Компактная диссипативная схема для нелинейного уравнения Шредингера*

В. И. Паасонен, М. П. Федорук
Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия
Новосибирский государственный университет, Россия
e-mail: paas@ict.nsc.ru, mife@ict.nsc.ru

Для нелинейного уравнения Шредингера построена компактная разностная схема четвертого порядка точности по временной переменной. Кроме того, для компактной разностной схемы разработан механизм регулируемой диссипации. В серии численных экспериментов показано ее существенное преимущество в точности в сравнении с диссипативным аналогом схемы Кранка — Николсон.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, компактная разностная схема, диссипативная схема, повышенный порядок точности, нелинейная волоконная оптика, волоконный лазер, волоконно-оптическая линия связи.

1. Постановка задачи

Рассматривается задача Дирихле или периодическая начально-краевая задача для одномерного нелинейного уравнения Шредингера [1, 2]

$$i\frac{\partial A}{\partial z} = \frac{b}{2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - sf, \quad f = |A|^2 A$$

с комплексной искомой функцией A, зависящей от циклической переменной z и времени t. В левой части i — мнимая единица, коэффициенты b и s в правой части вещественны.

Данное уравнение является основным уравнением нелинейной волоконной оптики и активно используется, например, для математического моделирования волоконно-оптических линий связи, волоконных лазеров, различных оптических устройств [2, 3]. В настоящее время для численного решения этого уравнения, как правило, используется метод расщепления по физическим процессам (см., например, [2]). Этот метод позволяет получить приближенное решение в предположении, что при распространении оптического сигнала на малое расстояние q по эволюционной переменной z нелинейность и дисперсия действуют независимо. Относительно большая скорость реализации данного алгоритма ($\sim N_t \log_2 N_t$, где N_t — количество точек по временной переменной) по сравнению с большинством методов конечных разностей связана с использованием алгоритма быстрого преобразования Фурье (БПФ) для решения линейной части

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Гос. контракт № 02.740.11.5129), РФФИ (грант № 11-01-00294-а) и Правительства РФ для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых (грант № 11.G34.31.0035).

исходного уравнения. Однако для адекватного численного решения задач в области волоконно-оптических линий связи или волоконных лазеров типичное число точек по временной переменной может составлять $N_t = 10^6 - 10^7$, что приводит к огромным затратам машинного времени и к невозможности решения подобных задач даже на самых мощных персональных компьютерах. Единственным реальным путем расчета этих задач является параллельная реализация численных алгоритмов и использование высокопроизводительных вычислительных систем. Вместе с тем хорошо известно, что алгоритмы БПФ обладают низкой эффективностью распараллеливания.

С другой стороны, конечно-разностные схемы легко допускают параллельную реализацию [4, 5], хотя значительно уступают методам, основанным на БПФ, в точности расчета на фиксированной сетке по временной переменной. В связи с этим весьма актуальной является задача построения компактных конечно-разностных схем повышенного порядка аппроксимации, допускающих эффективную параллельную реализацию. Цель данного исследования состоит в разработке более экономичной компактной схемы четвертого порядка точности по временной переменной и сравнении ее с модифицированной схемой Кранка — Николсон на типичных линейных и нелинейных тестах.

Хотя рассматриваемое уравнение не является параболическим, формально оно очень напоминает обычное уравнение теплопроводности, и при выборе схем для расчета воспользуемся классическим опытом построения экономичных схем [6] для параболического уравнения.

2. Разностные схемы

Пусть q и τ суть шаги равномерной сетки по z и t соответственно, а Λ — обычный разностный оператор, аппроксимирующий двойное дифференцирование по времени. Тогда для уравнения Шредингера разностная схема с весами имеет вид

$$i\frac{A^{n+1} - A^n}{q} = \frac{b}{2}\Lambda(\alpha A^{n+1} + (1-\alpha)A^n) - s(\alpha f^{n+1} + (1-\alpha)f^n), \quad f = |A|^2 A.$$

Известно, что в параболическом случае (когда слева нет мнимой единицы) однородная схема абсолютно устойчива при $\alpha \geq 1/2$, т. е. множители возрастания гармоник

$$\rho_k = \frac{1 + r(\alpha - 1)\psi_k}{1 + r\alpha\psi_k}, \quad r = \frac{2bq}{\tau^2}, \quad \psi_k = \sin^2\frac{k\tau}{2}$$

по модулю не превышают единицы при любом соотношении шагов, а при меньших весах схема, в том числе и явная, условно устойчива. При этом важно отметить, что устойчивость именно сильная, поскольку неравенства, ограничивающие рост гармоник, являются строгими.

