприятным.

Однако при дальнейшем росте N ожидается переход к режиму насыщения:

$$\varepsilon_{L_2} \approx \varepsilon_{\text{round}} \quad \text{или} \quad \varepsilon_{L_2} \approx \varepsilon_{\text{model}}.$$

В этом режиме увеличение времени уже не будет приводить к улучшению точности.

3.12 D12. Требования к дальнейшей реализации

Для перехода от прототипа к вычислительному инструменту необходимо выполнить следующие шаги:

1. вынести решатель циклической трёхдиагональной системы в отдельный модуль;
2. реализовать независимые тесты для метода Томаса и циклического решателя;
3. добавить контроль нормы решения на каждом шаге;
4. добавить вычисление невязки:

$$R^n = \frac{W^{n+1} - W^n}{\Delta t} - \frac{i}{4} D_2(W^{n+1} + W^n);$$

5. добавить автоматическую оценку порядка сходимости;
6. расширить диапазон N и N_t ;
7. сравнить вычисления в типах `double`, `long double` и при необходимости в произвольной точности.

3.13 D13. Минимальный протокол регрессионного тестирования

Для каждого изменения кода должен выполняться следующий набор проверок.

Тест 1: сохранение нормы. Для уравнения шрёдингеровского типа:

$$\|W(t)\|_2 = \|W(0)\|_2.$$

Поэтому должно проверяться:

$$\left| \frac{\|W^n\|_2 - \|W^0\|_2}{\|W^0\|_2} \right| < \tau_{\text{mass}}.$$

Тест 2: сравнение с точным спектральным решением. Для начального условия из двух мод:

$$W_0(\psi) = e^{3i\psi} + 0.3e^{11i\psi}$$

должно выполняться:

$$\varepsilon_{L_2} < \tau_{\text{exact}}.$$

Тест 3: порядок сходимости. При переходе $N \rightarrow 2N$ должно выполняться:

$$\frac{\varepsilon_N}{\varepsilon_{2N}} \approx 4.$$

Эквивалентно:

$$p_N \approx 2.$$

Тест 4: линейное масштабирование времени. Для фиксированного N_t должно выполняться:

$$\frac{T(2N)}{T(N)} \approx 2.$$

3.14 D14. Вывод по разделу D

Численный алгоритм основан на схеме Кранка–Николсона и решении циклической трёхдиагональной системы на каждом временном шаге. Полученная структура имеет следующие свойства:

1. схема является нейтрально устойчивой для спектральных мод;
2. дискретизационная ошибка имеет второй порядок:

$$e_{\text{disc}} = O((\Delta\psi)^2 + \Delta t^2);$$

3. в проведённом эксперименте доминирует пространственная ошибка;
4. решение одной линейной системы имеет сложность $O(N)$;
5. полный расчёт имеет сложность $O(NN_t)$;
6. экспериментальные времена подтверждают линейное масштабирование.

Таким образом, реализованный алгоритм является корректным и эффективным базовым ядром для дальнейшего развития численного инструмента на более сложные геометрии.

Список литературы

- [1] F. D. Tappert, *The parabolic approximation method*, in: J. B. Keller and J. S. Papadakis (eds.), *Wave Propagation and Underwater Acoustics*, Lecture Notes in Physics, vol. 70, Springer, 1977.
- [2] M. Levy, *Parabolic Equation Methods for Electromagnetic Wave Propagation*, IET Electromagnetic Waves Series, 2000.
- [3] G. D. Dockery, *Development and use of electromagnetic parabolic equation propagation models for U.S. Navy applications*, Johns Hopkins APL Technical Digest, 1998.
- [4] L. Halpern and L. N. Trefethen, *Wide-angle one-way wave equations*, Journal of Computational Physics, 1988.
- [5] J. E. Sonesson, *Extending the utility of the parabolic approximation in medical ultrasound using wide-angle diffraction modeling*, IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 2017.
- [6] A. C. Radder, *On the parabolic equation method for water-wave propagation*, Journal of Fluid Mechanics, 1979.
- [7] S. A. Isaakidis and T. D. Xenos, *Parabolic equation solution of tropospheric wave propagation using FEM*, Progress In Electromagnetics Research, 2004.
- [8] M. D. Collins, *Parabolic Wave Equations with Applications*, Springer, 2019.