

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ И МЕТОДЫ

О РЕШЕНИИ РАЗНОСТНЫХ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ МЕТОДОМ ОПЕРАТОРНОЙ ЭКСПОНЕНТЫ

© *И.М. Нефедов, И.А. Шерешевский*

Институт Физики Микроструктур РАН,
Россия, 603600 Нижний Новгород, ул.Ульянова, 46
e-mail:nefd@ipm.sci-nnov.ru

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда
фундаментальных исследований (коды проектов 95-01-00573, 95-02-04994)

Предложена модификация метода операторной экспоненты для численного решения разностных линейных начально-краевых задач. Метод основан на представлении разностного оператора с заданными граничными условиями как возмущения того же оператора с периодическими граничными условиями. Проведен анализ погрешности, устойчивости и эффективности метода на модельном примере одномерного разностного оператора Лапласа.

ON THE SOLVING OF DIFFERENCE INITIAL BOUNDARY VALUE PROBLEMS
BY OPERATOR EXPONENTIAL METHOD

I.M. Nefedov, I.A. Shereshevskii

Institute for Physics of Microstructures, RAS,
Ulyanov str., 46, 603600 Nizhny Novgorod, Russia.

Modification of the operator exponential scheme for the numerical solving of the difference linear initial boundary value problems is suggested. The scheme is based on the representation of the difference operator for given boundary conditions as the perturbation of the same operator for periodic ones. Analysis of the error, stability and efficiency of the scheme is performed for model example of one-dimensional difference Laplace operator.

1. Введение

Численное решение линейных разностных начально-краевых задач является существенным этапом моделирования физических процессов и явлений, описываемых эволюционными дифференциальными уравнениями типа уравнения Шредингера, диффузионного уравнения, уравнения Гинзбурга-Ландау и многих других. Наряду с классическими сеточными методами [1] при решении подобных эволюционных задач все более широко применяется метод операторной экспоненты (ОЭ) [2], основанный на формуле Ли-Троттера-Като [3] для приближенного вычисления экспоненты от суммы некоммутирующих матриц. Метод ОЭ обладает рядом полезных свойств, характерных как для явных, так и для неявных разностных схем. Он

не требует итерационных процедур, часто оказывается абсолютно устойчивым. Однако применимость метода ОЭ ограничивается невозможностью явного вычисления экспоненты от разностных операторов достаточно общего вида. Фактически эффективные алгоритмы вычисления экспоненты существуют лишь для разностных операторов с постоянными коэффициентами и периодическими граничными условиями на "прямоугольных" подмножествах Z^n . Эти алгоритмы основаны на использовании быстрого преобразования Фурье [4] и позволяют вычислить экспоненту за $O(N \log_2 N)$ операций, где N - число точек в области. Уже в случае граничных условий, отличных от периодических, не существует подобного рода алгоритмов.

В настоящей работе линейный разностный оператор с заданными граничными условиями рассматривается как возмущение того же оператора с периодическими граничными условиями и для вычисления экспоненты от такого оператора применяется формула Ли-Троттера-Като. Возмущающий оператор оказывается оператором в пространстве функций на границе области, и задача вычисления экспоненты от такого оператора становится существенно проще исходной, поскольку число точек границы, как правило, много меньше общего числа точек области. Это обеспечивает практически такую же эффективность предлагаемого алгоритма, как и Фурье - метод для периодических задач.

Анализ погрешности, устойчивости и эффективности предлагаемого метода в общем случае довольно сложен и проводится в работе на модельном примере одномерного разностного оператора Лапласа. Этот пример является, вероятно, наиболее "неблагоприятным" для метода ОЭ из-за существования эффективных разностных схем типа метода прогонки [1]. Тем не менее предлагаемый метод может конкурировать с известными схемами, в частности, для уравнения Шредингера.

Идея рассматривать дифференциальные операторы с различными граничными условиями как возмущения друг друга принадлежит М.Г.Крейну [5] и интенсивно эксплуатируется в современной математической физике (см., например, [6]). Возможность применения метода М.Г.Крейна к разностным операторам рассматривалась в [7]. Основные результаты работы анонсированы в [8].

