

АЛГОРИТМІЧНІ АСПЕКТИ ПРОГРАМНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ FD-МЕТОДУ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ НЕЛІНІЙНОГО РІВНЯННЯ КЛЯЙНА – ГОРДОНА

В. Л. Макаров, Д. В. Драгунов, Д. А. Сембер

*Ин-т математики НАН України
Україна, 01601, Київ, вул. Терещенківська, 3
e-mail: semberdmitry@gmail.com*

In the paper we propose explicit and implicit schemes of the functional-discrete method (FD-method) for solving a nonlinear Klein–Gordon equation. The algorithm for the proposed FD-method is described and investigated from the complexity point of view. Explicit and implicit schemes of the FD-method are compared by numerical example.

Представлены явная и неявная схемы функционально-дискретного метода (FD-метода) решения нелинейного уравнения Кляйна – Гордона. Описан алгоритм предлагаемого FD-метода, который исследован с точки зрения его сложности. Явная и неявная схемы FD-метода сравниваются с помощью численного примера.

1. Вступ. Дана робота є логічним продовженням статті [1], в якій запропоновано та обґрунтовано явну схему функціонально-дискретного методу (FD-методу) розв'язування задачі Гурса для нелінійного рівняння Кляйна – Гордона

$$\frac{\partial^2 v(\xi, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 v(\xi, t)}{\partial \xi^2} + \mathbb{N}(v(\xi, t)) = \Phi(\xi, t). \quad (1)$$

Відомо, що нелінійне рівняння Кляйна – Гордона (1) широко застосовується в сучасній фізиці та інженерії. Зокрема, воно виникає при вивченні скалярного масивного поля у просторах де Сіттєра та анти-де Сіттєра [20, 21], при вивченні розповсюдження інтенсивних ультракоротких оптичних імпульсів з низькою щільністю діелектриків [7], піонних атомів [15] і т. д. Крім того, частинний випадок рівняння Кляйна – Гордона — рівняння синус-Гордона (the Sine-Gordon equation) — також має численні застосування у фізиці. Воно зустрічається при вивченні поширення магнітного потоку у переходах Джозефсона [4], динаміки доменної стінки в магнітних кристалах [2] і т. д. Крім того, в теорії сильних взаємодій рівняння синус-Гордона фігурує як спрощення класичної моделі [16, 18]. У геометрії задачі Гурса та Коші для рівняння синус-Гордона пов'язані з існуванням спеціальних сіток на поверхнях у просторі E^3 , які називаються чебишовськими сітками [17].

Функціонально-дискретний метод — це симбіоз скінченно-різницевого методу та методу гомотопій (методу продовження за параметром), завдяки чому він має основні властивості як аналітичних, так і дискретних методів одночасно. FD-метод, запропонований в [1], базується на загальній схемі FD-методу розв'язування операторних рівнянь, що наведена в [5, 12], і походить з функціонально-дискретного методу розв'язування задачі Штурма – Ліувілля (див. [13, 14]).

У даній роботі разом з явною схемою FD-методу (див. [1]) ми розглянемо також неявну схему FD-методу та порівняємо дві схеми з точки зору складності програмної реалізації та швидкості збіжності.

2. Короткий опис FD-методу (явна і неявна форма). Розглядається наступна задача Гурса для рівняння Кляйна – Гордона (1), яке наведено в дещо модифікованому вигляді, більш зручному для застосування до нього запропонованого методу:

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y} + \mathbb{N}(u(x, y)) = f(x, y), \quad (2)$$

$$u(x, 0) = \psi(x), \quad u(0, y) = \phi(y), \quad \psi(0) = \phi(0), \quad (3)$$

де $u(x, y) = v(x - y, x + y)$, $f(x, y) = \Phi(x - y, x + y)$.

Припускається, що нелінійну функцію $\mathbb{N}(u)$ можна зобразити у вигляді

$$\mathbb{N}(u) = N(u)u, \quad N(u) = \sum_{s=0}^{\infty} \nu_s u^s \quad \forall u \in \mathbf{R}, \quad \nu_s \in \mathbf{R},$$

а також виконуються наступні умови:

$$\psi(x) \in C^{(1)}(D_1) \cap C(\bar{D}_1), \quad \phi(y) \in C^{(1)}(D_2) \cap C(\bar{D}_2), \quad f(x, y) \in C(\bar{D}),$$

$$D = \{(x, y) : 0 < x < X, 0 < y < Y\}, \quad D_1 = (0; X), \quad D_2 = (0; Y).$$

Із зроблених припущень випливає, що розв'язок $u(x, y) \in C^{1,1}(D) \cap C(\bar{D})$ задачі Гурса (2), (3) існує і є єдиним у D (див. [10]).

Згідно із загальною схемою FD-методу, ми наближаємо точний розв'язок $u(x, y)$ задачі (2), (3) функцією $\overset{m}{u}(x, y)$, яка визначається таким чином:

$$\overset{m}{u}(x, y) = \sum_{k=0}^m \overset{(k)}{u}(x, y), \quad m \in \mathbf{N}. \quad (4)$$

Для визначення функцій $\overset{(k)}{u}(x, y)$ введемо до розгляду наступну сітку:

$$x_i = h_1 i, \quad y_j = h_2 j, \quad h_1 = \frac{X}{N_1}, \quad h_2 = \frac{Y}{N_2}, \quad i \in \overline{0, N_1}, \quad j \in \overline{0, N_2}, \quad N_1, N_2 \geq 1. \quad (5)$$

Використовуючи ідею, викладену в [5, 6], розглянемо наступне узагальнення задачі (2), (3):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(x, y, \tau)}{\partial x \partial y} + N(u_{\alpha, \perp}(x, y, \tau))u(x, y, \tau) - \\ - \tau [N(u_{\alpha, \perp}(x, y, \tau)) - N(u(x, y, \tau))] u(x, y, \tau) = f(x, y), \end{aligned} \quad (6)$$

$$u(x, 0, \tau) = \psi(x), \quad u(0, y, \tau) = \phi(y), \quad \psi(0) = \phi(0), \quad \tau \in [0; 1], \quad (7)$$

