

Об эффективности высокоточных разностных схем для уравнения Шрёдингера

В. И. ПААСОНЕН^{1,2,*}, М. П. ФЕДОРУК^{2,1}

¹Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, 630090, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия

*Контактный автор: Паасонен Виктор Иванович, e-mail: viki48@mail.ru

Поступила 16 сентября 2021 г., доработана 27 октября 2021 г., принята в печать 3 ноября 2021 г.

Исследуется ряд двух- и трехслойных разностных схем, построенных на расширенных шаблонах, до восьмого порядка точности для уравнения Шрёдингера. Наряду с многоточечными схемами рассматривается метод коррекции Ричардсона в приложении к схеме четвертого порядка аппроксимации, повышающий порядок точности путем построения линейных комбинаций приближенных решений, полученных на различных вложенных сетках. Проведено сравнение методов по устойчивости, сложности реализации алгоритмов и объему вычислений, необходимых для достижения заданной точности. На основе теоретического анализа и численных экспериментов выявлены методы, наиболее эффективные для практического применения.

Ключевые слова: порядок точности, уравнение Шрёдингера, устойчивость схемы, многоточечный оператор, коррекция Ричардсона.

Цитирование: Паасонен В.И., Федорук М.П. Об эффективности высокоточных разностных схем для уравнения Шрёдингера. Вычислительные технологии. 2021; 26(6):68–81. DOI:10.25743/ICT.2021.26.6.006.

Введение

На конечном симметричном отрезке $(-L_x, L_x)$ рассматривается задача Дирихле или периодическая начально-краевая задача для одномерного нелинейного уравнения Шрёдингера (см, например, [1, 2])

$$i \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = -s|U|^2 U$$

с комплексной искомой функцией U , зависящей от циклической (эволюционной) переменной $t \in (0, L_t)$ и конфигурационной переменной x . Здесь s — вещественный коэффициент; $D = \pm 1$ — признак типа дисперсии, нормальной или аномальной в зависимости от знака; i — мнимая единица.

Уравнение Шрёдингера умножением на $(-i)$ приводится к виду

$$\frac{\partial U}{\partial t} = C \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + F, \quad F = is|U|^2 U, \quad C = i \frac{D}{2},$$

формально напоминающему уравнение теплопроводности, но с мнимым коэффициентом C перед второй производной, поэтому с точки зрения аппроксимации все известные схемы для уравнения теплопроводности могут рассматриваться и как схемы для уравнения Шрёдингера, однако условия корректности схем существенно зависят от того, является C вещественным коэффициентом или мнимым.

Уравнение Шрёдингера моделирует задачи нелинейной волоконной оптики, например связанные с волоконно-оптическими линиями связи, лазерами и другими оптическими устройствами [2, 3]. Для численного решения этого уравнения часто 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 x по эволюционной переменной t нелинейность и дисперсия взаимно независимы. Хорошая скорость реализации данного алгоритма в сравнении с традиционными разностными схемами достигается использованием быстрого преобразования Фурье (БПФ) для решения линейной задачи на полушаге. Однако для адекватного численного решения задач в области волоконно-оптических линий связи или волоконных лазеров типичное число узлов по конфигурационной переменной может составлять до 10^7 точек, что приводит к огромным затратам машинного времени и необходимости параллельной реализации вычислений. Вместе с тем известно, что алгоритмы БПФ обладают низкой эффективностью распараллеливания.

С другой стороны, традиционные конечно-разностные схемы второго порядка точности легко допускают параллельную реализацию, но значительно уступают в точности расчета алгоритмам, связанным с БПФ. В этом отношении несколько лучше традиционных схем выглядят компактные схемы четвертого порядка точности [4–7], поскольку они имеют более высокий порядок точности при простой структуре трехточечных шаблонов, хотя крайне желательным остается еще большее повышение порядка. Пожалуй, единственная возможность повысить порядок точности решений без использования многоточечных схем состоит в применении коррекции Рундсона [8] к результатам, полученным на двух или нескольких сетках с соизмеримыми шагами. В отношении задач нелинейной волоконной оптики этот метод реализован в работе [9].

Однако в общем случае переход от схем четвертого порядка к схемам более высокого порядка сопряжен с необходимостью увеличения числа слоев [10] и (или) отказом от трехточечных разностных операторов [11], что приводит к дополнительным осложнениям. Это требует постановки дополнительных начальных данных и граничных условий, которых нет в исходной дифференциальной задаче, и усложнения реализации алгоритмов в целом из-за вида матриц, уже не являющихся трехдиагональными. Классификация множества двухслойных разностных схем любого порядка точности для уравнения Шрёдингера, построенных на произвольных многоточечных шаблонах, по свойствам корректности (т. е. абсолютной, условной устойчивости или абсолютной неустойчивости) проведена в работе [11]. В общем случае произвольного шаблона это исследование имеет лишь академический интерес, но при шаблонах, не слишком широких, например пяти- или семиточечных, такие схемы могли бы применяться на практике, и поэтому их следует оценить на предмет эффективности.

Цель данной работы состоит в сравнении эффективности ряда многоточечных явных и неявных схем, в том числе и компактных, от самых простых до сложных схем восьмого порядка точности, а также метода коррекции Рундсона в применении к классической компактной схеме [4]. Эвристический анализ эффективности схем проводится путем оценки числа операций, необходимых для достижения приблизительно

одной и той же заданной реальной точности при решении краевой задачи, исходя из того, что порядки аппроксимации по конфигурационной x и эволюционной t переменным известны. Помимо эвристических оценок проведены также численные эксперименты на простой тестовой задаче, одной и той же для всех испытанных схем.

1. Разностные операторы

Опишем явные и компактные разностные аппроксимации различных порядков для первой производной по эволюционной переменной t и для второй производной по конфигурационной переменной x , которые являются материалом для конструирования различных схем. Шаги равномерной сетки обозначим соответственно через τ и h .