2. Описание метода

Пусть M множество точек, а $C(M)$ — множество комплекснозначных функций на M . Пусть оператор $\hat{A} : C(M) \rightarrow C(M)$ есть линейный оператор вида

$$(\hat{A}f)(x) = \sum_{y \in \gamma_x} a_x(y) f(y), \quad f \in C(M), \quad (1)$$

где γ_x при каждом x есть конечное подмножество M , а $a_x(\cdot)$ — заданная функция на γ_x . Пусть Ω конечное подмножество M . Назовем точку $x \in \Omega$ *внутренней* точкой Ω *относительно оператора* \hat{A} , если $\gamma_x \subseteq \Omega$ и *граничной* точкой Ω *относительно* \hat{A} , если γ_x не лежит целиком в Ω . Обозначим через $\partial_A \Omega$ множество всех граничных точек Ω относительно \hat{A} . Введем также множество

$$b_A \Omega = \bigcup_{x \in \partial_A \Omega} \gamma_x \setminus \Omega.$$

Заметим, что в силу определения (1) для вычисления значений функции $\hat{A}f$ в граничных точках Ω необходимо знать значения функции f на множестве $\Omega \cup b_A \Omega$. Линейный оператор

$$\hat{L} : C(\Omega) \rightarrow C(\Omega \cup b_A \Omega)$$

будем называть оператором продолжения для оператора \hat{A} , если $(\hat{L}f)(x) = f(x)$ для всех $x \in \Omega$. Оператор $\hat{A}_L : C(\Omega) \rightarrow C(\Omega)$ назовем L -расширением оператора \hat{A} , если $(\hat{A}_L f)(x) = (\hat{A}\hat{L}f)(x)$ для всех $x \in \Omega$. Оператор \hat{L} для разностных операторов играет ту же роль, что и граничные условия для дифференциальных операторов.

Рассмотрим разностную начально-краевую задачу для оператора \hat{A} :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \hat{A}_L f, \quad t \geq 0, \quad f(0, x) = g(x), \quad (2)$$

где $f(t, \cdot), g \in C(\Omega)$, \hat{L} — заданный оператор продолжения для оператора \hat{A} . Решение задачи (2) имеет вид

$$f(t, \cdot) = \exp(t\hat{A}_L)g, \quad (3)$$

где оператор $\exp(t\hat{A}_L)$ может быть определен как матричный степенной ряд в силу конечности множества Ω . При заданных \hat{A} и Ω эффективность вычисления $\exp(t\hat{A}_L)$ в (3) может существенно зависеть от оператора продолжения \hat{L} .

Поясним сказанное на примере, который в дальнейшем будем рассматривать в качестве тестового. Пусть \mathcal{M} есть множество целых чисел Z , оператор $\hat{\Delta}$ — разностный оператор Лапласа [1], определенный соотношением

$$(\hat{\Delta}f)(x) = f(x-1) - 2f(x) + f(x+1), \quad x \in Z. \quad (4)$$

В этом случае в (1) γ_x есть множество $\{x-1, x, x+1\}$,

$$a_x(y) = \begin{cases} 1, & y = x-1, \\ -2, & y = x, \\ 1, & y = x+1. \end{cases}$$

Пусть $\Omega = \{0, 1, \dots, N-1\}$. Тогда множество граничных точек Ω относительно $\hat{\Delta}$ состоит из двух точек $\partial_{\Delta}\Omega = \{0, N-1\}$, а множество $b_{\Delta}\Omega = \{-1, N\}$. Пусть \hat{L} — оператор продолжения для $\hat{\Delta}$, соответствующий периодическим граничным условиям:

$$(\hat{L}f)(x) = \begin{cases} f(N-1), & x = -1, \\ f(x), & x \in \Omega, \\ f(0), & x = N. \end{cases} \quad (5)$$

Для экспоненты $\exp(t\hat{\Delta}_L)$ в (3) имеет место следующая формула:

$$\exp(t\hat{\Delta}_L) = \hat{F}^{-1} \exp(t\hat{\Lambda}) \hat{F}, \quad (6)$$

где $\hat{\Lambda}$ — диагональный оператор вида

$$(\hat{\Lambda}f)(x) = \nu(x)f(x), \quad \nu(x) = -4 \sin^2(\pi x/N), \quad x \in \Omega,$$

а \hat{F} — оператор дискретного преобразования Фурье:

$$(\hat{F}f)(x) = \sum_{y \in \Omega} \exp(-i2\pi xy/N) f(y).$$

Заметим, что для вычисления вектора $\exp(t\hat{\Delta}_L)f$ по формуле (6) требуется порядка $N \log_2 N$ операций при использовании известного алгоритма быстрого преобразования Фурье [4].

Пусть \hat{K} — оператор продолжения для $\hat{\Delta}$, соответствующий граничным условиям третьего рода, т.е.

$$(\hat{K}f)(x) = \begin{cases} \alpha f(0) & , x = -1, \\ f(x) & , x \in \Omega, \\ \beta f(N-1) & , x = N, \end{cases} \quad (7)$$

где α и β , вообще говоря, комплексные коэффициенты ($\alpha = \beta = -1$ соответствуют граничным условиям Дирихле, а $\alpha = \beta = 1$ — условиям Неймана). Тогда известные методы точного вычисления вектора $\exp(t\hat{\Delta}_K)f$ (например, с помощью разложения по собственным функциям $\hat{\Delta}_K$) требуют порядка N^2 операций.

