

ОПТИМИЗАЦИЯ КОМПАКТНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ СПЕКТРАЛЬНОГО РАЗРЕШЕНИЯ ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ ЦИФРОВОЙ ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ

Определены оптимальные значения параметров конечно-разностных схем для нестационарного уравнения Шрёдингера, обеспечивающие минимизацию фазовой погрешности приближенного решения в заданном спектральном диапазоне. Для решения задачи оптимизации использовано эквивалентное представление разностной схемы в виде однопараметрического семейства рекурсивных цифровых фильтров. Установлена зависимость оптимального параметра от ширины спектрального диапазона и стремление его к значению, отвечающему схеме четвертого порядка точности, когда ширина диапазона спектральной согласованности стремится к нулю. Показано, что соотношение пространственных и временных шагов, определяемое оптимизированной схемой цифровой фильтрации, является оптимальным для схемы с весами. Получены оценки погрешности передаточной функции оптимизированной дискретной модели, которые обеспечивают достаточно точное предсказание относительной локальной погрешности в заданном спектральном диапазоне. Эффективность оптимизированной схемы продемонстрирована на основе анализа спектрального разрешения дискретных моделей. В частности, показано, что предложенная оптимизация обеспечивает приблизительно четырехкратное уменьшение погрешности схемы четвертого порядка точности для нестационарного уравнения Шрёдингера.

Ключевые слова: конечно-разностные схемы; нестационарное уравнение Шрёдингера; рекурсивные цифровые фильтры; спектральное разрешение.

Optimal parameters values minimizing the phase error of finite-difference schemes for non-stationary Schrodinger equation in the pre-defined spectral range are found. The obtained results are based on an equivalent representation of the θ -method in the form of family of one-parametric IIR-filters. Dependence of the optimal parameter value on the spectral resolution bandwidth is discovered and it is shown that the optimized discrete model is converged to the fourth order θ -method as the spectral resolution range tends to zero. It is shown also that the ratio of the spatial and temporal step sizes given by the optimized digital filtering scheme is optimal for the finite difference θ -method. The transfer function error estimates for the optimized discrete model are obtained. The obtained estimates provide with ability to evaluate the relative local error in the pre-defined spectral range. Efficiency of the optimized scheme is demonstrated by means of analysis of the spectral resolution of the considered discrete models. In particular, it is shown that the proposed optimization provides about fourfold improvement of the accuracy of the 4th order θ -method for non-stationary Schrodinger equation.

Key words: finite-difference schemes; non-stationary Schrodinger equation; infinite impulse response digital filters; spectral-like resolution.

Анализ амплитудно- и фазово-частотных характеристик разностных схем играет важную роль в построении эффективных дискретных моделей дифференциальных задач математической физики. В частности, наряду с традиционными в теории разностных схем оценками скорости сходимости [1] данные характеристики позволили выработать дополнительные критерии спектральной согласованности [2] и эвристические приемы ее коррекции в виде искусственной вязкости и искусственной дисперсии [3, 4]. Анализ согласованности разностных схем в терминах спектрального разрешения является более тонким инструментом, детализирующим структуру погрешности и не требующим при этом количественных оценок производных высшего порядка от искомого решения [2]. В связи с этим перспективным представляется использование достижений в области методов цифровой обработки сигналов для построения дискретных моделей с заданными спектральными свойствами.

В настоящей статье показано, что представление компактной разностной схемы повышенного порядка точности для нестационарного уравнения Шрёдингера в виде рекурсивного цифрового фильтра позволяет, во-первых, найти параметры схемы, отвечающие минимальной фазовой погрешности в заданном спектральном диапазоне, а во-вторых, получить оптимальное соотношение пространственно-временных шагов разностной схемы, минимизирующее вычислительные затраты для достижения заданной точности приближенного решения. Результаты численного анализа спектральных характеристик показывают существенные преимущества дискретной модели с оптимальными параметрами по сравнению с аналогичной разностной схемой повышенного порядка точности.