Для первой производной по t будем использовать несколько видов аппроксимаций — обычную разность “вперед” и центральную разность

$$\Delta_+ u^n = \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = u_t + O(\tau), \quad \Delta_0 u^n = \frac{u^{n+1} - u^{n-1}}{2\tau} = u_t + O(\tau^2),$$

а также компактные аппроксимации второго и четвертого порядков аппроксимации

$$\Delta_2 = \left(E + \frac{\tau}{2}\Delta_+\right)^{-1} \Delta_+ = \frac{\partial}{\partial t} + O(\tau^2), \quad \Delta_4 = \left(E + \frac{\tau^2}{6}\Lambda_t\right)^{-1} \Delta_0 = \frac{\partial}{\partial t} + O(\tau^4), \quad (1)$$

где

$$\Lambda_t u^n = \frac{u^{n+1} - 2u^n + u^{n-1}}{\tau^2}.$$

Для второй производной на основе обычной трехточечной аппроксимации

$$\Lambda u(x) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{2h^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{2h^2}{6!} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} + \dots \quad (2)$$

сформируем ряд явных симметричных аппроксимаций четных порядков

$$\Lambda_4 = \Lambda - \frac{h^2}{12}\Lambda^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + O(h^4), \quad \Lambda_6 = \Lambda - \frac{h^2}{12}\Lambda^2 + \frac{h^4}{90}\Lambda^3 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + O(h^6), \quad (3)$$

а также семейство компактных аппроксимаций вида

$$\tilde{\Lambda} = (E + ah^2\Lambda + bh^4\Lambda^2)^{-1}(\Lambda + ch^2\Lambda^2) \quad (4)$$

с параметрами a , b , c , подлежащими определению. Используя представление (2), получим разложение

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{1}{12} + c - a\right) h^2 \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \left(\frac{1}{360} + \frac{c-a}{6} + a^2 - b - ac\right) h^4 \frac{\partial^6}{\partial x^6} + \\ &+ \left(\frac{2}{8!} + \frac{c-a}{80} + \frac{a^2 - b - ac}{4} + 2ab - a^3 + a^2c - dc\right) h^6 \frac{\partial^8}{\partial x^8} + O(h^8). \end{aligned}$$

Порядок аппроксимации оператора двойного дифференцирования компактным оператором $\tilde{\Lambda}$ зависит от того, сколько подряд расположенных остаточных членов в данном разложении обращается в нуль. Так, восьмой порядок достигается, если выполняется система условий на параметры:

$$\begin{aligned} \frac{1}{12} + c - a &= 0, & \frac{1}{360} + \frac{c-a}{6} + a^2 - b - ac &= 0, \\ \frac{2}{8!} + \frac{c-a}{80} + \frac{a^2 - b - ac}{4} + 2ab - a^3 + a^2c - dc &= 0. \end{aligned}$$

При этом, как легко установить, искомые параметры определяются однозначно

$$a = 13/63, \quad c = 31/252, \quad b = 23/3780. \quad (5)$$

Такой оператор условимся обозначать $\tilde{\Lambda}_8$, где индекс указывает на порядок аппроксимации.

Если из системы условий на параметры отбросить последнее уравнение, для оператора двойного дифференцирования получим семейство компактных аппроксимаций с погрешностью $O(h^6)$ со свободным параметром a . Другие два параметра определяются через него: $c = a - 1/12$ и $b = a/12 - 1/90$. Будем рассматривать только два наиболее интересных случая $a = 1/12$ и $a = 0$, при которых получаются операторы

$$\tilde{\Lambda}_6^1 = \left(E + \frac{h^2}{12}\Lambda - \frac{h^4}{240}\Lambda^2 \right)^{-1} \Lambda, \quad \tilde{\Lambda}_6^2 = \left(E - \frac{h^4}{90}\Lambda^2 \right)^{-1} \left(\Lambda - \frac{h^2}{12}\Lambda^2 \right), \quad (6)$$

представляющие компактные уточнения к трех- и пятиточечной явной аппроксимации соответственно.

Если в системе оставить лишь первое условие $a - c = 1/12$, положив $b = 0$, то получим семейство аппроксимаций $\tilde{\Lambda}^4$, совпадающее при $a = 1/12$ с классической трехточечной компактной аппроксимацией $O(h^4)$ [4, 5], а при $a = 0$ — с явной пятиточечной аппроксимацией того же порядка:

$$\tilde{\Lambda}_4^1 = \left(E + \frac{h^2}{12}\Lambda \right)^{-1} \Lambda, \quad \tilde{\Lambda}_4^2 = \left(\Lambda - \frac{h^2}{12}\Lambda^2 \right). \quad (7)$$

Если же, наконец, положить равными нулю все свободные параметры, получим обычную трехточечную аппроксимацию Λ второго порядка точности.

2. Явные разностные схемы

Исследуем явные двух- и трехслойные схемы с точки зрения устойчивости, сложности их реализации и потребностей вычислительных ресурсов для решения краевых задач.