Возвращаясь к общему случаю, сформулируем следующий вопрос: нельзя ли использовать имеющийся эффективный алгоритм вычисления $\exp(t\hat{A}_L)$ (\hat{L} — заданный оператор продолжения) для приближенного вычисления $\exp(t\hat{A}_K)$ для другого оператора продолжения \hat{K} ?

Ниже мы опишем вариант метода ОЭ, который устанавливает связь между экспонентами от различных расширений разностного оператора [8] и, тем самым, дает ответ на поставленный вопрос.

Пусть \hat{K} и \hat{L} два различных оператора продолжения для оператора \hat{A} . В дальнейшем будем предполагать для простоты, что эти операторы удовлетворяют следующему дополнительному условию: для любых $f, g \in C(\Omega)$ таких, что $f(x) = g(x)$ для $x \in \Omega \setminus \partial_A \Omega$ выполняются равенства $\hat{L}f = \hat{L}g$ и $\hat{K}f = \hat{K}g$.

Рассмотрим оператор $\hat{G}_{KL} = \hat{A}_K - \hat{A}_L$. Из определения оператора продолжения и сделанного выше предположения следует, что $(\hat{G}_{KL}f)(x) = 0$ во всех внутренних точках x из Ω и $\hat{G}_{KL}f = \hat{G}_{KL}g$, если значения функций f и g совпадают во внутренних точках Ω . Поэтому оператор \hat{G}_{KL} есть прямая сумма нулевого оператора в пространстве $C(\Omega \setminus \partial_A \Omega)$ и оператора в пространстве $C(\partial_A \Omega)$, который будем обозначать тем же символом \hat{G}_{KL} . Отсюда следует, что в случае, когда число граничных точек Ω много меньше общего числа точек Ω , задача вычисления оператора $\exp(t\hat{G}_{KL})$ существенно проще исходной задачи вычисления $\exp(t\hat{A}_K)$ ¹ (в рассмотренном выше примере оператора $\hat{\Delta}$ число граничных точек равно двум и вычисление $\exp(t\hat{G}_{KL})$ сводится к вычислению экспоненты от (2×2) матрицы). Поскольку $\hat{A}_K = \hat{A}_L + \hat{G}_{KL}$, то имеют место соотношения

$$\exp(t\hat{A}_K) = \exp(t\hat{A}_L) \exp(t\hat{G}_{KL}) + O(t^2) \equiv \hat{S}_1(t) + O(t^2), \quad (8)$$

$$\exp(t\hat{A}_K) = \exp(0.5t\hat{G}_{KL}) \exp(t\hat{A}_L) \exp(0.5t\hat{G}_{KL}) + O(t^3) \equiv \hat{S}_2(t) + O(t^3), \quad (9)$$

аналогичные обычно используемым схемам ОЭ первого и второго порядка аппроксимации [2].

В силу указанных выше свойств оператора \hat{G}_{KL} эти формулы позволяют приближенно вычислить экспоненту от оператора \hat{A}_K почти с той же эффективностью, что и оператор $\exp(t\hat{A}_L)$. Естественной областью применения формул (8),(9)

¹ В случае операторов продолжения общего вида некоторая модификация этих рассуждений приводит к тому же результату.

оказывается ситуация, когда \hat{A} есть разностный оператор с постоянными коэффициентами в $C(Z^s)$, $s \geq 1$ (т.е. функции $a_x(y)$ в выражении (1) зависят только от разности $x - y$), а Ω есть параллелепипед в Z^s : $\Omega = \prod_{j=1}^s \{0, 1, \dots, N_j - 1\}$. В этом случае существует выделенный оператор продолжения \hat{L} , определяемый соотношением $(\hat{L}f)(x) = f(x \bmod N)$, где $(x \bmod N)_j = x_j \bmod N_j$, $j = 0, 1, \dots, s$, соответствующего периодическим граничным условиям для оператора \hat{A} . Оператор $\exp(t\hat{A}_K)$ вычисляется точно с помощью многомерного дискретного преобразования Фурье, причем это вычисление требует порядка $M \log_2 M$ операций, где $M = N_1 \cdot \dots \cdot N_s$. Число точек множества $\partial_A \Omega$ можно оценить выражением

$$|\partial_A \Omega| \leq C(A)M \sum_{j=1}^s 1/N_j,$$

где константа $C(A)$ определяется размером носителя функции $a(x)$. Поэтому, если $C(A) \ll \min N_j$, то размер матрицы \hat{G}_{KL} оказывается много меньше размера матрицы \hat{A}_K , что и дает возможность эффективно использовать формулы (8), (9). Такая ситуация имеет место при разностной аппроксимации дифференциальных операторов, при этом константа $C(A)$ зависит от порядка аппроксимируемого оператора и, вообще говоря, от способа аппроксимации.