В нашем случае из дисперсионного соотношения схемы легко заметить, что при весе $\alpha \geq 1/2$ имеет место абсолютная устойчивость, так как множители

$$\rho_k = \frac{i + r(\alpha - 1)\psi_k}{i + r\alpha\psi_k}, \quad r = \frac{2bq}{\tau^2}, \quad \psi_k = \sin^2\frac{k\tau}{2}$$

по модулю не превышают единицы, но при меньших весах устойчивости нет вовсе, т. е. область условной устойчивости отсутствует. Заметим, что наибольший интерес, очевидно, представляют чисто неявная схема с единичным весом и схема Кранка — Николсон с равными весами. Первая имеет наибольший запас устойчивости, но только первый порядок по циклической переменной, в то время как вторая имеет второй порядок по обеим переменным. Однако в случае $\alpha = 1/2$ множитель возрастания гармоник по модулю равен точно единице, что означает отсутствие сильной устойчивости. В некоторых типичных случаях решений с большими градиентами при расчете на значительное число циклов слабой устойчивости может быть не достаточно для получения надежного результата. В целях устранения этого недостатка целесообразно модифицировать схему Кранка — Николсон, взяв вес чуть больше половины ($\alpha = 1/2 + cq$, $c > 0$) с отличием на величину порядка шага по циклической переменной. Это обеспечивает сильную устойчивость при сохранении второго порядка точности.

Если зафиксировать специальное значение веса

$$\alpha = \frac{1}{2} - \frac{i}{3r}, \quad r = 2b\frac{q}{\tau^2}$$

и специальным же образом [6] сформировать правую часть разностной схемы, приходим к компактной схеме повышенной точности $O(q^2 + \tau^4)$:

$$i\frac{A^{n+1} - A^n}{q} = \frac{b}{2}\Lambda(\alpha A^{n+1} + (1-\alpha)A^n) - s\left(\frac{f^{n+1} + f^n}{2} + \frac{\tau^2}{12}\Lambda f^n\right), \quad f = |A|^2 A.$$

Для однородного уравнения теплопроводности ($i = 1$) гармонический анализ указывает на абсолютную и сильную устойчивость схемы повышенной точности. В этом случае множители возрастания гармоник

$$\rho_k = \frac{1 - (1/3 + r/2)\psi_k}{1 - (1/3 - r/2)\psi_k}$$

строго меньше единицы.

Однако в нашем случае ситуация не такая благоприятная. Из дисперсионного соотношения для k-й гармоники получаем коэффициент возрастания в виде отношения комплексно-сопряженных величин

$$\rho_k = \frac{(1 - \psi_k/3)i - r/2\psi_k}{(1 - \psi_k/3) + r/2\psi_k}.$$

Следовательно, хоть устойчивость и абсолютна, но сильной устойчивости нет, как и в случае схемы Кранка — Николсон. Меняет ситуацию слабое увеличение веса схемы

$$\alpha = \frac{1}{2} + cq - \frac{i}{3r}, \quad r = 2b\frac{q}{\tau^2}, \quad c > 0.$$

Это изменение эквивалентно добавлению в уравнение искусственного диссипативного слагаемого

$$cq^2\frac{\partial A}{\partial z},$$

по порядку малости находящегося в пределах погрешности аппроксимации. Таким образом, получаем компактную схему точности $O(q^2 + \tau^4)$ с сильной устойчивостью. Действительно, квадрат модуля для коэффициента возрастания гармоники

$$|\rho_k|^2 = 1 - \frac{2cqr^2\psi_k^2}{|i + r\alpha\psi_k|^2}$$

оказывается строго меньшим единицы.

3. Некоторые результаты расчетов

В простейшем случае линейного уравнения Шредингера, когда $s = 0$, разностные схемы реализуются непосредственно трехточечной прогонкой на каждом шаге по z. В случае неоднородного уравнения ($s \neq 0$) приведенные схемы имеют кубичную нелинейность, присутствующую и на верхнем слое, что требует организации внутренних итераций по нелинейности. Представляется целесообразным применить простой способ линеаризации, подобный двухшаговой процедуре, применяемой в схемах предиктор-корректор. Для каждого фиксированного слоя n по эволюционной переменной определим последовательность $v^0, v^1, ..., v^k, ...$ приближений решения на следующем $(n+1)$-м слое. В качестве начального приближения используем, например, решение на верхнем слое, полученное по явной схеме. От текущего приближения v^k к следующему v^{k+1} переходим с помощью линейной схемы. В случае схемы повышенной точности итерационный процесс имеет вид

$$\left(iE - \frac{rq}{4}\Lambda\right)\frac{v^{k+1} - A^n}{q} - \frac{b}{2}\Lambda A^n + s\left(\frac{|v^k|^2 v^k + |A^n|^2 A^n}{2} + \frac{\tau^2}{12}\Lambda |A^n|^2 A^n\right) = 0.$$

Можно рассматривать также вариант представления функции f на верхнем слое в виде $|v^k|^2 v^{k+1}$, это несколько меняет коэффициенты трехдиагональной матрицы. Совершенно аналогично строится итерационный процесс для схемы с весами. На практике в отдельных вариантах снимались верхние ограничения по числу внутренних итераций, чтобы убедиться в их сходимости, а в основных расчетах достаточно ограничиться несколькими итерациями с выходом из итерационного цикла по сходимости.

