

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ШРЁДИНГЕРА И ГИНЗБУРГА — ЛАНДАУ С ПОВЫШЕННЫМ ПОРЯДКОМ ТОЧНОСТИ

В. И. Паасонен^{1,2}, М. П. Федорук^{1,2}

¹Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск

²Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск

УДК 519.6

В работе обсуждаются вопросы применения разностных схем четвертого порядка аппроксимации по ‘медленному’ времени и второго порядка по эволюционной переменной для численного решения нелинейных уравнений Шрёдингера и Гинзбурга — Ландау. Исследуется устойчивость и диссипативные свойства разностных схем. С целью построения экономичного безитерационного алгоритма используется трехслойная запись формально двухслойной схемы, с аппроксимацией нелинейной правой части уравнения на среднем слое. Приводятся результаты расчетов типичных тестовых задач на последовательности сгущающихся сеток в сравнении с расчетами по схеме второго порядка точности.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, уравнение Гинзбурга — Ландау, схема повышенной точности, диссипативная схема.

Введение

Рассматривается задача Дирихле или периодическая начально-краевая задача для уравнения Шрёдингера и уравнения Гинзбурга — Ландау (см., например, [1]). В нелинейной оптике уравнение Гинзбурга — Ландау обычно используется в форме

$$i \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + |U|^2 U = i \delta U + i \varepsilon |U|^2 U + i \beta \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + (i \mu - \nu) |U|^4 U \quad (1)$$

с комплексной искомой функцией U , зависящей от эволюционной переменной t , которая имеет смысл нормированной длины распространения, и ‘медленного’ времени x . Здесь i — мнимая единица, коэффициент $D = 1$ или $D = -1$ в зависимости от того, нормальна или аномальна дисперсия, а коэффициенты $\delta, \varepsilon, \beta, \mu, \nu$ в правой части вещественны, причем для корректности задачи требуется неотрицательность коэффициента β . В частном случае нулевых коэффициентов в правой части уравнение (1) переходит в нелинейное уравнение Шрёдингера.

Уравнения Шрёдингера и уравнения Гинзбурга — Ландау моделируют процессы, происходящие в волоконно-оптических линиях связи, волоконных лазерах и других оптических устройствах (см., например, [2]). Типичные решения таких уравнений имеют вид функции с обширным фоном плавного изменения и отдельных сигналов в виде солитонов, сосредоточенных в узких зонах. Ввиду наличия зон больших градиентов для успешного применения традиционных разностных схем требуется настолько детальная сетка, что процесс вычислений решения даже на современных компьютерах требует больших вычислительных затрат. Для решения таких задач чаще, чем разностные схемы, используются спектральные методы [3], основанные на применении быстрого преобразования Фурье. Они позволяют получить более высокую точность, однако в случае больших задач сталкиваются с серьезными затруднениями при попытках параллельной реализации. Разностные схемы, напротив, перспективны именно в отношении возможности распараллеливания, но обычно имеют более низкую точность. Поэтому одним из актуальных путей для повышения эффективности алгоритмов расчета представляется повышение порядка точности разностных схем. Исследования разностных схем четвертого порядка точности [4, 5, 6] убеждают в перспективности этого направления.

Данная работа посвящена вопросам применения для решения уравнения Гинзбурга — Ландау и уравнения Шрёдингера схем повышенного порядка точности на основе безитерационной технологии, исследованию устойчивости и оценке диссипативных свойств схем и численному исследованию метода в сравнении со схемой второго порядка точности.

1 Разностные схемы различных порядков точности

Для удобства представим уравнение (1) в канонической форме, умножив его на $-i$ и объединив слагаемые правой части. В результате получим уравнение

$$\frac{\partial U}{\partial t} = a \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + f(U), \quad f(U) = g(U) U, \quad g(U) = \delta + z|U|^2 + w|U|^4, \quad (2)$$

где

$$a = \beta + \frac{D}{2} i, \quad z = \varepsilon + i, \quad w = \mu + \nu i.$$

Формальное отличие уравнения (2) от уравнения Шрёдингера состоит в наличии ненулевой действительной части в коэффициенте при второй производной (в уравнении Шрёдингера коэффициент a чисто мнимый, так как $\beta = 0$) и в более сложной структуре правой части, состоящей из линейной части, кубичной нелинейности и нелинейности пятой степени. Вместе с тем уравнение (2) по форме в точности соответствует также и уравнению теплопроводности, хотя ввиду того, что коэффициенты и решение комплексные, относится к более сложному типу.