2.1. Явные двухслойные схемы

Все явные двухслойные схемы можно записать в общем виде

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = C \frac{A}{h^2} u^n + f^n.$$

Пусть A — один из операторов $h^2\Lambda$, $h^2\Lambda_4$, $h^2\Lambda_6$. Дисперсионное соотношение для коэффициента возрастания гармоники $\exp(i\omega x)$ имеет вид $\rho = 1 - iRa$, где a — собственное число оператора A , а $R = |C|\tau/h^2$. Оператору $-h^2\Lambda$ соответствуют собственные

числа $z = 4 \sin^2(\omega h/2)$, и когда ω пробегает все множество частот, соответствующие значения z пробегает значения отрезка $z \in [0, 4]$. Рассматриваемые операторы зависят только от степеней $-h^2\Lambda$, и это позволяет представлять корни характеристического уравнения как зависимости от простой переменной z на ограниченном отрезке $[0, 4]$, а не как комбинации тригонометрических функций, зависящих от частоты. Как и для всех явных схем, в данном случае $a = a(z)$ представляет собой полином от z . Например, в случае оператора Λ_6 имеем $a(z) = -z + 4z^2/12 - z^3/90$. Заметим, что ввиду симметрии оператора A его собственные числа a вещественны при любой частоте ω , а значит, $|\rho|^2 = 1 + R^2 a^2 > 1$. Отсюда следует абсолютная неустойчивость всех рассматриваемых двухслойных явных схем.

2.2. Явные трехслойные схемы

Аналогичные схеме Ричардсона трехслойные явные схемы вида

$$\frac{u^{n+1} - u^{n-1}}{2\tau} = C \frac{A}{h^2} u^n + f^n$$

с многоточечным оператором A в случае уравнения теплопроводности, когда C — вещественное положительное число, абсолютно неустойчивы, так как модуль одного из корней характеристического уравнения $\rho^2 - 2Rar\rho - 1 = 0$ всегда превосходит единицу. Однако в случае уравнения Шрёдингера все схемы рассматриваемого вида являются условно устойчивыми. В самом деле, при мнимом C характеристическое уравнение имеет вид $\rho^2 - 2iRar\rho - 1 = 0$ и его корни $\rho_{\pm} = iRa \pm \sqrt{1 - R^2 a^2}$ лежат на единичной окружности тогда и только тогда, когда выполняется неравенство

$$R|a(z)| \leq 1 \quad \forall z \in [0, 1], \quad (8)$$

которое и дает ограничение на соотношение шагов $R = |C|\tau/h^2$. При несоблюдении этого условия оба корня мнимые, причем один из них по модулю превосходит единицу, поэтому необходимое условие устойчивости по начальным данным в этом случае нарушается.

Если оператор $A = h^2\Lambda_4$, то имеем схему $O(\tau^2 + h^4)$ с условием устойчивости (8) в виде $z(1 + z/12)R \leq 1 \quad \forall z \in [0, 4]$, которое выполняется при $R \leq 3/16$. При $A = h^2\Lambda_6$ погрешность схемы $O(\tau^2 + h^6)$; в этом случае неравенство (8) имеет вид $z(1 + z/12 + z^2/90)R \leq 1$, оно для всех частот выполняется при ограничении $R \leq 45/68$.

Заметим, что для схемы $O(\tau^2 + h^6)$ при соотношении шагов $R = C\tau/h^2 = \text{const}$ преимуществ в точности по отношению к схеме $O(\tau^2 + h^4)$ нет, так как погрешность в этом случае определяется величиной τ^2 , которая при $R = \text{const}$ эквивалентна $O(h^4)$. С точки зрения сбалансированности главных членов разложения погрешности для данной схемы правильным было бы соотношение $\tau = O(h^3)$. При этом с устойчивостью нет проблем, так как при таком соотношении шагов $R = O(h)$, поэтому условие устойчивости выполняется автоматически для малых шагов. Однако число шагов по эволюционной переменной теперь существенно больше, и есть ли выигрыш при переходе от схемы четвертого порядка к схеме шестого порядка? Оценим его приблизительно.

Пусть по классической схеме $O(\tau^2 + h^4)$ при n шагах по x и m шагах по t достигнута точность ε . Тогда $\varepsilon = O(1/n^4)$ и при естественном соотношении $\tau = O(h^2)$ число $m = O(n^2)$, следовательно, на весь расчет требуется число операций, пропорциональное $L_4 = n \times m = O(n^3)$. Для достижения той же точности по схеме шестого порядка

можно позволить себе более крупный шаг H , удовлетворяющий условию $\varepsilon = O(H^6)$, а шаг T по t должен удовлетворять условию сбалансированности слагаемых погрешности $T = O(H^3)$. Тогда число узлов сетки по t есть величина $M = O(N^3)$, где N — число узлов по x , а по условию равенства ошибки в расчетах по двум схемам $N^6 \simeq n^4$. Число операций в этом случае пропорционально $L_6 = N \times M = O(N^4) = O(n^{8/3})$, поэтому выигрыш составляет

$$\frac{L_4}{L_6} \simeq \frac{n^3}{n^{8/3}} = O(n^{1/3}).$$

Например, при $n = 1000$ это отношение равно десяти.

Нетрудно показать, что для явной трехслойной схемы $O(\tau^2 + h^8)$ также имеет место условная устойчивость при ограничении вида $R \leq \text{const}$. Однако с точки зрения сбалансированности главных слагаемых разложения погрешности для нее требуется шаг $\tau = O(h^4)$. Повторение проведенных выше выкладок в отношении этой схемы показывает, что здесь экономия L_4/L_8 составляет величину $O(n^{1/2})$. При том же значении $n = 1000$ это дает выигрыш приблизительно в 31 раз.

Заметим, что наши числовые оценки выигрыша скорее всего несколько завышены, так как здесь не учтены некоторое усложнение формул при повышении порядка аппроксимации и различие в константах при главных членах погрешности. Но даже с этой оговоркой полученные коэффициенты эффективности являются довольно скромными. Для сравнения отметим, что переход от простейшей схемы $O(\tau + h^2)$ к схеме $O(\tau^2 + h^4)$ дает выигрыш $L_2/L_4 = O(n^{3/2})$, что при $n = 1000$ дает гигантский выигрыш в $10^{9/2}$ раз.

В качестве положительных черт явных трехслойных схем следует отметить их безытерационность и относительную простоту реализации граничных условий — эта проблема легко решается путем экстраполяции с достаточной точностью решения на предыдущем слое, где оно уже вычислено, за границу области.

