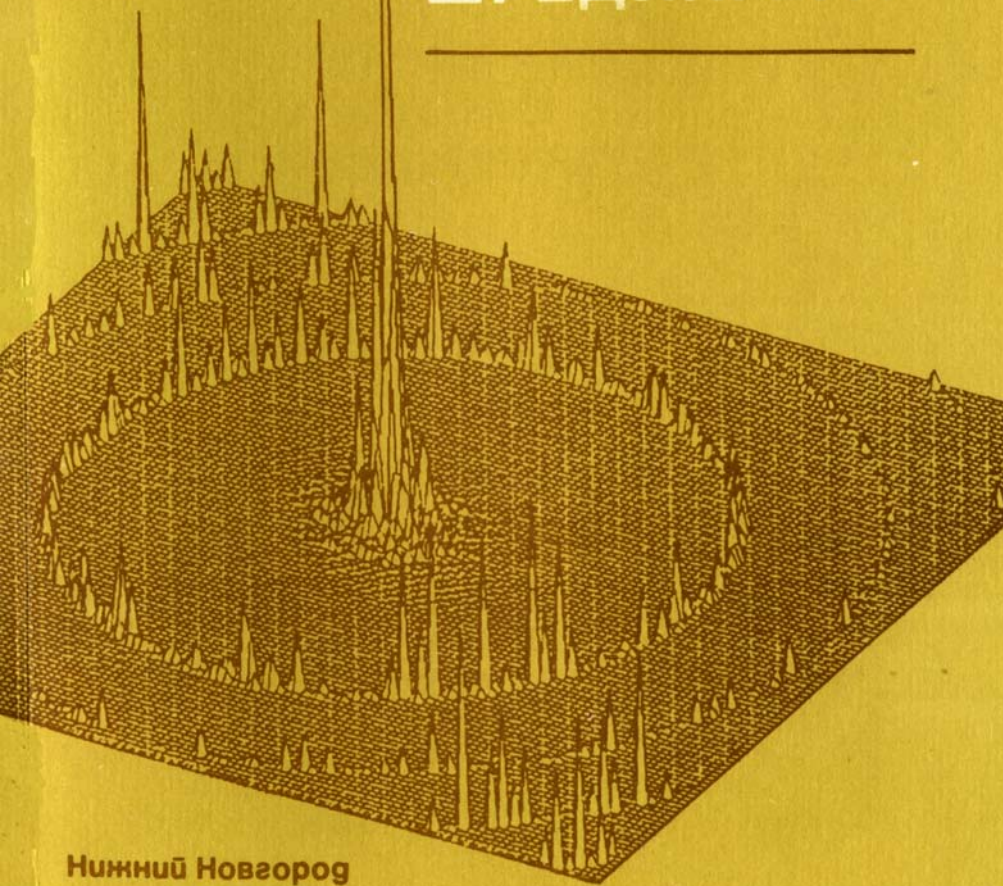


А.Д. ЮНАКОВСКИЙ

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕЛИНЕЙНОГО
УРАВНЕНИЯ
ШРЕДИНГЕРА**



**Нижний Новгород
1995**

Издано по решению Редакционно-издательского совета
Института прикладной физики РАН

УДК 519.63 (075.8)

Юнаковский А. Д. Моделирование нелинейного уравнения Шредингера
/ИПФ РАН. Нижний Новгород, 1995. 160 с.

Монография посвящена проблемам математического моделирования нелинейного уравнения Шредингера, обладающего высокой универсальностью и применяющегося для описания волновых процессов во многих областях физики. Сформулированы основные принципы построения приближенных решений этого уравнения, а также приводятся примеры их реализации как спектральными, так и сеточными методами. Приводятся и обосновываются алгоритмы, в основу построения которых положен принцип расщепления по физическим процессам. Для чтения приведенных в книге доказательства свойства используемых аппроксимаций достаточно знакомства с элементами функционального анализа. Необходимые сведения о дискретном преобразовании Фурье изложены в приложении.

Книга предназначена для широкого круга специалистов, занимающихся моделированием физических процессов на ЭВМ, а также для аспирантов и студентов старших курсов вузов.

Ил. 20, табл. 1, список использованной лит. 61.

Рецензенты

доктор физико-математических наук Г. М. Жислин,

доктор физико-математических наук Ю. А. Степаняц

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Введение</i>	5
<i>Глава 1. Некоторые свойства нелинейного уравнения Шредингера</i>	11
1.1. Метод моментов	13
1.2. Линзовое преобразование.....	16
1.3. Принципы построения приближенного решения.....	19
<i>Глава 2. Функция матриц</i>	24
<i>Глава 3. Задача Коши для системы обыкновенных уравнений</i>	29
<i>Глава 4. Применение преобразования Фурье для решения нестационарного уравнения Шредингера</i>	33
4.1. Приближенная операторная экспонента	36
4.2. Постановка краевых задач	39
4.3. Сохранение инвариантов	43
4.4. Примеры.....	44
<i>Глава 5. Введение в теорию пространств</i>	48
<i>Глава 6. Приближенная операторная экспонента</i>	50
<i>Глава 7. Система Захарова</i>	60
7.1. Одномерная система.....	60
7.2. Сохранение второго инварианта	64
7.3. Тестовый пример	69
7.4. Система со сферической симметрией	71
7.5. Двумерный векторный случай	75
7.6. Примеры и их анализ.....	81
<i>Глава 8. Гидродинамическая аналогия</i>	102
<i>Глава 9. Разностное уравнение второго порядка</i>	107
<i>Глава 10. Метод Бунемана</i>	110
<i>Глава 11. Разностные методы</i>	119
<i>Приложение. Преобразование Фурье</i>	130
Конечные ряды Фурье	131
Быстрое преобразование Фурье (БПФ).....	138
Свертки.....	145
Теоремы Котельникова и Агеева.....	147
Быстрое преобразование Ханкеля.....	150
<i>Литература</i>	154

CONTENTS

<i>Introduction</i>	5
Chapter 1. Some properties of nonlinear Schrodinger equation	11
1.1. The method of moments	13
1.2. Lens transformation	16
1.3. Principles of construction of the approximate solution	19
Chapter 2. The function of matrices	24
Chapter 3. Cauchy problem for the system of ordinary equations	29
Chapter 4. Application of Fourier transformation for the solution of nonstationary Schrodinger equation	33
4.1. Approximated operator exponent	36
4.2. Statement of boundary problems	39
4.3. Preservation of invariants	43
4.4. Examples	44
Chapter 5. Introduction to the theory of spaces	48
Chapter 6. The approximate operator exponent	50
Chapter 7. Zakharov system	60
7.1. A one-dimensional system	60
7.2. Preservation of the second invariant	64
7.3. The test example	69
7.4. A system with a spherical symmetry	71
7.5. A two-dimensional vector case	75
7.6. Examples and their analysis	81
Chapter 8. Hydrodynamic analogy	102
Chapter 9. The difference equation of the second order	107
Chapter 10. Buneman method	110
Chapter 11. Difference methods	119
Appendix. Fourier transformation	130
Finite Fourier series	131
Rapid Fourier transformation	138
Convolutions	145
Kotel'nikov and Ageev theorems	147
Rapid Hankel transformation	150
References	154

ВВЕДЕНИЕ

Ни одна область современной науки не обходится без численных расчётов. Особенно важно уметь использовать всю вычислительную мощь современных компьютеров. Правильное применение ЭВМ при моделировании физических систем означает нечто существенно большее, чем простое "перемальвание" чисел. Вычислительная машина уже давно не рассматривается как просто арифметическое устройство. Способность быстро и точно производить миллиарды арифметических операций сама по себе глубоко затрагивает любой аспект современной науки и жизни. Значительные изменения в количестве предопределяют и значительные изменения в качестве. Поэтому нет ничего установившегося в применении ЭВМ для получения численных решений. Здесь необходимо много аналитического мастерства и изобретательности и главным образом требуется большое понимание как научной сути задачи, так и математического аппарата. Лишь тогда, когда мы имеем алгоритм для получения численных результатов, можно считать, что на некотором временном интервале задача решена. Опытный вычислитель опирается на аналитическое решение и интуицию, применяя численные расчёты в задачах, которые не поддаются решению другими методами.

К сожалению, в рамках стандартного университетского курса обучению "вычислять" уделяется мало времени. Такое умение требует интеграции по крайней мере трёх дисциплин — математической физики, численного анализа и программирования, изучаемых обычно в не связанных между собой курсах. Неудачная, но понятная тенденция изучать эти части порознь, мало зная или вовсе не признавая существования других частей, жива до сих пор. В лучшем случае эта "великолепная изоляция" приводит к неполным результатам, в худшем случае она приводит к полностью ошибочным результатам.

Задачи изучения процессов, описываемых в физике, технике, экономике, биологии и т. д. уравнениями и системами дифференциальных уравнений, требуют как совершенствования аналитических методов, так и создания достаточно простых дискретных математи-

ческих моделей изучаемых процессов. Оба пути имеют одну цель — получение содержательных численных результатов современными ограниченными вычислительными средствами. Дифференциальные уравнения представляют собой сложнейшую область математики и математической физики. И всё же дифференцируемые многообразия, с которыми имеют дело уравнения и системы уравнений в частных производных, неизмеримо проще их дискретных аналогов, уравнений в конечных разностях.

В некотором смысле построение реалистичных дискретных математических моделей является простым. Реалистичные модели имеют, однако, неприятную особенность быстро исчерпывать память и скоростные возможности современных вычислительных машин. Прогресса можно достичь либо при искусном упрощении математической модели, позволяющем получить содержательные численные исследования, либо когда аналитические достижения позволят изучить класс процессов, которые ранее считались слишком сложными.

На протяжении всей книги мы касаемся как в высшей степени интересных аналитических вопросов, так и столь же интересной проблемы получения численного ответа на численно сформулированные вопросы с помощью разумно упрощенных регулярных методов и прозрачных вычислительных программ. Мы постоянно подчёркиваем, что эти два типа проблем тесно связаны.

Аналитический подход следует оценивать исходя из того, является ли он полезным с вычислительной точки зрения или нет. В четвёртой главе в качестве примера приведён ряд аналитических решений краевых задач, мало чем помогающих при изучении характера поведения конкретного решения. С другой стороны, построение вычислительных методов часто требует привлечения новых аналитических процедур.

Главное внимание в книге обращается на выявление самого пути построения метода приближённого решения задачи, в конце которого найти решение новой поставленной дискретной задачи может компьютер.

Часто бывает так, что построить алгоритм легче, чем понять, как он работает и что он может дать в результате. Обычно приходится особенно опасаться даже небольшой неустойчивости, которая, приводя к росту решения, может понизить точность и вообще испортить всё. Поэтому вычислители говорят, что в численных методах, как и в некоторых житейских ситуациях, нет мелочей.

Вопросы устойчивости, корректности и непрерывной зависимости начальных и краевых задач исследуются уже давно. Для диск-

ретных многообразий эти вопросы возникли вместе с началом эры компьютеризации. Понятно, что при постановке задач на ЭВМ, когда число дискретных переменных растёт и достигает предельного для вашей ЭВМ значения, данные вопросы играют первостепенное значение.

Можно в самом общем случае сформулировать основные требования при численном моделировании. К ним относятся: универсальность метода и его высокая разрешающая способность, что позволяет от идеализированных задач переходить к более реальным; высокая скорость при снижении точности и принципиальная возможность повышения точности до любой необходимой величины; широкий класс задач; алгоритмическая простота, удобство для программирования, доступность для программистов любой квалификации.

К другим важным свойствам относятся удобство и естественность распараллеливания вычислений, простота логической организации процесса вычислений и возможность быстрой визуализации. Алгоритмические вычисления имеют свои правила, свою методологию, которые просто невозможно игнорировать. Успех решения задачи в основном связан с правильным и корректным построением всего цикла алгоритмического процесса получения численного решения и его интерпретации.

Экономичность вычислительного процесса в широком смысле слова может быть понята только в рамках всей технологической цепочки вычислительной математики. Главный недостаток ЭВМ состоит в том, что каждая задача, к которой она может быть применена, должна быть приведена, часто довольно утомительным способом, к последовательности арифметических задач. С учётом больших затрат на программирование окончательная оценка качества алгоритма должна определяться не только количеством времени расчёта на ЭВМ, но и затратами человеческого времени на программирование, отладку, тестирование и усовершенствование программы. В численных расчётах всегда имеется бездна ловушек. Необходимо научиться распознавать симптомы численного нездоровья и правильно диагностировать решаемую задачу. Сколько громоздких преобразований, а порой и просто ошибочных результатов может получить физик, который без подготовки берется за вычисление на ЭВМ физической модели.

Одна из основных задач современного математического анализа состоит в создании вычислительных алгоритмов для численного решения уравнений в частных производных всех типов. Нелинейное

уравнение Шредингера обладает чрезвычайно высокой универсальностью и применяется для описания волновых процессов во многих областях физики: в теории поверхностных волн [1], в моделях эволюции распределений плазменных колебаний [2], нелинейной оптике [3], биофизике и т. д. Один известный класс решений этого уравнения описывает движение уединенных волн (солитонов), их образование и распад [4, 5]. Другой, не менее важный класс решений описывает образование за конечное время особенностей — коллапсирующих каверн [6, 7, 8]. Подобные характерные особенности поведения решений этого уравнения требуют тщательного отбора классов их конечномерных приближений и способов описания эволюции этих приближений. Как моделирование движения солитонов, так и расчет возникновения особенности за конечное время требуют в конце концов одного и того же — возможности реализации очень большого числа временных шагов. Для осуществления этого необходимо обладать целым набором самых разнообразных методов.

В этой книге мы хотели прежде всего показать, что способ расщепления по физическим процессам позволяет построить весьма мощные методы решения как линейного, так и нелинейного уравнения Шредингера, о широкой применимости которого для описания физических процессов мы уже говорили. В настоящее время известно достаточно много методов решения подобных задач, которые хорошо работают при тщательно оговорённых условиях. Однако все они, не исключая, разумеется, и методов, изложенных ниже, обладают различными недостатками. Это обстоятельство и понуждает к постоянному поиску новых подходов. Различные вариации основного развиваемого нами подхода и основного уравнения приводят к другим подходам и уравнениям, представляющим самостоятельный интерес.

При изучении солитонной турбулентности [9] и филаментаций квазиоптических пучков электромагнитных волн [10], когда в начальных данных имеется несколько солитонов или каверн, необходимо вести рассмотрение процессов взаимодействия одновременно на больших пространственных и временных интервалах. Главная трудность при численном моделировании заключается в невозможности получения решения как угодно близко к точке особенности без потери точности аппроксимации или ограничения пространства взаимодействия. Спектральный метод, применяемый в гл. 5 — 7, легко обобщается и позволяет рассмотреть целые классы различных механизмов затухания, начиная от сильнолокализованного многофотонного поглощения и до наиболее общего вида, задаваемого опера-

торами типа свёртки. К этому виду относится и модельное линейное затухание Ландау. Введение механизма затухания позволяет изучать задний фронт коллапса и послеколлапсные эффекты, рассматривать структуры, возникающие при распаде каверн, и т. п.

Сеточные методы, развиваемые в гл. 10 — 11, применяются в случаях, когда не работают спектральные методы или их применение приводит к большому объему вычислений. Это может быть связано с геометрией области или с граничными условиями. Например, для граничных условий третьего рода даже простое разложение функции в ряд по собственным функциям оператора Лапласа в прямоугольной области не является простой вычислительной задачей.

Не претендуя на исчерпывающее рассмотрение проблемы моделирования решения нелинейного уравнения Шредингера, рассмотрим только те "подводные камни", с которыми, по нашему мнению, наиболее часто встречается пользователь ЭВМ, занимающийся нелинейными уравнениями Шредингера. Таким образом, цель этой работы — создание и отбор численных методов, допускающих моделирование "долгоживущих" решений.

Приведённые в книге алгоритмы насколько возможно внимательно проверены на предмет ошибок и опечаток. Как показывает опыт, почти не бывает раз и навсегда безошибочно расписанных алгоритмов. Поэтому нет гарантии, что книга полностью свободна от ошибок.

Книга написана на основе специального курса, читавшегося автором в течение нескольких лет для студентов механико-математического факультета ННГУ им. Н. И. Лобачевского, специализирующихся в области математической физики. Надеюсь, что она будет представлять интерес не только для студентов-математиков, для которых она и написана, но и для физиков и инженеров, в той или иной мере связанных с проблемами моделирования, проведения сложных расчетов и с решением прикладных задач, содержащих нелинейные уравнения Шредингера. Успех приносит правильный и корректно построенный алгоритм. Убежден, что возможность вычисления моделей на ЭВМ может глубоко изменить даже содержательную постановку задачи.

Автор пользуется случаем поблагодарить своих коллег, оказавших большую помощь при написании настоящей книги. Среди них он хотел бы выделить Т. А. Петрову и Э. М. Шер, чей огромный труд был вложен в написание программ, реализующих многие описанные в книге алгоритмы. Автор искренне признателен за сотрудничество

проф. А. Г. Литваку и проф. Г. М. Фрайману, а также глубоко благодарен акад. В. И. Таланову, проф. Г. М. Жислину, проф. С. Н. Власову, д. ф.-м. н. Ю. А. Степанянцу, внимательно прочитавшим рукопись и сделавшим ряд полезных замечаний. Он с признательностью отмечает помощь своих коллег В. Е. Белова, Н. А. Бритова, Р. А. Дудника, не пожалевших времени, чтобы сообщить свои предложения и замечания к рукописям, предварявшим эту книгу. Автор бесконечно признателен коллективу сотрудниц редакции ИПФ РАН, квалифицированно и очень тщательно выполнивших всю подготовительную работу, за терпеливое сотрудничество.

Глава 1

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Цель этой главы — ввести читателя в основные понятия и проблемы математической теории решений уравнения Шредингера и дать ему возможность приобрести некоторые ощущения знакомства со свойствами этого нелинейного уравнения и имеющими место функциональными соотношениями. Мы преследовали только эту ограниченную цель, не позволяя себе углубиться во многие интересные процессы, связанные с классификацией возможных типов решений, их анализом и (или) их численными решениями.

Будем рассматривать нелинейное уравнение Шредингера в случае цилиндрической симметрии:

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} + |E|^2 E = 0. \quad (1.1)$$

Граничные условия:

$$\frac{\partial E}{\partial r} \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow 0; \quad E \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty. \quad (1.2)$$

Начальные условия:

$$E(r, 0) = e^{-r^2/2} = E_0(r). \quad (1.3)$$

У решения уравнения (1.1) с граничными условиями (1.2) есть по крайней мере два инварианта:

$$I = \int_0^{\infty} |E|^2 r dr = \text{const}, \quad (1.4)$$

обычно называемый "числом квазичастиц", и гамильтониан

$$H = \int_0^{\bar{r}} \left(\left| \frac{\partial E}{\partial r} \right|^2 - \frac{1}{2} |E|^4 \right) r dr. \quad (1.5)$$

Будем, естественно, предполагать, что решение принадлежит таким пространствам, в которых интегралы от решения в (1.4) и (1.5) существуют. Чтобы понять, какие свойства потребуются от приближённого решения для наиболее точного сохранения этих соотношений, покажем, как проверяется инвариантность (1.4) и (1.5) на решении уравнения (1.1) при соблюдении граничных условий (1.2). Продифференцируем сначала (1.4) по t , предполагая в дальнейшем всюду, где потребуется, возможность дифференцировать под знаком интеграла.

$$\frac{dI}{dt} = \int_0^{\bar{r}} \left(\frac{\partial E}{\partial t} \bar{E} - E \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} \right) r dr.$$

Подставим в полученное выражение значения $\frac{\partial E}{\partial t}$ и $\frac{\partial \bar{E}}{\partial t}$ из (1.1):

$$\frac{i}{2} \int_0^{\bar{r}} \left(\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} + |E|^2 \right) \bar{E} - \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} + |\bar{E}|^2 \bar{E} \right) E \right) r dr.$$

Очевидно, что вторые слагаемые во внутренних скобках взаимно уничтожатся, после чего сократится множитель r вне скобок:

$$\frac{i}{2} \int_0^{\bar{r}} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} \bar{E} - \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} E \right) dr.$$

Проинтегрировав по частям, получаем

$$\frac{i}{2} \left(r \frac{\partial E}{\partial r} \bar{E} - r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} E \right) \Big|_0^{\bar{r}} + \int_0^{\bar{r}} \left(r \frac{\partial E}{\partial r} \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} - r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} \frac{\partial E}{\partial r} \right) dr = 0.$$

Предположим, что решение уравнения (1.1) обладает достаточной гладкостью на рассматриваемом нами временном интервале. При вычислении несобственных интегралов и подстановок под их значениями понимаем следующее: существует последовательность $r_n \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$, такая, что значения подстановок в точках r_n

стремятся к нулю, а также и величины интегралов $\int_{r_n}^{\bar{r}} \dots dr$. Можно

также рассматривать уравнение (1.1) в ограниченной области $0 \leq r \leq r_n$ с граничным условием $E(t, r_n) = 0$ и находить предел последовательности решений $E_n(t, r)$ с $r_n \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$. Тогда очевидно, что в силу граничных условий (1.2) подстановка обращается в нуль, а под знаком интеграла происходит сокращение. Так как производная от $I(t)$ тождественно равна нулю, то сама величина I от t не зависит.

Докажем теперь инвариантность гамильтониана $H(t)$:

$$\frac{dH}{dt} = \int_0^{\infty} \left(\frac{\partial E}{\partial r} \frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial r \partial t} + \frac{\partial^2 E}{\partial r \partial t} \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} \right) r dr - \int_0^{\infty} |E|^2 \frac{\partial}{\partial t} |E|^2 r dr.$$

Преобразуем первый интеграл по формуле интегрирования по частям. Подстановка при этом обратится в нуль в силу граничных условий (1.2), так как по предположению если при $r \rightarrow \infty$ величина $E \rightarrow 0$, то $\frac{\partial E}{\partial r}$ и $\frac{\partial \bar{E}}{\partial t}$ тоже стремятся к нулю. В противном случае интегралы (1.4) и (1.5) не существуют. Получим

$$- \int_0^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} \frac{\partial E}{\partial t} \right) dr - \int_0^{\infty} |E|^2 \frac{\partial}{\partial t} |E|^2 r dr.$$

Воспользуемся уравнением (1.1) и заменим члены со второй производной по r . Очевидно, что члены с мнимой единицей сократятся, а оставшаяся величина в точности совпадает со вторым интегралом, но имеет противоположный знак. Доказательство завершено.