Пусть h и τ суть шаги равномерной сетки по x и t соответственно, а Λ — обычный разностный оператор, аппроксимирующий двойное дифференцирование по x . В этих обозначениях классическая разностная схема с весами для уравнения (2) имеет вид

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\tau} = a \Lambda(\sigma U^{n+1} + (1 - \sigma)U^n) + F^n. \quad (3)$$

Общая формулировка (3) включает в себя различные схемы. Например, при равных весах ($\sigma = 0.5$) имеем схему Кранка-Николсон второго порядка точности по обоим переменным, а при специальном значении веса схемы

$$\sigma = \frac{1}{2} - \frac{1}{12K}, \quad K = \frac{a\tau}{h^2}, \quad (4)$$

и специальной аппроксимации правой части

$$F^n = \frac{f^{n+1} + f^n}{2} + \frac{h^2}{12} \Lambda f^n$$

получаем классическую схему [7], имеющую погрешность аппроксимации $O(\tau^2 + h^4)$.

Ввиду зависимости правой части от решения схема (3) требует итераций по нелинейности, однако этот недостаток нетрудно ликвидировать, переходя к трехслойной схеме

$$\frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\tau} = a \Lambda(\sigma U^{n+1} + (1 - \sigma)U^{n-1}) + F^n, \quad (5)$$

которая получается из (3) элементарным удвоением шага τ , и изменяя способ аппроксимации F^n так, чтобы схемы стала линейной относительно решения на верхнем слое. Для этого, например, правую часть можно взять полностью со среднего слоя:

$$F^n = f^n + \frac{h^2}{12} \Lambda f^n, \quad f(U) = (\delta + z|U|^2 + w|U|^4) U.$$

При этом в выражении (4) для веса схемы следует также заменить τ на 2τ . Аналогично модифицируется в трехслойную безитерационную любая схема с весами, в частности, схема Кранка-Николсон.

Трехслойная схема требует задания начальных профилей решения на двух первых слоях по эволюционной переменной. Поэтому на старте вычислений приходится использовать двухслойную схему и итерационный процесс ее реализации с помощью некоторой линеаризации, например:

$$\frac{V^{k+1} - U^0}{\tau} = a \Lambda(\sigma V^{k+1} + (1 - \sigma)U^0) + \frac{f(V^k) + f(U^0)}{2} + \frac{h^2}{12} \Lambda f(U^0),$$

где $k = 0, 1, \dots$ — номер итерации, $V^0 = U(0)$ — начальное приближение. На практике для достижения удовлетворительной точности более трех-четырех итераций не требовалось, но если пришлось бы организовывать итерации на каждом слое, то общее время счета увеличилось бы более чем втрое. Чтобы избежать этого, следует предпочесть трехслойную безитерационную схему (5).

2 Дисперсионный анализ устойчивости схем

Исследуем устойчивость двухслойной однородной схемы в линейном приближении. Результат в равной степени относится также и к трехслойной схеме, так как в отсутствие правой части она представляет собой запись той же двухслойной схемы, но с двойным шагом. Дисперсионный анализ устойчивости приводит к выражению для множителя возрастания гармоник $\exp(ikx)$:

$$\rho_k = \frac{1 - 4 K (1 - \sigma) \lambda_k}{1 + 4 K \sigma \lambda_k}, \quad \lambda_k = \sin^2 \frac{k h}{2}, \quad K = \frac{a \tau}{h^2}. \quad (6)$$

В случае уравнения Гинзбурга — Ландау и уравнения Шрёдингера $a = \beta + i D/2$, и это отличает их от уравнения теплопроводности, в котором коэффициент теплопроводности вещественный. В связи с этим в высокоточной схеме для уравнений нелинейной оптики вес σ также комплексный, поскольку он связан алгебраическим соотношением (4) с комплексным параметром K .