3. Погрешность и устойчивость метода

Рассмотрим вопросы, связанные с погрешностью и устойчивостью численных алгоритмов, основанных на формулах (8) и (9).

Пусть $f(t, \cdot) = \exp(t\hat{A}_K)g$ — точное решение задачи (2) с оператором \hat{A}_K и $h_j(t, \cdot) = \hat{S}_j(t)g$, $j = 1, 2$, $g \in C(\Omega)$. В качестве оценки погрешности одного шага методов ОЭ рассмотрим нормы разности функций $f(t, \cdot)$ и $h_j(t, \cdot)$:

$$\varepsilon_j(t, g) = \|f(t, \cdot) - h_j(t, \cdot)\|, \quad j = 1, 2, \quad g \in C(\Omega).$$

Разлагая $f - h_j$ в ряд Тейлора при $t \rightarrow 0$, находим

$$\varepsilon_1(t, g) = \left\| \left[\hat{A}_K, \hat{G}_{KL} \right] g \right\| \frac{t^2}{2} + O(t^3), \quad (10)$$

$$\varepsilon_2(t, g) = \left\| \left(\left[\hat{A}_K, \left[\hat{A}_K, \hat{G}_{KL} \right] \right] - \frac{1}{2} \left[\hat{G}_{KL}, \left[\hat{A}_K, \hat{G}_{KL} \right] \right] \right) g \right\| \frac{t^3}{12} + O(t^4), \quad (11)$$

где $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ есть коммутатор операторов \hat{A} и \hat{B} .

Таким образом, схемы (8) и (9) имеют первый и второй порядок аппроксимации соответственно. Для сравнения приведем аналогичные оценки [1] для методов Эйлера $\delta_1(t, g)$ и Кранка-Никольсона (КН) $\delta_2(t, g)$:

$$\delta_1(t, g) = \left\| \hat{A}_K^2 g \right\| \frac{t^2}{2} + O(t^3), \quad (12)$$

$$\delta_2(t, g) = \left\| \hat{A}_K^3 g \right\| \frac{t^3}{12} + O(t^4). \quad (13)$$

Как видно, в отличие от величин δ_j оценки ε_j ($j = 1, 2$) определяются нормами коммутаторов операторов \hat{A}_K и \hat{G}_{KL} , а не степенями \hat{A}_K , что и обуславливает приведенные ниже различия в свойствах методов ОЭ и классических схем.

Для анализа устойчивости методов ОЭ (8) и (9) необходимо оценить нормы соответствующих операторов шага $\hat{S}_1(t)$ и $\hat{S}_2(t)$. Покажем, что эти методы устойчивы при достаточно малых $t > 0$, если оператор \hat{A}_K удовлетворяет условию

$$\operatorname{Re}(\hat{A}_K g, g) < 0, \quad g \in C(\Omega).$$

В самом деле, функции

$$s_j(t, g) = \|\hat{S}_j g\|^2, \quad g \in C(\Omega), \quad j = 1, 2$$

аналитичны по t в окрестности нуля и $s_j(0, g) = \|g\|^2$. Кроме того,

$$\left. \frac{\partial \hat{S}_j}{\partial t} \right|_{t=0} = 2\operatorname{Re}(\hat{A}_K g, g) < 0$$

в силу предположения об \hat{A}_K . Поэтому для достаточно малых положительных t справедливо неравенство

$$s_j(t, g) = \|g\|^2 + t \left. \frac{\partial \hat{S}_j}{\partial t} \right|_{t=0} + O(t^2) \leq \|g\|^2,$$

т.е. схемы (8),(9) устойчивы. Заметим, что при сделанном предположении спектр $\operatorname{spec} \hat{A}_K$ оператора \hat{A}_K лежит в левой полуплоскости [9], что обеспечивает устойчивость исходной задачи (2).

Можно указать два класса операторов \hat{A}_K , для которых метод ОЭ оказывается абсолютно устойчивым.