3. Неявные разностные схемы

Исследуем неявные двух- и трехслойные схемы, построенные с помощью рассмотренных выше компактных аппроксимаций производных u_t и u_{xx} .

3.1. Компактные двухслойные схемы

Рассмотрим схему вида

$$\Delta_2 u^n = C \tilde{\Lambda} u^n + f^n,$$

где операторы слева и справа определяются формулами (1) и (4). Избавляясь стандартным способом от обратных операторов, перепишем схему в виде

$$(E + ah^2\Lambda + bh^4\Lambda^2) \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = C(\Lambda + ch^2\Lambda^2) \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + (E + ah^2\Lambda + bh^4\Lambda^2) \frac{f^{n+1} + f^n}{2}. \quad (9)$$

Схема (9), согласно результатам анализа оператора (4), при специальных наборах параметров a, b, c аппроксимирует уравнение Шрёдингера с погрешностью $O(\tau^2 + h^{2p})$, где натуральное $p = 2, 3$ или 4 .

Характеристическое уравнение схемы (9) имеет вид

$$(1 - az + bz^2)(\rho - 1) + iR(z - cz^2) \frac{\rho + 1}{2} = 0, \quad (10)$$

отсюда нетрудно заметить, что множитель возрастания гармоника ρ есть отношение комплексно-сопряженных величин, поэтому $|\rho| \equiv 1$, и все схемы параметрического семейства (9) в линейном приближении абсолютно устойчивы.

В программной реализации схемы вида (9) существенно сложнее явных, так как требуют обращения не трехдиагональных, а пятидиагональных матриц, но дополнительноотягощенных еще более длинными первыми и последними строками, соответствующими неявному представлению формул высокоточной экстраполяции еще не вычисленного решения на верхнем слое в сеточные узлы за границы области. Эти формулы используем в качестве недостающих дополнительных граничных условий для пятиточечных прогонок. Такого рода сложная структура матриц требует предварительных преобразований длинных строк в короткие для приведения матриц к канонической пятидиагональной форме. Что касается расчета экономии объема вычислений при переходе от классической компактной схемы [4] четвертого порядка точности к схемам шестого-восьмого порядков, то здесь картина аналогична рассмотренной выше для явных трехслойных схем, так как и те и другие схемы имеют равный порядок относительно шага τ .

В целом сравнение в данном случае оказывается не в пользу компактных схем на пятиточечных шаблонах. Реализация неявных многоточечных схем сложнее, граничные условия сложнее, а коэффициент экономии ресурсов тот же, что и у явных схем. Единственный кажущийся плюс — это абсолютная устойчивость компактных схем, но, как упоминалось выше, условия устойчивости явных трехслойных схем налагают на шаг по эволюционной переменной ограничение $O(h^2)$, а это значительно более мягкое условие, чем требование сбалансированности порядков аппроксимации вида $\tau \simeq h^3$ для схемы шестого порядка или $\tau \simeq h^4$ для схемы восьмого порядка. Иначе говоря, аппроксимационные ограничения на шаг по t намного жестче, чем ограничения по условиям устойчивости.

3.2. Компактные трехслойные схемы

Рассмотрим схему вида

$$S^{-1}\Delta_0 u^n = C\Sigma^{-1}(\Lambda + ch^2\Lambda^2)u^n + f^n,$$

где $S = E + (\tau^2/6)\Lambda_t$ и $\Sigma = E + ah^2\Lambda + bh^4\Lambda^2$ суть осредняющие операторы по t и x соответственно. При специальных наборах параметров a, b, c , определенных выше, данная схема аппроксимирует уравнение Шрёдингера с погрешностью $O(\tau^4 + h^p)$, где $p = 4, 6$ или 8 . Действуя стандартным образом на обе части схемы произведением операторов S и Σ , перепишем схему в виде

$$\Sigma \frac{u^{n+1} - u^{n-1}}{2\tau} = C(\Lambda + ch^2\Lambda^2) \frac{u^{n+1} + 4u^n + u^{n-1}}{6} + \Sigma \frac{f^{n+1} + 4f^n + f^{n-1}}{6}. \quad (11)$$

Дисперсионное соотношение схемы (11) имеет вид

$$\sigma(\rho^2 - 1) + iR\delta(\rho^2 + 4\rho + 1) = 0, \quad \sigma = 1 - az + bz^2, \quad \delta = \frac{1}{3}(z - cz^2).$$

Нетрудно видеть, что оба его корня

$$\rho = \frac{2iR\delta \pm \sqrt{\sigma^2 - 3R^2\delta^2}}{\sigma - i\delta}$$

по модулю равны единице при условии неотрицательности дискриминанта

$$\sigma^2 - 3R^2\delta^2 \geq 0 \quad \forall z \in [0, 4],$$

которое, собственно, и налагает ограничение на соотношение шагов $R = |C|\tau/h^2$. Оно выполняется, если на всем промежутке $[0, 4]$

$$|1 - az + bz^2| \geq R\sqrt{3} z|1 - cz|. \quad (12)$$

В двух схемах с погрешностью $O(\tau^4 + h^4)$ для параметров a и c возможны два варианта: $a = 1/12, c = 0$ либо $a = 0, c = -1/12$, а параметр $b = 0$, поэтому неравенство (12) линейно по z , следовательно, его истинность всюду на отрезке эквивалентна его выполнению на обоих концах. Отсюда в первом варианте получаем условие устойчивости $R \leq \sqrt{3}/6$, а во втором — $R \leq 3/16$. Казалось бы, эти две схемы с точки зрения аппроксимации позволяют подобно схеме Кранка–Николсон использовать крупный шаг $\tau = O(h)$, однако такой выбор вступает в противоречие с условной устойчивостью, требующей шага $\tau = O(h^2)$, поэтому они не имеют преимуществ по отношению к классической компактной схеме $O(\tau^2 + h^4)$.

