Схемы для ур-я Шредингера. Модельное уравнение *

Дружный коллектив
Институт вычислительных технологий СО РАН
e-mail: paas@ict.nsc.ru

29 сентября 2010

Для простейшего модельного скалярного нелинейного уравнения сформулированы две разностные схемы различных порядков точности и описан один из способов реализации итераций по нелинейности.

Введение

Рассматриваются две схемы - схема с весами и схема повышенной точности, формально аналогичная компактной схеме для уравнения теплопроводности. Обе схемы двухслойные, и применительно к рассматриваемой модели имеют на верхнем слое кубичную нелинейность в правой части. Предлагается линеаризация и линейный итерационный прцесс.

1. Постановка задачи

Рассматривается задача Дирихле или периодическая начально-краевая задача для уравнения

$$i\frac{\partial A}{\partial z} - \frac{b}{2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + sf = 0, \qquad f = |A|^2 A.$$

Формально оно очень похоже на уравнение теплопроводности, и с точки зрения аппроксимации при выборе схем можно пользоваться опытом работы с параболическим уравнением.

2. Две схемы

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

$$i\frac{A^{n+1} - A^n}{q} - \frac{b}{2}\Lambda(\alpha A^{n+1} + (1-\alpha)A^n) + s(\alpha f^{n+1} + (1-\alpha)f^n) = 0, \qquad f = |A|^2 A.$$

*Работа поддерживается отовсюду

В линейном приближении однородная схема абсолютно устойчива при $\alpha \geq 1/2$. Наибольший интерес представляет чисто неявная схема с единичным весом и схема Кранка-Николсон с половинным весом. Первая имеет наибольший запас устойчивости, зато вторая имеет второй порядок по q. Однако в последнем случае множитель возрастания гармоники по модулю в точности равен единиице, что означает слабую устойчивость. Для устранения этого недостатка целесообразно взять вес, чуть больше половины $\alpha = 1/2 + O(q)$. Это обеспечивает сильную устойчивость при сохранении второго порядка точности.

Путем учета остаточных членов разложения погрешности схемы приходим к схеме повышенной точности $O(q^2 + \tau^4)$:

$$B\frac{A^{n+1} - A^n}{q} - \frac{b}{2}\Lambda A^n + s\left(\frac{f^{n+1} + f^n}{2} + \frac{\tau^2}{12}\Lambda f^n\right) = 0,$$

где

$$B = i(E + \frac{\tau^2}{12}\Lambda) - \frac{bq}{4}\Lambda,$$

а E – тождественный оператор. Гармонический анализ линейного однородного разностного уравнения свидетельствует об абсолютной устойчивости схемы повышенной точности.

3. Итерационные процессы

Приведенные схемы имеют нелинейность в правой части, причем из соображений повышенного порядка точности нелинейность присутствует и на верхнем слое, что не позволяет для реализации схемы воспользоваться непосредственно прогонкой. Требуется провести линеаризацию схемы. Теоретически это можно сделать любым способом решения нелинейной системы уравнений $F(x) = 0$, однако при выборе итерационного метода необходимо учитывать, что в реальных задачах такого рода детальность сетки по времени огромна, а она равна размерности этой нелинейной системы. В связи с этим целесообразно применить простой способ линеаризации, подобный процедуре предиктора-корректора.

Суть метода в следующем: Для каждого фиксированного слоя n по эволюционной переменной определим итерационную последовательность $v^0, v^1, ..., v^k, ...$ приближений решения на следующем слое A^{n+1}. В качестве начального приближения берем, например, решение на нижнем слое $v^0 = A^n$. А от текущего приближения v^k к следующему v^{k+1} переходим с помощью линейной схемы. В случае схемы повышенной точности линейный итерационный процесс имеет вид

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

т.е. вхождение функции $f = |A|^2 A$ на верхнем эволюционном слое представляется линейно относительно верхнего итерационного слоя таким образом, что квадрат модуля берется с предыдущего приближения. Из самого способа построения итерационного процесса следует, что если он сходится, то предельное решение будет удовлетворять нашей нелинейной схеме. Аналогично строится итерационный процесс для схемы с весами. Сходимость последовательности приближений следует контролировать численно, при достаточной сходимости полагаем $A^{n+1} = v^{k+1}$ и только тогда переходим к следующему слою. Следует заметить, что эти итерации не имеет смысла проводить до очень мелкой невязки, поскольку решение нелинейной схемы все равно имеет точность, определяемую погрешностью аппроксимации. На практике нужно на отдельных тестах провести много итераций, чтобы в принципе убедиться в их сходимости, а в рабочих расчетах в случае положительном ограничиваться несколькими итерациями, от двух до четырех, конкретное ограничение можно установить экспериментально.