1. Схемы (8),(9) абсолютно устойчивы, если операторы \hat{A}_K и \hat{A}_L эрмитовы и $\operatorname{spec} \hat{A}_K$ и $\operatorname{spec} \hat{G}_{KL}$ оба лежат в левой полуплоскости. Это сразу следует из простейших оценок:

$$\|\hat{S}_1(t)\| \leq \|\exp(t\hat{G}_{KL})\| \cdot \|\exp(t\hat{A}_L)\| \leq 1,$$

$$\|\hat{S}_2(t)\| \leq \|\exp(0.5t\hat{G}_{KL})\|^2 \cdot \|\exp(t\hat{A}_L)\| \leq 1.$$

К данному классу операторов принадлежит, в частности, разностный оператор Лапласа с граничными условиями Дирихле.

2. Метод ОЭ также абсолютно устойчив, если операторы \hat{A}_K и \hat{A}_L оба кососимметричные, т.е. $\hat{A}_K = -\hat{A}_K^*$ и $\hat{A}_L = -\hat{A}_L^*$. Это условие эквивалентно тому, что $\operatorname{spec} \hat{A}_K$ и $\operatorname{spec} \hat{A}_L$ оба лежат на мнимой оси. В этом случае операторы (8),(9) унитарны (так же как и оператор $\exp(t\hat{A}_K)$) и, следовательно, их норма равна единице. Примером может служить оператор Шредингера.

Однако абсолютной устойчивости метода ОЭ может не быть даже в случае, когда $\operatorname{spec} \hat{A}_K$ и $\operatorname{spec} \hat{A}_L$ оба лежат в левой полуплоскости. Отсутствие абсолютной устойчивости в этой ситуации связано с наличием положительных собственных значений у "граничного" оператора \hat{G}_{KL} . Примером является разностный оператор Лапласа с граничными условиями Неймана.

Проиллюстрируем приведенные выше оценки на примере D -расширения оператора Лапласа $\hat{\Delta}_D$ с оператором продолжения \hat{D} , соответствующим граничным

условиям Дирихле ($\alpha = \beta = -1$ в выражении (7)). В этом случае, как отмечалось выше, схемы (8),(9) абсолютно устойчивы.

Оценки погрешности временного шага метода ОЭ (10) и (11) зависят от начального вектора g . Рассмотрим в качестве типичных векторов g собственные функции оператора $\hat{\Delta}_D$:

$$\phi_j(k) = \sqrt{\frac{\sigma_j}{N}} \sin\left(\frac{\pi(j+1)}{N}(k+1/2)\right), \quad j, k = 0, 1, \dots, N-1,$$

где $\sigma_j = 2$, $j = 0, 1, \dots, N-2$; $\sigma_{N-1} = 1$. В этом случае

$$\varepsilon_1(t, \phi_j) = \begin{cases} 0 & , j = 1, 3, \dots, N-1, \\ \frac{4t^2}{2\sqrt{N}} \sqrt{-\sigma_j \mu_j (1 + (3 + \mu_j)^2)} + O(t^3), & j = 0, 2, \dots, N-2, \end{cases} \quad (14)$$

$$\varepsilon_2(t, \phi_j) = \begin{cases} 0, & j = 1, 3, \dots, N-1, \\ \frac{t^3}{48\sqrt{N}} \sqrt{-\sigma_j \mu_j (1 + 2(3 + \mu_j)^2 + (\mu_j^2 + 5\mu_j + 7)^2)} + \\ + O(t^4), & j = 0, 2, \dots, N-2, \end{cases} \quad (15)$$

где $\mu_j = -4 \sin^2(\pi(j+1)/2N)$, ($j = 0, 1, \dots, N-1$) — собственные значения оператора $\hat{\Delta}_D$. Соответствующие оценки для методов Эйлера и КН имеют вид

$$\delta_1(t, g) = \mu_j^2 \frac{t^2}{2} + O(t^3), \quad (16)$$

$$\delta_2(t, g) = \mu_j^3 \frac{t^3}{12} + O(t^4). \quad (17)$$

Сравнение приведенных оценок показывает, что при одинаковом порядке аппроксимации погрешность метода ОЭ существенно больше для собственных функций с малыми номерами и значительно меньше для больших гармоник.

Заметим, что ошибка классических схем связана с отличием собственных значений оператора шага от собственных значений оператора $\exp(t\hat{A}_K)$, в то время как собственные функции этих операторов совпадают. Операторы шага метода ОЭ имеют погрешность как в собственных значениях, так и в собственных функциях². Однако, как показывают численные расчеты, собственные значения операторов $\hat{S}_1(t)$ и $\hat{S}_2(t)$ лучше аппроксимируют спектр оператора $\exp(t\hat{A}_K)$, чем собственные значения классических схем.