В двух вариантах схем $O(\tau^4 + h^6)$ параметры $a = 1/12, b = -1/240, c = 0$ либо $a = 0, b = -1/90, c = -1/12$. В первом случае имеем неравенство $R \leq \sqrt{3}(1/z - 1/12 - z/240)$, в правой части которого функция монотонно убывает на $[0, 4]$. Отсюда следует ограничение на соотношение шагов $R \leq 0.15\sqrt{3}$. Во втором случае при $z \in [1, 4]$ неравенство (12) эквивалентно следующему $R \leq \sqrt{3}(1 - z^2/90)/(z - z^2/12)$. Здесь правая часть также убывает, в чем легко убедиться путем анализа знака первой производной, поэтому верное ограничение получается также при $z = 4$: $R \leq 37\sqrt{3}/120 = 0.308(3)\sqrt{3}$.

Если данные схемы используют сетку $N \times M$, а классическая компактная схема $O(\tau^2 + h^4)$ — соответственно сетку $n \times m$, то при одинаковой достигнутой по ним точности расчетов $M^4 \sim N^6 \sim n^4 \sim m^2$, следовательно, объемы вычислений равны соответственно $L_6 = NM = O(n^{5/3})$ и $L_4 = nm = O(n^3)$. Таким образом, выигрыш при переходе к компактным трехслойным схемам точности $O(\tau^4 + h^6)$ составляет величину $L_4/L_6 = O(n^{4/3})$; при $n = 1000$ это вполне приемлемый коэффициент 10^4 . Однако требование аппроксимации $\tau \sim h^{3/2}$ вступает здесь в противоречие с условием устойчивости $\tau \sim h^2$, что на практике при конечных шагах приводит к неестественному ограничению на шаг h сверху. Можно снять это противоречие, отказавшись от соотношения $M^4 = O(N^6)$ в пользу более естественного $M = O(N^2)$, тогда $L_6 = n^2$ и выигрыш в объеме вычислений падает до $L_4/L_6 = O(n)$ (равный тысяче при $n = 1000$), что тоже неплохо.

Компактная трехслойная схема $O(\tau^4 + h^8)$ реализуется при значениях параметров (5). При этих значениях параметров выражения под знаками модуля в (12) неотрицательны на промежутке $z \in [0, 4]$, поэтому оно выполняется при

$$R \leq \inf_{z \in [0, 4]} \sqrt{3}F(z), \quad F(z) = \frac{1 - az + bz^2}{z - cz^2}.$$

Легко установить, что $F'(z) < 0$ на всем отрезке, поэтому наименьшее значение $F(z)$ достигается на правом конце $z = 4$. Отсюда следует условие устойчивости

$$R \leq \frac{1 - 4a + 16b}{4 - 16c} \sqrt{3} = \frac{257}{420} \sqrt{3} \simeq 0.612\sqrt{3} \simeq 1.06.$$

Для данной схемы, имеющей погрешность $O(\tau^4 + h^8)$, естественным является соотношение $M \sim N^2$, тогда при равной реальной точности расчетов с классической компактной

схемой $O(\tau^2 + h^4)$ на сетке $n \times m$ справедливо соответствие $M^4 \sim N^8 \sim m^2 \sim n^4$. Отсюда находим $L_8 \sim MN \sim N^3 \sim n^{3/2}$, поэтому коэффициент экономии ресурсов составляет $L_4/L_8 \sim n^{3/2}$, что в нашем примере с $n = 1000$ равно огромной величине $10^{9/2}$. При этом нет никаких противоречий между условием сбалансированности аппроксимации и условием устойчивости, так как оба условия означают соблюдение естественного соотношения шагов $R = O(1)$.

Итак, установлено, что из числа рассмотренных схем наибольший выигрыш дает трехслойная пятиточечная компактная схема $O(\tau^4 + h^8)$, именно ее можно рекомендовать к применению, несмотря на сложности, связанные с необходимостью постановки дополнительных граничных условий экстраполяционного типа и необходимостью реализации алгоритма пятиточечной прогонкой. Рассмотренные выше трехслойные схемы с погрешностью $O(\tau^4 + h^6)$ имеют совершенно такую же пятиточечную структуру и одинаковые сложности реализации, но при этом гораздо худший показатель экономичности.

Заметим, что для трехслойных схем требуется постановка дополнительного начального данного, так как старт вычислений возможен только тогда, когда не только на начальном нулевом слое, но и на первом слое решение уже известно. Дополнительное начальное данное можно получить либо по двухслойной схеме на более мелкой сетке, либо, например, методом коррекции Ричардсона, обсуждаемым ниже.

3.3. Коррекция Ричардсона

Сравним теперь метод Ричардсона, примененный в отношении расчетов, полученных на разных сетках по классической компактной схеме [9], с самой этой схемой без коррекции. Пусть компактная схема решает задачу на сетке $n \times m$, достигая точности $O(1/n^4)$, а метод Ричардсона комбинирует решения на сетках $N \times M$ и $2N \times 4M$, повышая точность до $O(1/N^6)$. Принято считать, что в трехточечной прогонке на один узел приходится пять операций умножения. Тогда число операций по компактной схеме $L_4 = 5n \times m = 5n^3$, а в методе Ричардсона расчет на двух сетках требует $L_R = 5(N \times M + 2N \times 4M) = 45N \times M = 45N^3$ операций. Условие эквивалентности конечных реальных ошибок дает $n^4 \sim N^6$, поэтому $L_R = 45n^2$. Комбинирование двух решений на общей сетке также требует около пяти операций на узел, поэтому окончательно метод Ричардсона требует приблизительно $L_R = 50n^2$. В результате получаем коэффициент эффективности $L_4/L_R = n/10$; при $n = 1000$ выигрыш получается стократный.