Поясним схематично способ исследования неравенства $|\rho_k| \leq 1$ и приведем лишь результат, пропуская громоздкие выкладки. Записав выражения σ и K в виде комбинации вещественной и мнимой части и выполнив операции умножения в числителе и знаменателе дроби (6), представим ее в виде отношения комплексных чисел

$$\rho_k = \frac{r + i q}{R + i Q}.$$

Тогда исследуемое неравенство эквивалентно тому, что квадрат модуля знаменателя не меньше квадрата модуля числителя, т. е.

$$(R - r)(R + r) + (Q - q)(Q + q) \geq 0.$$

Входящие сюда разности и суммы имеют достаточно простой вид, и после сокращения на положительные величины получается неравенство

$$Re K + 2 (2 Re \sigma - 1) |K|^2 \lambda_k \geq 0.$$

Когда k пробегает все номера гармоник, λ_k пробегает множество точек отрезка $(0, 1)$. А так как наше неравенство линейно по λ_k , то следует потребовать его выполнения лишь на концах отрезка, т. е. в нуле и единице. Отсюда ввиду положительности β следует необходимое условие устойчивости Неймана

$$Re K + 2 (2 Re \sigma - 1) |K|^2 \geq 0. \quad (7)$$

Ясно, что при вещественном $\sigma \geq 0.5$ устойчивость абсолютна.

В случае схемы повышенной точности для уравнения Гинзбурга — Ландау (и для уравнения теплопроводности) подстановка выражения (4) превращает неравенство (7) в строгое истинное неравенство

$$\frac{2}{3} Re K > 0.$$

Поэтому схема повышенной точности для этих уравнений диссипативна, т. е. множители возрастания любой гармоники строго меньше единицы:

$$|\rho_k|^2 = 1 - \frac{8 \lambda_k Re K (1 - \lambda_k/3)}{|1 + 4 K \sigma \lambda_k|^2} < 1, \quad (\lambda_k \neq 0).$$

Заметим, что для уравнения Шрёдингера $\beta = Re K = 0$, и поэтому любая схема с весами теряет свойство диссипативности. В том числе и схема Кранка-Николсон, и схема четвертого порядка точности не является диссипативной, т. е. для каждой гармоники $|\rho_k| \equiv 1$. Между тем для улучшения качества расчетов, особенно при большом числе шагов по эволюционной переменной, диссипативность представляется весьма желательным свойством схемы.

Диссипативности можно добиться (см. [5]) путем добавления в выражение для веса σ дополнительного слагаемого $c\tau$ со свободным параметром c . Объединяя в одной формуле выражения для веса σ в обеих схемах, запишем его в виде

$$\sigma = \frac{1}{2} + c\tau - \frac{p}{12K}, \quad K = \frac{a\tau}{h^2},$$

где p принимает значения 0 в случае схемы Кранка-Николсон и значение 1 для схемы повышенной точности. При этом порядок точности схем относительно τ не уменьшается, и при положительном c обе схемы становятся диссипативными ввиду неравенства

$$|\rho_k|^2 = 1 - 32 \frac{c\tau |K|^2 \lambda_k^2}{|1 + 4K\sigma\lambda_k|^2} < 1.$$

Произвольный параметр c при этом играет роль регулятора степени диссипативности схемы.

3 Результаты численных экспериментов

Схемы для уравнения Шрёдингера сравнивались в численных экспериментах. В таблице 1 приведены результаты расчетов задачи с заранее известным точным решением в виде солитона

$$U(x, t) = \exp\left(-\frac{it}{2}\right) \operatorname{sech}(x).$$

Задача решалась в области $(0 \leq t \leq 4\pi) \times (-10 \leq x \leq 10)$. В первых двух столбцах таблицы 1 помещены размеры сетки по x и t , а затем группами по три столбца приведены значения глобальной C -нормы ошибки δ , коэффициента P убывания ошибки при дроблении сетки, а также времени счета T . Результаты в первой тройке столбцов соответствует двухслойной итерационной схеме второго порядка точности, во второй тройке — двухслойной итерационной схеме повышенной точности, в третьей — безитерационной трехслойной схеме четвертого порядка точности. Результаты свидетельствуют о существенном преимуществе высокоточных схем в сравнении со схемой второго порядка точности и о полезности использования безитерационной технологии.