1.1. Метод моментов

Решение уравнения (1.1) обладает тем свойством, что так называемый момент второго порядка

$$\xi_{\Phi}^2 = \int_0^{\infty} r^2 |E|^2 r dr = \int_0^{\infty} |E|^2 r^3 dr \quad (1.6)$$

(названный по аналогии с дисперсией функции распределения в теории вероятностей) может быть легко вычислен и представляет собой полином второй степени от t [11]. Вычислим вторую производную от момента (1.6), считая возможным дифференцирование под знаком интеграла:

$$\frac{d}{dt} \xi_{\rightarrow\phi}^2 = \int_0^{\bar{r}} \left(E \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial t} \bar{E} \right) r^3 dr.$$

Воспользовавшись уравнением (1.1) и проведя соответствующие сокращения, получим

$$\frac{d}{dt} \xi_{\rightarrow\phi}^2 = \frac{i}{2} \int_0^{\bar{r}} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} \bar{E} - E \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} \right) r^2 dr.$$

После интегрирования по частям и использования граничных условий (1.2) получим

$$\frac{d}{dt} \xi_{\rightarrow\phi}^2 = -i \int_0^{\bar{r}} \left(\frac{\partial E}{\partial r} \bar{E} - \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} E \right) r^2 dr.$$

Продифференцируем еще раз это соотношение:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \xi_{\rightarrow\phi}^2 &= i \int_0^{\bar{r}} \left(\frac{\partial E}{\partial t} \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} - \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} \frac{\partial E}{\partial r} \right) r^2 dr + \\ &+ i \int_0^{\bar{r}} \left(E \frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial r \partial t} - \frac{\partial^2 E}{\partial r \partial t} \bar{E} \right) r^2 dr. \end{aligned}$$

Воспользовавшись интегрированием по частям для второго интеграла и учтя граничные условия (1.2), получим

$$2i \int_0^{\bar{r}} \left[\frac{\partial E}{\partial t} \left(r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} + \bar{E} \right) - \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} \left(r \frac{\partial E}{\partial r} + E \right) \right] r dr.$$

Выразим производные по времени с помощью уравнения (1.1):

$$\begin{aligned} &- \int_0^{\bar{r}} \left[\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} + |E|^2 E \right) \left(r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} + \bar{E} \right) + \right. \\ &\left. + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} + |E|^2 \bar{E} \right) \left(r \frac{\partial E}{\partial r} + E \right) \right] r dr. \end{aligned}$$

Раскрыв круглые скобки и перегруппировав сопряженные члены, получим

$$\begin{aligned}
& - \int_0^{\infty} \left[\left| \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial E}{\partial r} \right) \right|^2 + r^2 |E|^2 \frac{\partial}{\partial r} |E|^2 + \right. \\
& \left. + \left(\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} \bar{E} + \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \bar{E}}{\partial r} E \right) + 2r |E|^4 \right] dr.
\end{aligned}$$

Первый член подынтегрального выражения интегрируется точно и в результате подстановки дает ноль. Выражение в круглых скобках преобразуется интегрированием по частям, подстановки зануляются. Во втором слагаемом $|E|^2$ вносим под знак дифференцирования.

$$- \int_0^{\infty} \left(\frac{r^2}{2} \frac{\partial}{\partial r} |E|^4 - 2r \left| \frac{\partial E}{\partial r} \right|^2 + 2r |E|^4 \right) dr.$$

Проинтегрировав первое слагаемое подынтегрального выражения по частям и приведя подобные, окончательно получаем:

$$2 \int_0^{\infty} \left(\left| \frac{\partial E}{\partial r} \right|^2 - \frac{1}{2} |E|^4 \right) r dr = 2H.$$

Таким образом найдено, что

$$\frac{d^2}{dt^2} \xi_{\text{эф}}^2 = 2H. \tag{1.7}$$

Проинтегрировав дважды полученное соотношение по t , получим полином второго порядка:

$$\xi_{\text{эф}}^2(t) = Ht^2 + \frac{d}{dt} \xi_{\text{эф}}^2(0) t + \xi_{\text{эф}}^2(0). \tag{1.8}$$

Проанализируем полученное выражение (1.8). В силу того, что $E_0(r)$ в начальных данных в (1.3) является действительной функцией, так называемый "плоский начальный фазовый фронт", $\frac{d}{dt} \xi_{\text{эф}}^2(0) = 0$. Нам нужны здесь только предельные значения при $t \rightarrow 0$ входящих в (1.8) интегралов. Поведение самого решения и его производных по r при таком предельном переходе составляет предмет отдельной задачи и, хотя и не является нашей целью, все же станет более понятным при построении операторной экспоненты в четвертой и шестой главах. Если начальные данные (1.3) таковы, что

для $E_0(r)$ гамильтониан $H > 0$, то ветви параболы (1.8) направлены вверх, и мы не получаем ничего неожиданного. Если же $H < 0$, то ветви параболы (1.8) направлены вниз и в некоторой точке t_0 парабола обязательно пересечёт ось абсцисс, т. е. величина $\xi_{эф}^2$, которая, согласно определению (1.6), должна быть всегда положительной, меняет знак. Получено противоречие, разрешить которое возможно лишь предположив, что или у решения уравнения (1.1) возникает особенность при $t_1 < t_0$, наличие которой не позволяет делать преобразования по частям и занулять подстановки, как это делалось при выводе соотношений (1.5) и (1.6), или если решение существует вплоть до точки t_0 , то квадрат его модуля стремится к функции типа δ — функции Дирака: всюду, кроме нулевой точки, решение стремится к нулю, а в самой нулевой точке неограниченно возрастает. Вопрос о скорости возрастания, как и о характере возникающей в конечной точке особенности остается дискуссионным (см. [12 — 14]). Равенство (1.8) получено В. И. Талановым [11], а соответствующее утверждение о возникновении особенности решения носит название "теорема Таланова". Процесс возникновения особенности называют коллапсом. Различные виды коллапсов представлены в гл. 8, где они допускают наиболее наглядную трактовку.

1.2. Линзовое преобразование

Построим теперь класс решений уравнения (1.1), обладающих особенностями. Для этого сделаем замену переменных и введем новую неизвестную функцию:

$$\xi = \frac{r}{a(t)}, \quad \tau = \int_0^t \frac{dt}{a^2(t)}, \quad E(r, t) = \frac{1}{a} U(\xi, \tau) e^{i \frac{a \dot{a} \xi^2}{2}}. \quad (1.9)$$

Это преобразование и носит название "линзовое" [8] и часто именуется преобразованием Таланова. Для удобства вычислений введем обозначение

$$\beta = \frac{a \dot{a} \xi^2}{2}.$$

Тогда $\frac{\partial \beta}{\partial r} = \dot{a} \xi$, $\frac{\partial \xi}{\partial t} = -\frac{\dot{a}}{a} \xi$. Будем последовательно вычислять все члены уравнения (1.1) в новых переменных:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{a^3} \frac{\partial U}{\partial \tau} - \frac{\dot{a}}{a^2} U + \left[\frac{i\xi^2}{2} \left(\ddot{a} + \frac{(\dot{a})^2}{a} \right) - i\dot{a} \frac{\dot{a}}{a} \xi \right] U - \frac{1}{a} \frac{\partial U}{\partial \xi} \frac{\dot{a}}{a} \xi \right\} e^{i\Phi},$$

$$r \frac{\partial E}{\partial r} = \frac{\xi}{a} \left(\frac{\partial U}{\partial \xi} + ia\dot{a}U \right) e^{i\Phi}.$$

Здесь и далее выразим r через ξ :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} = \frac{1}{\xi a} \left[\frac{1}{a^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial U}{\partial \xi} + 2i \frac{\dot{a}}{a} \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} + 2i \frac{\dot{a}}{a} \xi U - (\dot{a})^2 \xi^2 U \right] e^{i\Phi}.$$

Подставим полученные выражения в уравнение (1.1), приведем подобные члены и сократим на $\frac{1}{a^3} e^{i\Phi}$. В результате получим

$$2i \frac{\partial U}{\partial \tau} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial U}{\partial \xi} + |U|^2 U - \ddot{a}(t) a^3(t) \xi^2 U = 0. \quad (1.10)$$

Зависимость функции a от переменной t выделена здесь специально. Для завершения преобразования необходимо в последнем члене полученного уравнения избавиться от переменной t . Для этого, предположив, что функция a_1 зависит от τ и $a_1(\tau) = a(t)$, выразим производные по t через производные по τ :

$$a^3 \ddot{a}(t) = a^3 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{a_1^2} \frac{\partial a_1}{\partial \tau} \right) = - a_1(\tau) \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \left(\frac{1}{a_1(\tau)} \right).$$

Заметим, что если в (1.10) $a(t)$ является линейной функцией от t , например, $a(t) = t_0 - t$, то уравнение (1.10) по виду совпадает с уравнением (1.1), но записано в других переменных. Это значит, что при линейной функции $a(t)$ линзовое преобразование (1.9) оставляет уравнение (1.1) инвариантным. Если теперь найти ограниченное при всех τ решение $U(\xi, \tau)$, то соответствующее ему согласно (1.9) $E(r, t)$ будет иметь особенность при конечном t . Будем искать ограниченное решение $U(\xi, \tau)$ в виде

$$U(\xi, \tau) = V(\xi) e^{-i\omega\tau}.$$

Получим

$$2\omega V + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial V}{\partial \xi} + |V|^2 V = 0.$$

Сделав замену

$$\sqrt{2\omega} \xi = \rho, \quad V / \sqrt{2\omega} = v,$$

получим уравнение

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial v}{\partial \rho} + |v|^2 v + v = 0.$$

Решение этого уравнения при условиях $\frac{\partial v}{\partial \rho} \rightarrow 0$ при $\rho \rightarrow 0$, $v \rightarrow 0$ при $\rho \rightarrow \infty$ носит название "таунсовская мода" [9,15]. Зная v , легко восстанавливаем V , U , E и находим требуемые начальные данные $E_0(r)$. Остается проверить, какой знак будет у гамильтониана H (см. (1.5)) на решении, основанном на таунсовской моде.

Линзовое преобразование, которое может казаться непривычным, является одним из основных преобразований нелинейной оптики. Преобразование этого типа, позволяющее "отправить" предполагаемую точку особенности в бесконечно удаленную точку, показывает, в частности, что вместо поиска решения с особенностью уравнения (1.1), можно искать как ограниченные, так и неограниченные решения уравнения (1.10). Не будем, однако, рассматривать их здесь, равным образом как и те интригующие новые типы решений с особенностями, которые они позволяют искать [13, 14], ограничившись несколькими замечаниями. Если решение (1.10) остается ограниченным, то мы правильно выбрали функцию $a(t)$ и получили однозначный ответ на вопрос о характере возникающей особенности у решения уравнения (1.1) с выбранными начальными данными (1.3). Это, в свою очередь, даёт ответ на вопрос, поставленный в конце разд. 1.1, — будет ли подынтегральная функция $|E|^2$ в (1.6) стремиться к δ — функции или к линейной комбинации с соответствующими весами её и её производных. Если же решение становится неограниченным в конечной точке $t_1 < t_0$, то необходимо взять другое t_0 в линзовом преобразовании. Заметим, что в бесконечно удалённую точку переводилась точка t_1 , в которой $\xi_{\text{эф}}^2(t_1) \neq 0$. При ограниченности решения при любом конечном τ и неограниченном росте при $\tau \rightarrow \infty$ мы не угадали характер особенности при линзовом преобразовании. Вопрос о возможном поведении решения в окрестности возникающей особенности остаётся до сих пор дискуссионным (см. гл. 8, а также [7], [8]).

В разд. 1.1, 1.2 мы сформулировали некоторые характерные свойства решений нелинейных уравнений Шредингера с кубической нелинейностью, которые характерны именно для решений в пространстве, а не на прямой, и которые требуют разработки специальных методов численного моделирования. Одномерному случаю посвящена обширная литература (см., например, [4, 5]). Здесь возможны решения типа системы бегущих с разной скоростью солитонов, требующие при численном моделировании такого же большого числа шагов, как и при нахождении приближенного решения в окрестности точки возникновения особенности в (1.1).

1.3. Принципы построения приближенного решения

Существует много разных методов и численных схем нахождения приближенного решения нелинейных уравнений Шредингера, начиная от классического метода прямых (см., например, [16]), когда дифференциальный оператор по пространственным переменным заменяется конечно-разностным, а получившаяся при этом конечномерная система обыкновенных дифференциальных уравнений решается методом типа Рунге — Кутты (сюда же относится и схема предиктор — корректор), и кончая комбинированным или гибридным, когда на конечной стадии образования особенности моделирование ведётся методом многих частиц [17].

В случае двух пространственных переменных часто используется метод переменных направлений. Применение этого метода к нестационарному уравнению Шредингера описано в книге [18]. Однако у этого метода есть явно выделенное "первое" пространственное направление, что мешает на больших временных интервалах сохранить заложенную в начальных данных симметрию, а также организовать счёт в окрестности точки особенности.

Рассмотрим здесь лишь некоторые методы — "долгоживущие", дающие возможность при численном моделировании произвести очень большое число шагов по времени. Немаловажную роль при выборе метода счета играет простота реализации взятого алгоритма, возможность сделать это, не привлекая себе в помощь коллектива сотрудников для программирования. Проблема правильного составления большой программы так и остаётся нерешённой. Начиная с некоторого уровня сложности, появление непредвиденной ошибки становится неизбежным. Поэтому речь идёт о том, чтобы остаться в допустимых пределах.

Метод "расщепления по физическим процессам" [19] состоит в сведении исходной эволюционной задачи, описывающей сложный физический процесс, к решению последовательности задач, описывающих процессы более простой физической структуры. Приблизительно это удаётся сделать на основе аддитивности рассматриваемых процессов в малом. Покажем, что схема "расщепления по физическим процессам" строится путем последовательных операторных замен неизвестной функции на малом интервале. Далее эта схема станет для нас основной и все развиваемые здесь методы, как спектральные, так и сеточные, используются для реализации отдельных операторов схемы расщепления. Такой путь позволяет наиболее просто сделать обобщения на случай двух пространственных переменных. При проведении замен на первом этапе мы стремимся осуществить переход от уравнения или системы уравнений с неограниченными по пространственным координатам операторами к уравнениям с ограниченными операторами. Такой переход существенно расширяет возможности последующего численного моделирования.

Реализация схемы расщепления сводится к последовательному решению задач Коши для достаточно простых и, что немаловажно, знакомых уравнений. За начальные данные для последующего уравнения берутся результирующие значения предыдущего. Каждая из этих задач может быть решена отдельно. Необходимо следить лишь за тем, чтобы решение каждого из уравнений в схеме расщепления удовлетворяло граничным условиям исходного уравнения. Увидим, что в случае нулевых или периодических граничных условий никаких осложнений не возникает. При решении задачи с граничными условиями второго рода потребуется дополнительно выполнение этого же условия от потенциала уравнения. Случай граничных условий третьего рода надо рассматривать особо. Легко проверить непосредственными вычислениями, что в случае наличия кубической нелинейности выполняется так называемое условие излучения Зоммерфельда [20] у решений всех уравнений схемы расщепления.

Одним из уравнений схемы расщепления является линейное нестационарное уравнение Шредингера в однородном пространстве, решение которого тривиально записывается с помощью преобразования Фурье (см. гл. 4, 5). Однако находить это решение можно не обязательно с помощью преобразования Фурье. Например, в случае цилиндрической симметрии (см. (1.1)) можно воспользоваться разностным методом типа метода интегральных тождеств Г. И. Марчука [21] (см. гл. 11), но, естественно, для цилиндрического лапласиана. В случае увеличения пространственной размерности для решения

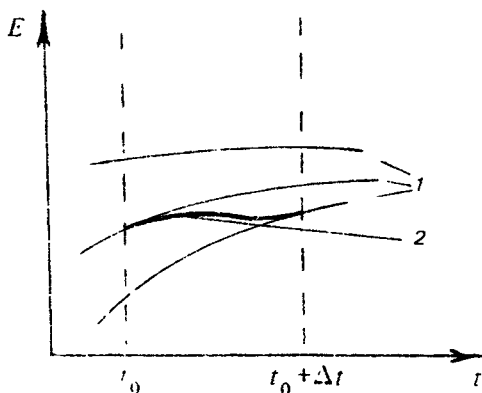


Рис. 1. Характер построенного приближенного решения: 1 – семейство точных решений $E(t)$, 2 – приближенное решение E_{ap}

уравнения в свободном пространстве можно применить метод Бунемана (см. гл. 10, а также [22]).

На заданном малом отрезке $(t_0, t_0 + \Delta t)$ будем стремиться построить такое приближенное решение задачи, которое кроме высокого порядка аппроксимации обладает ещё и тем свойством, что в начальной и конечной точках рассматриваемого интервала производные по времени приближенного решения совпадают с производными точного решения. Естественно, что в конечной точке $t_0 + \Delta t$ мы попадём на другую, близкую траекторию, но с производной, соответствующей именно этой траектории (рис. 1).

Если у решения уравнения $E(\tau)$, $t_0 \leq \tau \leq t_0 + \Delta t$, есть инвариант $I(E(\tau)) = \text{const}$, то автоматически выполняются равенства

$$\left. \frac{dI(E_{ap}(\tau))}{d\tau} \right|_{\tau=t_0} = \left. \frac{dI(E_{ap}(\tau))}{d\tau} \right|_{\tau=t_0 + \Delta t} = 0$$

для приближенного решения $E_{ap}(\tau)$ в начальной и конечной точках рассматриваемого интервала. Выполнение именно этих равенств мы проверяли при доказательстве существования инвариантов (1.4), (1.5).

При построении неявного алгоритма стремимся в случае нелинейного уравнения получить в точке $t_0 + \Delta t$ наиболее простую

алгебраическую (трансцендентную) систему уравнений относительно $E(t_0 + \Delta t)$. Вместо обычно возникающей системы уравнений типа

$$f_j(E_1, E_2, \dots, E_n) = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (1.11)$$

будем стремиться получить для каждой компоненты E_i своё уравнение

$$F_i(E_i) = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.12)$$

Если при нахождении решения системы (1.11) каким-либо итерационным методом сделаем $m < n$ шагов, то фактически осуществим движение в m -мерном подпространстве n -мерного пространства решений. Если рассматривать это как процесс минимизации функции

$$F = \sum_{i=1}^n (f_i(E))^2,$$

то скорость сходимости его к нулю определяется по обусловленности якобиана $\left(\frac{\partial f_i}{\partial E_j} \right)$.

Оценить эту обусловленность можно по асимптотике поведения собственных чисел оператора правой части исходного уравнения. Так как при моделировании мы вынуждены работать в ограниченной пространственной области, то в системе (1.18) участвуют конечномерные аппроксимации как функций, так и соответствующих операторов. Возьмем проекцию линеаризованного оператора правой части на первые n его собственных векторов. Можно считать, что она такая же, как и у оператора Лапласа, т. е. собственные числа растут не быстрее, чем

$$\lambda_n \approx C n^2.$$

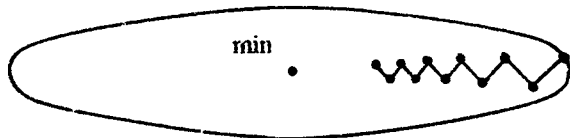


Рис. 2. Траектория поиска минимума градиентным методом

Тогда обусловленность якобиана оценивается величиной

$$\Lambda_{об} \approx 1 + C \Delta t n^2.$$

Обычно из условия устойчивости берут

$$\Delta t n^2 < 1. \quad (1.13)$$

На рис. 2 показано, что даже для случая $n = 2$, когда линии уровня функции F являются практически эллипсами большого эксцентриситета, продвижение к минимуму, находящемуся в центре, происходит очень медленно. При этом маршрут состоит из осцилляций в направлении локальных градиентов. Очевидно, что число шагов m при нахождении минимума должно быть не меньше, а гораздо больше n . Имеется явная необходимость в ускорении сходимости итераций. Достичь этого можно уменьшением Δt из условия (1.13). При этом поверхности постоянного уровня функции F становятся близкими к $(n - 1)$ -мерным сферам, а градиент функции F будет направлен к их центру. Однако объем вычислений при этом не убывает, так как, уменьшив число шагов поиска минимума, мы соответственно увеличиваем число шагов по времени.

При решении систем типа (1.12), как увидим в дальнейшем, для наших задач не возникает ни проблемы отделения корней, ни нахождения решения с наперёд заданной точностью.

В случае, когда в точке $t_0 + \Delta t$ приходится решать систему линейных алгебраических уравнений, надо стремиться получать системы с трёхдиагональными матрицами, для которых работает метод прогонки [18]. В случае двух пространственных переменных — соответственно, блочно-трёхдиагональные, допускающие прямой быстрый метод нахождения решения, типа метода Бунемана (см. гл. 10).

Отметим ещё раз, что мы всегда стремимся получить просто реализуемый алгоритм, хотя способ его получения может оказаться достаточно сложным. Однако весьма важным является то, что понимание этих алгоритмов не вызывает затруднений. Они легко программируются и просты в употреблении. Простота реализации существенно ускоряет процесс написания программ, сокращает число ошибок программирования и в конечном итоге быстрее приводит к успеху.

Глава 2

ФУНКЦИИ МАТРИЦ

В этой главе излагаются общие сведения о функциях от матриц. Основные определения, а также алгебраические действия над матрицами предполагаются известными. Цель, которая здесь преследуется, — провести необходимое для вычислений "моделирование" некоторых разделов функционального анализа.

Пусть A — симметричная матрица. Тогда существует такая ортогональная матрица Q , что преобразование подобия

$$Q^{-1}AQ = J \quad (2.1)$$

приводит ее к диагональной форме, где на главной диагонали стоят собственные значения матрицы, а все остальные элементы матрицы — нули. С помощью такого преобразования легко получать функции от матриц.

Пусть

$$f(\lambda) = f_0 + f_1 \lambda + \frac{1}{2} f_2 \lambda^2 + \dots$$

— аналитическая функция λ в окрестности точки 0. Тогда, если все собственные значения матрицы A лежат в этой окрестности, можно определить матрицу

$$f(A) = f_0 I + f_1 A + \frac{1}{2} f_2 A^2 + \dots$$

где A — симметричная матрица. Воспользуемся преобразованием подобия (2.1):

$$\begin{aligned} Q^{-1}f(A)Q &= f_0 Q^{-1}IQ + f_1 Q^{-1}AQ + \frac{1}{2} f_2 Q^{-1}AQ \cdot Q^{-1}AQ + \dots = \\ &= f_0 I + f_1 J + \frac{1}{2} f_2 J^2 + \dots \end{aligned}$$

Домножив слева на матрицу Q , а справа на Q^{-1} , получим

$$f(A) = Q(f_0 I + f_1 J + \frac{1}{2} f_2 J^2 + \dots) Q^{-1}.$$

Пусть теперь матрица A не является симметричной. В этом случае гарантируется существование только невырожденной матрицы P , такой, что преобразование подобия с ней

$$P^{-1}AP = J$$

приводит матрицу к нормальной жордановой форме. Пусть имеется только одна нормальная жорданова клетка размерности n , отвечающая одному собственному значению:

$$J = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \end{pmatrix}.$$

У этой матрицы есть только один собственный вектор

$$Je_1 = \lambda e_1$$

и $n-1$ векторов e_2, e_3, \dots, e_n , удовлетворяющих соотношениям

$$Je_2 = \lambda e_2 + e_1, \quad Je_n = \lambda e_n + e_{n-1}$$

и называемых присоединенными векторами. Отметим, что инвариантными здесь являются все линейные оболочки векторов e_1, \dots, e_s для любого s , $1 \leq s \leq n$.

Пусть, к примеру, размерность n равна четырем. Тогда

$$J = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad J^2 = \begin{pmatrix} \lambda^2 & 2\lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda^2 & 2\lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda^2 & 2\lambda \\ 0 & 0 & 0 & \lambda^2 \end{pmatrix},$$

$$J^3 = \begin{pmatrix} \lambda^3 & 3\lambda^2 & 3\lambda & 1 \\ 0 & \lambda^3 & 3\lambda^2 & 3\lambda \\ 0 & 0 & \lambda^3 & 3\lambda^2 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda^3 \end{pmatrix}.$$

Как и в случае симметричных матриц, получим

$$\begin{aligned} P^{-1}f(A)P &= f_0 P^{-1}IP + f_1 P^{-1}AP + \frac{1}{2}f_2 P^{-1}AP P^{-1}AP + \dots = \\ &= f_0 I + f_1 J + \frac{1}{2}f_2 J^2 + \dots \end{aligned}$$

Подставив в полученный ряд вычисленные значения степеней матрицы J , найдем

$$P^{-1}f(A)P = \begin{pmatrix} F_0 & F_1 & F_2 & F_3 \\ 0 & F_0 & F_1 & F_2 \\ 0 & 0 & F_0 & F_1 \\ 0 & 0 & 0 & F_0 \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$F_0 = f(\lambda) = f_0 + f_1 \lambda + f_2 \lambda^2/2 + \dots,$$

$$F_1 = f'(\lambda) = f_1 + f_2 \lambda + f_3 \lambda^2/2 + \dots,$$

$$F_2 = f''(\lambda)/2! = f_2/2 + f_3 \lambda/2 + \dots,$$

$$F_3 = f'''(\lambda)/3! = f_3/3! + \dots$$

Теперь, действуя по аналогии, можно построить аналитическую функцию от произвольной матрицы. Самым трудным моментом здесь является нахождение матрицы P преобразования подобия.

Пусть заданы две матрицы A и B и для каждой из них известны матрицы преобразования подобия, приводящие каждую из них к диагональному виду. Преобразование же подобия для суммы $A + B$ неизвестно, как и факт наличия или отсутствия присоединенных векторов, а необходимо найти матрицу $e^{(A+B)t}$, не прибегая к громоздкому и копящему ошибки построению ряда, в котором участвует многократное перемножение матриц. Очевидно, что можно найти отдельно матрицы e^{At} и e^{Bt} . Попытаемся определить, справедливо ли равенство

$$e^{At} e^{Bt} = e^{(A+B)t} ? \quad (2.2)$$

Легко показать с помощью рядов Тейлора, что

$$e^{At} e^{Bt} = e^{(A+B)t} + \frac{t^2}{2} [A, B] + \dots \quad (2.3)$$

где

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.4)$$

называется коммутатором матриц A и B .

Необходимым условием выполнения равенства (2.2) является перестановочность матриц A и B , т. е. равенство нулю коммутатора (2.4). Заметим, что коммутатор антисимметричен относительно перестановки матриц

$$[A, B] = -[B, A].$$

Можно воспользоваться этим свойством для получения аппроксимации оператора $e^{(A+B)t}$ в виде произведения операторов вида e^{At} и e^{Bt} . Составим произведение

$$\begin{aligned} U(t) &= e^{A t/2} e^{B t} e^{A t/2} = e^{A t/2} e^{B t/2} e^{B t/2} e^{A t/2} = \\ &= e^{(A+B)t} + \frac{t^3}{24} [A + 2B, [A, B]] + \dots \end{aligned} \quad (2.5)$$

Здесь мы воспользовались сменой знака коммутатора при перестановке операторов и избавились от члена с четной степенью t^2 в выражении для ошибки аппроксимации. Чтобы еще повысить порядок аппроксимации, нужно суметь избавиться от члена с нечетной степенью t , оператор при которой состоит из суммы четной $(\frac{1}{2} \cdot [B - A, [A, B]])$ и нечетной $(\frac{3}{2} \cdot [A + B, [A, B]])$ относительно перестановки операторов A и B частей. Для этого составим произведение

$$\begin{aligned} U(t) U(-\alpha t) U(t) &= e^{(A+B)(2-\alpha)t} + \\ &+ \frac{t^3}{24} [A + 2B, [A, B]] (2 - \alpha^3) + O(t^4). \end{aligned} \quad (2.6)$$

При $\alpha = 2^{1/3}$ получим аппроксимацию порядка t^4 , составленную в виде произведения семи экспонент операторов A и B .