Если применить двукратную коррекцию Ричардсона к расчетам, полученным на исходной грубой сетке $N \times M$ и на двух более детальных сетках $2N \times 4M$, $4N \times 16M$, то достигается точность $O(1/N^8)$ при числе операций приблизительно $L_{RR} = 80N \times M = 80N^3$. Но условие равенства ошибок в данном случае означает $n^4 = N^8$, поэтому $L_{RR} = 80n^{3/2}$ и коэффициент эффективности оказывается равным $L_4/L_{RR} = n^{3/2}/16$. При $n = 1000$ это колоссальный выигрыш $10^{9/2}/16$. По порядку оценки эффективности данный метод эквивалентен трехслойной компактной схеме $O(\tau^4 + h^8)$, самой экономичной из рассмотренных выше схем, но в отличие от нее здесь не требуется ни дополнительных граничных условий, ни дополнительного начального условия для старта, при этом все расчеты осуществляются трехточечными прогонками.

4. Некоторые результаты расчетов

Схемы тестировались на точном решении

$$u(x, t) = \frac{T_0}{\sqrt{w}} \exp\left(\frac{x^2}{2w}\right), \quad w = T_0^2 - iDt,$$

однородного уравнения Шрёдингера в области $(0 \leq t \leq L_t) \times (-L_x \leq x \leq L_x)$. Результаты расчетов при значениях входных параметров

$$D = 1, \quad L_x = 10, \quad L_t = 1, \quad T_0 = 1$$

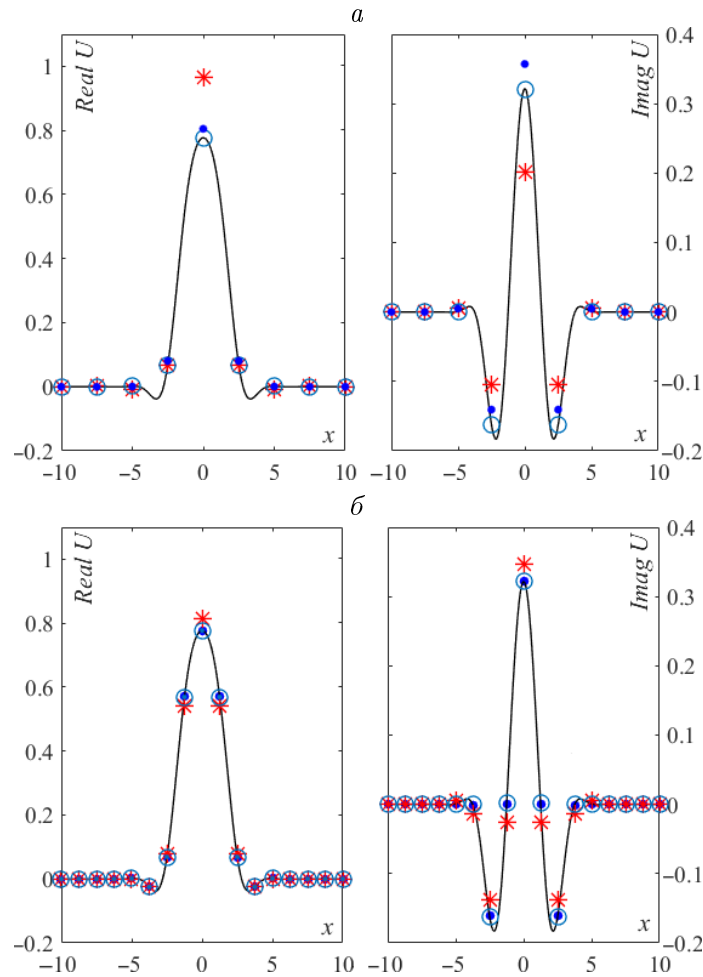
приведены на рисунке и в табл. 1. Сетка, начиная с размера $n \times m = 4 \times 5$, дробилась с удвоением числа шагов по x так, что соотношение $r = C\tau/h^2$ оставалось постоянным.

В каждом из трех блоков таблицы приводятся C -норма ошибки, оценка Рунге p реально достигнутого порядка точности и время, затраченное на решение задачи. Из таблицы видно, что для схемы $O(\tau^2 + h^4)$ без поправок и для простой коррекции (имеющей погрешность $O(\tau^3 + h^6)$) оценки порядка быстро стремятся к своим теоретическим значениям 4 и 6 соответственно, а для трехслойной схемы оценка p при медленном изменении немного не доходит до теоретической восьмерки. Медленная сходимость вносит некоторые коррективы в практическую оценку эффективности трехслойной компактной схемы. Например, если для разных методов по данным таблицы сравнить зависимости времени счета от ошибки, то можно заметить, что для достижения реальной ошибки порядка 10^{-7} коррекция Ричардсона затрачивает даже немного меньше времени, чем трехслойная схема, несмотря на превосходство последней в порядке точности. Порог нарушения сходимости оценки Рунге можно, конечно, отодвинуть путем применения вычислений с удлиненной мантисой, однако это существенно увеличило бы время выполнения каждой операции и суммарное время решения задачи в целом.

В табл. 2 для той же тестовой задачи приведены результаты, полученные по двум методам, имеющим равный теоретический порядок аппроксимации $O(\tau^4 + h^8)$. Это двойная коррекция по отношению к двухслойной компактной схеме и трехслойная компактная схема. Сравнение результатов показало, что время счета по двум методам различается незначительно, при этом для обоих алгоритмов имеет место медленное стремление практически наблюдаемого порядка к своему теоретическому значению 8 с нарушением сходимости при достижении ошибок порядка 10^{-11} . Это объясняется тем, что оценка Рунге в случае очень малых значений ошибки приближается к операции вычисления неопределенности вида $0/0$, и поэтому ошибки округления в числителе и знаменателе имеют здесь уже существенное влияние на результат.