де

$$u_{\alpha, \perp}(x, y, \tau) = u(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})$$

$$\forall (x, y) \in [x_{i-1}, x_i] \times [y_{j-1}, y_j] \quad \forall \alpha \in [0; 1] \quad \forall i \in \overline{1, N_1} \quad \forall j \in \overline{1, N_2}.$$

Припускаючи, що розв'язок $u(x, y, \tau)$ задачі (6), (7) існує для будь-якого $\tau \in [0; 1]$, неважко зробити висновок, що $u(x, y) = u(x, y, 1)$. Крім того, припускаючи, що розв'язок $u(x, y, \tau)$ може бути знайдений у вигляді ряду

$$u(x, y, \tau) = \sum_{i=0}^{\infty} \overset{(i)}{u}(x, y) \tau^i, \quad (8)$$

де $\overset{(i)}{u}(x, y)$ — функції, що не залежать від τ , приходимо до висновку, що розв'язок $u(x, y)$ задачі (2), (3) може бути з довільною точністю наближений за допомогою функції $\overset{(m)}{u}(x, y)$ (4). Підставляючи ряд (8) у задачу (6), (7) та прирівнюючи функціональні коефіцієнти при однакових степенях τ , переконуємось, що невідому функцію $\overset{(0)}{u}(x, y) \in C(\bar{D})$ можна знайти як розв'язок нелінійної задачі Гурса з кусково-сталім коефіцієнтом, яка називається *базовою задачею*:

$$\frac{\partial^2 \overset{(0)}{u}(x, y)}{\partial x \partial y} + N(\overset{(0)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) \overset{(0)}{u}(x, y) = f(x, y) \quad \forall (x, y) \in \bar{P}_{i,j}, \quad (9)$$

$$\overset{(0)}{u}(x, 0) = \psi(x), \quad \overset{(0)}{u}(0, y) = \phi(y) \quad \forall (x, y) \in \bar{D}, \quad \psi(0) = \phi(0), \quad (10)$$

де

$$P_{i,j} = (x_{i-1}, x_i) \times (y_{j-1}, y_j), \quad i \in \overline{1, N_1}, \quad j \in \overline{1, N_2}. \quad (11)$$

Функції $\overset{(k)}{u}(x, y) \in C(\bar{D})$, $k \in \overline{1, m}$, шукаються як розв'язки наступної послідовності лінійних задач Гурса:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 \overset{(k)}{u}(x, y)}{\partial x \partial y} + N(\overset{(0)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) \overset{(k)}{u}(x, y) = \\ & = -N'(\overset{(0)}{u}(x, y)) \overset{(0)}{u}(x, y) \overset{(k)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}) - \\ & - \sum_{s=1}^{k-1} A_{k-s}(N; \overset{(0)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), \dots, \overset{(k-s)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) \overset{(s)}{u}(x, y) - \\ & - A_k(N; \overset{(0)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), \dots, \overset{(k-1)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), 0) \overset{(0)}{u}(x, y) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{s=0}^{k-1} \left[A_{k-1-s}(N; \overset{(0)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), \dots, \overset{(k-1-s)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) - \right. \\
& \left. - A_{k-1-s}(N; \overset{(0)}{u}(x, y), \dots, \overset{(k-1-s)}{u}(x, y)) \right] \overset{(s)}{u}(x, y) = \overset{(k)}{F}(x, y), \quad (12)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \overset{(k)}{u}(x_{i-1} + 0, y) = \overset{(k)}{u}(x_{i-1} - 0, y), \quad \overset{(k)}{u}(x, y_{j-1} + 0) = \overset{(k)}{u}(x, y_{j-1} - 0) \\
& \forall (x, y) \in \bar{P}_{i,j} \quad i \in \overline{1, N_1} \quad j \in \overline{1, N_2}, \quad (13)
\end{aligned}$$

$$\overset{(k)}{u}(0, y) = \overset{(k)}{u}(x, 0) = 0 \quad \forall x \in [0, X] \quad \forall y \in [0, Y]. \quad (14)$$

Через $A_n(N; v_0, v_1, \dots, v_n)$ позначено поліноми Адомяна n -го порядку для функції $N(\cdot)$ (див., наприклад, [8, 11, 19]), які можуть бути обчислені за формулою

$$\begin{aligned}
A_n(N; v_0, v_1, \dots, v_n) &= \frac{1}{n!} \frac{d^n}{d\tau^n} N \left(\sum_{s=0}^{\infty} v_s \tau^s \right) \Big|_{\tau=0} = \\
&= \sum_{\substack{\alpha_1 + \dots + \alpha_n = n \\ \alpha_1 \geq \dots \geq \alpha_{n+1} = 0 \\ \alpha_i \in \mathbf{N} \cup \{0\}}} N^{(\alpha_1)}(v_0) \frac{v_1^{\alpha_1 - \alpha_2}}{(\alpha_1 - \alpha_2)!} \cdots \frac{v_n^{\alpha_n - \alpha_{n+1}}}{(\alpha_n - \alpha_{n+1})!}. \quad (15)
\end{aligned}$$

Відомо (див., наприклад, [3]), що розв'язки задач (9)–(12) можна записати в явному вигляді за допомогою розв'язуючого оператора, роль якого відіграє функція Рімана:

$$\begin{aligned}
\overset{(k)}{u}(x, y) &= R(x, y_{j-1}, x, y) \overset{(k)}{u}(x, y_{j-1}) + R(x_{i-1}, y, x, y) \overset{(k)}{u}(x_{i-1}, y) - \\
& - R(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}, x, y) \overset{(k)}{u}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}) - \\
& - \int_{x_{i-1}}^x \left[\frac{\partial}{\partial \xi} R(\xi, y_{j-1}, x, y) \right] \overset{(k)}{u}(\xi, y_{j-1}) d\xi - \\
& - \int_{y_{j-1}}^y \left[\frac{\partial}{\partial \eta} R(x_{i-1}, \eta, x, y) \right] \overset{(k)}{u}(x_{i-1}, \eta) d\eta + \\
& + \int_{x_{i-1}}^x \int_{y_{j-1}}^y R(\xi, \eta, x, y) g_k(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad \forall (x, y) \in \bar{P}_{i,j}, \quad (16)
\end{aligned}$$

