

УДК 519.63

В.М. ВОЛКОВ, Д.Ю. ДЕДКОВ

ОЦЕНКА СКОРОСТИ СХОДИМОСТИ ЯВНОГО ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА НА ОСНОВЕ ПРИБЛИЖЕННОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ МАТРИЧНОЙ ЭКСПОНЕНТЫ ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Convergence conditions and convergence rate estimates of explicit unconditionally stable methods based on the approximate matrix exponential factorization for the time dependent Schrodinger equation are obtained. Correctness of the theoretical estimates is confirmed by the results of numerical experiments.

Уравнения шредингеровского типа имеют широкий спектр приложений, связанных с моделированием линейных и нелинейных волновых процессов различной физической природы [1]. С точки зрения численного анализа нестационарное уравнение Шредингера отличается от других задач математической физики тем, что для него отсутствуют условно устойчивые алгоритмы в классе двухслойных разностных схем [2]. Как следствие, не существует явных двухслойных схем полной аппроксимации, устойчивых при сколь-нибудь разумных соотношениях на шаги сетки вида $\tau = O(h_2)$. В силу отмеченных причин для численного анализа уравнений шредингеровского типа в различных приложениях используются преимущественно неявные методы, среди которых наибольшее предпочтение отдается консервативным симметричным разностным схемам, сохраняющим инвариантность квадратичной нормы решения (см., например, [3]).

В данной работе рассмотрен один из примеров явных, безусловно устойчивых алгоритмов для уравнения Шредингера, основанных на методе приближенной факторизации матричной экспоненты с применением схемы дробных шагов [4–6]. Исследованы вопросы сходимости метода и получены оценки погрешности, показывающие наличие условной аппроксимации схем данного класса. Приведены результаты численных экспериментов, подтверждающие корректность полученных оценок.

Постановка задачи. Метод разложения матричной экспоненты. Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера

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

с начальными и граничными условиями вида

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

Проводя дискретизацию уравнения (1) по пространственной переменной на равномерной сетке $\omega_x = \{x_k = hk, k = \overline{0, N}, h = 2L / N\}$, мы приходим к следующей задаче, в которой дифференциальный оператор аппроксимируется разностным:

$$\frac{dU}{dt} = iAU, U = (u_1, u_2, \dots, u_{N-1})^T, \quad u_k = u(x_k, t), \quad A \in C^{(N-1) \times (N-1)}. \quad (3)$$

При использовании стандартной трехточечной аппроксимации дифференциального оператора матрица системы уравнений (3) представляет собой трехдиагональную матрицу с элементами $a_{k,k\pm 1} = \frac{1}{h^2} = b, \quad a_{k,k} = -\frac{2}{h^2} = 2a$.

Решение задачи (3) на произвольном отрезке $t \in [0, T], \quad T = n\tau$, может быть формально представлено в виде

$$U(T) = \exp(in\tau A)U(0) = X^n U(0), \quad (4)$$

где $X = \exp(i\tau A)$ – матричная экспонента.

Непосредственное вычисление матричной экспоненты от трехдиагональной матрицы приводит к матрице полной структуры, и вычислительная сложность одного шага по времени в схеме (4) имеет квадратичный рост по отношению к количеству узлов пространственной сетки. Использование в схеме (4) алгоритма быстрого дискретного преобразования Фурье, приводящего матрицу дифференцирования A к диагональному виду, позволяет понизить вычислительную сложность данной схемы от $O(N^2)$ до $O(N \log_2 N)$. Более экономичный (и одновременно более универсальный) способ реализации схемы (4) состоит в приближенной факторизации матричной экспоненты на основе аддитивного представления матрицы разностного дифференцирования в виде суммы двух блочно-диагональных матриц [3–5]:

$$A = A_e + A_o, \quad A_e = \begin{pmatrix} a & b & \dots & 0 & \dots \\ b & a & \dots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \dots & 0 & \dots & a & b \\ \dots & 0 & \dots & b & a \end{pmatrix}, \quad A_o = \begin{pmatrix} a & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & a & b & 0 & \dots \\ 0 & b & a & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & a \end{pmatrix}.$$