Таблица 1: Результаты решения уравнения Шрёдингера на сгущающихся сетках по схемам второго и четвертого порядков точности

N_x	N_t	δ_2	P_2	T_2	δ_4	P_4	T_4	δ	P	T
20	20	2.4197-00		0.09	8.7966-01		0.11	1.7320-00		0.04
40	80	7.1275-01	3.39	0.17	6.6587-02	13.21	0.19	2.3239-02	74.53	0.06
80	320	2.2153-01	3.22	0.90	6.2449-03	10.66	0.94	1.8797-02	12.36	0.30
160	1280	7.6367-02	2.90	4.31	5.5693-04	11.21	4.54	1.6632-03	11.30	1.47
320	5120	2.6835-02	2.85	24.10	4.9901-05	11.16	24.57	1.441-05	11.31	5.72
640	20480	9.4732-03	2.83	169.32	4.3687-06	11.42	170.76	1.3006-06	11.31	54.48

Для итерационных схем внутренние итерации проводились в данном примере до достижения различия между итерациями $\epsilon = 10^{-8}$ с верхним ограничением до пяти итераций.

Из таблицы 1 видно, что коэффициенты убывания ошибки для обеих схем оказались несколько ниже, чем следовало бы ожидать в соответствии с теоретическим порядком точности. Анализ результатов показывает, что практически наблюдаемые порядки сходимости для схем второго и четвертого порядка аппроксимации составляют приблизительно величины 1.6 и 3.5 соответственно. Авторы полагают, что это связано с влиянием ошибок округления, которые в условиях сильной нелинейности при достаточно малых шагах сетки становятся сравнимыми с аппроксимационной ошибкой. Для подтверждения этого предположения были проведены расчеты той же задачи на более грубых сетках. Соответствующие результаты приведены в таблице 2, из которой видно, что при детализации сетки коэффициент убывания ошибки сначала приближается к теоретическим значениям 2^2 и 2^4 , а при дальнейшем уменьшении шага снижается ввиду влияния ошибок округления. Это обычное явление для любых краевых задач, но в задачах с сильной нелинейностью влияние неточности машинной арифметики при детализации сетки наступает быстрее, чем в более спокойных условиях.

Таблица 2: Результаты расчета нелинейной задачи по безитерационным схемам второго и четвертого порядков точности на грубых сетках

N_x	N_t	δ_2	P_2	δ_4	P_4
4	8	1.4541-00		1.1474-00	
8	32	2.0410-00	0.712	1.5821-00	0.725
16	128	2.4684-00	0.827	1.9784-00	0.800
32	512	1.3302-00	1.856	1.1152-01	17.740
64	2048	3.1587-01	4.211	6.6918-03	16.665
128	8192	1.0722-01	2.946	5.7731-04	11.591

С целью определения влияния коэффициента диссипации на точность расчета проведена серия численных экспериментов при различных значениях c для этой же задачи. В таблице 3 приведена зависимость ошибки решения на сетке $Nx \times Nt = 320 \times 1280$ от параметра c для модифицированной схемы Кранка-Николсон и схемы повышенной точности.

Таблица 3: Зависимость ошибки от параметра диссипации для безитерационных схем второго и четвертого порядков точности

c_2	0	-0.2	-0.4	-0.6	-0.8	-1.0
$10^2 \times \delta_2$	2.65	2.37	2.08	1.79	1.52	21.67
c_4	0	0.008	0.016	0.024	0.032	0.04
$10^5 \times \delta_4$	26.29	14.88	7.62	9.32	20.54	32.01

Как и следовало ожидать, масштабы ошибок по схемам второго и четвертого порядков точности существенно различаются. Результаты таблицы 3 свидетельствуют о полезности искусственной диссипации, хотя вопрос о выработке рекомендаций к выбору оптимального параметра c остается открытым. Более того, для схемы второго порядка точности оптимальный параметр c неожиданно оказался в отрицательной области. Очевидно, это обстоятельство свидетельствует о том, что дисперсионный анализ схемы с нулевой правой частью не отражает в полной мере реалии вычислительного процесса. В надежде понять этот неожиданный факт авторами был проведен дисперсионный анализ схем для уравнения Шрёдингера с линеаризованной правой частью, в которой $\omega = |U|^2 > 0$ выступает в качестве ‘замороженного’ коэффициента. В этом предположении интервал для параметра c , при котором схема остается диссипативной, оказался несколько шире; к положительной оси присоединяется небольшой интервал отрицательных значений, причем оптимальный параметр в данном случае оказался принадлежащим именно отрицательной области.