Таким образом, если мы хотим избавиться от очередного четного члена аппроксимации, необходимо воспользоваться сменой мест операторов A и B в уже имеющейся конструкции. От нечетных членов можно избавляться с помощью конструкции типа (2.5). На практике чаще всего требуется работать в бесконечномерном пространстве, когда один из операторов A или же B бывает неограниченным. В случае действительных — в отличие от чисто мнимых или

диссипативных (см. [23]) — операторов этот оператор должен быть полуограниченным и не должен иметь нулевого собственного значения [24]. Посмотрим, приведет ли использование аппроксимации типа (2.6) к росту погрешности вычислений, т. е. к развитию неустойчивости. При реальных вычислениях вместо неограниченного оператора (пусть это будет оператор A) берется его конечномерное приближение, у которого модули всех собственных значений ограничены. В результирующем произведении операторных экспонент

$$\begin{aligned} e^{(A+B)(2-\alpha)t} &= U(t) U(-\alpha t) U(t) = \\ &= e^{A t/2} e^{Bt} e^{-A(\alpha-1)t/2} e^{Bt} e^{-A(\alpha-1)t/2} e^{Bt} e^{A t/2} + \\ &+ O(t^4) \end{aligned}$$

в середине содержится экспонента $e^{-A(\alpha-1)t/2}$ с множителем, у которого $|\alpha-1| < 1/3$, но с обратным знаком у t . Именно эта экспонента могла бы вызывать развитие неустойчивости, но она применяется только после $e^{A t/2}$ с нужным знаком у t и с коэффициентом в три раза большим. Даже второй сомножитель с обратным знаком t внутри произведения экспонент не может "нарастить" проекцию на собственный вектор, отвечающий максимальному по модулю отрицательному собственному значению аппроксимирующего A оператора. Это значит, что неустойчивость не может развиваться.

Нам осталось отметить, что согласно формуле (2.6), операторная экспонента будет найдена в точке

$$\Delta t = (2 - \alpha) t, \quad \text{где } \alpha = 2^{1/3}.$$

Глава 3

ЗАДАЧА КОШИ ДЛЯ СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

Найдём приближенное решение задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dy}{dt} = A(t)y \quad (3.1)$$

с начальными данными

$$y(0) = y_0. \quad (3.2)$$

Задача Коши для конечномерной системы обыкновенных дифференциальных уравнений, несомненно, всегда лишь приближение к действительному положению дел, но приближение весьма полезное и удобное. Важную роль в исследовании линейных систем с постоянными коэффициентами играет понятие "матричного экспоненциала" — экспоненты от матрицы, рассмотренного в предыдущей главе. Через эту функцию от матрицы выражается решение линейной системы. Случай переменных коэффициентов гораздо более сложен. В этой главе покажем, что для нахождения приближенного решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений с успехом можно применять метод усреднения, когда вместо поиска решения исходной задачи ищется решение другой, полученной путем усреднения по времени оператора правой части исходной.

Если матрица A не зависит от t , то точный аналитический ответ записывается с помощью операторной экспоненты:

$$y(t) = e^{At}y_0.$$

В общем случае решение записывается с помощью разложения Дайсона [25]:

$$\begin{aligned}
y(t) &= y_0 + \int_0^t A(\tau) y_0 d\tau + \int_0^t \int_0^\tau A(\tau) A(s) y_0 d\tau ds + \dots + \\
&+ \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} A(t_1) A(t_2) \dots A(t_n) y_0 dt_1 dt_2 \dots dt_n + \dots = \\
&= U(t, 0) \cdot y_0.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Оператор $U(t, 0)$ называется пропагатором и обычно в нем начальная точка не 0, а произвольная точка s . Пропагатор обладает свойством

$$U(t, s) = U(t, \tau) U(\tau, s).$$

Введем оператор

$$B = \int_0^t A(\tau) d\tau = \left(\int_0^t a_{ij}(\tau) d\tau \right), \tag{3.4}$$

представляющий собой матрицу из проинтегрированных по t элементов матрицы $A(t)$, и найдем операторную экспоненту

$$e^B = E + \int_0^t A(\tau) d\tau + \frac{1}{2} \left(\int_0^t A(\tau) d\tau \right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\int_0^t A(\tau) d\tau \right)^3 + \dots$$

Теперь с точностью $O(t^3)$ найдем разность

$$\begin{aligned}
(U(t, 0) - e^B) y_0 &= \int_0^t \int_0^\tau A(\tau) A(s) d\tau ds y_0 - \\
&- \frac{1}{2} \int_0^t A(\tau) d\tau \int_0^t A(s) ds y_0 + O(t^3).
\end{aligned}$$

Записав оба интеграла в виде повторных, найдем

$$\begin{aligned}
&\int_0^t A(\tau) \left(\int_0^\tau A(s) ds - \frac{1}{2} \int_0^t A(s) ds \right) d\tau y_0 + O(t^3) = \\
&= \frac{1}{2} \int_0^t A(\tau) \left(\int_0^\tau A(s) ds - \int_\tau^t A(s) ds \right) d\tau y_0 + O(t^3).
\end{aligned}$$

Рассмотрим отдельно второй интеграл этой разности, записав его в виде повторного интеграла, и сменим в нем порядок интегрирования:

$$\begin{aligned} \int_0^t A(\tau) \int_{\tau}^t A(s) ds d\tau &= \int_0^t \int_{\tau}^t A(\tau) A(s) ds d\tau = \\ &= \int_0^t \int_0^s A(\tau) A(s) d\tau ds. \end{aligned}$$

При этом надо помнить, что нельзя менять местами операторы $A(\tau)$ и $A(s)$, так как они могут и не коммутировать. Сделаем замену переменных $s_n = \tau$, $\tau_n = s$ и в дальнейшем опустим индекс n :

$$\int_0^t \int_0^s A(s) A(\tau) ds d\tau.$$

Теперь имеем

$$\left(U(t, 0) - e^B \right) y_0 = \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^s (A(\tau) A(s) - A(s) A(\tau)) ds d\tau y_0 + O(t^3).$$

Не нарушая порядка точности, можно вычислить внешний интеграл приближенно по формуле трапеций:

$$\frac{t}{4} \int_0^t (A(t) A(s) - A(s) A(t)) ds y_0 + O(t^3).$$

Теперь и этот интеграл мы приближенно посчитаем по формуле трапеций:

$$\frac{t^2}{8} (A(t) A(0) - A(0) A(t)) y_0 + O(t^3).$$

Разложив $A(t)$ в ряд Тейлора в окрестности точки ноль, получаем

$$\left(U(t, 0) - e^B \right) y_0 = \frac{t^3}{8} (A'(0) A(0) - A(0) A'(0)) y_0 + O(t^3).$$

Видно, что, во-первых, в результате получена величина третьего порядка малости, а, во-вторых, в остаточный член входит коммутатор операторов $A'(0)$ и $A(0)$. Таким образом, если мы хотим найти приближенное решение системы обыкновенных дифференциальных

уравнений (3.1) с начальными условиями (3.2) с точностью $O(t^3)$, то достаточно проинтегрировать покомпонентно матрицу $A(t)$, найти операторную экспоненту от получившейся в результате интегрирования матрицы и умножить на нее вектор начальных данных.

Матрицу B можно посчитать приближенно по формуле трапеций с точностью $O(t^3)$:

$$B = \frac{t}{2} A(t) + \frac{t}{2} A(0) + O(t^3).$$

Тогда, используя аппроксимацию (2.3), получим

$$y(t) = e^{A(t) t/2} e^{A(0) t/2} y_0 + \frac{t^2}{8} [A(t) A(0) - A(0) A(t)] y_0.$$

Разложив $A(t)$ в ряд Тейлора, получим

$$y(t) = e^{A(t) t/2} e^{A(0) t/2} y_0 + \frac{t^3}{8} [A'(0) A(0) - A(0) A'(0)] y_0, \quad (3.5)$$

т. е. и здесь имеем аппроксимацию порядка $O(t^3)$.

Необходимым условием для получения этих аппроксимаций является ограниченность оператора A и его первой и второй производных Фреше [25]. Естественно, такой метод хорошо работает, когда есть возможность эффективно построить $e^{A(0) t/2}$ и $e^{A(t) t/2}$. Покажем в дальнейшем, что идея такой аппроксимации решения работает не только в случае линейного, но и нелинейного уравнения Шредингера.

Глава 4

ПРИМЕНЕНИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Сначала будем конструировать метод нахождения приближенного решения линейного нестационарного уравнения Шредингера

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + N(x, t) E = 0 \quad (4.1)$$

в случае одной пространственной переменной $-\infty < x < +\infty$. Вместо граничных условий $E \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$ можно использовать условие принадлежности решения пространству L_2 . Легко проверить, что, как и в случае уравнения (1.1), решение $E(x, t)$ сохраняет первый интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |E|^2 dx = \text{const.} \quad (4.2)$$

Осталось задать начальные данные:

$$E(x, 0) = E_0(x). \quad (4.3)$$

Будем обозначать

$$FE(k, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(x, t) e^{-ikx} dx \quad (4.4)$$

преобразование Фурье функции $E(x, t)$. После применения преобразования Фурье к уравнению (4.1) получим

$$2i \frac{dFE}{dt} - k^2 FE + F(N \cdot E) = 0. \quad (4.5)$$

Опустим аргумент k у функций, а аргумент t будем писать только в случае необходимости. К бесконечномерной системе (4.5) может быть применен метод предыдущей главы (см. (3.5)). Однако при этом приходится иметь дело с неограниченным оператором $A(t)$ [26] (хотя оператор $e^{iA(t)\tau/2}$ является, как мы увидим в дальнейшем, ограниченным в соответствующих нормах).

Введем новую функцию

$$u = FE e^{ik^2 t/2}. \quad (4.6)$$

Воспользовавшись уравнением (4.5), получим

$$\frac{du}{dt} = \frac{i}{2} e^{ik^2 t/2} F(NE).$$

Проинтегрировав по t и выразив результат через функцию FE , получим

$$FE(t) = FE(0) e^{-ik^2 t/2} + \frac{i}{2} \int_0^t e^{-ik^2 (t-\tau)} F(N(\tau) E(\tau)) d\tau. \quad (4.7)$$

Если ограничиться по переменной k такой областью, что

$$k_{\max}^2 t < \pi, \quad (4.8)$$

то интеграл в правой части можно приближенно вычислить по формуле трапеций с точностью $O(t^3)$:

$$\begin{aligned} FE(t) = & FE(0) e^{-ik^2 t/2} + i \frac{t}{4} F(N(t) E(t)) + \\ & + i \frac{t}{4} e^{-ik^2 t/2} F(N(0) E(0)) + O(t^3). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Перенесем все члены уравнения, зависящие от t , в левую часть, а остальные — в правую. Внесем коэффициент $i \frac{t}{4}$ под знак преобразования Фурье и сгруппируем члены уравнения в левой и правой частях под общий знак преобразования Фурье:

$$\begin{aligned} F \left[\left(1 - i \frac{t}{4} N(t) \right) E(t) \right] = \\ = e^{-ik^2 t/2} F \left[\left(1 + i \frac{t}{4} N(0) \right) E(0) \right]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Применим к обеим частям этого равенства обратное преобразование

Фурье и обозначим получившуюся правую часть через B :

$$\left(1 - i \frac{t}{4} N(t)\right) E(t) = F^{-1} \left\{ e^{-ik^2 t/2} F \left[\left(1 + i \frac{t}{4} N(0)\right) E(0) \right] \right\} = B.$$

Величина B выражается через значения функций в точке ноль и является известной. Отсюда

$$E(t) = \frac{B}{1 - it N(t)/4}. \quad (4.11)$$

Для заданной функции $N(t)$ мы уже получили приближенное значение $E(t)$.

Очень часто бывает, что N является функцией от $E(t)$. Например,

$$N = |E(t)|^\alpha.$$

В этом случае, взяв квадрат модуля левой и правой частей равенства (4.11), получим трансцендентное уравнение для определения $|E(t)|^2$:

$$|E(t)|^2 = \frac{|B|^2}{1 + t^2 |E(t)|^{2\alpha}/16}.$$

Обозначив $s = |E(t)|^2$, будем искать корень уравнения

$$f(s) = s(1 + t^2 s^\alpha/16) - |B|^2 = 0. \quad (4.12)$$

Производная

$$f'(s) = 1 + t^2 (\alpha + 1) s^\alpha/16 > 0$$

при $\alpha > -1$. Следовательно, в этом случае трансцендентное уравнение имеет единственный корень. Зная $s = |E(x, t)|^2$, из (4.11) находим $E(x, t)$. Отметим, что мы решали не совокупную систему нелинейных уравнений относительно $|E(x, t)|^2$ при всех x , а отдельно для каждой точки x , и следовательно своего $B(x)$, решали уравнение (4.12). Это очень существенно уменьшает объем вычислений и позволяет для каждого x задавать свою точность нахождения корня. В случае решения совокупной системы нелинейных уравнений это невозможно.

Посмотрим, насколько точно соотношение (4.10) сохраняет первый интеграл (4.2). Для этого возьмем квадраты модулей правой и левой частей соотношения (4.10) и проинтегрируем по k от $-\infty$ до

+ ∞. Так как модуль экспоненты $e^{-ik^2 t/2}$ равен единице, то её можно не писать:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| F \left[\left(1 - i \frac{t}{4} N(t) \right) E(t) \right] \right|^2 dk = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| F \left[\left(1 + i \frac{t}{4} N(t) \right) E(t) \right] \right|^2 dk.$$

По равенству Парсеваля с точностью до константы интеграл от квадрата модуля образа Фурье функции равен интегралу от квадрата модуля прообраза. Поэтому

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \left(1 - i \frac{t}{4} N(t) \right) E(t) \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \left(1 + i \frac{t}{4} N(t) \right) E(t) \right|^2 dx.$$

Воспользовавшись вещественностью функции N , разбив интегралы в левой и правой частях этого равенства на суммы интегралов и сгруппировав отдельно члены разных порядков малости по t , получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |E(t)|^2 dk = \int_{-\infty}^{+\infty} |E(0)|^2 dk - \\ - \frac{t^2}{16} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(|N(t) E(t)|^2 - |N(0) E(0)|^2 \right) dk. \quad (4.13)$$

Как видно, интеграл (4.2) сохраняется с точностью $O(t^2)$.

4.1. Приближенная операторная экспонента

Теперь воспользуемся результатами предыдущей главы и построим приближенное решение уравнения (4.1) с начальными условиями (4.3) при помощи приближенной операторной экспоненты (3.5). Для этого используем замену (4.6), но в правую часть полученного уравнения вместо E подставим его выражение через u :

$$\frac{du}{dt} = \frac{i}{2} e^{ik^2 t/2} F \left(N(t) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} u(t) \right) \right) = i A(t) u(t). \quad (4.14)$$

Приближенное решение этого уравнения найдем с помощью приближенной операторной экспоненты (3.5). Мы можем это сделать, так как оператор $A(t)$ является ограниченным оператором, в чем убедимся позже (см. далее гл. 6), а производные Фреше также ограничены при выполнении условия (4.8). Для этого необходимо отдельно посчитать операторные экспоненты $e^{iA(0)t/2}$ и $e^{iA(t)t/2}$ при фиксированном t . Первая из них представляет собой решение уравнения

$$\frac{du}{dt} = i \frac{1}{2} A(0) u(t), \quad \text{где } A(0) u(t) = F \left(N(0) F^{-1} u(t) \right)$$

с соответствующими начальными данными. Для решения этой системы воспользуемся обратным преобразованием Фурье. Для функции

$$v(x, t) = F^{-1} u(k, t)$$

получим уравнение

$$\frac{dv}{dt} = i \frac{t}{4} N(0) v(t)$$

с постоянными (по t) коэффициентами и соответствующими начальными данными. Решение записывается в виде операторной экспоненты

$$v(t) = e^{iN(0)t/4} v(0).$$

Сделав обратное преобразование Фурье, запишем

$$u(k, t) = e^{iA(0)t/2} u(0) = F \left(e^{iN(x, 0)t/4} F^{-1} u(k, 0) \right). \quad (4.15)$$

Вторую необходимую нам операторную экспоненту будем искать как решение уравнения

$$\frac{du(s)}{ds} = i \frac{1}{2} A(t) u(s),$$

где

$$A(t) u(s) = \frac{1}{2} e^{ik^2 t/2} F \left(N(t) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} u(s) \right) \right).$$

Так как при фиксированном t мы имеем дело с оператором с постоянными коэффициентами (не зависящими от s), то можем воспользоваться обычным разложением экспоненты в ряд. Учитывая, что

$$\begin{aligned}
 A(t)^2 u(s) &= \frac{1}{2} e^{ik^2 t/2} F \left(N(t) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} A(t) u(s) \right) \right) = \\
 &= \frac{1}{4} e^{ik^2 t/2} F \left(N(t) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} e^{ik^2 t/2} \times \right. \right. \\
 &\times \left. \left. F \left(N(t) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} u(s) \right) \right) \right) \right),
 \end{aligned}$$

а после сокращения экспонент и прямого и обратного преобразования Фурье

$$A(t)^2 u(s) = \frac{1}{2} e^{ik^2 t/2} F \left(N^2(t) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} u(s) \right) \right),$$

легко вычислим

$$e^{i\Lambda(t)/2} u(0) = e^{ik^2 t/2} F \left(e^{iN(t)/4} F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} u(0) \right) \right). \quad (4.16)$$

Теперь соотношение (3.6) дает нам окончательный ответ

$$\begin{aligned}
 u(t) &= e^{i\Lambda(t)/2} e^{i\Lambda(0)/2} u(0) + O(t^3) = \\
 &= e^{ik^2 t/2} F \left(e^{iN(t)/4} F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} F \left(e^{iN(0)/4} F^{-1} u(k, 0) \right) \right) \right) + O(t^3).
 \end{aligned}$$

Обратная замена (см. (4.6)) приводит к соотношению

$$E(x, t) = e^{iN(t)/4} F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} F \left(e^{iN(0)/4} E(x, 0) \right) \right) + O(t^3). \quad (4.17)$$

Если, как мы уже рассматривали, N есть функция от $|E(t)|$:

$$N = |E(t)|^\alpha,$$

то опять получаем трансцендентное уравнение

$$E(x, t) = e^{i|E(t)|^\alpha t/4} B,$$

где

$$B = F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} F \left(e^{iN(0)/4} E(x, 0) \right) \right). \quad (4.18)$$

Очевидно, что $|E(t)| = |B|$ и $E(t)$ находится тривиально:

$$E(x, t) = e^{i|B|^\alpha t/4} B. \quad (4.19)$$

Полученная аппроксимационная формула (4.17) может быть интерпретирована как вариант схемы расщепления по физическим

процессам: на первом шаге ищется решение обыкновенного дифференциального уравнения

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} = N(x, t) E, \quad (4.20)$$

где за оператор правой части взята соответствующая часть исходного оператора, отвечающая за стабилизацию распыливания волнового пакета из-за дисперсии. $N(x, t)$ здесь может быть не только заданной функцией от x и t , но и зависеть от $|E|$ (см., к примеру, (1.1)). Добавка нелинейного члена обусловлена поправкой к частоте из-за нелинейного закона дисперсии, т. е. обобщение на слабо нелинейный случай заключается просто в замене [10]

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + i\alpha |E|^2,$$

в соответствии с разложением исходного дисперсионного уравнения в ряд по степеням амплитуды E .

На втором шаге ищется решение линейного уравнения с оператором диффузионного типа

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial^2 E}{\partial x^2}, \quad (4.21)$$

описывающего распыливание волнового пакета в однородном пространстве из-за дифракции. На третьем шаге опять ищется решение обыкновенного дифференциального уравнения (4.20). Сравнение различных вариантов метода расщепления проведено в [27].

4.2. Постановка краевых задач

В случае ограниченной области $0 \leq x \leq l$ решение уравнения (4.1) должно удовлетворять граничным условиям. В случае условий периодичности и граничных условий первого рода

$$E(0, t) = E(l, t) = 0 \quad (4.22)$$

можно продолжать пользоваться формулой (4.17) для нахождения приближенного решения. Надо только помнить, что вместо пространства образов Фурье (4.4) необходимо работать с соответствующим пространством коэффициентов Фурье, а обратное преобразование F^{-1} будет суммированием ряда Фурье. Используя схему

расщепления (4.20), (4.21), потребуем удовлетворения граничным условиям от решения обоих уравнений. Очевидно, что можно найти решение уравнения (4.21), удовлетворяющее выбранным нами граничным условиям. Этим же условиям будет удовлетворять решение уравнения (4.20) как в случае линейного, так и нелинейного уравнения.

В случае одного из граничных условий второго рода

$$\frac{\partial E(0, t)}{\partial x} = 0, \quad E(l, t) = 0 \quad (4.23)$$

легко находится удовлетворяющее им решение уравнения (4.21). Решение же уравнения (4.20) при произвольной $N(x, t)$

$$E(x, t) = \exp\left[-\frac{i}{2} \int_0^t N(x, \tau) d\tau\right] E_0(x) \quad (4.24)$$

удовлетворяет граничному условию (4.23) в точке ноль, только если

$$\frac{\partial N(0, t)}{\partial x} = 0. \quad (4.25)$$

В случае нелинейного уравнения с $N = f(|E|^2)$ решение

$$E(x, t) = \exp\left[-\frac{i}{2} f(|E_0(x)|^2) t\right] \cdot E_0(x) \quad (4.26)$$

уравнения (4.20) удовлетворяет граничным условиям (4.23), если, естественно, им удовлетворяет функция $E_0(x)$. Легко проверить, что в случае граничного условия третьего рода

$$\frac{\partial E}{\partial x} + i\gamma E \Big|_{x=0} = 0 \quad (4.27)$$

решение нелинейного уравнения (4.26) ему удовлетворяет.

Рассмотрим уравнение (4.1) в области $0 \leq x < +\infty$ с граничным условием третьего рода (4.27), называемым также условием излучения Зоммерфельда [20], и с функцией $N(x, t)$, удовлетворяющей условию (4.25). Снова воспользуемся идеей схемы расщепления (4.20), (4.21) для нахождения приближённого решения. Очевидно, что решение (4.24) уравнения (4.20) при наших предположениях (4.25) относительно функции $N(x, t)$ удовлетворяет граничному условию (4.27). Решение уравнения (4.21), удовлетворяющее граничному условию (4.27), может быть найдено при помощи следующего утверждения (см. [28]): если функция $E(x, t)$ удовлетворяет уравнению

с постоянными коэффициентами (4.21) и граничному условию (4.27), то её производная $\frac{\partial E(x, t)}{\partial x}$ тоже. Функция Грина этой задачи имеет вид

$$G(x, x_0, t) = \frac{1-i}{2\sqrt{\pi t}} \left(e^{-i(x-x_0)^2/2t} + e^{-i(x+x_0)^2/2t} + 2i\gamma \int_0^{\infty} e^{i\gamma s - i(x+x_0+s)^2/2t} ds \right), \quad (4.28)$$

а решение записывается в стандартной форме:

$$E(x, t) = \int_0^{\infty} G(x, x_0, t) E_0(x_0) dx_0. \quad (4.29)$$

Для нахождения приближённого решения можно воспользоваться дискретным преобразованием Фурье, ограничив область изменения пространственных переменных $0 \leq x, x_0 \leq L$ и используя формулу циклической свёртки (см. приложение на с. 130). Однако такой метод нахождения приближённого решения, очевидно, намного более трудоёмок, чем в случае граничных условий первого рода. Кроме того, он не является "долгоживущим", так как коэффициенты Фурье функции $E_0(x)$, имеющей разрыв в точке $x=0$, убывают очень медленно. Поэтому дискретный аналог формулы (4.29) при движении по времени быстро копит ошибку.