де

$$g_k(x, y) = \begin{cases} f(x, y), & k = 0; \\ -N^k l(u^{(0)}(x, y)) u^{(0)}(x, y) u^{(k)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}) - F^{(k)}(x, y), & k > 0, \end{cases}$$

$$R(x, y; \xi, \eta) = J_0 \left(\sqrt{4N_{i,j}(x - \xi)(y - \eta)} \right) = {}_0F_1(1; -(x - \xi)(y - \eta)N_{i,j}),$$

$$\frac{\partial}{\partial x} R(x, y; \xi, \eta) = {}_0F_1(2; -(x - \xi)(y - \eta)N_{i,j}) N_{i,j}(\eta - y), \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} R(x, y; \xi, \eta) = {}_0F_1(2; -(x - \xi)(y - \eta)N_{i,j}) N_{i,j}(\xi - x),$$

$$N_{i,j} = \left| N(u^{(k)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) \right| \quad \forall (x, y), (\xi, \eta) \in \bar{P}_{i,j}, \quad i \in \overline{1, N_1}, \quad j \in \overline{1, N_2},$$

а через $J_0, {}_0F_1$ позначено функцію Бесселя першого роду нульового порядку та вироджену гіпергеометричну функцію відповідно (див. [9]).

При $\alpha = 0$ описаний вище алгоритм — це *явна схема* FD-методу, при $\alpha > 0$ — *неявна схема* FD-методу. Взагалі кажучи, α може набувати довільних значень $0 \leq \alpha \leq 1$, але в даній роботі під *неявною схемою* FD-методу ми розумітимемо таку схему, в якій $\alpha = 1$.

В роботі [1] було знайдено достатні умови збіжності явної схеми FD-методу та одержано оцінки швидкості такої збіжності. Крім того, було досліджено апроксимаційні властивості розв'язку базової задачі (9), (10) по відношенню до розв'язку вихідної задачі (2), (3). Нижче основні результати з [1] наведено у вигляді теорем.

Теорема 1. *Припустимо, що $u(x, y)$ — розв'язок задачі (2), (3), а $u^{(0)}(x, y)$ — розв'язок задачі (9), (10) при $\alpha = 0$. Тоді для довільних достатньо малих значень h_1 та h_2 існує не залежна від h_1 та h_2 стала κ така, що має місце наступна оцінка:*

$$\left\| u(x, y) - u^{(0)}(x, y) \right\|_{\bar{D}} \leq h\kappa, \quad h = \sqrt{h_1^2 + h_2^2}, \quad (18)$$

де $\|u(x, y) - u^{(0)}(x, y)\|_{\bar{D}} = \max_{(x,y) \in \bar{D}} |u(x, y) - u^{(0)}(x, y)|$.

Теорема 2. *Припустимо, що для задачі Гурса (2), (3) виконуються наступні умови:*

1) $\mathbb{N}(u) = u \sum_{k=0}^{\infty} \nu_k u^k \quad \forall u \in \mathbf{R}, \nu_k \in \mathbf{R}$;

2) $\psi(x) \in C^{(1)}(\bar{D}_1) \cap C(\bar{D}_1), \phi(y) \in C^{(1)}(\bar{D}_2) \cap C(\bar{D}_2), f(x, y) \in C(\bar{D})$.

Тоді явна схема FD-методу для задачі Гурса (2), (3) збігається до точного розв'язку задачі. Крім того, мають місце наступні оцінки абсолютної похибки методу:

$$\|u(x, y) - u^{(m)}(x, y)\|_{1, \bar{D}} \leq \frac{cR}{(m+1)^{1+\varepsilon}(R-h)} \left(\frac{h}{R} \right)^{m+1}, \quad m \in \mathbf{N} \cup \{0\}, \quad (19)$$

де $h = \sqrt{h_1^2 + h_2^2}$, $h < R^1$, а додатні дійсні сталі залежать лише від вхідних даних задачі (2), (3).

¹ Детальніше про походження сталої R див. [1].

3. Алгоритм програмної реалізації FD-методу та його обчислювальна складність. У даному пункті ми розглянемо питання алгоритмічної реалізації FD-методу (4)–(10) та оцінимо складність запропонованого алгоритму з точки зору кількості необхідних *основних операцій* (додавання, множення, ділення).

Очевидно, що інтеграли у формулі (16) не можуть бути виражені через елементарні функції. Тому для обчислення функцій $u^{(k)}(x, y)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, необхідно використовувати чисельні методи інтегрування. Однак безпосереднє застосування квадратурних формул таких, наприклад, як формули Ньютона–Котеса чи Sink-квадратурні формули, не є виправданим з точки зору обчислювальної складності. Причиною цього є той факт, що функція Рімана $R(x, y; \xi, \eta)$ (17) не може бути розщеплена на мультиплікативні частини (множники), кожна з яких залежить або лише від (x, y) , або лише від (ξ, η) . Іншими словами, застосовуючи квадратурні формули до інтеграла

$$\int_{x_i}^x \int_{y_j}^y R(\xi, \eta, x, y) g_k(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (20)$$