Чтобы убедиться в этом, найдем спектр $\lambda_j(t)$, $j = 0, 1, \dots, N-1$ оператора шага $\hat{S}_2(t)$ для лапласиана $\hat{\Delta}_D$. В Приложении показано, что для нечетных номеров j собственные значения и собственные функции операторов $\hat{S}_2(t)$ и $\exp(t\hat{\Delta}_D)$ совпадают. Именно поэтому погрешности методов ОЭ (14) и (15) равны нулю для этих гармоник. Остальные $N/2$ собственных значений $\lambda_{2j}(t) = \exp(t\xi_j(t))$, $j = 0, 1, \dots, N/2-1$, где $\xi_j(t)$ удовлетворяют "дисперсионному" уравнению (26). Результаты численного решения этого уравнения показаны на рис.1, где приведены значения величин $|\xi_j - \mu_{2j}|$ в зависимости от j (кривая 1). На рисунке видно, что для большинства

²Интересно отметить, что спектры операторов $\hat{S}_1(t)$ и $\hat{S}_2(t)$ совпадают, а их собственные функции отличаются только в граничных точках.

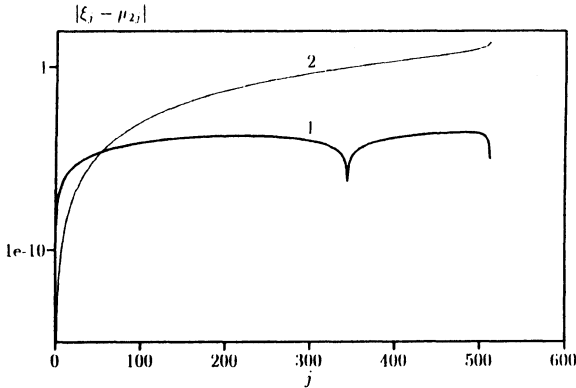


Рис. 1. Погрешность в четных собственных значениях оператора шага метода ОЭ (1) и схемы Кранка-Никольсона (2) для одномерного оператора Лапласа с граничными условиями Дирихле, $t = 0.5$, $N = 1024$.

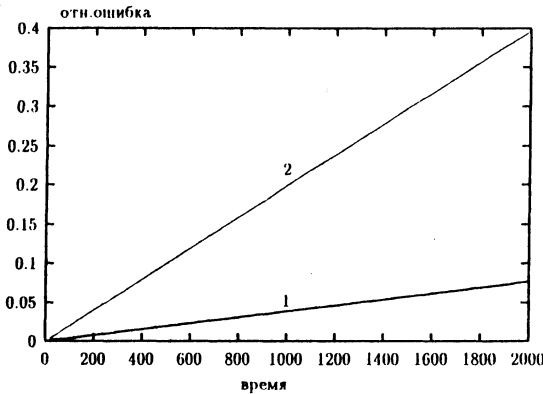


Рис. 2. Относительная погрешность решения уравнения Шредингера методами ОЭ (1) и Кранка-Никольсона (2) со случайным начальным вектором, $t = 0.5$, $N = 128$.

гармоник погрешность в собственных значениях метода ОЭ значительно меньше, чем у схемы КН (кривая 2). Кроме того, отметим "равномерность" оценки спектра схемы (9) — погрешность слабо зависит от номера собственного значения. Аналогичная ситуация имеет место и для оператора $i\hat{\Delta}_D$.

Такое свойство оператора шага численной схемы важно, когда решение исходной эволюционной задачи содержит вклады от всех собственных функций оператора \hat{A}_K . Это имеет место, например, при решении задачи (4) с косозермитовым оператором \hat{A}_K (уравнение Шредингера). На рис.2 приведены зависимости относительных погрешностей численного решения задачи

$$\frac{\partial f}{\partial t} = i\hat{\Delta}_D, \quad f(0) = g$$

от времени для схем ОЭ (9) (кривая 1) и КН (кривая 2). Начальный вектор g выбран случайным равномерно распределенным на единичной сфере в C^N .

4. Заключение

Методы расщепления, в том числе и метод операторной экспоненты, широко используются для решения разностных линейных и квазилинейных начально-краевых задач [2, 4]. Предложенный вариант метода ОЭ может быть использован

в случае, когда эволюционный оператор представим в виде суммы разностного оператора с постоянными коэффициентами на прямоугольной области в Z^s (главной части) и некоторого, возможно, нелинейного оператора (возмущения). Если граничные условия для главной части не позволяют явно вычислить экспоненту исходного оператора, то задачу можно решать методом расщепления в два этапа: сначала отщепляется возмущение, а затем предложенным в работе методом строится приближенная экспонента от главной части. Уже в случае прямоугольных областей в Z^2 даже для оператора Лапласа с граничными условиями третьего рода применение методов типа обратного метода Эйлера или Кранка-Никольсона требует итерационных процедур для построения резольвенты. Предложенный метод является явным и, как показывают приведенные в работе одномерные примеры, конкурентоспособным с этими схемами. Одним из важных, на наш взгляд, свойств рассматриваемого метода является "равномерная" оценка спектра исходной задачи. Авторы успешно применяли описанный метод для решения одно- и двумерного уравнения Гинзбурга-Ландау [10], уравнения диффузии четвертого порядка [11] и некоторых других задач.