Постановка задачи

Рассмотрим нестационарное уравнение Шрёдингера

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in (-L, L), \quad (1)$$

с начальными и граничными условиями вида

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad u(-L, t) = u(L, t) = 0. \quad (2)$$

Двухслойная разностная схема с весами для задачи (1), (2) на равномерной сетке $\omega_x = \{x_k = hk, k = \overline{0, N}, h = 2L/N, t_m = m\tau, m = 0, 1, \dots\}$ имеет вид

$$i \frac{\widehat{U}_k - U_k}{\tau} = -\sigma \frac{\widehat{U}_{k+1} - 2\widehat{U}_k + \widehat{U}_{k-1}}{h^2} - (1-\sigma) \frac{U_{k+1} - 2U_k + U_{k-1}}{h^2}, \widehat{U}_0 = \widehat{U}_{N+1}, \quad (3)$$

где $U_k = U(x_k, t_m)$; $\widehat{U}_k = U(x_k, t_{m+1})$. При $\sigma = \sigma_0 = \frac{1}{2} + \frac{ih^2}{12\tau}$ разностная схема (3) имеет порядок точности $O(h^4 + \tau^2)$ [1, с. 186].

Отметим, что решение задачи (1), (2) на временном отрезке $[t, t + \tau]$ методом Фурье реализуется в частотной области путем покомпонентного умножения вектора коэффициентов Фурье решения $\psi(\omega_k) = F[u(x, t)]$, $k = \overline{-N/2, N/2 - 1}$, на вектор

$$H(\omega, \tau) = \left\{ H(\omega_k, \tau) = \exp(-i\tau\omega_k^2), k = \overline{-N/2, N/2 - 1}, \omega_k = \frac{\pi k}{L} \right\}; \quad (4)$$

$$u(x, t + \tau) = F^{-1} \left[H(\omega, \tau) F[u(x, t)] \right],$$

где $F[u(x, t)]$, $F^{-1}[\psi(\omega)]$ – прямое и обратное дискретное преобразование Фурье, а комплекснозначная вектор-функция $H(\omega, \tau)$ (см. (4)) может быть интерпретирована как передаточная функция соответствующего дискретного фазового фильтра.

Согласно теореме Найквиста – Котельникова [5] для спектрально ограниченных начальных данных, $U(|\omega_k| > \Omega/2) \equiv 0$, метод Фурье позволяет получить точное решение дифференциальной задачи (1), (2) с использованием конечного числа спектральных компонент на равномерной сетке с шагом $h \leq 2\pi/\Omega$.

Аналогично может быть получено спектральное представление решения разностной задачи (3). Передаточная функция в данном случае будет иметь вид [1, с. 168]

$$H_h(\omega_k h, \tau) = \frac{i + (1-\sigma)\tau\lambda_k}{i - \tau\sigma\lambda_k}, \quad \lambda_k = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{h\omega_k}{2}, \quad k = \overline{-N/2, N/2 - 1}. \quad (5)$$

Как показано в работе [6], существует альтернативное представление дискретной модели (3) дифференциального уравнения Шрёдингера (1) в виде пары сопряженных рекурсивных цифровых фильтров первого порядка:

$$U(x_k, t + \tau/2) = pU(x_k, t) - iU(x_{k-1}, t) + ipU(x_{k-1}, t + \tau/2); \quad (6)$$

$$U(x_k, t + \tau) = pU(x_k, t + \tau/2) - iU(x_{k+1}, t + \tau/2) + ipU(x_{k+1}, t + \tau), \quad (7)$$

где $k = \overline{1, N - 1}$. Исключая из однопараметрической дискретной модели (6), (7) решение на промежуточном полушаге $U(x_k, t + \tau/2)$, несложно получить условия эквивалентности данной схемы и разностной схемы с весами (3). В частности, если параметры схемы (3) определить следующим образом:

$$\sigma = 0,5 + \frac{ip}{(1-p^2)}, \quad \tau = \tau_0(p) = 2h^2 p \frac{(1-p^2)}{(1+p^2)^2}, \quad p = p_0 = \sqrt{6} - \sqrt{5}, \quad (8)$$

то решение разностной задачи (3) с точностью до постоянного фазового множителя $\zeta = (1+ip)^2(1-ip)^{-2}$ совпадает с решением дискретной модели (6), (7) [6]. Передаточная функция последовательности фильтров (6), (7) с учетом корректирующего фазового множителя ζ имеет вид

$$H_F(\omega_k h, p) = \zeta^{-1} \frac{1 - p^2 + 2ip \cos(\omega_k h)}{1 - p^2 - 2ip \cos(\omega_k h)}. \quad (9)$$

Следует отметить, что для полной эквивалентности дискретных моделей (3), (6)–(8) необходимо исключить влияние краевых условий на решение задачи путем выбора достаточно большой ширины пространственной области, определяемой постоянной L .

