СПЕКТРАЛЬНОЕ РАЗРЕШЕНИЕ МЕТОДА ПРИБЛИЖЕННОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ МАТРИЧНОЙ ЭКСПОНЕНТЫ ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Дедков Д. Ю., Рыжиков Ф. Ю., Егоров А. А., Волков В. М.

БГУ, Минск, Беларусь, e-mail: volkovvm@bsu.by

Спектральные характеристики дискретных моделей уравнений математической физики содержат важную информацию относительно их согласованности с соответствующей дифференциальной задачей. Анализ спектрального разрешения позволяет получить более полную картину структуры погрешности численного метода и конструктивно влиять на ее количественные и качественные показатели.

Рассмотрены различные варианты метода приближенной факторизации матричной экспоненты, применяемые для построения явных, безусловно-устойчивых численных методов решения нестационарного уравнения Шредингера [1]. Получены аналитические выражения амплитудно- и фазово-частотных характеристик, ассоциируемых со свойствами консервативности и дисперсионными свойствами дискретной модели. Данные выражения позволяют точно вычислить амплитудную и фазовую погрешности приближенного решения и показывают условный характер аппроксимации рассматриваемого класса методов. Кроме того, для стандартных схем расщепления данные характеристики несимметричны, что объясняет качественные искажения приближенного решения при возрастании шага по эволюционной переменной. Показано, что использование аддитивно-усредненной схемы в разложении матричной экспоненты не только устраняет асимметричность спектральных характеристик, но и существенно снижает амплитудную и фазовую погрешности метода.

Приближение матричной экспоненты, выступающей в качестве эволюционного оператора на одном шаге по времени при решении нестационарного уравнения Шредингера, имеет вид ленточной матрицы, ширина ленты которой зависит от выбранного приближения. Схема решения задачи сводится к умножению данной матрицы на вектор приближенного решения при переходе с одного временного слоя на другой. Показана эффективность параллельной реализации метода с использованием технологии распараллеливания вычислений на графическом процессоре современной ЭВМ. Проанализированы возможности использования рассмотренного класса алгоритмов для решения нелинейных задач и задач с переменными коэффициентами, включая случай неравномерных сеток, когда строгий анализ спектральных характеристик невозможен.

Работа частично поддержана БРФФИ (грант Ф10Р-103).

Литература

1. De Raedt H. Product formula algorithms for solving the time dependent Schrödinger equation// Computer Physics reports. V. 7. 1987. pp. 1-72