ми не можемо використати адитивну властивість інтеграла. Так, використовуючи, наприклад, квадратурну формулу Сімпсона, нам потрібно (як буде показано нижче) виконати порядку $O(n^4)$ основних операцій, де через n позначено дискретизацію прямокутника $[x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$. На противагу цьому метод послідовних наближень є значно більш ефективним при обчисленні функцій $u^{(k)}(x, y)$, $k = 0, 1, 2, \dots$. Для того щоб проілюструвати цей факт, розглянемо прямокутник $P_{i,j} = (x_{i-1}, x_i) \times (y_{j-1}, y_j)$, $i \in \overline{1, N_1}$, $j \in \overline{1, N_2}$. Для обчислення наближеного значення інтеграла (20) розіб'ємо прямокутник $P_{i,j}$ деякою сіткою з рівномірними кроками по обох координатних осях $(x_i - x_{i-1})/p$ та $(y_j - y_{j-1})/p$ відповідно. Позначимо вузли цієї квадратурної сітки (ξ_k, η_l) , $k, l \in \overline{1, p}$. Якби подвійний інтеграл (20) мав адитивну властивість, то для його обчислення за допомогою деякої квадратурної формули Ньютона–Котеса на сітці (ξ_k, η_l) , $k, l \in \overline{1, p}$, нам потрібно було б виконати порядку p^2 основних операцій. Справді, двічі застосувавши до подвійного інтеграла, що має адитивну властивість, деяку квадратурну формулу Ньютона–Котеса з рівномірним розбиттям області інтегрування по обох координатах, одержимо

$$\begin{aligned} \int_0^x \int_0^y f(\xi, \eta) d\xi d\eta &\approx \int_0^x \sum_{j=0}^p A_j f(\xi, y_j) d\xi = \sum_{j=0}^p A_j \int_0^x f(\xi, y_j) d\xi \approx \\ &\approx \sum_{j=0}^p A_j \sum_{i=0}^p B_i f(x_i, y_j) = \sum_{j=0}^p \sum_{i=0}^p A_j B_i f(x_i, y_j), \end{aligned} \quad (21)$$

де A_j та B_i — деякі сталі, які залежать від коефіцієнтів застосованих квадратурних формул.

Підрахуємо скільки операцій додавання потрібно виконати, щоб обчислити інтеграл (20) у точках (ξ_k, η_l) , $k, l \in \overline{1, p}$, за допомогою частинного випадку формули (21) — формули прямокутників. Позначимо через $r_{k,l}$ кількість операцій додавання², необхідних для

² У формулі прямокутників операцій додавання значно більше, ніж множення, тому останніми в даному випадку можна знехтувати.

обчислення інтеграла в точці (ξ_k, η_l) . Тоді очевидно, що

$$r_{1,1} = 1, r_{1,2} = 2, r_{1,3} = 3, r_{1,4} = 4, \dots, r_{1,p} = p,$$

а

$$\sum_{s=1}^p r_{1,s} = 1 + 2 + 3 + 4 + \dots + p = \frac{p(p+1)}{2};$$

$$r_{2,1} = 2, r_{2,2} = 4, r_{2,3} = 6, r_{2,4} = 8, \dots, r_{2,p} = 2p,$$

а

$$\sum_{s=1}^p r_{2,s} = 2 + 4 + 6 + 8 + \dots + 2p = \frac{2p(p+1)}{2};$$

$$r_{3,1} = 3, r_{3,2} = 6, r_{3,3} = 9, r_{3,4} = 12, \dots, r_{3,p} = 3p,$$

а

$$\sum_{s=1}^p r_{3,s} = 3 + 6 + 9 + 12 + \dots + 3p = \frac{3p(p+1)}{2}.$$

І в загальному

$$\sum_{s=1}^p r_{p,s} = p + 2p + 3p + 4p + \dots + p^2 = p \frac{p(p+1)}{2}.$$

Тепер ми можемо підрахувати кількість S додавань, необхідних для наближеного обчислення згаданого інтеграла в усіх вузлах сітки (ξ_k, η_l) , $k, l \in \overline{1, p}$:

$$\begin{aligned} S &= \frac{p(p+1)}{2} + \frac{2p(p+1)}{2} + \frac{3p(p+1)}{2} + \dots + p \frac{p(p+1)}{2} = \\ &= \frac{p(p+1)}{2} (1 + 2 + 3 + 4 + \dots + p) = \frac{p(p+1)}{2} \frac{p(p+1)}{2} = \left(\frac{p(p+1)}{2} \right)^2 = O(p^4). \end{aligned} \quad (22)$$

Підрахуємо тепер кількість основних операцій, необхідних для безпосереднього знаходження функцій $u^{(k)}(x, y)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, з рівнянь (9), (11), використавши метод послідовних наближень:

$$\begin{aligned} u_n^{(r)}(\xi_k, \eta_l) &= - \int_{x_{i-1}}^{\xi_k} \int_{y_{j-1}}^{\eta_l} \left[N \left(u_{n-1}^{(r)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}) \right) u_{n-1}^{(r)}(x, y) - \right. \\ &\quad \left. - g_r \left(x, y, u_{n-1}^{(r)}(x, y) \right) \right] dy dx + u_n^{(r)}(x_{i-1}, \eta_l) + \\ &\quad + u_n^{(r)}(\xi_k, y_{j-1}) - u_n^{(r)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), \end{aligned} \quad (23)$$

де

$$g_r(x, y, u_{n-1}^{(r)}(x, y)) = \begin{cases} f(x, y), & r = 0, \\ -N' \left(u^{(0)}(x, y) \right) u^{(0)}(x, y) u_{n-1}^{(r)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}) - F(x, y), & r > 0, \end{cases}$$

$$u_0^{(r)}(x, y) \equiv 0 \quad \forall (x, y) \in P_{i,j}, \quad r = 0, 1, 2, \dots, \quad k, l \in \overline{1, p}, \quad i \in \overline{1, N_1}, \quad j \in \overline{1, N_2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Отже, як було показано вище, в цьому випадку (див. формулу (21)) у кожному прямокутнику $P_{i,j}$ потрібно виконати порядку p^2 основних операцій. Оскільки таких клітин-прямокутників сітки $\omega \in N_1 \times N_2$, то на кожному кроці методу матимемо порядку $p^2 N_1 N_2$ основних операцій. А для m задач FD-методу (9)–(14) будемо мати порядку $m p^2 N_1 N_2$ основних операцій. Для знаходження наближення (4) потрібно ще виконати $(m+1)p^2 N_1 N_2$ операцію додавання. Отже, всього потрібно виконати порядку $m p^2 N_1 N_2 + (m+1)p^2 N_1 N_2 = (2m+1)p^2 N_1 N_2$ основних операцій.