Несложно убедиться в том, что если $\text{Re}(\sigma) = 1/2$, $\text{Im}(p) = 0$,

то

$$|H(\omega)| = |H_h(\omega_k h)| = |H_F(\omega_k h)| = 1. \quad (10)$$

Следствием тождества (10) является консервативность разностной схемы (3) и схемы цифровой фильтрации [7, 8]. Кроме того, несложно показать, что решение в частотной области на произвольном отрезке по времени длиной $\Delta t = k\tau$ находится с помощью передаточной функции на шаге τ :

$$u(x, t + \Delta t) = F^{-1} \left[(H(\omega, \tau))^k F[u(x, t)] \right].$$

Ошибка консервативных методов (3), (6), (7) имеет фазовый характер:

$$\arg \{H(\omega, \tau)\} \neq \arg \{H_h(\omega_k h, \tau)\}, \quad \arg \{H(\omega, \tau)\} \neq \arg \{H_F(\omega_k h, \tau)\}.$$

Погрешность метода с приближенной передаточной функцией, например $H_h(\omega, \Delta t)$, определяется следующим соотношением:

$$\delta(x, t + \Delta t) = U(x, t + \Delta t) - u(x, t + \Delta t) = F^{-1} \left[\left[(H_h(\omega, \tau))^k - (H(\omega, \tau))^k \right] F[u(x, t)] \right],$$

откуда

$$\frac{F[\delta(x, t + \Delta t)]}{F[u(x, t)]} = (H_h(\omega, \tau))^k - (H(\omega, \tau))^k, \quad (11)$$

т. е. погрешность передаточной функции ассоциируется с относительной погрешностью метода в спектральной области.

Для оптимизации параметров дискретной модели (3) сначала рассмотрим однопараметрическую модель (6), (7) в виде рекурсивных цифровых фильтров. Затем, основываясь на условии эквивалентности (8), покажем, что оптимальные параметры модели (6), (7) обеспечивают наилучшие спектральные характеристики компактной разностной схемы (3).

Спектральное разрешение схемы цифровой фильтрации

В качестве критерия оптимальности параметров дискретной модели исследуем условие минимума погрешности переходной функции в заданном спектральном диапазоне. Рассмотрим среднеквадратичную погрешность функции передачи (9) схемы цифровой фильтрации (6), (7) на отрезке по времени длиной $\Delta t = \tau_0(p_0)$:

$$\|\delta(\Omega, p)\| = \sqrt{\frac{1}{2\Omega} \int_{-\Omega}^{\Omega} (H(\omega, \tau_0) - H_F^{\theta}(\omega, p))^2 d\omega}, \quad 0 < \Omega < \pi,$$

где $\theta = \tau_0(p_0)/\tau_0(p)$; $\omega = \omega_k h$ – циклическая частота, нормированная на частоту дискретизации $f_h = 1/h$; значение Ω/π определяет относительный частотный диапазон, в котором вычисляется погрешность дискретной модели. Предельные значения частотного диапазона $\omega = \pm\pi$ соответствуют частоте Найквиста: $f_N = f_h/2$. С учетом (11) несложно заметить, что величина $\|\delta(\Omega, p)\|$ численно равна относительной среднеквадратичной погрешности приближенного решения, имеющего симметричную относительно нулевой частоты прямоугольную форму спектра шириной 2Ω , на отрезке численного интегрирования по времени длиной Δt .

Задача оптимизации параметров дискретной модели (6), (7) может быть сформулирована в терминах спектрального разрешения [2]. А именно, определим значения параметра p , обеспечивающего минимум относительной погрешности $\|\delta(\Omega, p)\|$ в заданном частотном диапазоне $0 < \Omega \leq \pi/2$.

Результаты численного анализа спектральных характеристик дискретной модели (6), (7) приведены на рис. 1. Непрерывными линиями на рисунке изображены зависимости нормы погрешности переходной функции $H_F(\omega, p)$ от параметра p для различных спектральных диапазонов шириной от $\Omega/\pi = 1/16$ до $\Omega/\pi = 1/4$. Штриховыми линиями представлены аналогичные характеристики схемы (3), для которой с учетом условий эквивалентности (8) переходная функция имеет вид $H_h(\omega, \Delta t) = H_F(\omega, p_0)$.

Приведенные на рис. 1 результаты позволяют констатировать следующее.

Утверждение. Существует единственное оптимальное значение параметра $p = p_{\text{opt}}(\Omega) \geq p_0$, обеспечивающее минимум погрешности передаточной функции $H_F(\omega, p)$ для схемы цифровой фильтрации (6), (7) в заданном спектральном диапазоне $-\Omega \leq \omega \leq \Omega$, $0 < \Omega < \pi/4$.