Сначала схемы тестировались на точном решении

$$A(z,t) = \frac{T_0}{\sqrt{w}} \exp\left(\frac{t^2}{2w}\right), \quad w = T_0^2 - ibz$$

однородного уравнения ($s = 0$) при значениях параметров $b = -1$, $c = 0.01$, $T_0 = 1.8$. Задача решалась в области $(0 \leq z \leq 10) \times (-10 \leq t \leq 10)$. Результаты расчетов приведены в табл. 1. Здесь в первых двух столбцах приводятся размеры сетки по временной и циклической переменной, третий и пятый столбцы содержат глобальную C-норму ошибки численного решения

$$\delta = \max |A_j^n - A(z_n, t_j)|$$

по схемам второго и четвертого порядка точности, а в четвертом и шестом столбцах приведены коэффициенты убывания ошибки при детализации сетки для рассматриваемых схем. Полученные значения коэффициентов свидетельствуют о совпадении теоретических и практически наблюдаемых порядков сходимости. Очевидно явное преимущество компактной схемы.

В табл. 1 приведены также результаты расчета нелинейного уравнения с параметром $s = 1$ в области $(0 \leq z \leq 4\pi) \times (-10 \leq t \leq 10)$. Точное решение задачи

$$A(z,t) = \exp\left(\frac{iz}{2}\right) sech(t)$$

имеет вид солитона.

Т а б л и ц а 1. Результаты расчета линейной и нелинейной задач на сгущающихся сетках по схемам второго и четвертого порядка точности

N_t	N_z	δ_2	K_2	δ_4	K_4
Линейная задача					
20	20	8.7144-02		1.2963-02	
40	80	2.2095-02	3.94	8.2559-04	15.69
80	320	5.4733-03	4.02	5.1446-05	16.05
160	1280	1.3645-03	4.02	3.2122-06	16.02
320	5120	3.4089-04	4.00	2.0072-07	16.05
640	20480	8.5210-05	4.00	1.2545-08	15.99
Нелинейная задача					
20	20	1.4643-00		7.6688-01	
40	80	7.1275-01	2.06	6.6585-02	11.52
80	320	2.2153-01	3.22	6.2449-03	10.66
160	1280	7.6367-02	2.90	5.5693-04	11.21
320	5120	2.6835-02	2.85	4.9901-05	11.16
640	20480	9.4732-03	2.83	4.3687-06	11.42

Т а б л и ц а 2. Зависимость ошибки расчета от параметра диссипации компактной схемы

c	0.0	0.0001	0.001	0.01	0.1
Сетка 320×1280	0.0444	0.0440	0.0399	0.0021	0.4057
Сетка 640×2360	0.0105	0.0103	0.0087	0.0081	0.1763

В данном примере внутренние итерации проводились до различия между итерациями $\varepsilon = 10^{-8}$ с верхним ограничением до пяти итераций. Практически же для такого порога сходимости не требовалось более пяти итераций на шаге. Из результатов расчета следует, что коэффициенты убывания ошибки для обеих схем в нелинейном случае несколько ниже, чем в линейном, что объясняется влиянием ошибок округления. Анализ коэффициентов показывает, что практически наблюдаемые порядки сходимости для схем второго и четвертого порядка аппроксимации для нелинейной задачи составляют примерно величины 1.6 и 3.5 вместо 2 и 4.

С целью определения влияния на ошибку величины коэффициента диссипации c проведена серия расчетов этой же нелинейной задачи, но на большем интервале по циклической переменной $(0 < z < 20\pi)$. Из результатов расчета (табл. 2) видно, что при возрастании параметра c ошибка δ_4 сначала падает, а затем возрастает. Следовательно, зависимость ошибки от c имеет по крайней мере один минимум. Таким образом, умеренная искусственная диссипация в сравнении с полным ее отсутствием улучшает расчет. Экспериментально установлено, что во всех расчетах наилучшее значение коэффициента искусственной диссипации находится в пределах $0.001 \div -0.01$.

Список литературы

[1] Кившарь Ю.С., Агравал Г.П. Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам. М.: Физматлит, 2005. 647 с.

[2] Agrawal G.P. Nonlinear Fiber Optics. N.Y.: Acad. Press, 2001. 446 с.

[3] Agrawal G.P. Aplications of Nonlinear Fiber Optics. N.Y.: Acad. Press, 2001. 458 p.

[4] Яненко Н.Н., Коновалов А.Н., Бугров А.Н., Шустов Г.В. Об организации параллельных вычислений и распараллеливании прогонки // Численные методы механики сплошной среды. 1978. Т. 9, № 7. С. 136–139.

[5] Паасонен В.И. Параллельный алгоритм для компактных схем в неоднородных областях // Вычисл. технологии. 2003. Т. 8, № 3. С. 98–106.

[6] Микеладзе Ш.Е. О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов // Изв. АН СССР. Математика. 1941. Т. 5, № 1. С. 57–74.

Поступила в редакцию 12 мая 2011 г.