Тепер аналогічним чином підрахуємо кількість основних операцій, які необхідно виконати для обчислення функцій $u^{(k)}(x, y)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, за формулами (16), (17). Оскільки в кожному прямокутнику $P_{i,j}$ розв'язок $u^{(k)}(x, y)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, зображується за допомогою формули (16), то, врахувавши (22), матимемо порядку $\left(\frac{p(p+1)}{2}\right)^2$ основних операцій у кожному з таких прямокутників. Оскільки таких клітин-прямокутників сітки $\omega \in N_1 \times N_2$, то на кожному кроці методу матимемо порядку $\left(\frac{p(p+1)}{2}\right)^2 N_1 N_2$ основних операцій. А для m задач FD-методу будемо мати порядку $\left(\frac{p(p+1)}{2}\right)^2 m N_1 N_2$ основних операцій. Для знаходження наближення (4) потрібно ще виконати $\left(\frac{p(p+1)}{2}\right)^2 (m+1) N_1 N_2$ операцію додавання. Отже, всього потрібно виконати порядку $(2m+1) \left(\frac{p(p+1)}{2}\right)^2 N_1 N_2$ основних операцій.

Отже, як впливає з наведених міркувань, безпосереднє знаходження функцій $u^{(k)}(x, y)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, з рівнянь (9), (11) з допомогою методу послідовних наближень є ефективнішим з точки зору кількості виконання основних операцій, ніж їх обчислення за формулами (16), (17).

Розглянемо детально алгоритм FD-методу. Нижче наведено дві алгоритмічні схеми, перша з яких — це алгоритм розв'язування базової задачі (9)–(11), а друга — алгоритм явної схеми FD-методу розв'язування послідовності задач (12)–(14). Тут $u_{p,k}^{(0)}(x, y)$ — розв'язок базової задачі методом послідовних наближень на k -му кроці цього методу у p -му прямокутнику сітки FD-методу ($p = \overline{1, N_1 \times N_2}$), ε — машинний епсілон (наприклад, для типу double $\varepsilon \approx 1 \cdot 10^{-16}$).

Алгоритм 1. Алгоритм FD-методу розв'язування базової задачі.

```

1 input: дійсні сталі  $N_1, N_2 \in \mathbb{N}$ ,  $\varepsilon > 0$ , функції  $\psi(x) \in C^{(1)}(D_1) \cap C(\bar{D}_1)$ 
2  $\phi(y) \in C^{(1)}(D_2) \cap C(\bar{D}_2)$ ,  $f(x, y) \in C(\bar{D})$ ,  $N(u) \in C^\infty(\mathbf{R})$ 
3 output: функції  $u_{p,k}^{(0)}(x, y)$  такі, що  $\|u_{p,k}^{(0)}(x, y) - u_{p,k-1}^{(0)}(x, y)\|_{P_{i,j}} \leq \varepsilon$ 
4 begin
5    $\Phi(y) := \varphi(y); \Psi(x) := \psi(x)$ 
6    $p := 1; u_{p,0}^{(0)}(x, y) := 0; u_{p,1}^{(0)}(x, y) := 1$ 
7   for  $j = 1$  to  $N_2$  do
8     for  $i = 1$  to  $N_1$  do
9       if  $(i < N_1)$  and  $(j < N_2)$  then
10          $\Phi(y) := u_{p-1,k-1}^{(0)}(x_{i-1}, y)$ 
11          $\Psi(x) := u_{p-N_1,k-1}^{(0)}(x, y_{j-1})$ 
12       else
13         if  $(i = 1)$  and  $(j > 2)$  then
14            $\Phi(y) := \varphi(y)$ 
15            $\Psi(x) := u_{p-N_1,k-1}^{(0)}(x, y_{j-1})$ 
16         else
17           //Виконується, коли  $(j=1)$  and  $(i > 2)$ 
18            $\Psi(x) := \psi(x)$ 
19            $\Phi(y) := u_{p-1,k-1}^{(0)}(x_{i-1}, y)$ 
20         end
21       end
22        $k := 1; u_{p,0}^{(0)}(x, y) := 0; u_{p,1}^{(0)}(x, y) := 1$ 
23       while  $\|u_{p,k}^{(0)}(x, y) - u_{p,k-1}^{(0)}(x, y)\|_{P_{i,j}} > \varepsilon$  do
24          $u_{p,k}^{(0)}(x, y) := - \int_{x_{i-1}}^x \int_{y_{j-1}}^y \left( N(u_{p,k-1}^{(0)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) u_{p,k-1}^{(0)}(\xi, \eta) + \right.$ 
25          $\left. + f(\xi, \eta) \right) d\xi d\eta + \Phi(y) + \Psi(x) - \Phi(0)$ 
26          $k := k + 1$ 
27       end
28        $p := p + 1$ 
29     end
30 end