Таким образом, на основе эвристического анализа и численных экспериментов можно сделать вывод о том, что с учетом коэффициентов эффективности, степени сложности алгоритмов реализации и практически наблюдаемых зависимостей ошибки от шага сетки всем рассмотренным схемам расчета следует, вероятно, предпочесть простую коррекцию к решениям, полученным с помощью классической компактной схемы. Двойная коррекция дополнительно улучшает точность при умеренных ошибках, которые реализуются на сетках с крупным шагом, а при малых ошибках (т.е. при мелкой сетке) двойная коррекция несколько снижает свою эффективность.

Выбранная тестовая задача решает однородное уравнение, не имеющее нелинейности. При решении задач общего вида для неоднородного уравнения в правой части неявных схем присутствуют слагаемые с нелинейностью на верхнем слое, и в этом случае



Численные решения тестовой задачи, полученные на сетках с числом шагов $N = 8$ (а) и $N = 16$ (б) по двухслойной компактной схеме $O(\tau^2 + h^4)$ без коррекции (*), с коррекцией (•) и по трехслойной компактной схеме $O(\tau^4 + h^8)$ (○); — — точное решение

Numerical solutions of the test problem obtained on grids with the number of steps $N = 8$ (a) and $N = 16$ (б) according to a two-layer compact scheme $O(\tau^2 + h^4)$ without correction (*), with correction (•) and three-layer compact scheme $O(\tau^4 + h^8)$ (○); — — exact solution

Т а б л и ц а 1. Результаты расчета тестовой задачи на сгущающихся сетках по компактной двухслойной схеме $O(\tau^2 + h^4)$ без коррекции и с коррекцией и по трехслойной компактной схеме $O(\tau^4 + h^8)$

Table 1. The results of calculating the test problem on condensed grids using a compact two-layer scheme $O(\tau^2 + h^4)$ without correction and with correction and the three-layer compact scheme $O(\tau^4 + h^8)$

n	Схема $O(\tau^2 + h^4)$			Схема с коррекцией			Схема $O(\tau^4 + h^8)$		
	δ	p	Время	δ	p	Время	δ	p	Время
8	2.2e-01	2.2	3.0e-02	4.5e-02	2.1	7.3e-02	2.6e-03	4.5	1.3e-01
16	4.6e-02	2.3	4.1e-02	2.0e-03	4.5	8.6e-02	2.8e-05	6.5	1.4e-01
32	2.4e-03	4.1	4.2e-02	2.0e-05	6.6	9.9e-02	1.7e-07	7.4	2.6e-01
64	1.4e-04	4.1	5.3e-02	2.0e-07	6.1	2.2e-01	2.5e-09	6.1	1.3e+00
128	8.9e-06	4.0	1.5e-01	3.0e-09	6.0	1.2e+00	2.4e-11	6.7	9.1e+00
256	5.5e-07	4.0	1.0e+00	4.7e-11	6.0	9.1e+00	—	—	—
512	3.4e-08	4.0	7.8e+00	—	—	—	—	—	—

Т а б л и ц а 2. Результаты расчета тестовой задачи на сгущающихся сетках по схеме $O(\tau^2 + h^4)$ с двойной коррекцией и по трехслойной компактной схеме $O(\tau^4 + h^8)$

Table 2. Results of calculating the test problem on condensed grids according to the scheme $O(\tau^2 + h^4)$ with double correction and the three-layer compact scheme $O(\tau^4 + h^8)$

n	Схема $O(\tau^2 + h^4)$ с двойной коррекцией			Схема $O(\tau^4 + h^8)$		
	δ	p	Время	δ	p	Время
8	2.7e-03	2.3	1.1e-01	2.6e-03	4.5	1.3e-01
16	2.8e-05	6.6	1.2e-01	2.8e-05	6.5	1.4e-01
32	1.6e-07	7.5	2.3e-01	1.7e-07	7.4	2.6e-01
64	2.1e-09	6.3	1.0e+00	2.5e-09	6.1	1.3e+00
128	2.3e-11	6.5	8.7e+00	2.4e-11	6.7	9.1e+00

требуются итерации по нелинейности. Однако это не вносит изменений в иерархию рассмотренных выше методов, выстроенную по эффективности, так как необходимость проведения трех-четырёх итераций на каждом шаге по эволюционной переменной возникает в равной степени для всех неявных схем. Явные же методы, хотя они и свободны от итерационных проблем, должны быть отложены в сторону по иной причине, а именно из-за абсолютной неустойчивости двухслойных схем и низкого коэффициента эффективности трехслойных.

Благодарности. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 20-11-20040.

Список литературы

- [1] **Кившарь Ю.С., Агравал Г.П.** Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам. М.: Физматлит; 2005: 647.
- [2] **Agrawal G.P.** Nonlinear fiber optics. N.Y.: Academic Press; 2001: 446.
- [3] **Agrawal G.P.** Applications of nonlinear fiber optics. N.Y.: Academic Press; 2001: 458.
- [4] **Микеладзе Ш.Е.** О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов. Известия АН СССР. Серия математическая. 1941; 5(1):57–74.
- [5] **Паасонен В.И., Федорук М.П.** Компактная диссипативная схема для нелинейного уравнения Шрёдингера. Вычислительные технологии. 2011; 16(6):68–73.
- [6] **Xie S.-S., Li G.-X., Yi S.** Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation b,2. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2009; (198):1052–1061.
- [7] **Паасонен В.И., Федорук М.П.** Трехслойная безытерационная схема повышенного порядка точности для уравнения Гинзбурга–Ландау. Вычислительные технологии. 2015; 20(3):46–57.
- [8] **Марчук Г.И., Шайдуров В.В.** Повышение точности решения разностных схем. М.: Наука; 1979: 319.
- [9] **Паасонен В.И., Федорук М.П.** О повышении точности численных решений уравнения Гинзбурга–Ландау. Вычислительные технологии. 2020; 25(4):45–57. DOI:10.25743/ICT.2020.25.4.005.