Следствие. Спектральное разрешение компактной разностной схемы с весами может быть улучшено в диапазоне $-\pi/4 < \omega \leq \pi/4$ по сравнению со схемой четвертого порядка точности (3) путем задания ее параметров согласно выражениям (8), $p_0 < p < 0,225$. Экспериментальные подтверждения такой возможности продемонстрированы в работе [6].

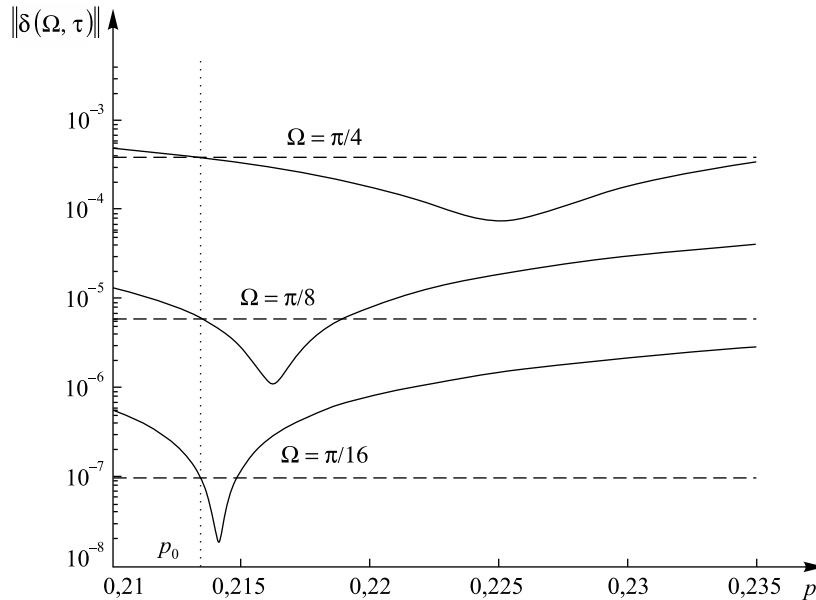


Рис. 1. Зависимости нормы погрешности передаточной функции схемы цифровой фильтрации (6), (7) от параметра p для разной ширины спектрального диапазона. Штриховые линии соответствуют $p = p_0$ и набору параметров (8), отвечающему схеме четвертого порядка точности (3)

Отметим, что среднеквадратичная норма погрешности переходной функции $H_F^{\theta}(\omega, p_{\text{opt}})$ приблизительно в четыре раза меньше, чем соответствующая норма погрешности переходной функции $H_F(\omega, p_0) = H_h(\omega, \tau_0)$, отвечающей схеме четвертого порядка точности (3) с параметрами (8). Примечательно также, что при уменьшении диапазона спектрального разрешения оптимальное значение параметра p , обеспечивающее минимум погрешности фазово-частотных характеристик, стремится к значению p_0 , соответствующему схеме четвертого порядка точности. Это говорит о том, что схема четвертого порядка точности оптимальна при расчете решения с бесконечно узким спектром в окрестности нулевой частоты. Поскольку на практике приходится сталкиваться с решениями, имеющими конечную ширину спектра, то параметр p следует выбирать с учетом обеспечения соответствующего диапазона спектрального разрешения.

Выбор оптимального соотношения шагов сетки

В отличие от однопараметрической схемы цифровой фильтрации (6), (7) разностная схема (3) имеет дополнительный свободный параметр τ . Отметим, что в схеме (6), (7) значение шага τ определяется величиной параметра p согласно выражению (8), при этом $\tau = O(h^2)$. Для определения оптимального соотношения шагов сетки рассмотрим зависимость нормы погрешности передаточной функции $H_h(\omega, \tau)$ от шага τ для фиксированного отрезка по времени $\Delta t = \tau_0(p_{\text{opt}})$:

$$\|\delta(\Omega, \tau)\| = \sqrt{\frac{1}{2\Omega} \int_{-\Omega}^{\Omega} (H(\omega, \tau_0) - H_h^{\theta}(\omega, \tau))^2 d\omega}, \quad \theta = \tau_0(p_{\text{opt}}(\Omega))/\tau.$$

Зависимость погрешности передаточной функции (5) для схемы (3) с весом $\sigma = 0,5 + i \frac{\theta p_{\text{opt}}}{1 - p_{\text{opt}}^2}$ от шага по времени в диапазоне $\tau_0(p_{\text{opt}})/10 \leq \tau \leq 5\tau_0(p_{\text{opt}})$ представлена на рис. 2 сплошными линиями. На том же графике штриховыми линиями изображена норма погрешности передаточной функции (5), которая при $\sigma = 0,5 + i \frac{h^2}{12\tau}$ характеризует погрешность схемы четвертого порядка точности.