В данном случае вычисление матричных экспонент с аргументами A_e и A_o сводится к вычислению матричной экспоненты от отдельных диагональных блоков $E = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$:

$$\exp(\tau E) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \exp(i\tau(a+b)) + \exp(i\tau(a-b)) & \exp(i\tau(a+b)) - \exp(i\tau(a-b)) \\ \exp(i\tau(a+b)) - \exp(i\tau(a-b)) & \exp(i\tau(a+b)) + \exp(i\tau(a-b)) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Принимая во внимание, что для произвольных матриц A, B и достаточно малого τ

$$\exp(\tau(A+B)) = \exp(\tau A) \exp(\tau B) + O(\tau^2(AB-BA)), \quad (6)$$

могут быть получены следующие приближенные представления [4]:

$$\exp(i\tau A) = \exp(i\tau A_e) \exp(i\tau A_o) + O(\tau^2), \quad (7)$$

$$\exp(i\tau A) = \exp\left(\frac{i\tau}{2} A_e\right) \exp(i\tau A_o) \exp\left(\frac{i\tau}{2} A_e\right) + O(\tau^3), \quad (8)$$

$$\exp(\tau A) = \exp\left(\frac{i\tau}{4} A_o\right) \exp\left(\frac{i\tau}{2} A_e\right) \exp\left(\frac{i\tau}{2} A_o\right) \exp\left(\frac{i\tau}{2} A_e\right) \exp\left(\frac{i\tau}{4} A_o\right) + O(\tau^4). \quad (9)$$

Выражения (7) – (9) соответствуют приближениям матричной экспоненты второго, третьего и четвертого порядков точности относительно малого параметра τ . Использование данных выражений в схеме (4) для расчета приближенного решения на конечном отрезке по времени с достаточно малым шагом τ позволяет достичь первого, второго или третьего порядков точности приближенного реше-

ния соответственно. Приближенная факторизация матричной экспоненты дает возможность при некоторой потере точности получить экономичный, безусловно устойчивый алгоритм явного типа, в котором вычисление неизвестного решения на новом слое по времени осуществляется путем умножения вектора решения с нижнего слоя на ленточную матрицу перехода [4–6]. Ширина ленты матрицы перехода в приближенных представлениях матричной экспоненты (7) – (9) варьируется от четырех до восьми ненулевых элементов, увеличиваясь на две дополнительные ненулевые диагонали при достижении очередного порядка точности.

Оценка точности метода разложения матричной экспоненты. В работах [4–6] при анализе точности метода приближенной факторизации матричной экспоненты не учитывалась структура компонент аддитивного представления аргумента. Как следствие, все известные к настоящему времени результаты оценки точности рассматриваемого семейства схем базируются на известных формулах умножения матричных экспонент [4], которые учитывают зависимость погрешности решения только от шага дискретизации по времени. Следует подчеркнуть, что погрешность приближенной факторизации матричной экспоненты (см., например, [4, 5]) пропорциональна коммутатору компонент аддитивного представления аргумента $[A_e, A_o] = A_e A_o - A_o A_e$. Непосредственные вычисления позволяют оценить норму данного коммутатора $\|[A_e, A_o]\|_\infty = O(h^{-4})$. В силу этого, несмотря на безусловную устойчивость, следует ожидать наличия условной сходимости схемы расщепления матричной экспоненты.

Исследуем детально сходимость схемы расщепления (4) с использованием разложения матричной экспоненты (8):

$$\bar{U}(n\tau) = \left(\exp\left(\frac{i\tau}{2} A_e\right) \exp(i\tau A_o) \exp\left(\frac{i\tau}{2} A_e\right) \right)^n \bar{U}(0) = \bar{X}^n \bar{U}(0), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (10)$$

Теорема. *Схема приближенной факторизации матричной экспоненты*

$$\bar{U}(n\tau) = \left(\exp\left(\frac{i\tau}{2} A_e\right) \exp(i\tau A_o) \exp\left(\frac{i\tau}{2} A_e\right) \right)^n \bar{U}(0) = \bar{X}^n \bar{U}(0)$$

при $\tau = o(h^{5/2})$ сходится к достаточно гладкому решению дифференциальной задачи и для погрешности приближенного решения выполняется оценка

$$\|\delta(T)\| = \|u(T) - \bar{U}(T)\| \leq C(\tau^2 h^{-5} + h^2), \quad (11)$$

где C – положительная постоянная, не зависящая от шагов сетки, $\|\delta\| = \sqrt{(\delta, \delta)}$.