Для решения задачи (4.21), (4.27) можно поступить следующим образом: продолжим начальные данные $E_0(x)$, заданные лишь при $x > 0$, на отрицательную полуось следующим способом:

$$E_0(x) = E_0(-x) - 2i\gamma \int_0^{-x} e^{i\gamma(x+s)} E_0(s) ds, \quad x < 0. \quad (4.30)$$

Тогда (см. [28]), если функция $E_0(x)$ удовлетворяет граничному условию (4.27), то функция

$$\varphi(x) = \frac{\partial E_0(x)}{\partial x} + i\gamma E_0(x)$$

является нечётной, а решение задачи может быть записано в стандартном виде в образах Фурье

$$E(x, t) = F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} F E_0(x) \right)$$

или, что эквивалентно, через функцию Грина оператора на всей оси

$$E(x, t) = \frac{1-i}{2\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(x-x_0)^2/2t} E_0(x_0) dx_0,$$

где, естественно, $E_0(x)$ продолжена на отрицательную полуось согласно (4.30). Проверку выполнения граничного условия (4.27) мы предоставляем читателю.

Отметим, что использование продолжения (4.30) не только ведёт к увеличению области интегрирования, а следовательно, числа дискретных точек и соответственного объёма вычислений, но и приводит к накоплению ошибки при $x \rightarrow -\infty$. Следовательно, и этот метод не является "долгоживущим". Поэтому для решения задачи (4.21), (4.27) целесообразно воспользоваться разностными методами, развиваемыми далее в гл. 11.

Будем искать приближенное решение уравнения (4.1) на полуоси при произвольной функции $N(x, t)$, удовлетворяющее граничному условию третьего рода (4.27).

Введём функции

$$N(t) = N'_x(0, t), \quad N_1(x, t) = N(x, t) + \frac{4N(t)}{e^x + 1}. \quad (4.31)$$

Функция $N_1(x, t)$ удовлетворяет условию $\left. \frac{\partial N_1}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$ в точке границы. Поэтому можно воспользоваться идеей схемы расщепления (4.20), (4.21), но с уравнениями

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} + N_1(x, t) E = 0, \quad (4.32)$$

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{4N(t)}{e^x + 1} E = 0 \quad (4.33)$$

и граничным условием (4.27). Замена переменной $e^x = y$ приводит уравнение (4.33) к виду

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} + y^2 \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} + y \frac{\partial E}{\partial y} - \frac{4N(t)}{y+1} E = 0.$$

Решение этого уравнения может быть выражено через гипергеометрическую функцию Гаусса. Трудоемкость такого подхода очевидна.

4.3. Сохранение инвариантов

Проверим теперь, с какой точностью соотношение (4.17) сохраняет первый интеграл (4.2). С точностью до постоянного множителя из равенства Парсеваля считаем

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |E(t)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} |B|^2 dx = \text{const} \int_{-\infty}^{+\infty} |FB|^2 dk = \\ &= \text{const} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| F \left(e^{iN(0)t/4} E(0) \right) \right|^2 dk = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left| e^{iN(0)t/4} E(0) \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |E(0)|^2 dx. \end{aligned}$$

Получается, что метод приближенной операторной экспоненты (соотношение (4.17)) сохраняет первый интеграл (4.2), иными словами, оператор в правой части (4.17) в случае линейного уравнения Шредингера является унитарным. Очевидно, что и в нелинейном случае для $N = N(|E|^2)$ свойство унитарности сохраняется (см. (4.19)), соответственно сохраняется и интеграл (4.2). Отметим также, что в силу унитарности оператора дискретного преобразования Фурье и выполнения равенства Парсеваля в конечномерном случае (см. [29], а также приложение) сохраняются конечные суммы, заменяющие в этом случае (4.2).

В случае нелинейного уравнения Шредингера с потенциалом $N = N(|E|^2)$ могут существовать кроме интеграла (4.2) (см. также (1.4)) ещё и интегралы типа (1.5), куда входят производные от решения по пространственным переменным. Любой метод построения приближенного решения дифференциального уравнения в частных производных позволяет с большей или меньшей эффективностью находить неизвестную функцию, но отнюдь не её производные по пространству. Поэтому при нахождении производных по пространственным переменным неизбежно участвует аппроксимация. Используя ту или иную аппроксимацию уже найденного приближенного решения, найдем соответствующее приближение для производных и для рассматриваемого интеграла. Сохранение или несохранение построенного приближения для интеграла (правильнее сказать, сохранение с определенной точностью $O(\Delta t^\beta)$) может ещё ничего не говорить о качестве найденного приближенного решения,

а только о качестве используемой аппроксимации производных. Одним из лучших способов нахождения приближенного значения интеграла является метод аппроксимации самого интеграла, а не производных функции, стоящей под его знаком. Например, при использовании преобразования Фурье равенство Парсевала даёт

$$\int \left| \frac{\partial E}{\partial x} \right|^2 dx = \int k^2 |FE|^2 dk.$$

В конечномерном случае сумма конечного числа гармоник считается абсолютно точно и использует всю имеющуюся для приближенного решения информацию. При этом если интеграл типа (1.5) сохраняется, то это не даёт никаких дополнительных сведений о качестве найденного приближенного решения. Если же он не сохраняется, то имеет смысл еще поработать над используемым методом. К вопросу о сохранении интегралов типа (1.5) вернёмся в гл. 6 (см. следствие 1).

4.4. Примеры

Методы нахождения приближённого решения нелинейного уравнения Шредингера, приведённые в этой главе, применялись как в случае одной, так и двух пространственных переменных. В одномерном случае [30] исследовалась неустойчивость периодических решений уравнения Шредингера с кубичной нелинейностью, так называемых кноидальных волн вида

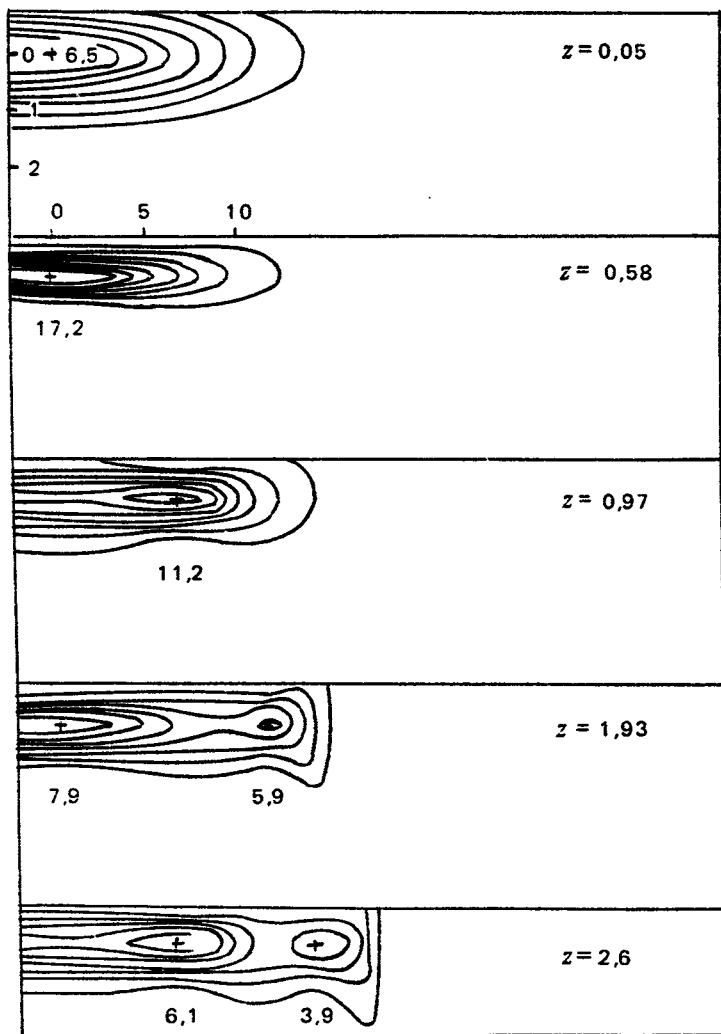
$$E(x, t) = Af(A(x - vt)) \exp[i(\omega t + vx/2)].$$

Эти волны оказались устойчивыми по отношению к возмущениям с пространственным периодом задачи, но неустойчивыми по отношению к длинноволновым возмущениям.

Методы, основанные на схеме расщепления (4.20), (4.21) с использованием дискретного преобразования Фурье, успешно применялись [31 – 33] при нахождении решения нелинейного уравнения Шредингера гиперболически-параболического типа

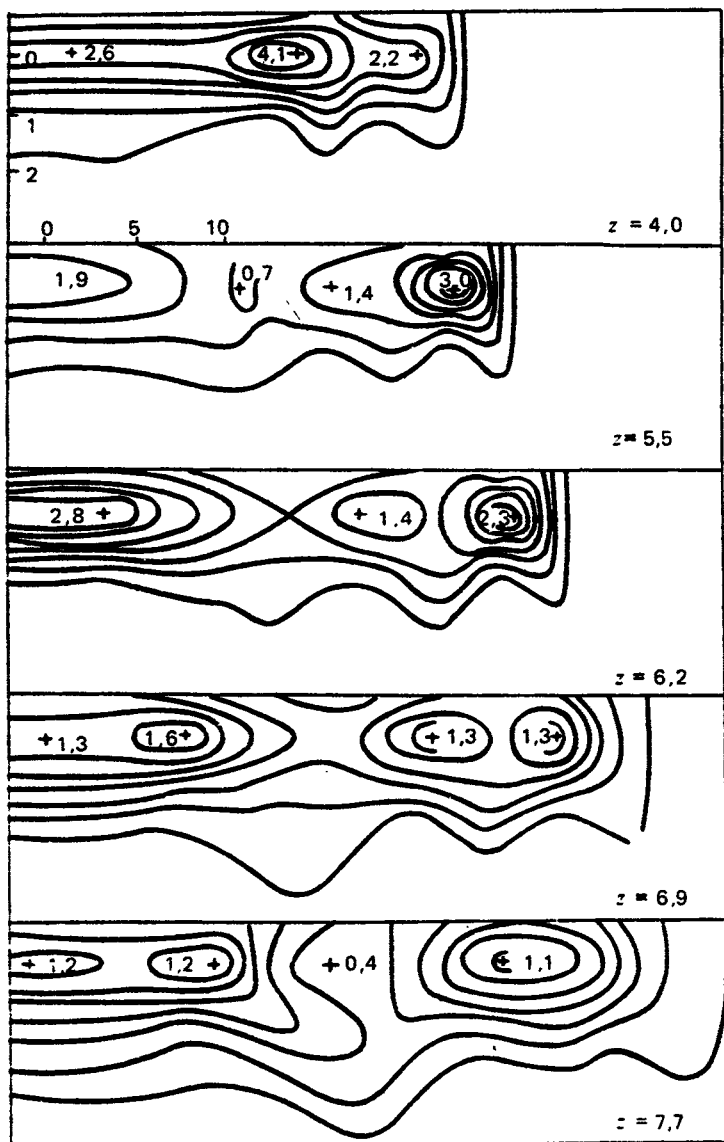
$$2i \frac{\partial E}{\partial z} + \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} + |E|^2 E = 0, \quad (4.33)$$

имеющего противоположные знаки коэффициентов при вторых производных. Эти уравнения описывают самовоздействие широкого класса волн, поверхности волновых векторов у которых имеют



a

Рис. 3. Линии уровня функции $|E|^2$ уравнения (4.33) при начальном соотношении между полуосями 1/10. Знак плюс соответствует максимуму распределения поля $|E|$, цифры – величина поля в максимуме



б

Рис. 3. Окончание

седловую точку (например, гравитационные волны на глубокой воде [1], плазменные колебания в замагниченной плазме [34]). Проведённые численные исследования эволюции начальных локализованных распределений поля гауссовой формы [35]

$$E(x, y, 0) = A \exp\left(-x^2/2a^2 - y^2/2b^2\right)$$

подтвердили отсутствие локализованных стационарных состояний.

На рис. 3 представлены отдельные моменты развития процесса самовоздействия поля с исходным соотношением пространственных масштабов $a/b = 1/10$ и амплитудой $A = 2.5$. Прежде всего отчётливо виден монотонный характер расширения распределений вдоль оси y , сопровождающийся сложным пульсирующим изменением его ширины в x -направлении. Наблюдается эффект дробления начальной квазиоднородной структуры, приводящий к образованию дополнительного горба в распределении поля в результате каждой пульсации приосевой области пучка. На больших расстояниях процесс всегда переходит в режим самодефокусировки, сопровождающийся монотонным снижением уровня поля.

Глава 5

ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ПРОСТРАНСТВ

В этой главе приведем только самые необходимые в дальнейшем сведения по теории пространств, в которых будем искать решения. Более подробное изложение см. в [36].

Пространство \mathcal{H}_0 есть гильбертово пространство $L_2(R)$. Для целых положительных чисел s пространство \mathcal{H}_s определяется как предгильбертово пространство функций f , для которых $D^p f \in L_2$ при каждом p с $|p| \leq s$, причем операторы дифференцирования D^p действуют в смысле теории распределений. Скалярное произведение на \mathcal{H}_s определяется по формуле

$$\langle f, g \rangle_s = \sum_{|p| \leq s} \int_R D^p f(x) D^p \bar{g}(x) dx \quad (5.1)$$

и в соответствии с этим норма — по формуле

$$\|f\|_s = \left(\sum_{|p| \leq s} \int_R |D^p f(x)|^2 dx \right)^{1/2}. \quad (5.2)$$

Справедливо утверждение, что пространство \mathcal{H}_s полно (т. е. является гильбертовым).

Из $\mathcal{H}_s \subset L_2$ немедленно вытекает, что для каждого $f \in \mathcal{H}_s$ существует преобразование Фурье (см. (4.4)). Кроме того, так как преобразованием Фурье функции $D^p f$ служит $(ik)^p Ff(k)$, то по теореме Парсеваля получаем следующее выражение для квадрата нормы в \mathcal{H}_s :

$$\|f\|_s^2 = \sum_{|p| \leq s} \left\| (ik)^p Ff(k) \right\|_{L_2}^2 = \int_R \sum_{|p| \leq s} |k^p|^2 |Ff(k)|^2 dk.$$

Очевидно, что существуют такие постоянные $0 < c < C$, что

$$c \sum_{|p| \leq s} |k^p|^2 \leq (1 + |k|^2)^s \leq C \sum_{|p| \leq s} |k^p|^2.$$

Следовательно, можно определить новую норму на \mathcal{H}_s , эквивалентную (5.2)

$$\begin{aligned} \|f\|_s^2 &= \int_R (1 + |k|^2)^s |F f(k)|^2 dk = \\ &= \left\| (1 + |k|^2)^{s/2} F f(k) \right\|_{L_2}^2. \end{aligned}$$

Поскольку в дальнейшем предполагается работать в пространстве образов Фурье, для избежания путаницы введем новую норму в пространстве образов Фурье:

$$\begin{aligned} \|Ff\|_{FH_s}^2 &= \int_{R(k)} (1 + |k|^2)^s |F f(k)|^2 dk = \\ &= \left\| (1 + |k|^2)^{s/2} F f(k) \right\|_{L_2}^2. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Соответствующее скалярное произведение определяется соотношением

$$\begin{aligned} \langle Ff, Fg \rangle_{FH_s} &= \\ &= \left\langle (1 + |k|^2)^{s/2} F f(k), (1 + |k|^2)^{s/2} F g(k) \right\rangle_{L_2}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Справедливы утверждения, что пространство $F\mathcal{H}_s$ отделимо, т. е. из равенства нулю нормы функции следует равенство нулю самой функции, и полно, т. е. является гильбертовым пространством. Очевидно, что в силу указанной эквивалентности норм сама функция f для $s > 0$ по крайней мере непрерывна.

Заметим, что в (5.3) и (5.4) s уже не обязательно целое число.

Определим теперь банахово пространство FL_s , задав норму

$$\|u(k)\|_{FL_s} = \int_{R(k)} (1 + |k|^2)^{s/2} |u(k)| dk. \quad (5.5)$$

Отделимость и полнота очевидны.

Глава 6

ПРИБЛИЖЕННАЯ ОПЕРАТОРНАЯ ЭКСПОНЕНТА

В этой главе будем строить приближенное решение нестационарного уравнения Шредингера (4.1) с теми же, что и в гл. 4, граничными и начальными условиями, путем проведения последовательных операторных замен неизвестной функции. Покажем, что на этом пути можно получить приближенное решение типа схемы расщепления (4.17), для которого сумеем оценить ошибку аппроксимации в нормах пространств FH_s и FL_s с возможно меньшими s . Замены делаются таким образом, чтобы, во-первых, получающийся в правой части оператор был ограничен по норме в таких пространствах, в которых и сами функции и их образы Фурье непрерывны; во-вторых, оператор в правой части обращается в нуль в начальной и конечной точках выбранного интервала интегрирования. В силу ограниченности его нормы это говорит о его достаточной малости на выбранном интервале, а значит о малом отклонении на этом интервале новой неизвестной функции от своих начальных данных. Следствием является также то, что построенное приближенное решение в начальной и конечной точках выбранного интервала интегрирования удовлетворяет исходному уравнению. Поэтому в начальной точке производная по времени приближенного решения совпадает с производной точного решения, а в конечной точке интервала — с соответствующей производной для близкой к решению траектории (см. рис. 1).

Утверждение 1. Функция

$$u = e^{ik^2 t/2} FE \quad (6.1)$$

удовлетворяет уравнению

$$\frac{du}{dt} = \frac{i}{2} C(t) u \quad (6.2)$$

с ограниченным оператором

$$C(t) = e^{ik^2 t/2} F \left(N(t) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} \dots \right) \right), \quad (6.3)$$

действующим из $FH_s(k) \cap C(k)$ в $FH_s \cap C(k)$, $0 \leq s$, если $FN(t) \in FL_s(k)$.

Схема доказательства. Докажем ограниченность оператора $C(t)$ в пространстве $FH_s(k)$:

$$\|C(k)\| \stackrel{\text{def}}{=} \max_{0 \leq \tau \leq t} \sup_u \left| \frac{\langle (1 + |k|^2)^s C(\tau) u, u \rangle_{FH_0}}{\|u\|_{FH_s}^2} \right|.$$

Сделав замену $v(\tau) = F^{-1} \left(e^{-ik^2 \tau/2} u(\tau) \right)$ и отметив, что F является унитарным оператором в L_2 , получаем

$$\|C(t)\| = \max_{0 \leq \tau \leq t} \sup_v \left| \frac{\langle (1 + |k|^2)^s F(N(\tau) v), Fv \rangle_{FH_0}}{\|Fv\|_{FH_s}^2} \right|.$$

По неравенству Коши–Буняковского для скалярного произведения в $L_2 = FH_0$ (см. (5.4)) найдем оценку сверху числителя и сократим на $\|Fv\|_{FH_s}$:

$$\|C(t)\| \leq \max_{0 \leq \tau \leq t} \sup_v \frac{\| (1 + |k|^2)^{s/2} F(N(\tau) v) \|_{FH_0}}{\|Fv\|_{FH_s}}.$$

Отдельно оценим норму числителя. Для этого предварительно докажем неравенство

$$\begin{aligned} 1 + |k|^2 &= 1 + |k - k_1 + k_1|^2 \leq 1 + 2(|k - k_1|^2 + |k_1|^2) \leq \\ &\leq 2(1 + |k - k_1|^2)(1 + |k_1|^2). \end{aligned}$$

Запишем теперь образ Фурье от произведения в виде свертки и не будем пока писать аргумент τ :

$$\begin{aligned} &\left\| (1 + |k|^2)^{s/2} \int_{-\infty}^{+\infty} FN(k - k_1) Fv(k_1) dk_1 \right\|_{L_2(k)} \leq \\ &\leq C \cdot \left\| \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + |k - k_1|^2)^{s/2} |FN(k - k_1)| \times \right. \end{aligned}$$

$$\times \left(1 + |k_1|^2\right)^{s/2} |Fv(k_1)| dk_1 \Big\|_{L_2(k)}$$

Воспользуемся равенством Парсеваля и перейдем в прообразы Фурье. При этом свертка перейдет в произведение прообразов:

$$C \Big\| F^{-1} \left(\left(1 + |k|^2\right)^{s/2} |FN(k)| \right) \times \\ \times F^{-1} \left(\left(1 + |k|^2\right)^{s/2} |Fv(k)| \right) \Big\|_{L_2(x)}$$

Теперь вместо первой из функций под знаком нормы возьмем максимум ее модуля:

$$C \cdot \max_x \left| F^{-1} \left(\left(1 + |k|^2\right)^{s/2} |FN(k)| \right) \right| \times \\ \times \Big\| F^{-1} \left(\left(1 + |k|^2\right)^{s/2} |Fv(k)| \right) \Big\|_{L_2(x)}$$

Представим функцию под знаком модуля в форме обратного преобразования Фурье. Для второго сомножителя опять применим равенство Парсеваля:

$$C \cdot \max_x \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + |k|^2\right)^{s/2} |FN(k)| e^{ikx} dk \right| \times \\ \times \Big\| \left(1 + |k|^2\right)^{s/2} |Fv(k)| \Big\|_{L_2(k)}$$

Взяв под знаком интеграла вместо e^{ikx} её модуль и отметив, что максимум находить теперь уже не нужно, получаем окончательную оценку

$$C \Big\| \left(1 + |k|^2\right)^{s/2} |FN(k)| \Big\|_{L_1(k)} \|Fv\|_{FH_s} = \\ = C \|FN\|_{FL_s} \|Fv\|_{FH_s}$$

Отсюда для нормы оператора $C(t)$ немедленно следует

$$\|C(t)\| \leq C \max_{0 \leq \tau \leq t} \|FN(\tau)\|_{FL_s} \quad (6.4)$$

Докажем теперь ограниченность нашего оператора $C(t)$ в пространстве непрерывных функций $C(k)$. Согласно (6.3)

$$|C(t) u| = \left| F \left(N(t) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} u(t) \right) \right) \right|.$$

Оценка свертки здесь проводится аналогично вышеизложенному, но с $s = 0$:

$$\begin{aligned} |C(t) u| &\leq \|FN(t)\|_{FL_0} \left| e^{-ik^2 t/2} u(t) \right| \leq \\ &\leq \|FN(t)\|_{FL_0} |u(t)|_{C(k)}. \end{aligned}$$

Утверждение 1 доказано.

Введем на отрезке $0 \leq \tau \leq t$ оператор

$$C_1(\tau, t) = e^{ik^2 t/2} F \left(\frac{\tau}{t} N(\tau) F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} \dots \right) \right), \quad (6.5)$$

действующий на функции $u(\tau)$. С помощью разложения Дайсона [25] определим операторы

$$D_{\pm}(\tau) = e^{ik^2 t/2} F \left(\exp \left[\mp \frac{i}{2t} \int_0^{\tau} \tau_1 N(\tau_1) d\tau_1 \right] F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} \dots \right) \right), \quad (6.6)$$

представляющие собой операторные экспоненты от (6.5) с соответствующими множителями $\pm i$ перед $N(\tau)$. Очевидно, что $D_+(\tau) D_-(\tau) = I$, и они оба являются унитарными операторами в пространстве L_2 .

Функция

$$v(\tau) = D_+(\tau) u(\tau) \quad (6.7)$$

удовлетворяет при $0 \leq \tau \leq t$ уравнению

$$\begin{aligned} \frac{dv}{d\tau} &= \frac{d}{d\tau} D_+(\tau) u(\tau) + D_+(\tau) \frac{du}{d\tau} = \\ &= \frac{d}{d\tau} D_+(\tau) \cdot D_-(\tau) v(\tau) + \frac{i}{2} D_+(\tau) C(\tau) D_-(\tau) v(\tau). \end{aligned}$$

Из (6.5) и (6.6) легко следует, что

$$\frac{d}{d\tau} D_+(\tau) \cdot D_-(\tau) = -\frac{i}{2} C_1(\tau, t).$$

Следовательно, для $v(\tau)$ получено уравнение

$$\frac{dv}{d\tau} = \frac{i}{2} C_2(\tau, t) v(\tau) = \frac{i}{2} \left[D_+(\tau) C(\tau) D_-(\tau) - C_1(\tau, t) \right] v(\tau). \quad (6.8)$$

Легко видеть, что $C_2(t, t) = 0$, а $C_2(0, t) = C(0)$.

С помощью того же разложения Дайсона определим операторы

$$\hat{D}_{\pm}(\tau) = F \left(\exp \left[-\frac{i}{2t} \int_0^{\tau} (t - \tau_1) N(\tau_1) d\tau_1 \right] F^{-1} \dots \right), \quad (6.9)$$

также являющиеся унитарными, и введем новую функцию

$$\omega(\tau) = \hat{D}_{+}(\tau) v(\tau), \quad (6.10)$$

удовлетворяющую уравнению

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{d\tau} &= -\frac{i}{2} C_3(\tau, t) \omega = \\ &= \frac{i}{2} \hat{D}_{+}(\tau) C_2(\tau, t) \hat{D}_{-}(\tau) \omega(\tau) - \frac{i}{2} F \left(\frac{t - \tau}{t} N(\tau) F^{-1} \omega(\tau) \right). \end{aligned} \quad (6.11)$$

Отметим важный для нас факт, что $C_3(0, t) = C_3(t, t) = 0$. Так как операторы C_1 , C_2 и C_3 , по аналогии с $C(t)$, — ограниченные, точнее, для них справедливо утверждение 1, а $C_3 = 0$ в начальной и конечной точках интервала интегрирования, то можно ожидать, что функция $\omega(\tau)$ почти постоянна на этом интервале.