- [10] **Wang T.** Convergence of an eighth-order compact difference scheme for the nonlinear Schrödinger equation. *Advances in Numerical Analysis*. 2012; Article ID 913429. DOI:10.1155/2012/913429.
- [11] **Паасонен В.И.** Классификация разностных схем максимально возможной точности на расширенных симметричных шаблонах для уравнения Шрёдингера и уравнения теплопроводности. *Сибирский журнал вычислительной математики*. 2020; 23(1):99–114.

Вычислительные технологии, 2021, том 26, № 6, с. 68–81. © ФИЦ ИВТ, 2021
Computational Technologies, 2021, vol. 26, no. 6, pp. 68–81. © FRC ICT, 2021

ISSN 1560-7534
eISSN 2313-691X

COMPUTATIONAL TECHNOLOGIES

DOI:10.25743/ICT.2021.26.6.006

On the efficiency of high-order difference schemes for the Schrödinger equation

PAASONEN VIKTOR I.^{1,2,*}, FEDORUK MIKHAIL P.^{2,1}

¹Federal Research Center for Information and Computational Technologies, 630090, Novosibirsk, Russia

²Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk, Russia

*Corresponding author: Paasonen Viktor I., e-mail: viki48@mail.ru

Received September 16, 2021, revised October 27, 2021, accepted November 3, 2021.

Abstract

The efficiency of difference methods for solving problems of nonlinear wave optics is largely determined by the order of accuracy. Schemes up to the fourth order of accuracy have the traditional architecture of three-point stencils and standard conditions for the application of algorithms. However, a further increase in the order in the general case is associated with the need to expand the stencils using multipoint difference approximations of the derivatives. The use of such schemes forces formulating additional boundary conditions, which are not present in the differential problem, and leads to the need to invert the matrices of the strip structure, which are different from the traditional tridiagonal ones. An exception is the Richardson correction method, which is aimed at increasing the order of accuracy by constructing special linear combinations of approximate solutions obtained on various nested grids according to traditional structure schemes. This method does not require the formulation of additional boundary conditions and inversion of strip matrices.

In this paper, we consider several explicit and implicit multipoint difference schemes up to the eighth order of accuracy for the Schrödinger equation. In addition, a simple and double Richardson correction method is also investigated in relation to the classical fourth-order scheme. A simple correction raises the order to sixth and a double correction to eighth. This large collection of schemes is theoretically compared in terms of their properties such as the order of approximation, stability, the complexity of the implementation of a numerical algorithm, and the amount of arithmetic operations required to achieve a given accuracy. The theoretical analysis is supplemented by numerical experiments on the selected test problem. The main conclusion drawn from the research results is that of all the considered schemes, the Richardson-corrected scheme is the most preferable in terms of the investigated properties.

Keywords: order of accuracy, Schrödinger equation, difference scheme stability, multipoint approximations, Richardson correction.

Citation: Paasonen V.I., Fedoruk M.P. On the efficiency of high-order difference schemes for the Schrödinger equation. *Computational Technologies*. 2021; 26(6):68–81. DOI:10.25743/ICT.2021.26.6.006. (In Russ.)

Acknowledgements. The work is supported by RSF (grant No. 20-11-20040).

References

1. **Kivshar' Yu.S., Agrawal G.P.** Opticheskie solitony. Ot volokonnykh svetovodov k fotonnym kristallam [Optical solitons. From optical fibers to photonic crystals]. Moscow: Fizmatlit; 2005: 647. (In Russ.)
2. **Agrawal G.P.** Nonlinear fiber optics. N.Y.: Academic Press; 2001: 446.
3. **Agrawal G.P.** Applications of nonlinear fiber optics. N.Y.: Academic Press; 2001: 458.
4. **Mikeladze Sh.** Numerische integration der gleichungen vom elliptischen und parabolischen typus. Izvestiya Akademii Nauk SSSR. Seriya Matematicheskaya. 1941; 5(1):57–74. (In Russ.)
5. **Paasonen V.I., Fedoruk M.P.** A compact dissipative scheme for nonlinear Schrödinger equation. Computational Technologies. 2011; 16(6):68–73. (In Russ.)
6. **Xie S.-S., Li G.-X., Yi S.** Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation b,2. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2009; (198):1052–1061.
7. **Paasonen V.I., Fedoruk M.P.** Three-level non-iterative high accuracy scheme for Ginzburg–Landau equation. Computational Technologies. 2015; 20(3):46–57. (In Russ.)
8. **Marchuk G.I., Shaydurov V.V.** Povyshenie tochnosti resheniya raznostnykh skhem [Improving the accuracy for solutions of difference schemes]. Moscow: Nauka; 1979: 319. (In Russ.)
9. **Paasonen V.I., Fedoruk M.P.** Improving the accuracy for numerical solutions of the Ginzburg–Landau equation. Computational Technologies. 2020; 25(4):45–57. DOI:10.25743/ICT.2020.25.4.005. (In Russ.)
10. **Wang T.** Convergence of an eighth-order compact difference scheme for the nonleniar Shrödinger equation. Advances in Numerical Analysis. 2012; Article ID 913429. DOI:10.1155/2012/913429.
11. **Paasonen V.I.** Classification of difference schemes of maximum possible accuracy on extended symmetric stencils for the Schrödinger equation and the heat conduction equation. Numerical Analysis and Applications. 2020; 13(1):82–94. DOI:10.1134/S1995423920010073.