Доказательство. Отметим, что метод матричной экспоненты (4) дает приближенное решение дифференциальной задачи (1), (2) с точностью $\|U - u\| = O(h^2)$. Погрешность данного метода определяется исключительно погрешностью аппроксимации пространственной производной.

Разлагая матричные экспоненты $\exp(i\tau A)$, $\exp(i\tau A_e/2)$, $\exp(\tau A_o)$ в степенной ряд, несложно оценить главный член погрешности (10) на одном шаге по времени:

$$\exp(i\tau A) = \exp\left(\frac{i\tau A_e}{2}\right) \exp(i\tau A_o) \exp\left(\frac{i\tau A_e}{2}\right) - \frac{i\tau^3}{12} [A_e, A_o] \left(A_o + \frac{A_e}{2}\right) + O(\tau^4). \quad (12)$$

Величина коммутатора в выражении (12) может быть оценена путем непосредственных вычислений соответствующих матричных произведений. В частности, строки матрицы данного коммутатора, за исключением трех первых и последних, имеют вид

$$a_{k,m} = h^{-6} [\dots, a_{k,k-3}, 0, a_{k,k-1}, 0, a_{k,k+1}, 0, a_{k,k+3}, \dots], \quad \sum_{m=1}^N a_{k,m} = 0.$$

Ненулевые компоненты строк матрицы коммутатора могут принимать следующие значения:

$$a_{2k,2k-3} = -1, a_{2k,2k-1} = -2, a_{2k,2k+1} = 1, a_{2k,2k+3} = 2 \quad \text{или} \\ a_{2k+1,2k-2} = 2, a_{2k+1,2k} = 1, a_{2k+1,k+2} = -2, a_{2k+1,k+4} = -1, \quad k = \overline{2, N/2-2}.$$

Структура матрицы коммутатора позволяет ассоциировать ее с некоторым оператором разностной производной первого порядка на шеститочечном шаблоне. В итоге имеем

$$\left[[A_e, A_o] \left(A_o + \frac{A_e}{2} \right) \right] u = 12 \frac{\partial u}{\partial x} h^{-5} + O(h^{-4}).$$

Подставляя полученные оценки погрешности приближенной факторизации матричной экспоненты в (10) и вычисляя норму погрешности приближенного решения на одном шаге по времени, получаем оценку

$$\|U(t+\tau) - \bar{U}(t+\tau)\| \leq \|U(t) - \bar{U}(t)\| + \tau \left(\frac{\tau^2 2L}{h^5} \max_x \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| + O(\tau^2 h^{-4}) \right). \quad (13)$$

Учитывая безусловную устойчивость метода (10) и используя рекуррентно оценку (13) для последовательности шагов на конечном отрезке по времени $t \in [0, T]$, а также принимая во внимание то, что

$$\|U - u\| = O(h^2), \text{ приходим к оценке (11), где } C = 2LT \max_{x,t} \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|.$$

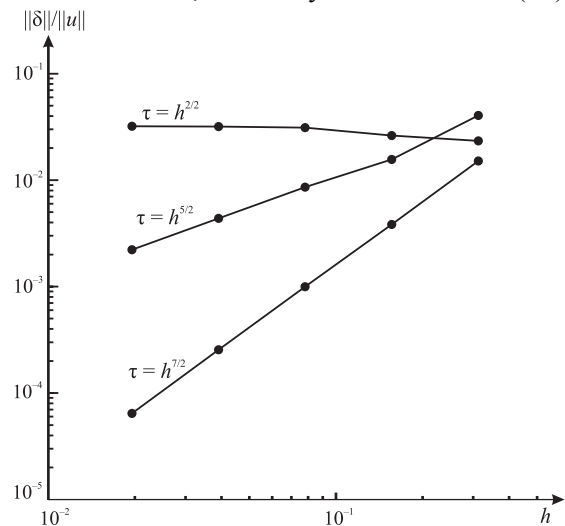
Следствие. Метод приближенной факторизации матричной экспоненты (10) достигает точности $O(h^2)$ при $\tau = O(h^{7/2})$.

Аналогично может быть доказана сходимость метода при использовании приближенной факторизации матричной экспоненты (7) и (9). Условия и скорость сходимости в этих случаях определяются требованием $\tau = o(h^3)$ и $\tau = o(h^{7/3})$ соответственно.