Авторы выражают благодарность Е.И.Гордону и М.А.Антонцу за многочисленные полезные обсуждения работы.

5. Приложение

Ниже выводится уравнение для собственных значений оператора $\hat{S}_2(t)$, определенного соотношением (9) для одномерного разностного оператора Лапласа $\hat{\Delta}_D$ с граничными условиями Дирихле. Для упрощения выкладок будем считать, что N — четное число, $N = 2M$.

В этом случае "граничный" оператор \hat{G}_{KL} имеет вид: $\hat{G}_{KL} = -2\hat{Q}_0$, где \hat{Q}_0 — ортогональный проектор на вектор $x_0 = (e_1 + e_{N-1})/\sqrt{2}$ ($\{e_j\}_{j=0}^{N-1}$ — стандартный базис в C^N). Экспоненту от такого оператора нетрудно вычислить:

$$\exp(0.5t\hat{G}_{KL}) = \hat{E} + (e^{-t} - 1)\hat{Q}_0. \quad (18)$$

Пусть λ — собственное значение оператора $\hat{S}_2(t)$ и Φ_λ — соответствующая собственная функция. Тогда

$$\hat{S}_2(t)\Phi_\lambda \equiv \exp(0.5t\hat{G}_{KL}) \exp(t\hat{\Delta}_D) \exp(0.5t\hat{G}_{KL})\Phi_\lambda = \lambda\Phi_\lambda. \quad (19)$$

Используя (18) и обозначение $\Psi_\lambda = \exp(0.5t\hat{G}_{KL})\Phi_\lambda$, перепишем это соотношение в виде

$$(\lambda\hat{E} - \exp(t\hat{\Delta}_D))\Psi_\lambda = \lambda(1 - e^{2t})\hat{Q}_0\Psi_\lambda. \quad (20)$$

Обозначим через $\{f_j\}_{j=0}^{N-1}$ собственный базис оператора $\hat{\Delta}_L$ (лапласиан с периодическими граничными условиями):

$$(f_j)(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(i\frac{2\pi jk}{N}\right), \quad j, k = 0, 1, \dots, N-1, \quad (21)$$

а через ν_j соответствующие собственные значения:

$$\nu_j = -4 \sin^2(\pi j/N), \quad j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (22)$$

Обратим внимание, что $\nu_j = \nu_{N-j}$ и $\nu_j = \mu_{2j+1}$, $j = 1, 2, \dots, M$, где μ_k — собственные значения оператора $\hat{\Delta}_D$.

Заметим, что правая часть (20) при любом Ψ_λ пропорциональна вектору x_0 , разложение которого по базису (21) имеет вид

$$x_0 = \sum_{j=0}^{N-1} (x_0, f_j) f_j = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{j=0}^{N-1} \left(1 + \exp\left(-i\frac{2\pi j}{N}\right) \right) f_j. \quad (23)$$

Если c_j , $j = 0, 1, \dots, N-1$ — коэффициенты разложения функции Ψ_λ по базису (21), то соотношение (20) можно записать в виде

$$(\lambda - \exp(t\nu_j))c_j = a_\lambda \lambda (1 - e^{2t})(x_0, f_j), \quad j = 0, 1, \dots, N-1, \quad (24)$$

где $a_\lambda = (\Psi_\lambda, x_0)$.

Для нахождения всех решений уравнения (23) рассмотрим отдельно два случая.