Схемы для уравнения Гинзбурга — Ландау тестировались на многочисленных точных решениях из обширной коллекции [1], однако здесь приводятся результаты расчетов только одной задачи. Точное решение в расчетной области $(-2 \leq x \leq 2) \times (0 < t \leq 1)$ имеет вид

$$U(x, t) = \alpha(x) \exp[i(\phi(x) - \omega t)], \quad (8)$$

где ω — вещественная постоянная, α и ϕ — вещественные функции, связанные равенством $\phi(x) = d \ln(\alpha(x))$, d — так называемый параметр чирпа. Параметры нелинейности пятой степени в правой части уравнения (2) нулевые: $\nu = \mu = 0$.

Условия совместности двух ОДУ для вещественной и мнимой компонент решения удовлетворяются при следующих соотношениях между коэффициентами уравнения (2):

$$d = \frac{\sqrt{9S^2 + 8H^2} - 3S}{2H}, \quad \omega = -\frac{\delta(1 - d^2 + 4\beta d)}{2R},$$

где

$$S = 1 + 2\varepsilon\beta, \quad H = 2\beta - \varepsilon, \quad R = d - \beta + \beta d^2.$$

При этих условиях функция $\alpha(x)$ однозначно определяется в явной форме

$$\alpha(x) = B C \operatorname{sech}(B x), \quad C = \sqrt{\frac{3d(1 + 4\beta^2)}{2H}}, \quad B = \sqrt{\frac{\delta}{R}}. \quad (9)$$

Задача решалась при значениях параметров $D = 1$, $\delta = 1$, $\beta = 1$; $\varepsilon = 0.25$ на сгущающихся вложенных сетках, начиная с сетки 100×400 , с уменьшением шага по h вдвое и по τ в четыре раза.

На рис. 1, 2 приведены результаты расчетов для конечного значения эволюционной переменной $t = 1$, полученные по двум трехслойным безитерационным схемам: схеме Кранка-Николсон и схеме повышенной точности. Значение N на рисунках означает число шагов по x .