Следствие 1. Приближенное решение

$$FE_{ap}(\tau) = e^{-ik^2 \tau/2} D_{-}(\tau) \hat{D}_{-}(\tau) FE_0 \quad (6.12)$$

удовлетворяет уравнению (4.5) в начальной и конечной точках интервала интегрирования $0 \leq \tau \leq t$.

Действительно, выразив в полученной после формального дифференцирования сумме все слагаемые через саму функцию $FE_{ap}(\tau)$, найдем уравнение, которому она удовлетворяет на интервале $0 \leq \tau \leq t$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial FE_{ap}(\tau)}{\partial \tau} &= -\frac{ik^2}{2} FE_{ap}(\tau) + \\ &+ e^{-ik^2(t-\tau)/2} F \left(\frac{i\tau}{2t} N(\tau) F^{-1} \left(e^{ik^2(t-\tau)/2} FE_{ap}(\tau) \right) \right) + \\ &+ e^{-ik^2 \tau/2} D_{-}(\tau) F \left(\frac{i(t-\tau)}{2t} N(\tau) F^{-1} \left(D_{+}(\tau) e^{ik^2 \tau/2} FE_{ap}(\tau) \right) \right). \end{aligned}$$

В точке $\tau = 0$ второе слагаемое обращается в нуль, в третьем слагаемом $D_{-}(0) = D_{+}(0) = I$, и тогда получаем

$$\frac{\partial FE_{ap}(0)}{\partial \tau} = -\frac{ik^2}{2} FE_{ap}(0) + F\left(\frac{i}{2} N(0) F^{-1}(FE_{ap}(0))\right). \quad (6.13)$$

Так как начальные данные у приближенного и точного решений одни и те же, то

$$\frac{\partial FE_{ap}(0)}{\partial \tau} = \frac{\partial FE(0)}{\partial \tau}.$$

В точке $\tau = t$ третье слагаемое обращается в нуль, и тогда

$$\frac{\partial FE_{ap}(t)}{\partial \tau} = -\frac{ik^2}{2} FE_{ap}(t) + F\left(\frac{i}{2} N(t) F^{-1}(FE_{ap}(t))\right), \quad (6.14)$$

т. е. $FE_{ap}(t)$ удовлетворяет уравнению (4.5). Это означает, что в конечной точке $\tau = t$ траектория $FE_{ap}(\tau)$ касается траектории решения уравнения (4.5), близкого к точному решению задачи Коши (4.5), (4.3).

Проинтегрируем теперь уравнение (6.11) относительно $w(\tau)$ по интервалу $0 \leq \tau \leq t$:

$$w(t) = w_0 - \frac{i}{2} \int_0^t C_3(\tau, t) w(\tau) d\tau.$$

Проинтегрировав по частям, что возможно в силу ограниченности оператора C_3 в пространстве непрерывных функций, получим

$$w(t) = w_0 - \frac{i}{2} \tau C_3(\tau, t) w(\tau) \Big|_0^t + \frac{i}{2} \int_0^t \tau \frac{d}{d\tau} (C_3(\tau, t) w(\tau)) d\tau.$$

Подстановка обращается в нуль в силу свойств оператора C_3 . Проинтегрируем по частям исходное уравнение относительно $w(\tau)$ еще раз, но уже с функцией $\tau - t$ вместо τ :

$$w(t) = w_0 + \frac{i}{2} \int_0^t (\tau - t) \frac{d}{d\tau} (C_3(\tau, t) w(\tau)) d\tau.$$

Взяв полусумму полученных выражений, находим

$$w(t) = w_0 + \frac{i}{2} \int_0^t [\tau - (t - \tau)] \frac{d}{d\tau} (C_3(\tau, t) w(\tau)) d\tau.$$

Взяв интеграл ещё раз по частям, получаем

$$\begin{aligned} w(t) &= w_0 + \frac{i}{2} \int_0^t \tau (t - \tau) C_4(\tau, t) w(\tau) d\tau = \\ &= w_0 + \frac{i}{2} \int_0^t \tau (t - \tau) \frac{d^2}{d\tau^2} (C_3(\tau, t) w(\tau)) d\tau. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Здесь подстановка обращается в нуль за счет функции $\tau(t - \tau)$. В силу уравнения (6.11)

$$\begin{aligned} C_4(\tau, t) w(\tau) &= \frac{d^2}{d\tau^2} (C_3(\tau, t) w(\tau)) = \left[\frac{d^2}{d\tau^2} C_3(\tau, t) - \right. \\ &\left. - i \left(\frac{d}{d\tau} C_3(\tau, t) \right) C_3(\tau, t) - \frac{i}{2} C_3(\tau, t) \frac{d}{d\tau} C_3(\tau, t) - \frac{1}{4} (C_3(\tau, t))^3 \right] w(\tau). \end{aligned}$$

Здесь нельзя менять местами оператор C_3 и его производную по τ , так как они могут и не коммутировать. В случае, когда у спектра оператора $C_3(\tau, t)$ точка ноль является кратным собственным значением, сам оператор $C_3(\tau, t)$ может не быть производящим оператором полугруппы (см. [24]). Коммутационные соотношения при этом могут и не выполняться, а сам этот случай нужно рассматривать отдельно.

Утверждение 2. Оператор $C_4(\tau, t)$ в (6.15) является ограниченным оператором из $FH_2(k)$ в $L_2(k)$, если $FN \in FL_4$. Справедлива оценка

$$\left| \langle C_4(\tau, t) w, w \rangle_{L_2} \right| \leq C \max_{0 \leq \tau \leq t} M(\tau) \|w\|_{FH_3} \|w\|_{L_2}, \quad (6.16)$$

где

$$\begin{aligned} M(\tau) &= \max \{ \|FN\|_{FL_4}, \|FN'_t\|_{FL_2}, \|FN''_{tt}\|_{FL_0} \} \times \\ &\times \left(1 + \tau^2 \|FN\|_{FL_2}^2 \right). \end{aligned} \quad (6.17)$$

Схема доказательства. В операторе $C_4(\tau, t)$, представляющем собой интегральный оператор типа свертки, выделим главную, т. е. наиболее быстро растущую с ростом $|k|$ часть. Как уже было при выводе уравнения (6.8), при дифференцировании операторов D_{\pm} появляется множитель — ограниченный оператор $C_1(\tau, t)$. Аналогично происходит при дифференцировании \hat{D}_{\pm} . Неограниченный мно-

жителъ $\frac{i}{2}(k^2 - k_1^2)$ появляется только при дифференцировании оператора $C(\tau)$. Таким образом, главной частью оператора является

$$\text{main } C_4(\tau, t)w = \hat{D}_+(\tau) D_+(\tau) \frac{d^2}{d\tau^2} C(\tau) D_-(\tau) \hat{D}_-(\tau) w.$$

В свою очередь

$$\text{main } \frac{d^2}{d\tau^2} C(\tau)f = -\frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (k^2 - k_1^2)^2 FN(k - k_1, \tau) e^{i(k^2 - k_1^2)\tau/2} f(k_1) dk_1.$$

Оценим полученный неограниченный множитель:

$$\begin{aligned} (k^2 - k_1^2)^2 &= (k - k_1)^2 (k - k_1 + 2k_1)^2 \leq (k - k_1)^2 [3(k - k_1)^2 + 6k_1^2] \leq \\ &\leq 6[1 + (k - k_1)^2]^2 (1 + k_1^2). \end{aligned}$$

Теперь можно оценить норму главной части оператора $C_4(\tau, t)$. При этом, естественно, опустим возникающие по ходу доказательства слагаемые меньшего порядка роста:

$$\begin{aligned} \langle \text{main } C_4(\tau, t) w, w \rangle_{L_2(k)} &= \\ &= \langle \hat{D}_+(\tau) D_+(\tau) \frac{d^2}{d\tau^2} C(\tau) \cdot D_-(\tau) \hat{D}_-(\tau) w, w \rangle_{L_2(k)}. \end{aligned}$$

Воспользовавшись обозначениями (6.1), (6.7) и (6.10), получим

$$\begin{aligned} \langle \text{main } C_4(\tau, t) w, w \rangle_{L_2(k)} &= \left\langle \frac{d^2}{d\tau^2} C(\tau) FE, FE \right\rangle_{L_2(k)} = \\ &= -\frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (k^2 - k_1^2)^2 FN(k - k_1) FE(k_1) \overline{FE}(-k) dk_1 dk. \end{aligned}$$

Из полученной нами оценки неограниченного множителя немедленно следует

$$\begin{aligned} &\left| \left\langle \frac{d^2}{d\tau^2} C(\tau) FE, FE \right\rangle_{L_2(k)} \right| \leq \\ &\leq c \left\| \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + (k - k_1)^2)^2 FN(k - k_1) (1 + k_1^2) FE(k_1) dk_1 \right\|_{L_2(k)} \|FE\|_{L_2(k)} \leq \end{aligned}$$

$$\leq c \|FN\|_{FL_2(k)} \|FE\|_{FH_2(k)} \|FE\|_{L_2(k)}.$$

Остальные слагаемые оператора $C_4(\tau, t)$ могут содержать только множитель $(k^2 - k_1^2)$ и производные FN'_τ и $FN''_{\tau\tau}$, а они оцениваются в тех же нормах. Для завершения доказательства нам нужно оценить $\|FE\|_{FH_2}$ через $\|w\|_{FH_2}$. В силу эквивалентности норм (5.2) и (5.3) можно воспользоваться дифференциальной нормой (5.2). При этом появятся производные по x от функции N . Так как в (6.6) и (6.8) входит экспонента от функции N , то при втором дифференцировании по x появится слагаемое с N^2 . Вернувшись в пространство образов Фурье, оценим получившиеся свертки. Эта оценка завершает доказательство:

$$\|FE\|_{FH_2(k)} \leq C \max_{0 \leq \tau \leq t} \left(1 + \tau^2 \|FN(\tau)\|_{FL_2(k)}^2 \right) \|w(\tau)\|_{FH_2(k)}.$$

Полученные нами оценки (6.16), (6.17) оператора $C_4(\tau, t)$ не улучшаемы. Сравнивая эти результаты с аналогичными, получаемыми при оценке ошибки аппроксимации разностных схем (см., например, [37]) и первого дифференциального приближения [38], видим, что по сравнению с ними мы имеем самый низкий порядок роста ошибки по $|k|$ в образах Фурье или наименьший порядок производных от неизвестной функции в пространстве преобразов.

Только начиная с этого момента будем пользоваться ограниченностью области изменения k ($|k| \leq k_{\max}$) — естественным ограничением приближенного метода.

Следствие 2. Из утверждений 1 и 2 вытекает, что если функция $FE(k)$ равна нулю при $|k| \geq k_{\max}$, то для соответствующего w (см. (6.1), (6.7) и (6.10)) справедливы оценки (см. (6.16), (6.17))

$$\left| \langle C_4(\tau, t) w, w \rangle_{L_2(k)} \right| \leq C \max_{0 \leq \tau \leq t} M(\tau) k_{\max}^2 \|w\|_{L_2(k)}^2, \quad (6.18)$$

$$\|w\|_{L_2(k)} = \frac{\|w_0\|_{L_2(k)}}{1 - CM(t) k_{\max}^2 t^3}. \quad (6.19)$$

Отметим, что $w_0 = FE_0$ и по предположению удовлетворяет условию следствия. Оценка (6.19) является очень грубой, но она необходима в качестве предостережения. Она заставляет следить за нормами функции $FN(t)$, входящими в (6.17), для прогнозирования

изменений шага по t при нарастании $M(t)$, а также там, где требуется по возможности увеличить k_{\max} для улучшения разрешающей способности метода, и, следовательно, пропорционально уменьшить шаг счета t . При вычислениях можно воспользоваться известным утверждением о связи значений коэффициентов Фурье дискретного и обычного преобразований ([29], см. также приложение). Для функций $E(x, t)$, для которых $FE(k, t) = 0$ при $|k| > k_{\max}$, эти коэффициенты совпадают. Таким образом, мы можем применять дискретное преобразование Фурье.

Оценка (6.18) позволяет нам ожидать, что интеграл в правой части (6.15) мал и функция $w(\tau)$ при $0 \leq \tau \leq t$ практически постоянна.

Утверждение 3. Если $FN \in FL_4$, а FE_0 равна нулю при $|k| \leq k_{\max}$, то в норме $L_2(k)$

$$FE(t) = e^{-ik^2 t/2} D_-(t) \hat{D}_-(t) FE_0 + O(k_{\max}^2 \tau^3). \quad (6.20)$$

Здесь $D_-(t)$ и $\hat{D}_-(t)$ определены в (6.6) и (6.8). В преобразовании этот результат дает формулу приближенной операторной экспоненты:

$$E(t) = \exp \left(\frac{i}{2t} \int_0^t \tau N(\tau) d\tau \right) \times \\ \times F^{-1} \left(e^{-ik^2 t/2} F \left(\exp \left(\frac{i}{2t} \int_0^t (t - \tau) N(\tau) d\tau \right) E(0) \right) \right). \quad (6.21)$$

Очевидно, что для (6.21), как и для (4.17), сохраняется первый интеграл (4.2).

Для случая $N = |E|^2$ интегралы по τ в (6.21) можно приближенно посчитать по формуле трапеций и немедленно получить соотношение (4.19).

Глава 7

СИСТЕМА ЗАХАРОВА

Одним из наиболее фундаментальных и зачаровывающих явлений в физике плазмы является ленгмюровская турбулентность. Хотя в линейном приближении при малых амплитудах эта турбулентность содержит только высокочастотные электронные осцилляции, присутствие волн большой амплитуды индуцирует нелинейности, которые связывают высокочастотные электронные колебания с низкочастотными ионными. Эти нелинейности ведут к параметрической неустойчивости, включающей трёхволновое взаимодействие, называемое распадной неустойчивостью, а также четырёхволновое взаимодействие, называемое модуляционной неустойчивостью или осцилляционной двухпоточной неустойчивостью. Сильно нелинейный режим ведёт к образованию когерентных структур, называемых солитонами. Эти структуры устойчивы в случае одного пространственного измерения и могут коллапсировать в случае двух и трёх измерений.

В. Е. Захаров [7] ввёл относительно простую систему уравнений движения жидкости для описания всех этих явлений. Эта модель эволюции распределения плазменных колебаний описывает плазму при помощи временной огибающей высокочастотного поля E и вариации плотности плазмы N относительно средней плотности N_0 .

7.1. Одномерная система

В случае одной пространственной переменной система Захарова имеет вид

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + NE = 0, \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial^2 N}{\partial t^2} - a^2 \left(\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 |E|^2}{\partial x^2} \right) = 0. \quad (7.2)$$

Область изменения x — либо вся действительная ось, при условии, что $E \in L_2$, либо $0 \leq x \leq 2\pi$ при дополнительных нулевых или периодических граничных условиях.

Начальные данные: $E(x, 0) = E_0(x)$, $N(x, 0) = 0$, $\frac{\partial N(x, 0)}{\partial t} = 0$.

Система (7.1)–(7.2) имеет при этом следующие интегралы движения:

$$I_1 = \int |E|^2 dx; \quad (7.3)$$

$$I_2 = \int \left(\left| \frac{\partial E}{\partial x} \right|^2 + \frac{1}{2} \left(N^2 + \left| \frac{\partial N}{\partial t} \right|^2 \right) - N |E|^2 \right) dx. \quad (7.4)$$

Численное моделирование таких смешанных систем нелинейных уравнений сталкивается с определенными трудностями. Попытки считать эти системы традиционными сеточными методами приводят к необходимости "разбалансировать" шаги по времени и по пространству для одного из входящих в систему (7.1)–(7.2) уравнений, так как из-за соотношения масштабов уравнение (7.1) требует при моделировании, чтобы шаг по времени был пропорционален квадрату шага по пространству:

$$\Delta t \sim \Delta x^2,$$

а гиперболическое уравнение (7.2) требует счета по характеристикам, т. е. пропорциональности шагов:

$$\Delta t \sim \Delta x.$$

Выбрав меньший шаг по времени, мы автоматически должны пользоваться промежуточной аппроксимацией для N , так как область влияния гиперболического уравнения, определяемая его характеристиками, в этом случае сосредоточена в малой окрестности расчетного узла ($\delta x = a \delta t \sim \Delta x^2$) и очень далеко отстоит от смежных узлов функций E и N . Как хорошо известно, уклонение в методе счета гиперболического уравнения от движения по характеристикам ведет к возникновению дисперсии скорости "сеточных" волн, их специфической групповой скорости, обусловленной дискретными свойствами сетки. Это особенно заметно при нахождении негладких решений, содержащих высокочастотные составляющие, у которых дисперсия скорости сеточных волн увеличивается с ростом частоты (см., наприм-

мер, [37], с. 317), а скорость распространения уменьшается. Появление ряби впереди фронта бегущей волны в этом случае связано с некогерентным ростом проекций на высокочастотные собственные функции, а не с изменением их скоростей.

Один из путей преодоления сформулированных вычислительных трудностей основан на спектральном представлении решения. Переход к образам Фурье позволяет разрабатывать приближенный метод расчета в таком функциональном пространстве, когда и образы функций FE и FN и прообразы E и N являются лишь непрерывными (см. (5.3), (5.5)).

Уравнение (7.2) легко интегрируется в образах Фурье

$$FN(t) = FN_1(t) + FN_2(t), \quad (7.5)$$

где

$$FN_1(t) = FN(0) \cos(v t) + FN'_t \frac{\sin(v t)}{v} \quad (7.6)$$

— общее решение однородного уравнения, удовлетворяющее заданным начальным условиям;

$$FN_2(t) = v \int_0^t \sin(v(t - \tau)) F(|E|^2) d\tau \quad (7.7)$$

— частное решение неоднородного уравнения, удовлетворяющее нулевым начальным условиям. Здесь $v = ak$.

На отрезке $0 \leq \tau \leq t$ рассмотрим две вспомогательные линейные задачи:

$$\mp 2i \frac{\partial G_{\pm}}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 G_{\pm}}{\partial x^2} = 0 \quad (7.8)$$

для функций G_+ и G_- с начальными данными

$$G_+(x, 0) = E(x, t) \quad \text{и} \quad G_-(x, 0) = E(x, 0) \quad (7.9)$$

и с теми же, что и для E , граничными условиями. Решение $G_+(x, \tau)$ дает нам как бы пересчет по линейной задаче в однородном пространстве ($N \neq 0$) значения $E(x, t)$ с верхнего слоя $\tau = t$ назад, а $G_-(x, \tau)$ — с нижнего слоя $E(x, 0)$ вперед:

$$G_{\pm}(x, \tau) = F^{-1} \left(e^{\pm ik^2 \tau / 2} FE(k, \xi_{\pm}) \right), \quad (7.10)$$

где $\xi_+ = t$, $\xi_- = 0$.

Тогда из (4.1), (4.5) и (4.6) легко следует

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} F(|E(\tau)|^2) = \\ & = -\frac{i}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left((k - k_1)^2 - k_1^2 \right) \exp\left[-i\left((k - k_1)^2 - k_1^2 \right) \tau / 2\right] \times \\ & \times u(k - k_1, \tau) \overline{u(k_1, \tau)} dk_1 = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial \tau} \exp\left[-i\left((k - k_1)^2 - k_1^2 \right) \tau / 2\right] u(k - k_1, \tau) \overline{u(k_1, \tau)} dk_1. \end{aligned}$$

Согласно утверждению 1 (см. (6.2), (6.3)), производная $\frac{\partial u}{\partial \tau}$ ограничена в норме $C(k)$ одной и той же константой для всех k . Поэтому можно заменить $u(k - k_1, \tau) \overline{u(k_1, \tau)}$ с точностью $O(t^2)$ линейной комбинацией по крайним точкам. Проинтегрировав получившееся соотношение по τ , взяв интеграл в правой стороне по частям и сократив получившиеся в результате интегрирования справа и слева одинаковые подстановки, результат можно легко выразить через G_+ и G_- :

$$\frac{1}{t} \int_0^t F\left(|G_+(t - \tau)|^2 - |G_-(\tau)|^2\right) d\tau = O(t^3). \quad (7.11)$$

Воспользовавшись формулой прямоугольников, получим равенство

$$F\left(|G_+(t/2)|^2\right) = F\left(|G_-(t/2)|^2\right) + O(t^2), \quad (7.12)$$

справедливое при каждом k .

Применим этот прием для вычисления FN_2 в (7.7). Здесь аппроксимируем линейной комбинацией по крайним точкам функцию

$$f(\tau) = \cos[v(t - \tau)] u(k - k_1, \tau) \overline{u(k_1, \tau)}.$$

Это возможно, если

$$|vt| \ll \pi/2. \quad (7.13)$$

В результате получим

$$FN_2(t) = \frac{2}{t} \int_0^t \left(F(|G_+(\tau)|^2) - \cos vt \cdot F(|G_-(\tau)|^2) \right) d\tau + O(t^3). \quad (7.14)$$

Воспользовавшись (7.11), избавимся от зависимости FN_2 от значения функции $E(t)$ на верхнем слое, а затем по формуле прямоугольников, как в (7.12), найдём

$$FN_2(t) = (1 - \cos vt) F(|G_-(t/2)|^2) + O(t^3). \quad (7.15)$$

Полученное приближение обладает третьим порядком точности и выражается, согласно (7.10), только через значение E в точке ноль.

Для вычисления $E(t)$ воспользуемся приближенной операторной экспонентой (6.21). Входящие в неё интегралы от $N_1(\tau)$ считаются аналитически, а от $N_2(\tau)$ находятся вышеизложенным приемом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{t} \int_0^t \tau FN_2(\tau) d\tau &= \left(\frac{t}{2} - \frac{\sin vt}{v} + \frac{1 - \cos vt}{v^2 t} \right) F(|G_-(t/2)|^2), \\ \frac{1}{t} \int_0^t (t - \tau) FN_2(\tau) d\tau &= \left(\frac{t}{2} - \frac{1 - \cos vt}{v^2 t} \right) F(|G_-(t/2)|^2). \end{aligned} \quad (7.16)$$

Для того чтобы можно было сделать следующий шаг по времени, необходимо вычислить $FN'_t(t)$. Действуя аналогично, получаем

$$(FN_2)'_t(t) = v \sin vt \cdot F(|G_-(t/2)|^2). \quad (7.17)$$

Приближенное решение (6.21), (7.6), (7.15) системы (7.1), (7.2) с интегралами, посчитанными по формулам (7.16), и с приближенным значением производной плотности плазмы (7.17) обладает хорошим порядком аппроксимации и, кроме того, сохраняет первый интеграл (7.3). Посчитанное по этим формулам значение второго интеграла (7.4) может быть использовано для подбора величины шага по времени. Достоинством построенной схемы является также то, что она явная, здесь не нужны итерации, как это было в случае схемы (4.10), требующей решения трансцендентного уравнения (4.12).

7.2. Сохранение второго инварианта

Построим теперь на интервале $0 \leq \tau \leq t$ такое приближенное решение системы (7.1)–(7.2), которое не только сохраняет точно первый интеграл (7.3), но и удовлетворяет соотношениям

$$\left. \frac{dI_2}{d\tau} \right|_{\tau=0} = \left. \frac{dI_2}{d\tau} \right|_{\tau=t} = 0. \quad (7.18)$$

Именно такое соотношение было получено при доказательстве сохранения гамильтониана H в (1.5).

Если построенное приближенное решение $E_{ap}(\tau)$, $N_{ap}(\tau)$, $0 \leq \tau \leq t$, будет удовлетворять системе (7.1)–(7.2) в точках $\tau = 0$ и $\tau = t$, то не только будет сохраняться первый интеграл (7.3), но и соотношения (7.18) будут выполняться автоматически.