Результаты численного эксперимента. Для оценки фактической эффективности рассмотренного метода исследуем поведение погрешности схемы факторизации матричной экспоненты при различных соотношениях шагов сетки. В качестве примера рассмотрим решение задачи (1), (2) с начальными условиями в виде гауссовой функции $u_0(x) = \exp(-x^2)$, точное решение которой известно [1].

На рисунке представлена динамика относительной погрешности приближенного решения при уменьшении шага h , $T = 0,2$. Представленные результаты показывают, что полученная оценка (11) скорости сходимости метода (4), (7) близка к оптимальной. В частности, при соотношении шагов сетки $\tau = O(h^2)$ погрешность приближенного решения не убывает, когда $h \rightarrow 0$. Это подтверждает факт условной сходимости данного метода, хотя приведенные в теореме условия сходимости носят скорее достаточный характер, поскольку в конкретных случаях сходимость может достигаться и при $\tau = O(h^{5/2})$. При $\tau = O(h^{7/2})$ численный пример подтверждает сходимость метода со скоростью порядка $O(h^2)$. Использование более жестких соотношений на шаги сетки вида $\tau = h^\alpha$, $\alpha > 7/2$, как и следовало ожидать, не дает ускорения сходимости, поскольку при этом доминирует погрешность, связанная с дискретизацией пространственной производной.

Полученные оценки скорости сходимости метода приближенной факторизации матричной экспоненты и результаты численных экспериментов показывают условный характер аппроксимации данного семейства



Динамика относительной погрешности метода (4), (7) при различных соотношениях шагов сетки

схем на решении рассмотренного класса задач для нестационарного уравнения Шредингера. Несмотря на жесткость условия сходимости схемы второго порядка точности, оно существенно слабее аналогичного условия для стандартной явной двухслойной схемы, устойчивость которой требует $\tau \leq ch^4$ [2].

Привлекательность рассмотренного метода связана с тем, что он явный и в силу этого имеет существенные преимущества по сравнению с неявными аналогами при параллельной реализации. В качестве одной из перспективных областей приложений метода приближенной факторизации можно отметить возможность использования данного подхода в методе дробных шагов для реализации линейной части нелинейных уравнений шредингеровского типа (см., например, [7]). В частности, жесткость условий сходимости рассмотренного метода приближенной факторизации в случае существенного преобладания нелинейных эффектов может быть сопоставима с требованиями малости шага, обеспечивающими точность решения нелинейной части задачи и всего метода дробных шагов в целом.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (грант Ф10Р-103).

1. Виноградова М.Б., Руденко О.В., Сухоруков А.П. Теория волн. М., 1990.
2. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., 1989.

3. Карамзин Ю.Н., Сухоруков А.П., Трофимов В.А. Математическое моделирование в нелинейной оптике. М., 1989.
4. De Raedt H. // Computer Physics reports. 1987. Vol. 7. P. 1.
5. De Raedt H., Michielsen K. // Computers in Physics. 1994. Vol. 8. P. 600.
6. Watanabe N., Tsukada M. // Phys. Rev. E62. 2000. P. 2914.
7. Ando T., Fujimoto M. // Phys. Rev. E72. 2005. 026706.

Поступила в редакцию 01.07.11.

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

Даниил Юрьевич Дедков – аспирант кафедры веб-технологий и компьютерного моделирования. Научный руководитель – В.М. Волков.

$$\begin{aligned}
 & - \int_{\geq 0}^{\infty} \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x+Y} - \frac{1}{x+Y^2} + \dots \right)^{Y-1} \xi \\
 & \quad \xi \\
 & \quad X \quad t \geq \\
 & \quad n. n. \\
 & \quad 0
 \end{aligned}$$

$$s \cdot t \quad s \sim \quad (\quad , \quad , \quad , \quad). \quad s$$

$$x \quad C \left[\frac{e^{-Mx}}{x^{+Y}} 1_{x>0} + \frac{e^{-||}}{|^{1+Y}} 1_{x<0} \right],$$

$$_A y = \left\{ \begin{array}{l} y \quad A, \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned}
 & F \\
 & k \\
 & = \quad - \quad (\quad ^{1/k} \quad - \quad k
 \end{aligned}$$