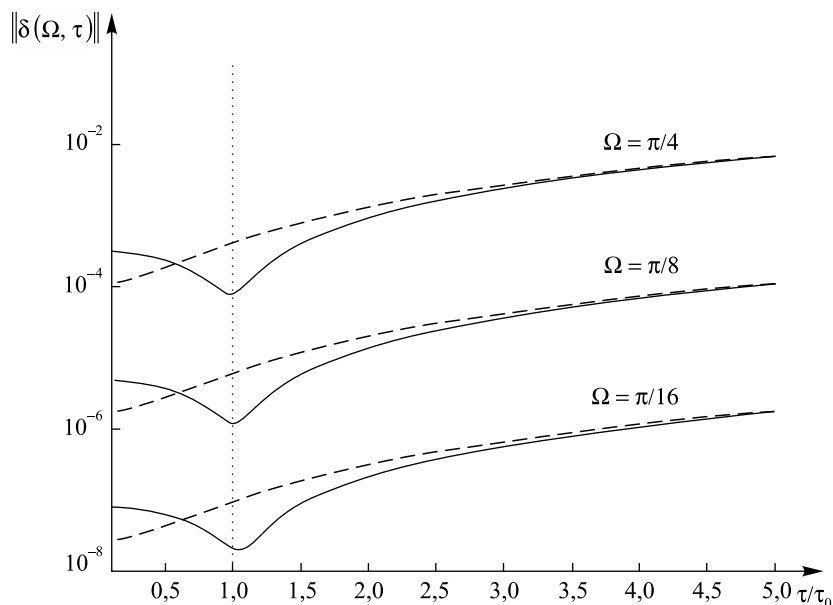


Рис. 2. Зависимость от τ нормы погрешности передаточной функции компактной разностной схемы спектрального разрешения (3) с параметрами (8), $p = p_{\text{opt}}(\Omega)$ (сплошные линии) и $p = p_0$ (штриховые линии)

Из рисунка видно, что почти во всем диапазоне изменения шага τ схема цифровой фильтрации с оптимальным параметром $p = p_{\text{opt}}(\Omega)$ обеспечивает меньшую погрешность передаточной функции по сравнению со схемой четвертого порядка точности. Более того, минимум нормы погрешности достигается при соотношении шагов, определяемом схемой цифровой фильтрации с оптимальным параметром $p = p_{\text{opt}}(\Omega)$.

Таким образом, из представленных результатов следует, что соотношение на шаги сетки

$$\tau = \tau(p) = 2h^2 p \frac{(1 - p^2)}{(1 + p^2)^2}, \quad p = p_{\text{opt}}(\Omega),$$

которое определяет схема цифровой фильтрации (6), (7), является оптимальным с точки зрения минимизации погрешности передаточной функции в заданном спектральном диапазоне.

Результаты оценки спектрального разрешения схемы с весами, оптимизированной на основе методов цифровой обработки сигналов, могут быть использованы для построения алгоритмов выбора шагов сетки, обеспечивающих заданные границы погрешности разностного решения для уравнений шрёдингеровского типа. Необходимая информация для расчета параметров дискретизации состоит в оценке ширины спектра приближенного решения задачи, что всегда доступно на основе фурье-преобразования.

Полученные оценки погрешности передаточных функций дискретных моделей дают достаточно точное представление о локальной относительной ошибке метода на одном шаге по времени, когда спектр решения близок к прямоугольному. Полученные оценки могут быть адаптированы для произвольной конфигурации амплитудного спектра решения путем использования соответствующих весовых функций при построении нормы для оценки погрешности передаточной функции. Сопоставляя погрешность передаточной функции в спектральном диапазоне искомого решения с требованиями