```

Алгоритм 2. Алгоритм FD-методу розв'язування задач вищих рангів.

```

1 input: дійсні сталі  $N_1, N_2 \in \mathbb{N}$ ,  $\varepsilon > 0$ ,  $m$  — ранг FD-методу функції
2  $\psi(x) \in C^{(1)}(D_1) \cap C(\bar{D}_1)$ ,  $\phi(y) \in C^{(1)}(D_2) \cap C(\bar{D}_2)$ ,  $f(x, y) \in C(\bar{D})$ ,  $N(u) \in C^\infty(\mathbf{R})$ 
3 output: функції  $u_{p,k}^{(r)}(x, y)$ , такі, що  $\|u_{p,k}^{(r)}(x, y) - u_{p,k-1}^{(r)}(x, y)\|_{P_{i,j}} \leq \varepsilon$ 
4 begin
5    $\Phi(y) := \varphi(y)$ ;  $\Psi(x) := \psi(x)$ ,  $p := 1$ ;  $r := 1$ ;  $u_{p,0}^{(r)}(x, y) := 0$ ;  $u_{p,1}^{(r)}(x, y) := 1$ 
6   while  $r > m$  do
7     for  $j = 1$  to  $N_2$  do
8       for  $i = 1$  to  $N_1$  do
9         if  $(i < 1)$  and  $(j < 1)$  then
10           $\Phi(y) := u_{p-1,k-1}^{(r)}(x_{i-1}, y)$ ;  $\Psi(x) := u_{p-N_1,k-1}^{(r)}(x, y_{j-1})$ 
11        else
12          if  $(i = 1)$  and  $(j > 2)$  then
13             $\Phi(y) := \varphi(y)$ ;  $\Psi(x) := u_{p-N_1,k-1}^{(r)}(x, y_{j-1})$ 
14          else
15            //Виконується, коли  $(j = 1)$  and  $(i > 2)$ 
16             $\Psi(x) := \psi(x)$ ;  $\Phi(y) := u_{p-1,k-1}^{(r)}(x_{i-1}, y)$ 
17          end
18        end
19       $k := 1$ ;  $u_{p,0}^{(r)}(x, y) := 0$ ;  $u_{p,1}^{(r)}(x, y) := 1$ 
20      while  $\|u_{p,k}^{(r)}(x, y) - u_{p,k-1}^{(r)}(x, y)\|_{P_{i,j}} > \varepsilon$  do
21         $F(x, y) = -N'(u_{p,k-1}^{(0)}(x, y)) u_{p,k-1}^{(0)}(x, y) u_{p,k-1}^{(r)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}) -$ 
22         $-\sum_{s=1}^{r-1} A_{r-s}(N; u_{p,k-1}^{(0)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), \dots, u_{p,k-1}^{(r-s)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) \times$ 
23         $\times u_{p,k-1}^{(s)}(x, y) -$ 
24         $-A_r(N; u_{p,k-1}^{(0)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), \dots, u_{p,k-1}^{(r-1)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), 0) \times$ 
25         $\times u_{p,k-1}^{(0)}(x, y) +$ 
26         $+\sum_{s=0}^{r-1} \left[ A_{r-1-s}(N; u_{p,k-1}^{(0)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}), \dots, u_{p,k-1}^{(r-1-s)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) -$ 
27         $-A_{r-1-s}(N; u_{p,k-1}^{(0)}(x, y), \dots, u_{p,k-1}^{(r-1-s)}(x, y)) \right] u_{p,k-1}^{(s)}(x, y)$ 
28         $u_{p,k}^{(r)}(x, y) := - \int_{x_{i-1}}^x \int_{y_{j-1}}^y (N(u_{p,k-1}^{(0)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})) u_{p,k-1}^{(k)}(x, y) -$ 
29         $- F(\xi, \eta)) d\xi d\eta + \Phi(y) + \Psi(x) - \Phi(0)$ 
30         $k := k + 1$ 
31      end
32       $p := p + 1$ 
33    end
34  end
35  end
36   $r := r + 1$ 
37 end

```

Поліноми Адомяна, які фігурують у виразі функції $F^{(k)}(x, y)$, $k = 0, 1, 2 \dots$ (13), можна обчислити за допомогою формули (15), зокрема у випадку нелінійної функції $N(u) \in C^\infty(\mathbf{R})$ вони мають вигляд

$$\begin{aligned} A_0(N; u_0) &= N(u_0), \\ A_1(N; u_0, u_1) &= u_1 N'(u_0), \\ A_2(N; u_0, u_1, u_2) &= u_2 N'(u_0) + \frac{u_1^2}{2!} N''(u_0), \\ A_3(N; u_0, u_1, u_2, u_3) &= u_3 N'(u_0) + u_1 u_2 N''(u_0) + \frac{u_1^3}{3!} N'''(u_0), \\ A_4(N; u_0, u_1, u_2, u_3, u_4) &= u_4 N'(u_0) + \left(u_1 u_3 + \frac{u_2^2}{2!}\right) N''(u_0) + \frac{u_1^2}{2!} u_2 N'''(u_0) + \frac{u_1^4}{4!} N^{(IV)}(u_0), \\ A_5(N; u_0, u_1, u_2, u_3, u_4, u_5) &= u_5 N'(u_0) + (u_1 u_4 + u_2 u_3) N''(u_0) + \\ &+ \frac{1}{2!} (u_1^2 u_3 + u_1 u_2^2) N'''(u_0) + \frac{u_1^3}{2!} u_2 N^{(IV)}(u_0) + \frac{u_1^5}{5!} N^{(V)}(u_0), \\ &\dots \end{aligned}$$

Запропонований алгоритм FD-методу було реалізовано у відкритому програмному продукті, який є доступним за посиланням <http://sourceforge.net/projects/imathsoft>.