1) $a_\lambda = 0$. В этом случае для каждого $j = 0, 1, \dots, N-1$ либо $c_j = 0$, либо $\lambda = \exp(t\nu_j)$. Поскольку $\Psi_\lambda \neq 0$, то существует индекс l такой, что $c_l \neq 0$. В этом случае $\lambda = \exp(t\nu_l) = \exp(t\nu_{N-l})$, $l = 1, 2, \dots, M$ и $c_j = 0$, $j \neq l, N-l$. Соответствующие собственные функции находятся тогда из условия $a_\lambda = 0$:

$$\Psi_l(k) \sim \sin\left(\frac{2\pi l}{N}(k+1/2)\right), \quad k = 0, 1, \dots, N-1, \quad l = 1, 2, \dots, M. \quad (25)$$

Заметим, что эти функции являются собственными функциями оператора $\hat{\Delta}_D$, отвечающими собственным значениям μ_{2l-1} , $l = 1, 2, \dots, M$;

2) $a_\lambda \neq 0$. В этом случае из (24) следует, что $\lambda \neq \exp(t\nu_j)$ при всех $j = 0, 1, \dots, N-1$. Умножая обе части (23) на $(f_j, x_0)/(\lambda - \exp(t\nu_j))$ и суммируя по j , получим следующее равенство:

$$a_\lambda = a_\lambda \lambda (1 - e^{2t}) \sum_{j=0}^{N-1} \frac{|(x_0, f_j)|^2}{\lambda - \exp(t\nu_j)}.$$

Используя условие $a_\lambda \neq 0$, а также (22) и (23), это соотношение можно переписать в виде

$$1 = \frac{1 - e^{2t}}{M} \left(\frac{1}{1 - \exp(t\xi)} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{M-1} \frac{4 + \nu_j}{1 - \exp(t(\nu_j - \xi))} \right), \quad (26)$$

где $\xi = \ln \lambda / t$. Нетрудно видеть, что уравнение (26) имеет ровно M вещественных корней, по одному в каждом интервале (ν_j, ν_{j+1}) , $j = 0, 1, \dots, M-1$. Поскольку в крайних точках этих интервалов правая часть (26) обращается в бесконечность, решения уравнения без труда могут быть найдены численно методом деления пополам.

Обозначим через $\xi_j(t)$, $j = 1, 2, \dots, M$ решения (26). Тогда для спектра $\lambda_j(t)$, $j = 0, 1, \dots, N-1$ оператора $\hat{S}_2(t)$ окончательно имеем

$$\lambda_{2j}(t) = \exp(t\xi_j(t)), \quad \lambda_{2j+1}(t) = \exp(t\nu_j), \quad j = 0, 1, \dots, M-1.$$

Заметим, что для собственных значений $\lambda(t) = \exp(it\xi(t))$ оператора шага $\hat{S}_2(t)$, отвечающего оператору $i\hat{\Delta}_D$ (уравнение Шредингера), уравнение (26) имеет вид

$$1 = \frac{\operatorname{tg} t}{M} \left(-\frac{1}{\operatorname{tg}(0.5t\xi)} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{M-1} \frac{4 + \nu_j}{\operatorname{tg}(0.5t(\nu_j - \xi))} \right),$$

решения которого с хорошей точностью совпадают с решением (26).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.А. Самарский, А.В. Гулин. Численные методы. – М.: Наука, 1989, 430с.
2. R.H. Hardin, F.D. Tappert. Application of the split-step Fourier method to the numerical solution of nonlinear and variable coefficient wave equations. // SIAM Rev.Chronicle, 1973, v.16, p.423.
3. Т. Като. Теория возмущений линейных операторов. – М.: Мир, 1972, 420с.
4. Г.И. Марчук. Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1989, 608с.
5. Н.И. Ахиезер, И.М. Глазман. Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве. – М.: Наука, 1966, 543с.
6. С. Алибеверю, Ф. Гестези, Р. Хоег-Крон, Х. Холден. Точно решаемые модели в квантовой механике. – М.: Мир, 1991, 428с.
7. И.А. Окомелькова, И.А. Шерешевский. Быстрый метод вычисления резольвент разностных краевых задач. // Матем.Моделирование, 1995, т.7, № 5, с.89;
I.A. Okomelkova, I.A. Shereshevskii. On the calculation of difference operator resolvent. // Nueral, Parallel and Scientific Computations, 1995 (направлена в печать).
8. И.М. Нефедов, И.А. Шерешевский. О вычислении экспонент от разностных операторов. // Матем.Моделирование, 1995, т.7, № 5, с.88.
9. Ф. Русс, Б. Секефальви-Надь. Лекции по функциональному анализу. – М.: Мир, 1979, 587с.
10. А. Andronov, I. Gordion, V. Kurin, I. Nefedov, I. Shereshevsky. Kinematic vortices and phase slip lines in the dynamics of the resistive state of narrow superconductive thin film channels. // Physica C, 1993, v.213, p.193.
11. А.С. Мельников, И.М. Нефедов, А.А. Фраерман, И.А. Шерешевский. О нелинейной стадии спиноподобного распада в многослойных структурах. // ЖЭТФ, 1996, т.109, вып.2, с.1.

Поступила в редакцию
21.12.95.