точности, несложно определить необходимое спектральное разрешение дискретной модели, т. е. величину пространственного шага h . Шаг по времени при этом автоматически получается из установленного выше оптимального соотношения шагов (8). Рассмотренная в работе схема цифровой фильтрации (6), (7) по эффективности превосходит известный аналог [9, 10] и может быть использована в методе дробных шагов для численного анализа нелинейных задач.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Самарский А. А. Теория разностных схем. М., 1989.
2. Lele S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution // J. of Computational Phys. 1992. Т. 103, № 1. С. 16–42.
3. Мухин С. И., Попов С. Ю., Попов Ю. П. О разностных схемах с искусственной дисперсией // ЖВМ и МФ. 1983. Т. 23, № 6. С. 1355–1369.
4. Мухин С. И., Попов С. Ю., Попов Ю. П. Исследование внутренних диссипативных и дисперсионных свойств разностных схем // Актуальные проблемы математической физики и вычислительной математики : сб. ст. М., 1984. С. 134–144.
5. Басараб М. А., Зелкин Е. Г., Кравченко В. Ф., Яковлев В. П. Цифровая обработка сигналов на основе теоремы Уиттекера – Котельникова – Шеннона. М., 2004.
6. Волков В. М., Циунчик А. С. Метод дробных шагов с использованием рекурсивных цифровых фильтров для решения нелинейных уравнений Шредингера // Докл. НАН Беларуси. 2009. Т. 53, № 5. С. 22–25.
7. Карамзин Ю. Н., Сухоруков А. П., Трофимов В. А. Математическое моделирование в нелинейной оптике. М., 1989.
8. Волков В. М., Мацука Н. П. О консервативности, точности и асимптотических свойствах численных методов для нелинейных уравнений шредингеровского типа // Дифференц. уравнения. 2000. Т. 36, № 7. С. 930–938.
9. Plura M., Kissing J., Gunkel M., Lenge J., Elbers J. P., Glingener C., Voges E. Improved split-step method for efficient fiber simulations // Electronics Letters. 2001. Vol. 37, № 5. P. 286–287.
10. Carena A., Curri V., Gaudino R., Poggiolini P., Benedetto S. A time-domain optical transmission system simulation package accounting for nonlinear and polarization-related effects in fiber // IEEE J. selected areas in communications. 1997. Vol. 15, № 4. P. 751–765.

Поступила в редакцию 06.04.2015.

Василий Михайлович Волков – доктор физико-математических наук, профессор кафедры веб-технологий и компьютерного моделирования физического факультета БГУ.

Алексей Николаевич Гуревский – аспирант кафедры веб-технологий и компьютерного моделирования физического факультета БГУ. Научный руководитель – В. М. Волков.

Ирина Владимировна Жукова – аспирант кафедры веб-технологий и компьютерного моделирования физического факультета БГУ. Научный руководитель – В. М. Волков.

УДК 33:517.925

Б. С. КАЛИТИН

КЛАССИФИКАЦИЯ И УСТОЙЧИВОСТЬ РЫНКА ТРЕХ ТОВАРОВ

Представлена классификация типов рынков трех благ. Исследуется устойчивость экономического равновесия математической модели рынка трех товаров или услуг (a, b, c) , где пары взаимодополняющих благ (a, b) и (b, c) являются взаимозаменяемыми парами товаров по отношению друг к другу. Модель такой экономики представлена в виде системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений относительно вектора цен. Конструкция модели основывается на понятии экономических сил продавцов, покупателей и государства. Используются функциональные выражения таких сил с учетом экономических законов товарного рынка. В модели предполагается, что объем продаж есть функция цены, зависящая от параметров эластичностей, и модель обладает экономическим равновесием. Исследована задача об устойчивости в основном и в критическом случаях одного нулевого корня. Получены достаточные условия устойчивого развития рынка и дан анализ устойчивых многообразий.

Ключевые слова: рынок; классификация; динамическая модель; экономическое равновесие; устойчивость.

In this paper, we present a classification of types of the markets three products. The stability of economic equilibrium of mathematical model of the three good market or services (a, b, c) is investigated, where the two pairs of complementary goods (a, b) and (b, c) are interchangeable. An economy model a system of nonlinear ordinary differential equations with respect to a price vector is presented as. The construction of the model is based on the notion of economic forces by sellers, buyers and government. We use the functional expression of such force, taking into account the economic laws of the good market. The model assumes that the volume of sales is a function of price, which depends on the elasticity parameters, and economic system has equilibrium. The problem of the stability in the principal case and in the critical case of one zero root is investigated. Sufficient conditions for sustainable development of the market are obtained and the analysis of stable manifolds is given.

Key words: market; classification; dynamic model; economic equilibrium; stability.

Классификация

В работах [1–4] изучаются экономико-математические модели рынков трех товаров и услуг относительно вектора цен. При этом в [1] модель строится на основе идеи Л. Вальраса [5], а в работах [2–4] – на базе идеи, представленной в [6]. Опираясь на эти исследования, можно дать классификацию рынка