4. Порівняння явної та неявної схем FD-методу. Проведемо порівняння явної та неявної схем FD-методу за допомогою чисельного експерименту. Розглянемо наступну задачу Гурса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y} &= e^{2u(x, y)}, \quad (x, y) \in D, \\ u(x, 0) &= \frac{x}{2} - \ln(1 + e^x), \quad u(0, y) = \frac{y}{2} - \ln(1 + e^y), \end{aligned} \tag{24}$$

де $D = \{(x, y) \mid 0 < x < X, 0 < y < Y\}$. Легко бачити, що точним розв'язком даної задачі є функція

$$u^*(x, y) = \frac{x + y}{2} - \ln(e^x + e^y).$$

Застосовуючи до цієї задачі явну та неявну схеми FD-методу, описані вище, апроксимуємо точний розв'язок задачі (24) частинною сумою ряду (4), доданки якого $u^{(k)}(x, y)$ задовольняють наступну систему лінійних задач Гурса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u^{(0)}(x, y)}{\partial x \partial y} + \frac{1 - \exp(2 u^{(0)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}))}{u^{(0)}(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})} u^{(0)}(x, y) &= 1, \\ u^{(0)}(x_{i-1} + 0, y) &= u^{(0)}(x_{i-1} - 0, y), \quad u^{(0)}(x, y_{j-1} + 0) = u^{(0)}(x, y_{j-1} - 0), \\ u^{(0)}(x, 0) &= \frac{x}{2} - \ln(1 + e^x), \quad u^{(0)}(0, y) = \frac{y}{2} - \ln(1 + e^y), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 {}^{(k)}u(x, y)}{\partial x \partial y} + \frac{1 - \exp(2 {}^{(0)}u(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}))}{{}^{(0)}u(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})} {}^{(k)}u(x, y) = \\ = \left(\frac{1 - \exp(2 {}^{(0)}u(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}))}{{}^{(0)}u(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})^2} + \frac{2 \exp(2 {}^{(0)}u(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}))}{{}^{(0)}u(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha})} \right) \times \\ \times {}^{(k)}u(x_{i-1+\alpha}, y_{j-1+\alpha}) {}^{(0)}u(x, y) + F(x, y), \quad x \in (x_{i-1}, x_i), \quad y \in (y_{j-1}, y_j), \end{aligned}$$

$${}^{(k)}u(x_{i-1} + 0, y) = {}^{(k)}u(x_{i-1} - 0, y), \quad {}^{(k)}u(x, y_{j-1} + 0) = {}^{(k)}u(x, y_{j-1} - 0),$$

$$i \in \overline{1, N_1}, \quad j \in \overline{1, N_2},$$

$${}^{(k)}u(x, 0) = 0, \quad {}^{(k)}u(0, y) = 0, \quad k = 1, 2, \dots,$$

де функція $F(x, y)$ визначається згідно з (13), а значенням $\alpha = 0$ та $\alpha = 1$ відповідають явна та неявна схеми FD-методу відповідно.

Для оцінки похибки методу використовуватимемо наступні функції:

$$\delta_{ex}(h_1, h_2, h'_1, h'_2, m) = \left\| {}^{(m)}u(x, y, h_1, h_2, h'_1, h'_2) - u^*(x, y) \right\|_{\overline{D}}, \quad (25)$$

$$\delta_{im}(h_1, h_2, h'_1, h'_2, m) = \left\| {}^{(m)}u(x, y, h_1, h_2, h'_1, h'_2) - u^*(x, y) \right\|_{\overline{D}}, \quad (26)$$

де h_1, h_2 — кроки сітки FD-методу, h'_1, h'_2 — кроки сітки квадратурної формули³, (25) — оцінка похибки явної схеми FD-методу, (26) — оцінка похибки неявної схеми FD-методу.

В табл. 1 наведено результати застосування FD-методу до задачі Гурса (24) в області $D = \{(x, y) | 0 < x < 2, 0 < y < 2\}$ з кроками сіток FD-методу та квадратурної формули $h_1 = h_2 = 0, 1$ та $h'_1 = h'_2 = 0, 01$ відповідно. Результати, наведені в табл. 2, стосуються задачі Гурса (24) на прямокутнику $D = \{(x, y) | 0 < x < 6, 0 < y < 6\}$ з $h_1 = h_2 = 0, 1$ та $h'_1 = h'_2 = 0, 01$. В табл. 3 наведені результати відповідають задачі Гурса (24) в області $D = \{(x, y) | 0 < x < 8, 0 < y < 8\}$ з тими ж значеннями кроків h_1, h_2, h'_1, h'_2 .

³ У даному прикладі для наближеного обчислення інтегралів використовувалась формула Сімпсона.

Таблиця 1. Похибка FD-методу як функція від рангу (m) і кроків сіток (h_1, h_2, h'_1, h'_2) (при $X = Y = 2$)

m	$\delta_{ex}(0.1, 0.1; 0.01, 0.01, m)$	$\delta_{im}(0.1, 0.1; 0.01, 0.01, m)$
$m = 0$	0,000446192099739173	0,000367283284495978
$m = 1$	0,000167706954512625	0,000233426857747632
$m = 2$	4,48894722493431e-6	8,51788157041344e-6
$m = 3$	8,36689053596018e-8	2,57477632104042e-7
$m = 4$	1,14462328504317e-9	6,9642438482731e-9
$m = 5$	7,21311899098964e-12	1,69383174153381e-10
$m = 6$	1,73194791841524e-13	3,71214170513667e-12
$m = 7$	7,66053886991358e-15	8,43769498715119e-14

Таблиця 2. Похибка FD-методу як функція від рангу (m) і кроків сіток (h_1, h_2, h'_1, h'_2) (при $X = Y = 6$)

m	$\delta_{ex}(0.1, 0.1; 0.01, 0.01, m)$	$\delta_{im}(0.1, 0.1; 0.01, 0.01, m)$
$m = 0$	0,00990099704793557	0,0166759460699123
$m = 1$	0,0427223772725684	0,0364800008223901
$m = 2$	0,00768326756163651	0,00556788648104944
$m = 3$	0,00154917762333551	0,00108472082240441
$m = 4$	0,000298257776059851	0,000175408476288719
$m = 5$	6,10327818401091e-5	3,38212358182988e-5
$m = 6$	1,23116236430132e-5	6,03698889534154e-6
$m = 7$	2,47648720252958e-6	1,17306679114915e-7