Значение $FN_1(\tau)$ в (7.7) является точным решением однородного уравнения из (7.2). Подставим в (7.7) вместо $F(|E(\tau)|^2)$ линейную аппроксимацию по крайним точкам:

$$F(|E(\tau)|^2)_{ap} = F(|E(0)|^2) \frac{t-\tau}{t} + F(|E(t)|^2) \frac{\tau}{t}, \quad 0 \leq \tau \leq t.$$

Тогда точно вычисляется

$$\begin{aligned} FN_2(\tau)_{ap} = & \left[1 - \cos v\tau - \left(\frac{\tau}{t} - \frac{\sin v\tau}{vt} \right) \right] F(|E(0)|^2) + \\ & + \left[\frac{\tau}{t} - \frac{\sin v\tau}{vt} \right] F(|E(t)|^2). \end{aligned} \quad (7.19)$$

Очевидно, что в точках $\tau = 0$ и $\tau = t$ функция $FN_2(\tau)_{ap}$ удовлетворяет неоднородному уравнению (7.2) с нулевыми начальными данными. Для нахождения приближенного значения $E(\tau)$ опять воспользуемся выражением (6.12) для приближенной операторной экспоненты. Входящие в $D_-(\tau)$, $\hat{D}_-(\tau)$ интегралы от $N_1(\tau)$ мы считали аналитически. Для оператора $D_-(\tau)$ также аналитически найдем интеграл от $FN_2(\tau)_{ap}$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{t} \int_0^\tau \tau_1 FN_2(\tau_1)_{ap} d\tau_1 = \\ & = \left(\frac{(3t-2\tau)\tau^2}{6t^2} + \frac{\sin v\tau}{v^3 t^2} - \frac{\tau \cos v\tau}{v^2 t^2} - \frac{\tau \sin v\tau}{vt} + \frac{1 - \cos v\tau}{v^2 t} \right) \times \\ & \times F(|E(0)|^2) + \\ & + \left(\frac{\tau^3}{3t^2} - \frac{\sin v\tau}{v^3 t^2} + \frac{\tau \cos v\tau}{v^2 t^2} \right) F(|E(t)|^2). \end{aligned} \quad (7.20)$$

Если найдем аналитически соответствующий интеграл в $\hat{D}_-(\tau)$ в (6.12), то получим выражение

$$\begin{aligned}
 K(\tau) &= \frac{1}{i} \int_0^{\tau} (t - \tau_1) FN_2(\tau_1)_{op} d\tau_1 = \\
 &= \left(\frac{t^3 - (t - \tau)^3}{3t^2} - \frac{\sin vt}{\sqrt{3}t^2} + \frac{\tau \cos vt}{\sqrt{2}t^2} - \frac{(t - \tau) \sin vt}{vt} \right) F(|E(0)|^2) + \\
 &+ \left(\frac{(3t - 2\tau)\tau^2}{6t^2} - \frac{1}{\sqrt{2}t} + \frac{\sin vt}{\sqrt{3}t^2} + \frac{(t - \tau) \cos vt}{\sqrt{2}t^2} \right) F(|E(t)|^2), \quad (7.21)
 \end{aligned}$$

дающее в результате вместо (6.21) неявную схему для нахождения $|E(t)|^2$. Здесь потребуется решать систему трансцендентных уравнений и вести какой-либо итерационный процесс, так как не только нельзя воспользоваться соотношениями типа (4.18)–(4.19), дающими возможность явно найти $|E(t)|^2$, а затем и $E(t)$, но и получить даже уравнения типа (4.12). Однако при неявном методе для точного решения полученной системы будут удовлетворяться соотношения (6.13) и (6.14), а следовательно и (7.18). Для найденного же в результате итераций приближенного значения $E(t)$ точность выполнения (6.14) и (7.18) неизвестна, по крайней мере потому, что мы не знаем величины входящей в (6.14) производной. Поэтому $K(\tau)$ будем находить приближенно, но так, чтобы не нарушались соотношения (6.13) и (6.14). Очевидно, что для этого необходимо выполнение условий

$$\left. \frac{dK(\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=0} = \left. \frac{dK(\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=t} = 0. \quad (7.22)$$

Воспользуемся (7.7) для нахождения $K(\tau)$. Сменив порядок интегрирования в образовавшемся двойном интеграле и вычислив внутренний интеграл, получим

$$K(\tau) = \int_0^{\tau} f(t, \tau, \tau_1) F(|E(\tau_1)|^2) d\tau_1, \quad (7.23)$$

где

$$f(t, \tau, \tau_1) = \frac{v}{i} \int_{\tau_1}^{\tau} (t - \tau_2) \sin v(\tau_2 - \tau_1) d\tau_2 =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{t - \tau_1}{t} - \frac{t - \tau}{t} \cos v(\tau - \tau_1) - \frac{1}{vt} \sin v(\tau - \tau_1) = \\
&= v^2 \frac{(\tau - \tau_1)^2}{2t} \left[t - \tau + \frac{\tau - \tau_1}{3} \right] - v^4 \frac{(\tau - \tau_1)^4}{4!t} \left[t - \tau + \frac{\tau - \tau_1}{5} \right].
\end{aligned}$$

Видно, что функция $f(t, \tau, \tau_1)$ имеет в точке $\tau_1 = \tau$ нуль второго порядка. Поэтому малые изменения значений $F(|E(\tau_1)|^2)$ в окрестности этой точки мало скажутся на значении самого интеграла. Воспользуемся разложением функции $F(|E(\tau_1)|^2)$ в ряд, но в окрестности нуля:

$$\begin{aligned}
F(|E(\tau_1)|^2) &= F(|E(0)|^2) + \tau_1 \frac{\partial}{\partial \tau_1} F(|E(0)|^2) + \\
&+ \frac{\tau_1^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tau_1^2} F(|E(0)|^2) + \dots
\end{aligned}$$

Очевидно, что из (7.1) и (7.8), (7.9) следует равенство первых производных

$$\frac{\partial}{\partial \tau_1} F(|E(0)|^2) = \frac{\partial}{\partial \tau_1} F(|G_-(0)|^2),$$

и так как $\frac{\partial^2}{\partial \tau_1^2} F(|E(0)|^2)$ зависит от значения $N(0)$, а $\frac{\partial^2}{\partial \tau_1^2} F(|G_-(0)|^2)$

не зависит, получим после замены производной по времени в силу уравнения (7.1) следующую аппроксимацию:

$$F(|E(\tau_1)|^2) = F(|G_-(\tau_1)|^2) + O(k^4 \tau^2).$$

Отсюда немедленно вытекает

$$K_{ap}(\tau) = \int_0^{\tau} f(t, \tau, \tau_1) F(|G_-(\tau_1)|^2) d\tau_1 = K(\tau) + O(v^2 k^4 \tau^5).$$

Воспользовавшись линейной комбинацией функции $F(|G_-(\tau_1)|^2)$ по крайним точкам, фактически вернёмся к формуле (7.21), но с функцией $G_-(t)$ вместо $E(t)$:

$$K_{ap}(\tau) = \left[\frac{t^3 - (t - \tau)^3}{3t^2} - \frac{\sin vt}{v^3 t^2} + \frac{\tau \cos vt}{v^2 t^2} - \frac{(t - \tau) \sin vt}{vt} \right] \times$$

$$\begin{aligned}
& \times F(|E(0)|^2) + \\
& + \left[\frac{(3t - 2\tau)\tau^2}{6t^2} - \frac{1}{v^2 t} + \frac{\sin v\tau}{v^3 t^2} + \frac{(t - \tau) \cos v\tau}{v^2 t^2} \right] F(|G_-(t)|^2) + \\
& + O(v^2 k^4 \tau^5).
\end{aligned} \tag{7.24}$$

При этом мы не ухудшили порядок аппроксимации. Непосредственной проверкой убеждаемся, что соотношения (7.22) выполнены, следовательно и равенство (6.13). Теперь по аналогии с (4.18) введем при $\tau = t$

$$\begin{aligned}
B = F^{-1} \left(e^{-ik^3 t/2} F \left(\exp \left(\frac{i}{2t} \int_0^t (t - \tau) N_1(\tau) d\tau - \right. \right. \right. \\
\left. \left. - \frac{i}{2} K_{ap}(t) \right) \cdot E(0) \right) \right).
\end{aligned} \tag{7.25}$$

Воспользовавшись (6.21), (7.20) и (7.25), получим, как и ранее в (4.19),

$$|E(t)| = |B|. \tag{7.26}$$

Вместо (7.16) можно пользоваться выражениями (см. (7.20), (7.21))

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{t} \int_0^t \tau FN_2(\tau)_{ap} d\tau = \\
& = \left(\frac{t}{6} + \frac{\sin vt}{v^3 t^2} - \frac{\cos vt}{v^2 t} - \frac{\sin vt}{v} + \frac{1 - \cos vt}{v^2 t} \right) F(|E(0)|^2) + \\
& + \left(\frac{t}{3} - \frac{\sin vt}{v^3 t^2} + \frac{\cos vt}{v^2 t} \right) F(|B|^2), \\
& \frac{1}{t} \int_0^t (t - \tau) FN_2(\tau)_{ap} d\tau = \left(\frac{t}{3} - \frac{\sin vt}{v^3 t^2} + \frac{\cos vt}{v^2 t} \right) F(|E(0)|^2) + \\
& + \left(\frac{t}{6} - \frac{1}{v^2 t} + \frac{\sin vt}{v^3 t^2} \right) F(|G_-(t)|^2).
\end{aligned} \tag{7.27}$$

В результате формула (7.21) становится, как и (4.19), явной формулой для нахождения $E(t)$.

Из (7.19) найдем

$$FN_2(t)_{ap} = \left(\frac{\sin vt}{vt} - \cos vt \right) F(|E(0)|^2) +$$

$$+ \left(1 - \frac{\sin vt}{vt} \right) F(|B|^2) \quad (7.28)$$

и после дифференцирования по t аналогичное выражение для производной

$$FN'_{2i}(t)_{ap} = \left(v \sin vt - \frac{1 - \cos vt}{t} \right) F(|E(0)|^2) + \frac{1 - \cos vt}{t} F(|B|^2). \quad (7.29)$$

Очевидно, что в силу равенства (7.26) соотношение (7.19) продолжает удовлетворять неоднородному уравнению (7.2) с нулевыми начальными данными, а следовательно, выполнено не только равенство (6.13), но и (6.14). Так как с учетом равенства (7.26) и производная $FN'_i(t)_{ap}$ найдена аналитически, то отсюда сразу же вытекает, что построенное приближенное решение системы (7.1), (7.2) удовлетворяет соотношениям (7.18).

7.3. Тестовый пример

Система уравнений (7.1), (7.2) на действительной оси имеет семейство точных решений типа уединённых волн (солитонов) [39]:

$$E = \frac{a \cdot \exp(i(a^2 t/4 + vx))}{ch\left(a(x - x_0 + vt) / \sqrt{2(1 - v^2)}\right)}, \quad n = |E|^2(1 - v^2),$$

где a и v — параметры.

Один из наиболее реалистичных тестов для проверки качества выбранного алгоритма был приведён в [40]. Рассмотрен случай двух сталкивающихся солитонов. За начальные данные была взята сумма двух солитонов с одинаковыми амплитудами $E_{\max} = 1.0$, но с противоположно направленными скоростями $v = \pm 0.628319$. Для того чтобы изучить эффекты столкновения, была выбрана очень длинная система. Длина L была взята равной 160.0, так чтобы волны, возбуждаемые столкновением, оставались внутри системы в течение всего процесса вычислений. Для демонстрации эффекта столкновения на рис. 4 приведены значения $|E(x,t)|$ и $n(x,t)$ в различные моменты времени; видно, что в процессе столкновения генерируются волны, и после столкновения оба солитона имеют изменившееся

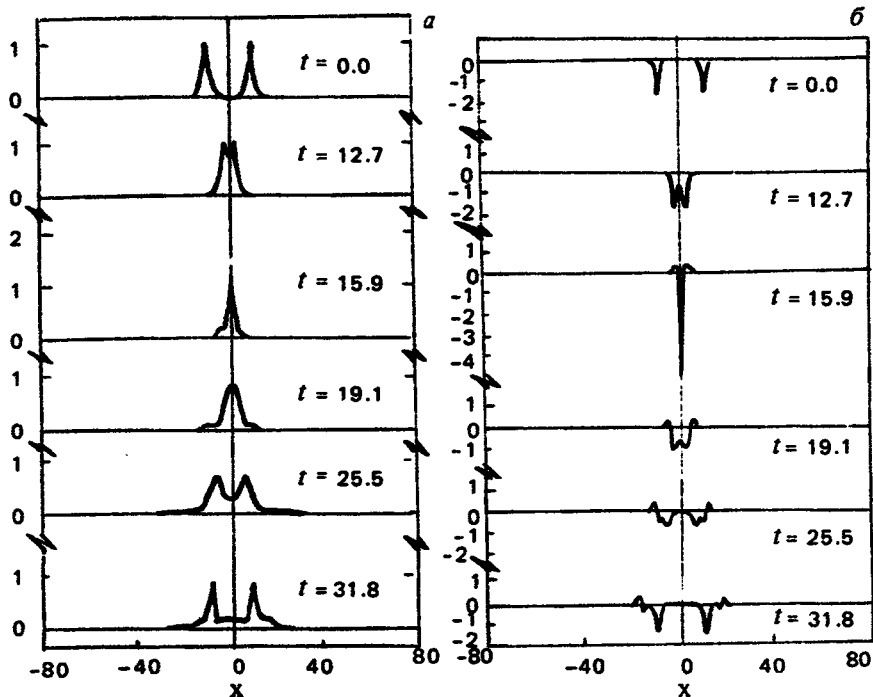


Рис. 4. Абсолютное значение электромагнитного поля (а) и плотности (б) в различные моменты времени для двух сталкивающихся солитонов с $E_{\max} = 1$

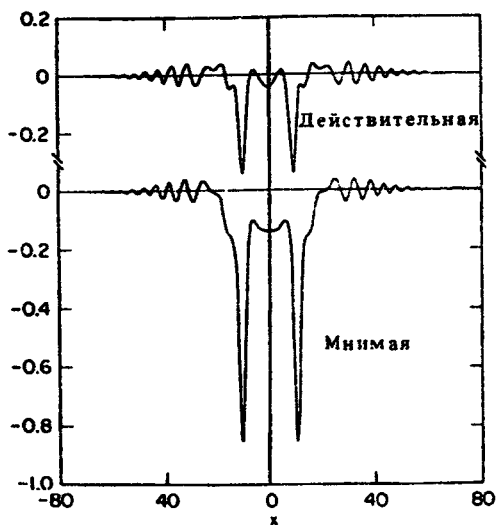


Рис. 5. Действительная и мнимая части электромагнитного поля при $t = 31.8$ для двух сталкивающихся солитонов

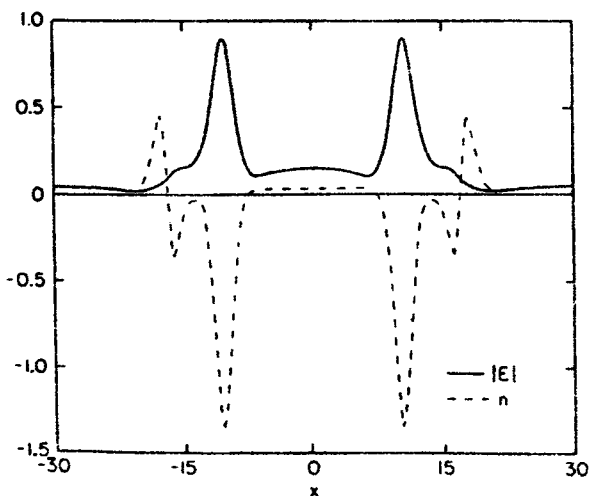


Рис. 6. Абсолютное значение поля и плотность при $t = 31.8$ для двух сталкивающихся солитонов

значение E_{\max} . Волны плотности двигаются со скоростью звука, а электромагнитные волны двигаются более быстро. На рис. 5 и 6 приведены значения поля и плотности при $t = 31.8$.

Мы ограничились этими иллюстрациями, так как детальное обсуждение физических эффектов столкновения солитонов не является нашей целью. Аналитическое описание этих процессов при больших временах см., например, в [41].

7.4. Система со сферической симметрией

В теории сильной ленгмюровской турбулентности одним из основных приближений является предположение о потенциальном характере электрического поля плазменных колебаний: $E = -\text{grad } \phi$. Это предположение строго справедливо только для симметричных распределений поля [42, 43], и, следовательно, пространственная моделирующая задача должна быть по крайней мере двумерной. В общем случае самовозбуждение потенциальных колебаний сопровождается генерацией вихревых полей и наоборот. Однако сферически симметричная модель, так называемый "скалярный коллапс", описывает процесс самофокусировки трёхмерных

квазиоптических пучков света, электрон-фотонное взаимодействие в твердых телах и т. п., и поэтому имеет самостоятельное значение.

В случае сферической симметрии система Захарова описывает скалярную модель ленгмюровского коллапса [7, 44, 45]:

$$-2i \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \mathcal{E} - N \mathcal{E} - i \hat{\gamma} \mathcal{E} = 0, \quad (7.30)$$

$$\frac{\partial^2 N}{\partial t^2} = \frac{a^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r N + \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r |\mathcal{E}|^2. \quad (7.31)$$

В такой модели теряется информация о геометрии реальной каверны, но принято ожидать, что она сохраняет правильный закон сжатия. Дополнительными условиями являются:

1) начальные условия

$$\mathcal{E}(r, 0) = \mathcal{E}_0(r), \quad N(r, 0) = \varphi(r), \quad \frac{\partial N}{\partial t}(r, 0) = \psi(r); \quad (7.32)$$

2) граничные условия

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial r}(0, t) = 0, \quad \frac{\partial N}{\partial r}(0, t) = 0, \quad \mathcal{E}(r, t) \text{ и } N(r, t) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty. \quad (7.33)$$

Здесь $\mathcal{E} = \mathcal{E}(r, t)$ — комплексная амплитуда поля, $N = N(r, t)$ — концентрация плазмы, $\hat{\gamma}$ — оператор затухания (в простейшем случае оператор умножения на число), a — групповая скорость ионно-звуковых волн.

Введем новую неизвестную функцию:

$$E(r, t) = r \mathcal{E}(r, t). \quad (7.34)$$

Тогда уравнения (7.30) — (7.31) примут вид

$$-2i \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} E - N E - i \hat{\gamma} E = 0, \quad (7.35)$$

$$\frac{\partial^2 N}{\partial t^2} = \frac{a^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r N + \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \left| \frac{E}{r} \right|^2. \quad (7.36)$$

Доопределим функции N и \mathcal{E} (следовательно, и E и начальные условия) при $r < 0$: N и \mathcal{E} продолжаютя четно, а E нечетно. При таком доопределении функцию $N(r, t)$ можно просто выразить через

E из уравнения (7.36) с учетом (7.32) по формуле Д'Аламбера для неоднородного волнового уравнения:

$$N(r, t) = N_1 + N_2, \quad (7.37)$$

где

$$N_1 = \frac{1}{2r} ((r + at) \varphi(r + at) + (r - at) \varphi(r - at)) + \frac{1}{2ar} \int_{r-at}^{r+at} \xi \psi(\xi) d\xi, \quad (7.38)$$

$$N_2 = \frac{1}{2ar} \int_0^t d\tau \int_{r-a(t-\tau)}^{r+a(t-\tau)} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left(\frac{|E(\xi, \tau)|^2}{\xi} \right) d\xi. \quad (7.39)$$

В формулу (7.37) для нахождения N входит двойной интеграл N_2 . Взяв внутренний интеграл (по ξ) и поменяв местами порядок интегрирования и дифференцирования, получим

$$N_2 = \frac{1}{2ar} \frac{\partial}{\partial r} \int_0^t \left(\frac{|E(r + a(t-\tau), \tau)|^2}{r + a(t-\tau)} - \frac{|E(r - a(t-\tau), \tau)|^2}{r - a(t-\tau)} \right) d\tau. \quad (7.40)$$

Домножив на r и применив преобразование Фурье, получим соотношения типа (7.6) и (7.7), но относительно rN , а вместо $F(|E|^2)$ берется $F\left(\frac{|E|^2}{r}\right)$. Для того чтобы эффективно посчитать $F\left(\frac{|E|^2}{r}\right)$, введем оператор T :

$$T f(k) = \int_{-\infty}^k f(s) ds - \int_k^{+\infty} f(s) ds. \quad (7.41)$$

Введение этого оператора объясняется тем, что

$$F\left(\frac{f(x)}{x}\right) = -\frac{i}{2} TF f(k). \quad (7.42)$$

Заметим, что:

1) если $t(k) = T f(k)$, то для нечетной функции $f(k)$ функция $Tf(k)$ четная, для четной — нечетная;

$$2) \text{ если } k \rightarrow \pm \infty, \text{ то } T f(k) \rightarrow \pm \int_{-\infty}^{+\infty} f(s) ds.$$

При реальных вычислениях интегралы в (7.41) заменяются суммами, причём для повышения точности суммирование нужно провести отдельно для каждого входящего в (7.41) интеграла, начиная с крайних точек, где по предположению функция $f(s)$ быстро стремится к нулю.

Тестирование вычислительной процедуры, осуществляющей оператор T , показало, что она дает более точные значения $F(f(x)/x)$, чем напрямую примененная к $f(x)/x$ программа быстрого преобразования Фурье. В таблице представлены результаты тестирования для функции $1024 \cdot \sin 20x$, заданной на 1024 точках. Как видно из таблицы, применение оператора T дает более точный результат (исчезает явление Гиббса [46]).

Таблица

k	$F(f(x)/x)$	$-\frac{i}{2}TF f(k)$	k	$F(f(x)/x)$	$-\frac{i}{2}TF f(k)$
0	1013.65	1024.05	16	995.521	1024.06
1	1034.39	1024.05	17	1060.70	1024.07
2	1013.55	1024.05	18	971.553	1024.07
3	1034.60	1024.05	19	1118.32	1024.08
4	1013.22	1024.05	20	509.466	512.086
5	1035.06	1024.05	21	- 89.0794	0.0811838
6	1012.63	1024.05	22	47.3281	0.0721014
7	1035.81	1024.05	23	- 31.4612	0.0674606
8	1011.69	1024.06	24	23.3123	0.0638244
9	1036.99	1024.06	25	- 18.2749	0.0606877
10	1010.21	1024.06	26	14.9759	0.0588254
11	1038.84	1024.06	27	- 12.5493	0.0571727
12	1007.85	1024.06	28	10.7992	0.0553008
13	1041.90	1024.06	29	- 9.37885	0.0539616
14	1003.78	1024.06	30	8.30984	0.0544504
15	1047.55	1024.06	31	- 7.37748	0.0550737

Примечание: В данной таблице приведены спектры Фурье функции $1024 \cdot \sin 20x/x$, представляющие собой ступеньку длиной в 20 единиц по k , рассчитанные двумя различными способами: $F(f(x)/x)$ прямо с помощью программы быстрого преобразования Фурье - FFT; $-\frac{i}{2}TF f(k)$ с использованием оператора T (см. (7.41)). Преимущества счета по второму способу очевидны...

Увеличение точности счёта $F\left(\frac{|E|^2}{r}\right)$ (фактически это свёртка) достигается с помощью добавления n более высоких гармоник FE , равных нулю. В случае одной пространственной переменной можно при выполнении прямого и обратного преобразований Фурье использовать вдвое больше значений E и FE , чем используется в основном алгоритме. В случае двух пространственных переменных такая возможность ограничивается имеющимися ресурсами ЭВМ.

Чтобы получить нужные нам значения $\mathcal{E}(t + \Delta t)$, используется тот же оператор T из (7.41), действующий на FE с последующим обратным преобразованием Фурье. Специфика рассматриваемого нами явления фокусировки такова, что с ростом $|\mathcal{E}(0, t)|$ и $|N(0, t)|$ спектры FE и FN расширяются. Чтобы учесть это расширение, можно сделать следующее: в моменты достижения величиной $|\mathcal{E}(0, t)/\mathcal{E}(0, 0)|$, называемой превышением, определённых контрольных значений (как правило, 2, 4, 8, 16 или 3, 6, 12, 24), число гармоник удваивается. Для получения значений функций в промежуточных точках используется та же процедура добавления нулей в старшие гармоники с последующим переходом в преобразы Фурье.

Совпадение трёх значащих цифр результатов счёта по приведённой выше методике с результатами расчётов, проведённых в [44] с помощью введения массовой переменной (см. гл. 8), показано в [45].

7.5. Двумерный векторный случай

В случае двух пространственных переменных (X, Y) имеет место система уравнений [6,7]

$$-2i \frac{\partial E}{\partial t} + \rho \operatorname{grad} \operatorname{div} E - \beta \operatorname{rot} \operatorname{rot} E + N \cdot E = 0, \quad (7.43)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} + a \operatorname{div} W = 0, \quad (7.44)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + a \operatorname{grad} (N - |E|^2) = 0. \quad (7.45)$$

Здесь E — комплексная амплитуда поля, N — плотность плазмы. Будем искать однородное по z решение E и, кроме того, считать

$E_z = 0$. Область изменения (X, Y) — либо все пространство (X, Y) при условии, что $E \in L_1 \cap L_2$, либо $0 \leq X, Y \leq 2\pi$ при дополнительных нулевых или периодических граничных условиях. Система (7.43) — (7.45) при этих условиях имеет следующие интегралы движения:

$$I_1 = \int |E|^2 dv, \quad (7.46)$$

$$I_2 = \int \left(\rho |\operatorname{div} E|^2 + \beta |\operatorname{rot} E|^2 + \frac{1}{2} (N^2 + |W|^2) - N |E|^2 \right) dv. \quad (7.47)$$

При нахождении решения этой системы для выяснения сравнительной динамики вихревой ($\operatorname{div} E_s = 0$) и потенциальной ($\operatorname{rot} E_p = 0$) компонент поля требуется предусмотреть возможность их эффективного получения.