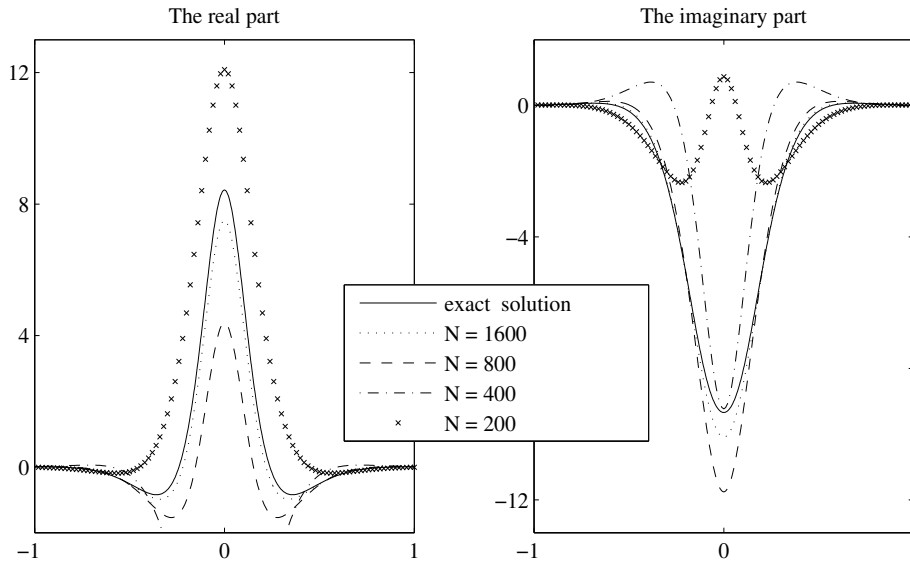


Рис. 1: Результаты расчетов по схеме Кранка-Николсон на последовательности сеток

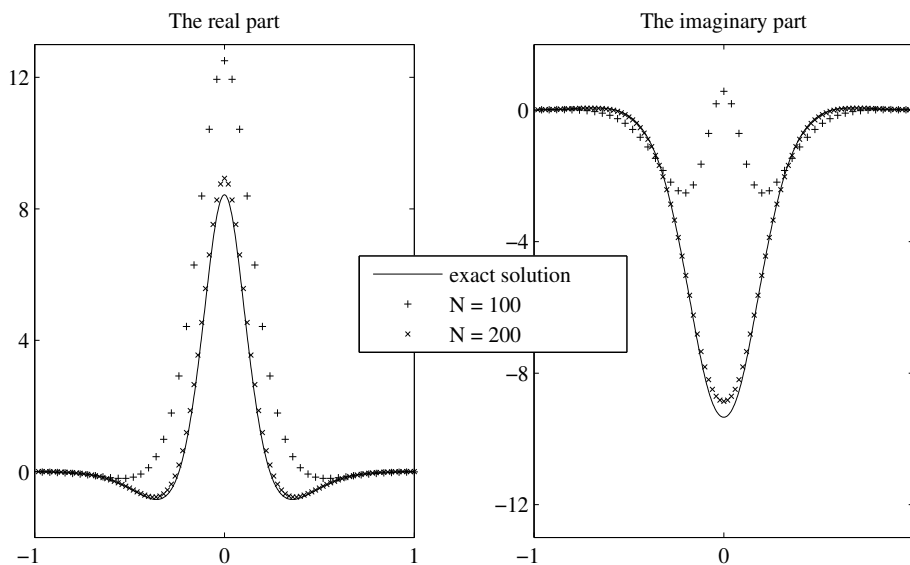


Рис. 2: Результаты расчета по схеме четвертого порядка точности на последовательности сеток

Из рис. 1 видно, что при детализации сетки численное решение по схеме второго порядка сходится к точному довольно медленно. В противоположность этому результаты расчеты по схеме четвертого порядка (рис. 2) сходятся настолько быстро, что при числе шагов $N > 200$ их уже нет необходимости приводить, так как они визуальнo сливаются с точным решением.

В таблице 4 для обеих схем приведены нормы относительных ошибок в процентах. Из таблицы видно,

что для достижения точности около 3% для схемы второго порядка приемлемой оказалась сетка с $N = 3200$ шагами. В противоположность ей схема повышенной точности дает превосходные результаты с погрешностью менее 0.4% уже на существенно более грубой сетке с $N = 400$ шагами. Заметим также, что соотношение погрешностей при каждом дроблении сетки, равное приблизительно 2^q для схем точности $O(h^q)$ ($q = 2$ или $q = 4$), подтверждает соответствие результатов теоретически ожидаемым порядкам точности.

Таблица 4: Относительная ошибка при численном решении уравнения Гинзбурга — Ландау

Число шагов N	100	200	400	800	1600	3200
Ошибка δ_2	162.8	86.26	133.43	37.41	9.47	2.72
Ошибка δ_4	85.25	5.52	0.35	2.16E-2	1.35E-3	8.41E-5

Список литературы

- [1] Akhmediev N. N., Afanasiev V. V. Singularities and special soliton solutions of the cubic-quintic complex Ginzburg-Landau equation // Physical Review E. 1996. V. 53, iss.1, P. 1190–1201.
- [2] Кившарь Ю. С., Агравал Г. П. Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам. Москва: Физматлит, 2005.
- [3] Lu S., Lu Q., Twizell E. H. Fourier spectral approximation to long-time behaviour of the derivative three-dimensional Ginzburg-Landau equation // J. Comput. Appl. Math. 2007. V. 198, P. 167–186.
- [4] Shu-Sen Xie, Guang-Xing Li, Sucheol Yi. Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation b,2.// Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2009. V. 198, P. 1052–1061.
- [5] Паасонен В. И., Федорук М. П. Компактная диссипативная схема для нелинейного уравнения Шредингера // Вычислительные технологии. 2011. Т. 16, № 6, С. 68–73.
- [6] Паасонен В. И., Федорук М. П. Компактная безитерационная схема для нелинейного уравнения Шредингера // Вычислительные технологии. 2012. Т. 17, № 3, С. 83–90.
- [7] Микеладзе Ш. Е. О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов // Известия АН СССР. Серия матем. 1941. Т. 5, № 1, С. 57–74.

*Виктор Иванович Паасонен — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр.
Института вычислительных технологий СО РАН,
доцент Новосибирского государственного университета;
e-mail: paas@ict.nsc.ru;*

*Михаил Петрович Федорук — д.ф.-м.н., зав. лабораторией
Института вычислительных технологий СО РАН,
Ректор Новосибирского государственного университета;
e-mail: mife@ict.nsc.ru.*

Дата поступления — 4 мая 2017 г.