Таблиця 3. Похибка FD-методу як функція від рангу (m) і кроків сіток (h_1, h_2, h'_1, h'_2) (при $X = Y = 8$)

m	$\delta_{ex}(0.1, 0.1; 0.01, 0.01, m)$	$\delta_{im}(0.1, 0.1; 0.01, 0.01, m)$
$m = 0$	0,0923974325023775	0,125326818244121
$m = 1$	0,411139985428395	0,27863153682922
$m = 2$	0,207256544743765	0,0181579710170172
$m = 3$	0,155366246421829	0,044569551541476
$m = 4$	0,111449896596149	0,00673670254222669
$m = 5$	0,0868443598360921	0,0104639209451075
$m = 6$	0,0681606731257846	0,00354428978981047
$m = 7$	0,0545617406466004	0,00317997251866142

Значення похибок $\delta_{ex}(h_1, h_2, h'_1, h'_2, m)$ та $\delta_{im}(h_1, h_2, h'_1, h'_2, m)$, наведених у табл. 1–3, показують, що неявна схема FD-методу при збільшенні розмірів області, в якій шукається розв'язок розглядуваної задачі Гурса, та при збереженні кроків сітки методу збігається краще, ніж явна схема FD-методу. Разом з тим результати, наведені в табл. 1, свідчать про те, що явна схема FD-методу збігається швидше за неявну схему у випадку малих областей D .

5. Висновки. В даній роботі описано та досліджено алгоритми FD-методу розв'язування задачі Гурса для нелінійного рівняння Кляйна–Гордона (1). Встановлено, що безпосереднє використання формул (16), (17) є значно менш ефективним (з точки зору обчислювальної складності), ніж використання методу послідовних наближень (23).

Крім того, на основі наведених у роботі результатів чисельного експерименту можна зробити висновок, що з точки зору чисельної стійкості неявна схема FD-методу має перевагу над явною. Цей факт обґрунтовує перспективність подальшого дослідження та обґрунтування неявної схеми FD-методу для розв'язування задачі Гурса (2), (3).

1. *Makarov V. L., Dragunov D. V., Sember D. A.* FD-method for solving the nonlinear Klein–Gordon equation // Укр. мат. журн. — 2012. — **64**, № 10. — С. 1394–1415.
2. *Barone A., Esposito F., Magee C., Scott A.* Theory and applications of the sine-Gordon equation // Riv. Nuovo cim. — 1971. — **1**. — P. 227–267.
3. *Bitsadze A. V.* Equations of mathematical physics. — Moscow: Mir, 1980.
4. *Frenkel J., Kontorova T.* On the theory of plastic deformation and twinning // Acad. Sci. USSR. J. Phys. — 1939. — **1**. — P. 137–149.
5. *Gavrilyuk I. P., Lazurchak I. I., Makarov V. L., Sytnyk D.* A method with a controllable exponential convergence rate for nonlinear differential operator equations // Comput. Meth. Appl. Math. — 2009. — **9**, № 1. — P. 63–78.
6. *Василик В. Б., Драгунов Д. В., Ситник Д. О.* Функціонально-дискретний метод розв'язування операторних рівнянь та його застосування. — Київ: Наук. думка, 2011. — 176 с.
7. *Gibbon J. D., Caudrey P. J., Bullough R. K., Eilbeck J. C.* N -soliton solutions on some non-linear dispersive wave equations of physical significance // Lect. Notes Math. Ordinary and Partial Different. Equat. (Proc. Conf., Univ. Dundee, Dundee, 1974). — 1974. — **415**. — P. 357–362.
8. *Abbaoui K., Cherruault Y., Seng V.* Practical formulae for calculus of multivariable Adomian polynomials // Math. Comput. Modelling. — 1995. — **22**, № 1. — P. 89–93.
9. *Gernard Cristensson.* Second order differential equations. — New York: Springer, 2010.
10. *Kungurtsev A. A.* A hyperbolic equation in three-dimensional space // Izv. Vyssh. Uchebn. Zav. Mat. — 2006. — **3**. — P. 76–80.
11. *Makarov V. L., Dragunov D. V.* A superexponentially convergent functional-discrete method for solving the Cauchy problem for systems of ordinary differential equations // arXiv:1101.0096v1, 2010.
12. *Makarov V. L., Dragunov D. V.* A numerical-analytic method for solving the Cauchy problem for ordinary differential equations // Comput. Meth. Appl. Math. — 2011. — **11**, № 4. — P. 491–509.
13. *Makarov V. L.* About functional-discrete method of arbitrary accuracy order for solving Sturm-Liouville problem with piecewise smooth coefficients // Dokl. Akad. Nauk. SSSR. — 1991. — **320**, № 1. — P. 34–39.
14. *Makarov V. L., Rossokhata N. O.* A review of functional-discrete technique for eigenvalue problems // J. Numer. Appl. Math. — 2009. — **97**. — P. 97–102.
15. *Mohammadi S.* Solving pionic atom with Klein-Gordon equation // Res. J. Phys. — 2010. — **4**. — P. 160–164.
16. *Perring J. K., Skyrme T. H. R.* A model unified field equation // Nucl. Phys. — 1962. — **31**. — P. 550–555.
17. *Popov A. G., Maevskii E. V.* Analytical approaches to the investigation of the sine-Gordon equation and pseudospherical surfaces // Sovrem. Mat. Pril. Geom. — 2005. — **31**. — P. 13–52.
18. *Skyrme T. H. R.* Particle states of a quantized meson field // Proc. Roy. Soc. Ser. A. — 1961. — **262**. — P. 237–245.

19. *Seng V., Abbaoui K., Cherruault Y.* Adomian's polinomials for nonlinear operators // *Math. Comput. Modelling.* — 1996. — **24**, № 1. — P. 59–65.
20. *Yagdjian K., Galstian A.* The Klein–Gordon equation in anti-de Sitter spacetime // *Rend. Semin. mat. Univ. e politecn. Torino.* — 2009. — **67**, № 2. — P. 271–292.
21. *Yagdjian K., Galstian A.* Fundamental solutions for the Klein–Gordon equation in de Sitter spacetime // *Communs Math. Phys.* — 2009. — **285**, № 1. — P. 293–344.

Одержано 14.12.12