Имеется всего несколько работ, посвящённых численному исследованию векторной модели коллапса [47 — 49], но в первых двух из них рассматривались лишь одномерные по пространственным переменным модели. В векторной постановке задачи важным является ответ на вопрос, остаётся ли изначально потенциальное поле таковым вплоть до возникновения особенности, а также каково поведение решения за точкой особенности. Приведённые в конце главы иллюстрации дают картину одного из возможных ответов на эти вопросы.

После преобразования Фурье вместо (7.43) получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений для образов Фурье FE , главная (неограниченная с ростом k_i) часть которой приводится к диагональному виду с помощью преобразования T :

$$2i \frac{\partial}{\partial t} TFE = \Lambda TFE + TF(NF^{-1} T^{-1} TFE); \quad (7.48)$$

здесь

$$\lambda_1 = -\rho |k|^2 = -\rho(k_1^2 + k_2^2), \quad \lambda_2 = -\beta |k|^2, \quad (7.49)$$

$$T = \frac{1}{|k|} \begin{vmatrix} k_1 & k_2 \\ k_2 & -k_1 \end{vmatrix}, \quad \Lambda = \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{vmatrix}. \quad (7.50)$$

Заметим, что компонентами вектора TFE являются образы Фурье от потенциальной и вихревой частей поля: $FE_p = T^{-1}(TFE_1)$, $FE_s = T^{-1}(TFE_2)$.

Вместо (6.21) получим соотношение

$$E(t) = \exp \left(\frac{-i}{2t} \int_0^t \tau N(\tau) d\tau \right) F^{-1} T^{-1} (\exp(-i \Lambda t/2) \times \\ \times TF \left(\exp \left(\frac{-i}{2t} \int_0^t (t - \tau) N(\tau) d\tau \right) E_0 \right)), \quad (7.51)$$

дающее приближенное решение уравнения (7.31). Очевидно, что в силу унитарности матрицы T и оператора преобразования Фурье F , соотношение (7.51) сохраняет интеграл (7.46). Утверждение 1 (см. (6.1) – (6.3)) остается справедливым для оператора

$$C(t) = \exp(i \Lambda t/2) TF \left(N(t) F^{-1} T^{-1} (\exp(-i \Lambda t/2) \dots) \right). \quad (7.52)$$

Делая те же замены, что и в гл. 6, но с

$$D_{\pm}(\tau) = \exp(i \Lambda t/2) TF \left(\exp \left(\pm \frac{i}{2t} \int_0^{\tau} \tau_1 N(\tau_1) d\tau_1 \right) \right) \times \\ \times F^{-1} T^{-1} (\exp(-i \Lambda t/2) \dots), \quad (7.53)$$

$$\hat{D}_{\pm}(\tau) = TF \left(\exp \left(\pm \frac{i}{2t} \int_0^{\tau} (t - \tau_1) N(\tau_1) d\tau_1 \right) F^{-1} T^{-1} \dots \right) \quad (7.54)$$

получим векторный аналог уравнения (6.15). Из-за наличия в матрице оператора $C_4(\tau, t)$ внедиагональных членов оценки (6.16) и (6.17) утверждения 2 ухудшаются и вместо них будем иметь

$$\left| \langle C_4(\tau, t) w, w \rangle_{L_2} \right| \leq c \max_{0 \leq \tau \leq t} M(\tau) \|w\|_{FH_3} \|w\|_{L_2}, \quad (7.55)$$

где

$$M(\tau) = \max \{ \|FN\|_{FL_4}, \|FN'_t\|_{FL_2}, \|FN''_{tt}\|_{FL_0} \} \times \\ \times \left(1 + \tau^2 \|FN\|_{FL_2}^2 \right)^{3/2}. \quad (7.56)$$

Для пояснения выпишем главную, наиболее быстро растущую с ростом $|k|$ часть оператора $C_4(\tau, t)$, представляющую собой интегральный оператор типа свертки:

$$\begin{aligned} \tilde{C}_4(\tau, t) W = & -\frac{1}{4} \hat{D}_+(\tau) D_+(\tau) \exp(i \wedge \tau/2) T \left[B^2(k) (FN + \dots) - \right. \\ & \left. - 2B(k) (FN + (B(k') \dots)) + (FN + (B^2(k') \dots)) \right] \times \\ & \times T^{-1} \exp(-i \wedge \tau/2) D_-(\tau) \hat{D}_-(\tau) W(\tau). \end{aligned}$$

Здесь $B(k) = T^{-1} \wedge T$. В силу унитарности $\hat{D}_\pm(\tau)$, $D_\pm(\tau)$, T и F справедливо

$$\begin{aligned} & \left| \langle \tilde{C}_4(\tau, t) W, W \rangle_{L_2(k)} \right| = \\ & = \left| \langle (B^2(k) (FN + FE) - 2B(k) (FN + B(k') FE) + \right. \\ & \left. + (FN + B^2(k') FE)), FE \rangle_{L_2(k)} \right|. \end{aligned}$$

Выделим в скалярном произведении наиболее быстро растущую по k' часть. Обозначим получившийся в результате оператор, действующий на FE , через $\hat{C}_4(\tau, t)$:

$$\begin{aligned} & \left| \langle \hat{C}_4(\tau, t) FE, FE \rangle_{L_2(k)} \right| = \\ & = \left| \iint FN(k - k') A(k, k') FE(k') \overline{FE}(-k) dk' dk \right|. \end{aligned}$$

Компоненты матрицы $A(k, k')$ равны соответственно (см. (7.50))

$$\begin{aligned} a_{11} = a_{22} = 0; \quad a_{12} = a_{21} = \\ = (\rho - \beta) \left[(k'_1)^2 + (k'_2)^2 \right] \left[(k_2 - k'_2) k'_1 - (k_1 - k'_1) k'_2 \right]. \end{aligned}$$

По неравенству Юнга (см. [25]) для свёрток получим оценку

$$\begin{aligned} & \left| \langle \hat{C}_4(\tau, t) FE, FE \rangle_{L_2(k)} \right| \leq \\ & \leq \| |k| FN \|_{L_1(k)} \| FE \|_{L_2(k)} \| FE \|_{FH_3(k)}. \end{aligned}$$

В остальные части оператора $\hat{C}_4(\tau, t)$ входят k' в степенях, меньших трех, и поэтому справедлива оценка

$$\begin{aligned} & \left| \langle C_4(\tau, t) W, W \rangle_{L_2(k)} \right| \leq \\ & \leq \| FE \|_{L_2(k)} \sum_{p=0}^3 \| |k|^{4-p} FN \|_{L_1(k)} \| FE \|_{FH_p(k)} \leq \end{aligned}$$

$$\leq C \|FN\|_{FL_2(k)} \|FE\|_{FH_2(k)} \|FE\|_{L_2(k)}.$$

Для завершения доказательства необходимо оценить $\|FE\|_{FH_2}$ через $\|W\|_{FH_2}$. Действуя аналогично гл. 6, получим

$$\|FE\|_{FH_2}^2 \leq C \max_{\tau} \left(1 + \|FN(\tau)\|_{FL_2}^2 \tau^2 \right)^3 \|W(\tau)\|_{FH_2}^2.$$

Следствие. Если вектор-функция $FE(k)$ равна нулю при $|k| > K_{\max}$, то для соответствующей W (см. (6.10), (6.7) и (6.1)) справедлива оценка

$$\left| \langle C_4(\tau, t) W, W \rangle_{L_2(k)} \right| \leq C \max_{0 \leq \tau \leq t} M(\tau) K_{\max}^3 \|W\|_{L_2(k)}^2. \quad (7.57)$$

Определив $M(t) = \max_{0 \leq \tau \leq t} M(\tau)$, получим оценку для W :

$$\|W\|_{L_2(k)} \leq \frac{\|W_0\|_{L_2(k)}}{1 - C M(t) K_{\max}^3 t^3}.$$

Она является ещё более грубой, чем (6.16), так как имеет по k более быстрый рост и, кроме того, $M(t)$ в (7.55) содержит более грубую норму FN , чем (6.17).

Вместо (7.10) получим

$$G_{\pm}(\tau) = F^{-1} T^{-1} (\exp(\mp i \Lambda \tau/2) TFE(\xi_{\pm})); \quad \xi_{+} = t, \quad \xi_{-} = 0. \quad (7.58)$$

Соответственно

$$2i \frac{\partial}{\partial \tau} F(|E|^2) = T^{-1} \Lambda (\exp(-i \Lambda \tau/2) U) * T^{-1} \exp(i \Lambda \tau/2) \overline{U} - \\ - T^{-1} \exp(-i \Lambda \tau/2) U * T^{-1} \Lambda (\exp(i \Lambda \tau/2) \overline{U}),$$

где U вводится аналогично (6.1).

Проинтегрировав это равенство по τ , взяв вместо функции $f(\tau) = U(k - k', \tau) \overline{U}(-k', \tau)$ под знаком свертки и интеграла по τ её линейную аппроксимацию по крайним точкам

$$f(\tau) = TFE(k - k', 0) \overline{TFE}(-k', 0) \frac{t - \tau}{t} + \\ + \exp(i \Lambda (k - k') t/2) TFE(k - k', t) \exp(-i \Lambda (k') t/2) \times \\ \times \overline{TFE}(-k', t) \frac{\tau}{t} + O(t^2),$$

получим соотношения (7.11) и (7.12), но для соответствующих векторов $G_{\pm}(t)$ из (7.58). Можно также воспользоваться формулами (7.27) для подсчета входящих в (7.51) интегралов и векторным аналогом формулы (7.25). Выражения (7.28) и (7.29) для нахождения плотности и ее производной по времени остаются без изменений. Надо только помнить, что вместо скаляров E и B стоят векторы $G_{\pm}(t)$ из (7.58).

В завершение приведём способ счёта интеграла движения I_2 (см. (7.47)) в образах Фурье. Первые три слагаемых легко находятся по равенству Парсеваля:

$$\int \rho |\operatorname{div} E|^2 dv = \rho \int |k_1 FE_x - k_2 FE_y|^2 dk,$$

$$\int \beta |\operatorname{rot} E|^2 dv = \beta \int |k_2 FE_x - k_1 FE_y|^2 dk,$$

$$\int N^2 dv = \int |FN|^2 dk.$$

Мы умеем, согласно (7.17) или (7.29), находить $\frac{\partial N}{\partial t}$. Покажем, как с её помощью находится FW . Проинтегрировав (7.45) по t , находим

$$W = -a \operatorname{grad} f,$$

$$\text{где } f = \int_0^t (N - |E|^2) dt.$$

Взяв div от обеих частей полученного равенства и воспользовавшись (7.44), находим

$$\operatorname{div} W = -a \Delta f = -\frac{1}{a} \frac{\partial N}{\partial t}.$$

В рассматриваемой нами области при выбранных граничных условиях для функций E и N можно найти функцию f , обратив лапласиан. Формально для этого нужно выполнение равенств

$$\int \frac{\partial N}{\partial t} dv = 0 \text{ или } F \left(\frac{\partial N}{\partial t} \right) \Big|_{k=0} = 0.$$

В образах Фурье получаем

$$Ff = -\frac{1}{a^2 |k|^2} \frac{\partial FN}{\partial t}, \quad FW = \frac{-ik}{a |k|^2} \frac{\partial FN}{\partial t}.$$

Последнее слагаемое в (7.47) считаем по формуле

$$\int N |E|^2 dv = \int FN \cdot \overline{F(|E|^2)} dk.$$

Дополнительных обращений к программе преобразования Фурье здесь не требуется, так как все необходимые величины у нас уже есть (см. (7.28)).

7.6. Примеры и их анализ

Проиллюстрируем возможности разработанных алгоритмов, а также проанализируем встречающиеся на пути вычислений "подводные камни". Такой анализ особенно интересен в случае двух пространственных переменных, когда визуализация результатов затрудняется выбором угла зрения, набора линий уровня, а в случае решений с обострениями и масштаба по вертикали.

Полученные нами в (6.16), (6.17) и в (7.55), (7.56) оценки погрешности $\psi(t)$ имеют наименьший из известных для ошибок аппроксимации порядок производных по пространственным переменным, или, что одно и то же, самый низкий порядок роста по $|k|$ в образах Фурье, как по сравнению с погрешностями разностных схем [37], так и дифференциальных приближений [38]. Кроме того, эти оценки (см. также (6.19)) гарантируют наличие обычной устойчивости линеаризованной задачи (см. [37]) и сходимость приближённого решения E_{ap} к точному. Для устойчивости, вообще говоря, достаточно ограниченности оператора $C_3(\tau, t)$ в (6.11), доказываемой аналогично утверждению 1 гл. 6. Сохранение интегралов (7.3), (7.46) и (7.4), (7.47) в смысле, сформулированном в (7.18), говорит о выполнении условий полной консервативности (см. [37]).

Оказалось, что если за основу вычислений взять спектральное представление неизвестных функций, то таким образом дополнительно увеличивается разрешающая способность метода, что мы и продемонстрируем в дальнейшем на рис. 9. Проверку устойчивости, а также критерий правильности результата — фактически момента остановки счёта для решения с обострением — легко вести по нарастанию коэффициентов Фурье при больших значениях $|k|$.

Оказалось, что сохранение конечномерного аналога интеграла (7.46)

$$I_1 = \int |E|^2 dv \approx \sum_{i,j} |E(x_i, y_j, t)|^2 \Delta x \Delta y$$

приводит к ограничению роста $|E_{\max}|$. При сосредоточении функции $E(x_i, y_j, t)$ в окрестности одной точки

$$|E_{\max}|^2 \leq I_1 / \Delta x \Delta y.$$

Это эквивалентно введению сильнолокализованного (многофотонного) затухания, аналогичного рассмотренному в [8, 9]. При этом плотность N в этой точке растёт, так как каверна у N продолжает сужаться, а сохранение интегралов

$$\int N(x, y, t) dx dy, \quad \int N_i^2(x, y, t) dx dy$$

этому не препятствует. Величина $|E_{\max}|$ не может ни уменьшиться (этому мешает наличие каверны у N), ни вырасти (этому мешает, как мы видели, сохранение дискретного аналога интеграла I_1). Значит, в окрестности точки E_{\max} некоторое время $|E|$ практически не меняется, а изменяется лишь фаза E . Посмотрим, к чему это должно привести. Предположим, что в правой части системы (7.44) – (7.45) в окрестности точки коллапса есть локальная, постоянная в течение некоторого отрезка времени функция $f_0(x, y)$, которая по модулю намного больше значений правой части во всей остальной области. Вклад её в решение $N_{\text{loc}}(x, y, t)$ может быть оценён отдельно. В этом случае (см. [28], стр. 423) у решения волнового уравнения, к которому сводится система (7.44) – (7.45), благодаря такой правой части имеют место периодические колебания с амплитудой

$$v(x, y) = \iint f_0(x_0, y_0) H_0^{(1)}(kr) dx_0 dy_0,$$

где $r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$, так что

$$N_{\text{loc}}(x, y, t) = v(x, y) e^{iakt}.$$

Если мы рассматриваем периодическую задачу, то вместо одной функции имеем дело с суммой:

$$\sum_{m, n = -\infty}^{+\infty} f(x_0 + nL, y_0 + mL).$$

На рис. 7 приведена типичная картина появления такого решения. Здесь изображена функция $N(x, y, t)$, являющаяся решением задачи (7.43) – (7.45) с периодическими граничными условиями при начальных данных

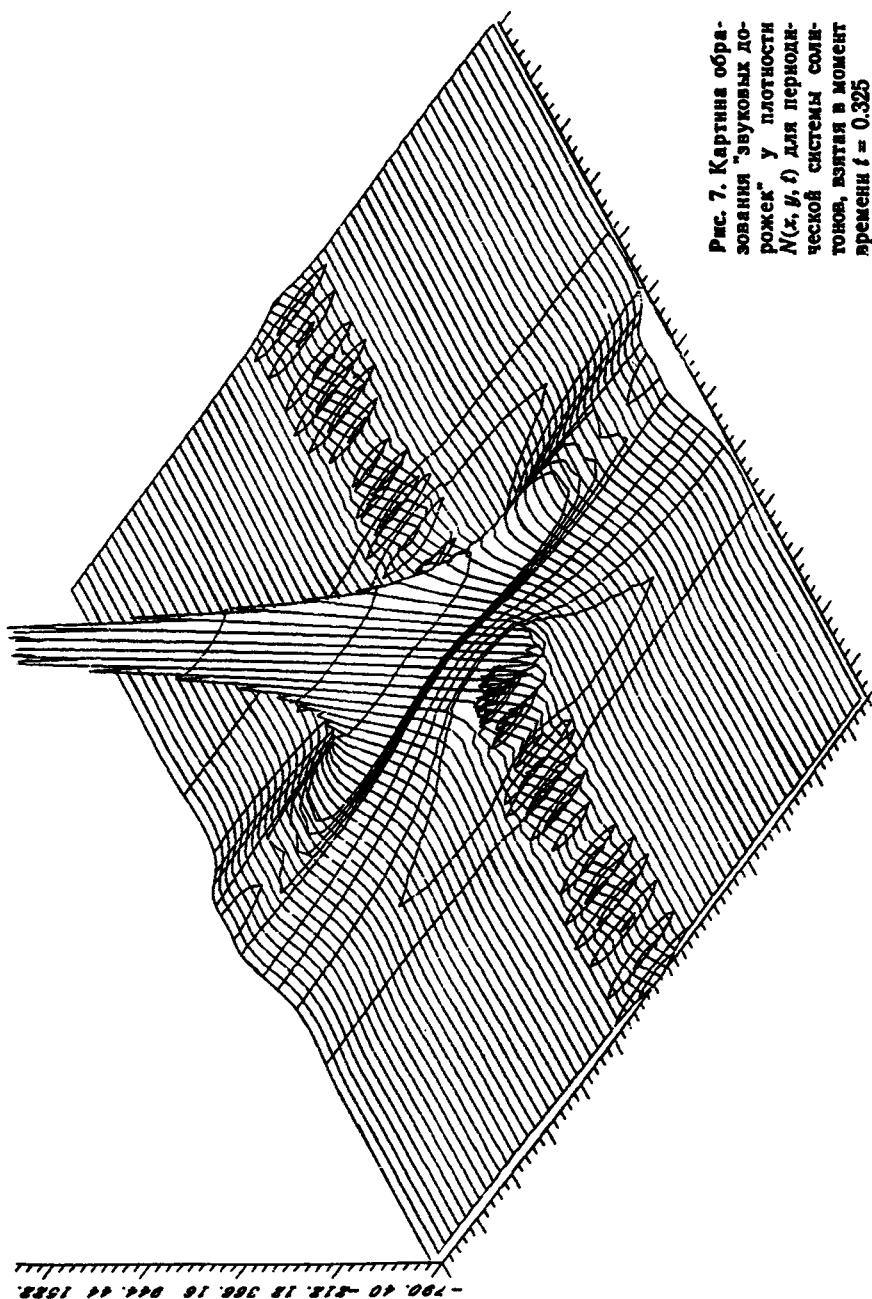


Рис. 7. Картина образования "звуковых рожек" у плотности $N(x, y, t)$ для периодической системы солитонов, взятая в момент времени $t = 0.325$

-790.40 -512.18 386.16 944.44 1582.

$$E_{0,1}(x, y) = \frac{\sqrt{2}}{a \cdot \operatorname{ch}(x/a)}, \quad E_{0,2}(x, y) = 0.5 \left(\sin \frac{\pi y}{2L} + \sin \frac{\pi y}{L} + \sin \frac{3\pi y}{2L} \right),$$

$$N_0(x, y) = |E_{0,1}(x, y)|^2 + |E_{0,2}(x, y)|^2, \quad (N_0)'_t(x, y) = 0,$$

$$a = 0.16, \quad L = 0.96, \quad \rho = 1, \quad \beta = 10$$

в момент времени $t = 0.325$. Функция $|E|^2$, входящая в правую часть (7.45), в области фокуса выглядит аналогично приведённой на рис. 7, т. е. $|E|^2 \approx N$. Поэтому максимальное значение $\Delta |E|^2$ будет достигаться на гребне в некоторой точке (x_0, y_0) . Просуммируем вклад в решение от двух точек, расположенных на вершинах двух соседних гребней, в области между ними. От левого гребня возьмём волну, бегущую вправо, а от правого — влево:

$$N_{\text{loc}}(x, y, t) = f_{\text{max}} \left[H_0^{(1)}(|k|r_1) e^{iakt} + H_0^{(1)}(|k|r_2) e^{-iakt} \right].$$

Здесь

$$r_1 = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}, \quad r_2 = \sqrt{(x - x_0 + L)^2 + (y - y_0)^2}.$$

Посмотрим, что будет на прямой $y = y_0$. Для достаточно большого $|k|$ можно воспользоваться асимптотическим представлением функции Ханкеля. Взяв положительное k , получаем

$$\begin{aligned} N_{\text{loc}}(x, y, t) &= \\ &= f_{\text{max}} \left[\frac{\sin(k(x - at) - \pi/4)}{\sqrt{kx}} + \frac{\sin(k(L - x + at) - \pi/4)}{\sqrt{k(L - x)}} \right]. \end{aligned}$$

Если $kL = 2\pi n$, то после несложных выкладок находим

$$N_{\text{loc}}(x, y, t) = \frac{2f_{\text{max}}}{\sqrt{k}} \cos kx \cos akt \sin(-\pi/4) \left(\frac{1}{\sqrt{x}} + \frac{1}{\sqrt{L - x}} \right),$$

т. е. типичную картину образовавшейся стоячей волны. Если гребень функции N достаточно длинный и, например, в двух соседних точках по направлению оси $y - (x_0, y_0)$ и $(x_0, y_0 + h)$ — функция f_0 принимает одинаковое значение, то вклад в решение на прямой $y = y_0$ от точки $(x_0, y_0 + h)$ будет

$$N_{1, \text{loc}}(x, y, t) = \frac{2f_0}{\sqrt{k}} \cos kx \cos akt \sin(kh - \pi/4) \left(\frac{1}{\sqrt{x}} + \frac{1}{\sqrt{L-x}} \right).$$

Если $kh = \pi/4$, то источники, взятые в двух соседних точках на гребне солитона, на прямых $y = y_0$ и $y = y_0 + h$ как бы не взаимодействуют друг с другом. Вклад их в общее решение представляет собой плоскую по y ($y_0 \leq y \leq y_0 + h$) волну, которая наблюдается на рис. 7. Так как $h = L/N$, где N — число точек на периоде, то k определяется однозначно:

$$k = \frac{2\pi}{L} \frac{N}{8}.$$

Если на рассматриваемой периодической области образуется сразу несколько каверн, то, так как вероятность совпадения их амплитуд и указанных выше фазовых соотношений мала, то стоячие волны (звуковые дорожки) между двумя такими кавернами, расположенными на одном периоде, не образуются.

При приближении по времени к точке образования особенности поля и плотности плазмы шаг счёта нужно уменьшать согласно естественному критерию (см. (7.51))

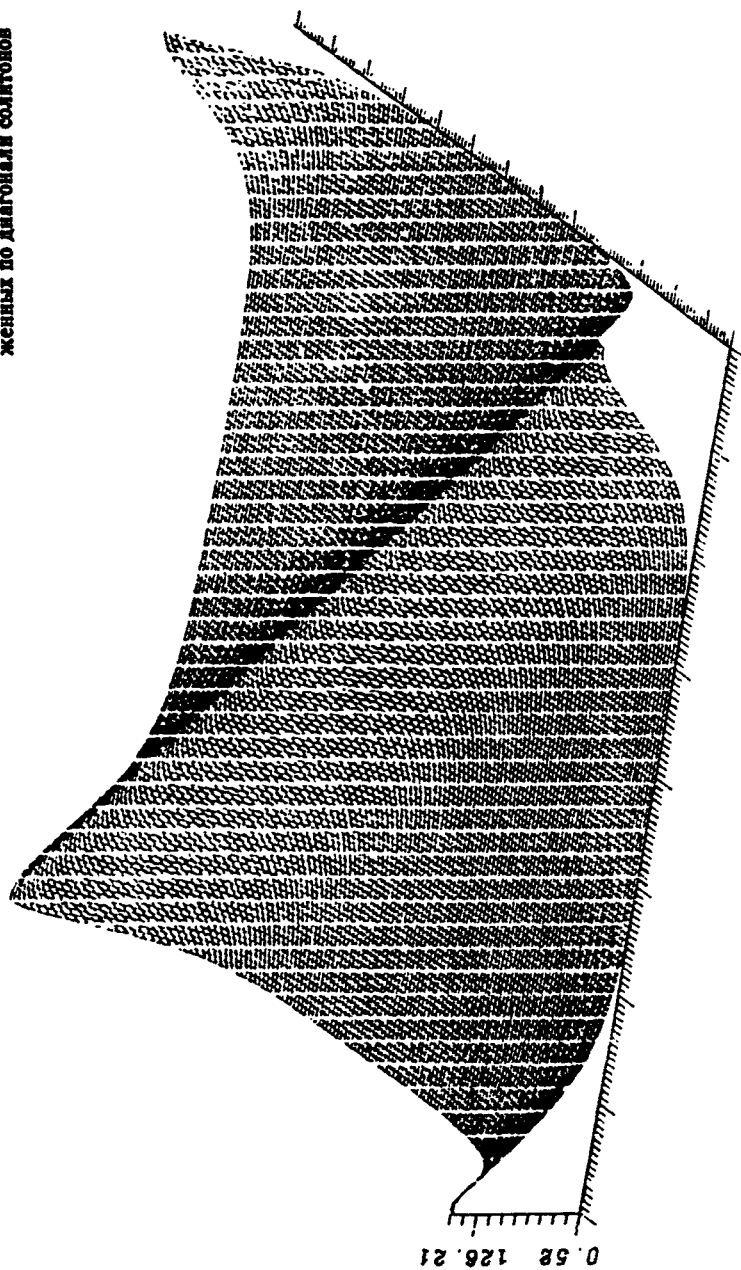
$$\left| \frac{-i}{2t} \int_0^t \tau N(\tau) d\tau \right| < \frac{\pi}{2}, \quad \left| \frac{-i}{2t} \int_0^t (t - \tau) N(\tau) d\tau \right| < \frac{\pi}{2},$$

исключающему возникновение "случайной фазы" в двух соседних узлах счёта в окрестности точки особенности.

Окончанием коллапса, или, собственно говоря, точкой коллапса следует считать ту точку t_c , в которой достигается пик $N(x_m, y_l, t)$ или $N'_t(x_m, y_l, t_c) = 0$. Однако несколько раньше по времени появляется точка пика $|N'_t(x_m, y_l, t)|$. Целесообразно именно этот момент считать началом заднего фронта коллапса, так как именно с него начинается быстрое разрушение каверны, причём процесс разрушения идёт с гораздо большей скоростью, чем процесс образования. Наиболее быстро меняющейся величиной здесь становится N'_t . Именно по скорости изменения этой величины приходится выбирать шаг по времени.

Для того чтобы увеличить энергию в начальных данных (увеличить значение I_1), одновременно увеличив наблюдаемую на периоде

Рис. 8. Квадрат модуля поля при $t = 0$ для системы расположенных по диагонали солитонов



длину гребня солитона и не увеличивая его амплитуду, расположим его по диагонали (рис. 8). Заодно проверим, образуются ли "звуковые дорожки" между двумя кавернами, расположенными на расстоянии меньше периода друг от друга.

Зададим следующие начальные данные:

$$E_{0,1}(x, y) = \frac{2}{a \cdot \operatorname{ch}((x-y)/2a)} + \frac{2}{a \cdot \operatorname{ch}((x-y-L)/2a)} + \\ + \frac{2}{a \cdot \operatorname{ch}((x-y+L)/2a)},$$

$$E_{0,2}(x, y) = 0.5 \left(\sin \frac{\pi(x+y)}{L} + \sin \frac{2\pi(x+y)}{L} + \sin \frac{3\pi(x+y)}{L} \right),$$

$$N_0(x, y) = |E_{0,1}(x, y)|^2 + |E_{0,2}(x, y)|^2, \quad (N_0)'_i(x, y) = 0,$$

$$a = 0.16, \quad L = 0.96, \quad \rho = 1, \quad \beta = 10.$$

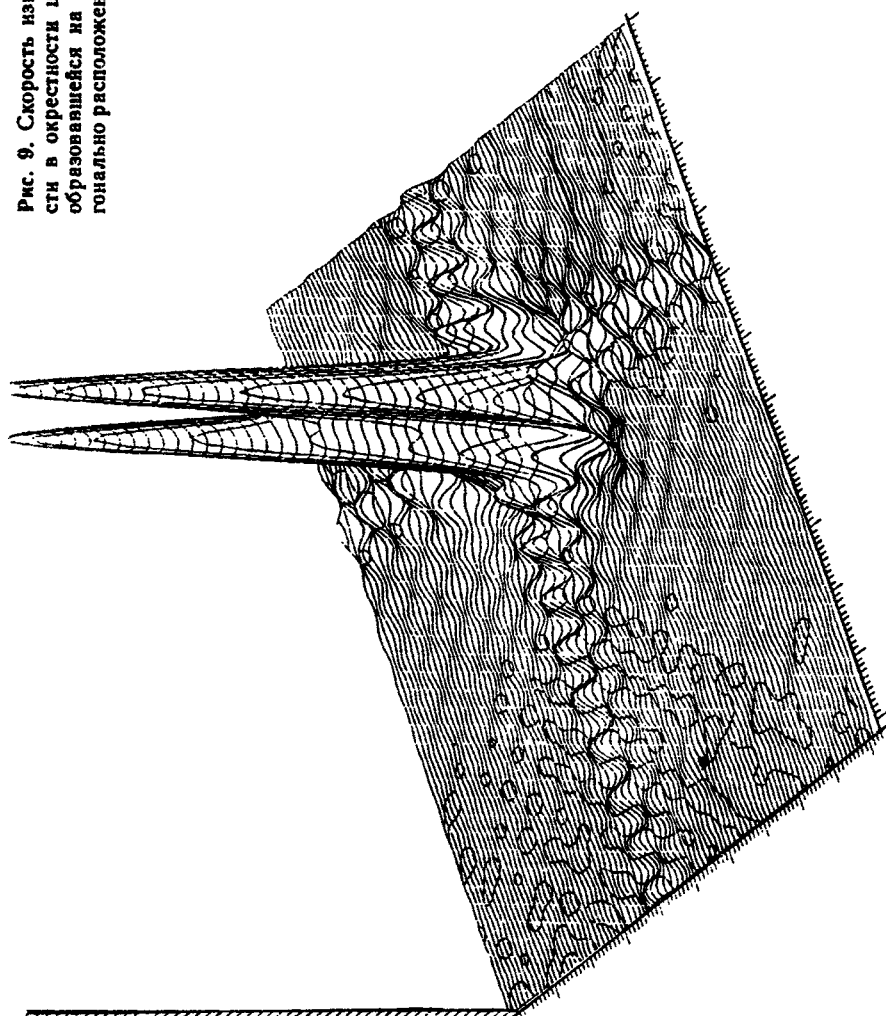
Расчёт этого варианта вёлся в гармониках Фурье на области $-64 \leq k, l \leq +64$, т. е. на 128×128 дискретных точках.

Допустим, что именно момент времени t_0 , когда $N'_i(x_0, y_0, t_0)$ достигает своего максимального значения в центре каверны, у нас является моментом задания начальных данных. Не обращая внимания на то, насколько правилен путь в эту точку, будем наблюдать процесс разрушения каверны с этого момента.

Для иллюстрации возможностей счёта в гармониках Фурье необходимо выбрать такую точку по времени на заднем фронте коллапса, в которой в центре каверны $N'_i(x_0, y_0, t) = 0$. На рис. 9 изображена функция $N'_i(x, y, t)$ в окрестности центра каверны. Добавив нулями недостающие значения коэффициентов Фурье функции $FN'_i(k, l, t)$ на области $-128 \leq k, l \leq 128$, сделаем обратное преобразование Фурье. Получившаяся на сетке 256×256 проинтерполированная функция $N'_i(x, y, t)$ ведёт себя достаточно гладко даже в окрестности максимумов функции. Хорошо видно, что в окрестности максимумов и на "звуковых дорожках" проходят несколько (больше двух) сеточных линий. Это говорит о том, что разрешающая способность использованного метода счёта здесь достаточно велика.

На рис. 10 изображён квадрат модуля поля при $t = 0.45$. Видна "замороженная" каверна в центре рисунка, развивающаяся каверна

Рис. 9. Скорость изменения плотности в окрестности центра каверны, образовавшейся на начальном диагонально расположенном солитоне



—BPAQ. 00 13315. 10 63366. 87 86416 50 15318.

Рис. 10. Квадрат модуля поля при $t = 0.45$

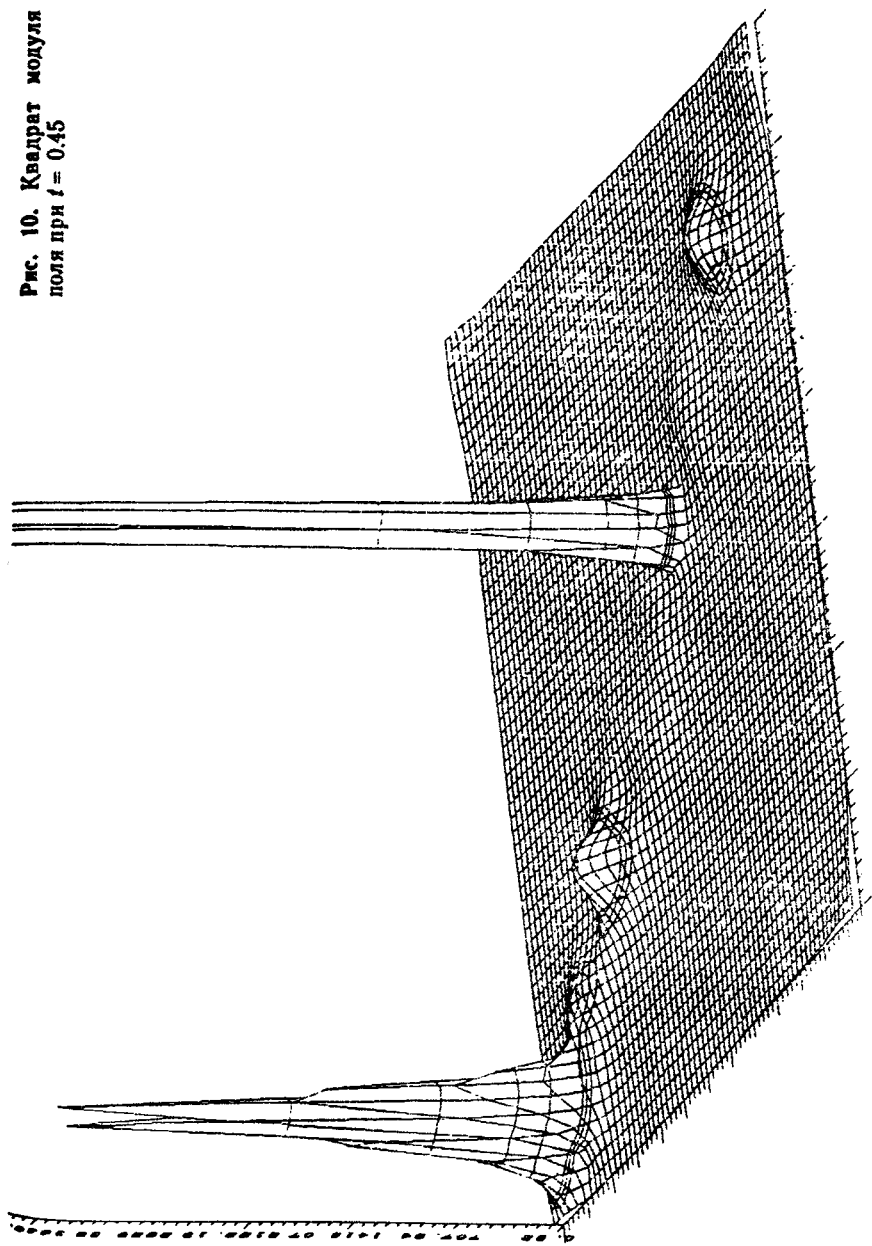
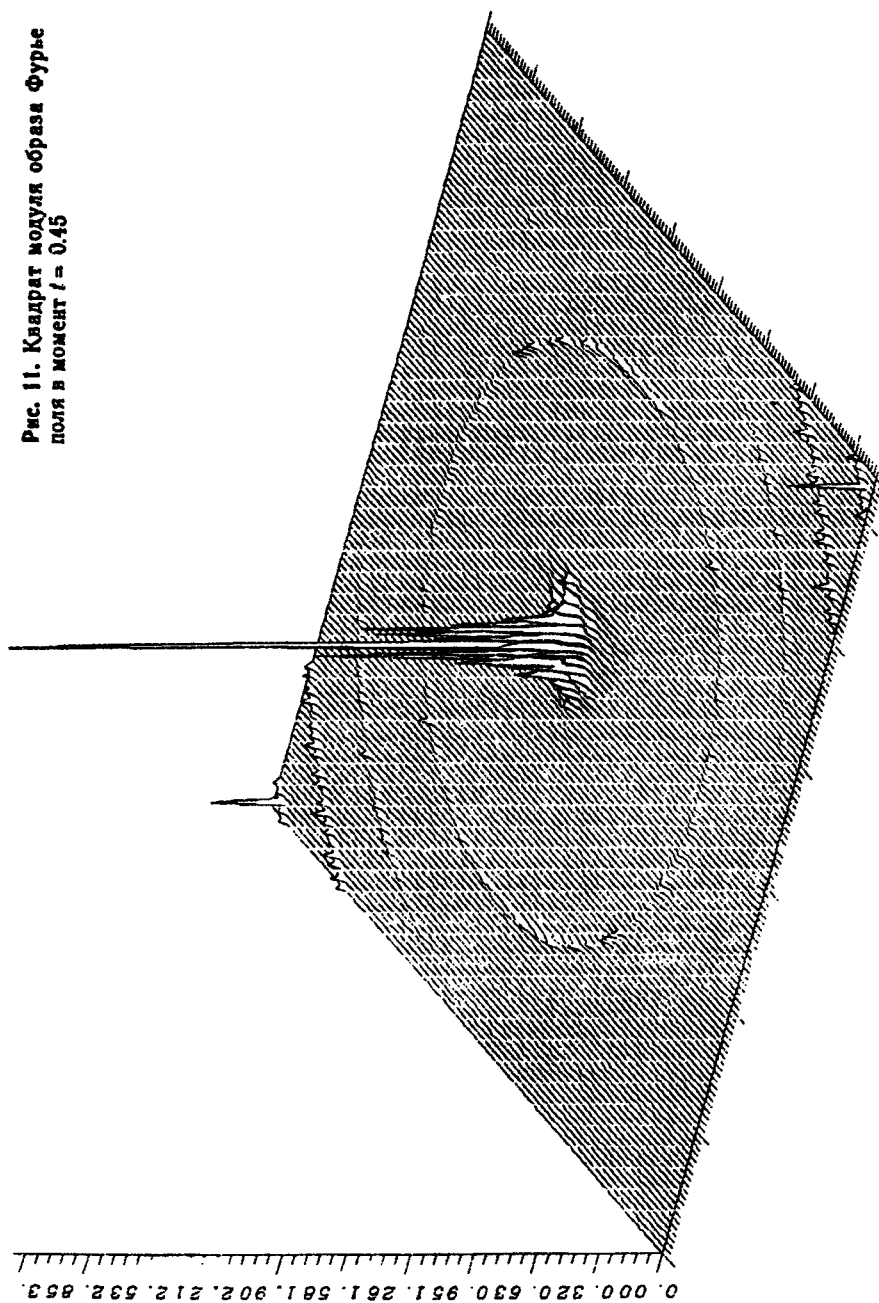


Рис. 11. Квадрат модуля образа Фурье поля в момент $t = 0,45$



и два небольших локальных возмущения поля, расположенных вдоль гребня начального солитона.

На рис. 11 изображен квадрат модуля образа Фурье поля на заднем фронте коллапса в момент $t = 0,45$. Видны образовавшиеся кольцевые структуры. Об изначальной плоской солитонной структуре напоминает лишь несколько вытянутый по диагонали центральный пик.

На рис. 12, *а* изображена амплитуда образа Фурье поля за точкой коллапса. Центральный пик сформирован потенциальной частью поля (рис. 12, *б*), а кольцевые структуры — вихревой частью (рис. 12, *в*).

Квадрат модуля потенциальной части поля, приведённый на рис. 13, *а*, — достаточно гладкая функция, модуль вихревой части, изображённый на рис. 13, *б* может считаться хаотической функцией. Так как амплитуды гармоник Фурье вихревой части остаются ограниченными и достаточно локализованными, то можно продолжать вести счёт в гармониках Фурье, что невозможно сделать другим методом для функции на рис. 13, *б*. Видно, что центральная каверна изначально практически потенциального поля очень быстро разрушилась, передав часть своей энергии вихревой компоненте поля. Во вновь образующейся каверне присутствует не только потенциальная, но и вихревая компоненты.

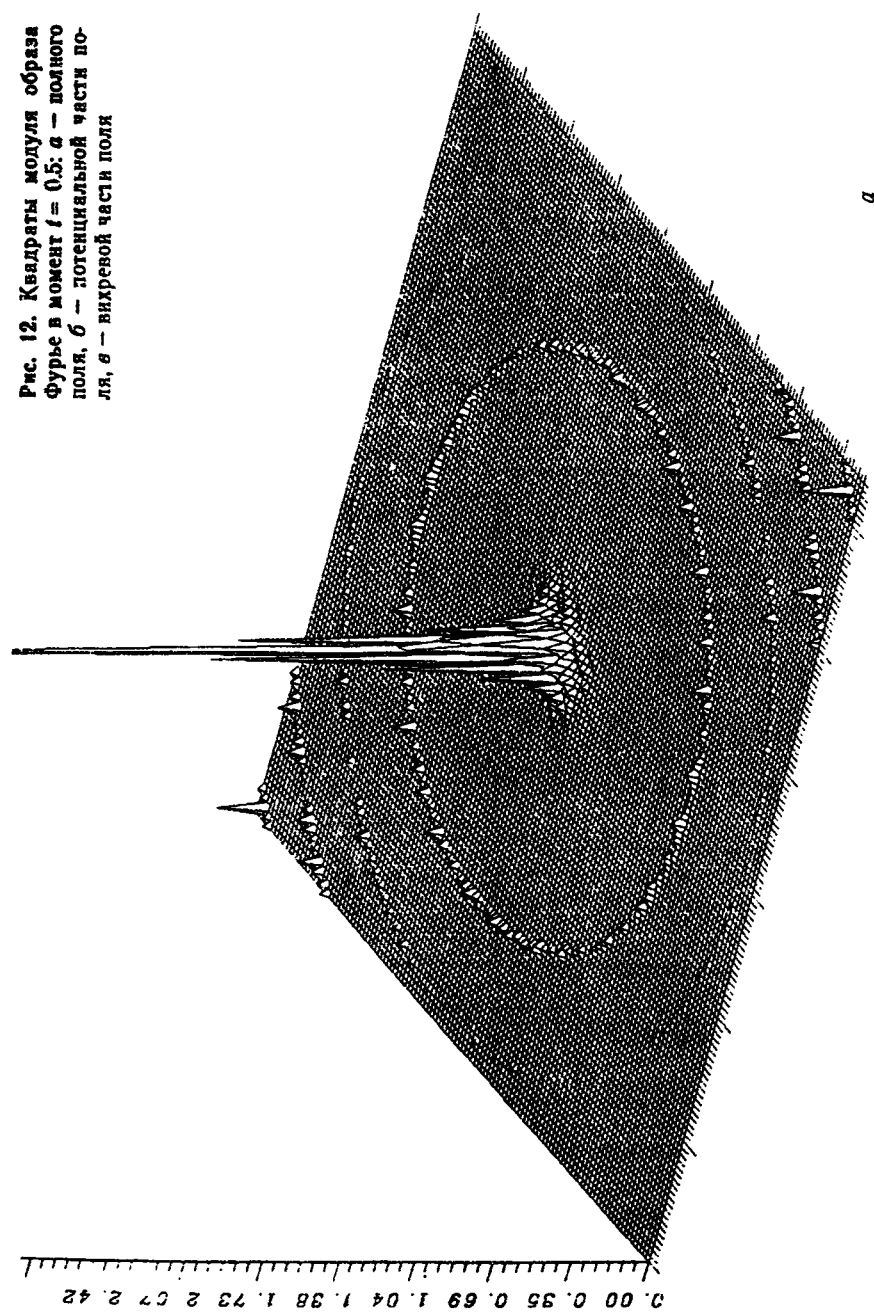
Расчёты велись как на области 128×128 гармоник, так и на 64×64 . Кольцевые структуры возникали в обоих случаях на одних и тех же местах, причём для области 64×64 гармоники в область счёта (рис. 14) попало не всё кольцо минимального радиуса, а лишь его часть, расположенная по углам рисунка. Важно отметить, что эти дуги помещаются на кольцо того же радиуса, что и на рис. 12, полученного на области 128×128 гармоник. Изменились лишь их амплитуды.

Продолжить расчёты до $t = 0,8$ нам удалось лишь введя в уравнения (7.44) и (7.45) небольшое затухание, соответственно пропорциональное $\epsilon \Delta N$ и $\epsilon \Delta W$ с $\epsilon = 0,005$.

Приведённое на рис. 15 изображение квадрата модуля образа Фурье поля при $t = 0,8$ сохранило кольцевую структуру, хотя далее на рис. 16 видно, что у самого поля образовались две новые каверны.

На рис. 17 изображена плотность плазмы, посчитанная при введённом в уравнения (7.44) и (7.45) модельном затухании. Видно, что от разрушающихся каверн у плотности плазмы бегут цилиндрические

Рис. 12. Квадраты модуля образа Фурье в момент $t = 0.5$: а — полного поля, б — потенциальной части поля, в — вихревой части поля



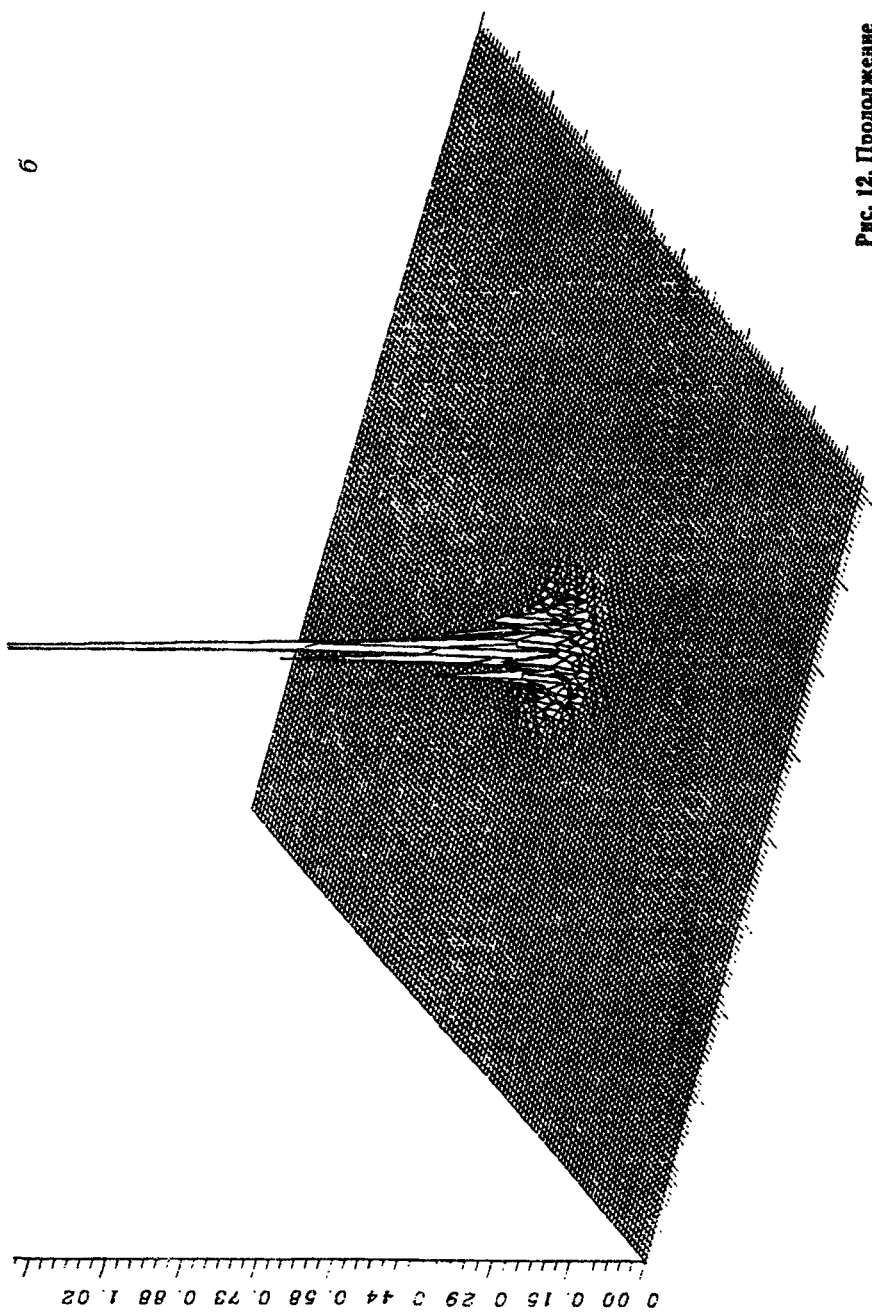


Рис. 12. Продолжение

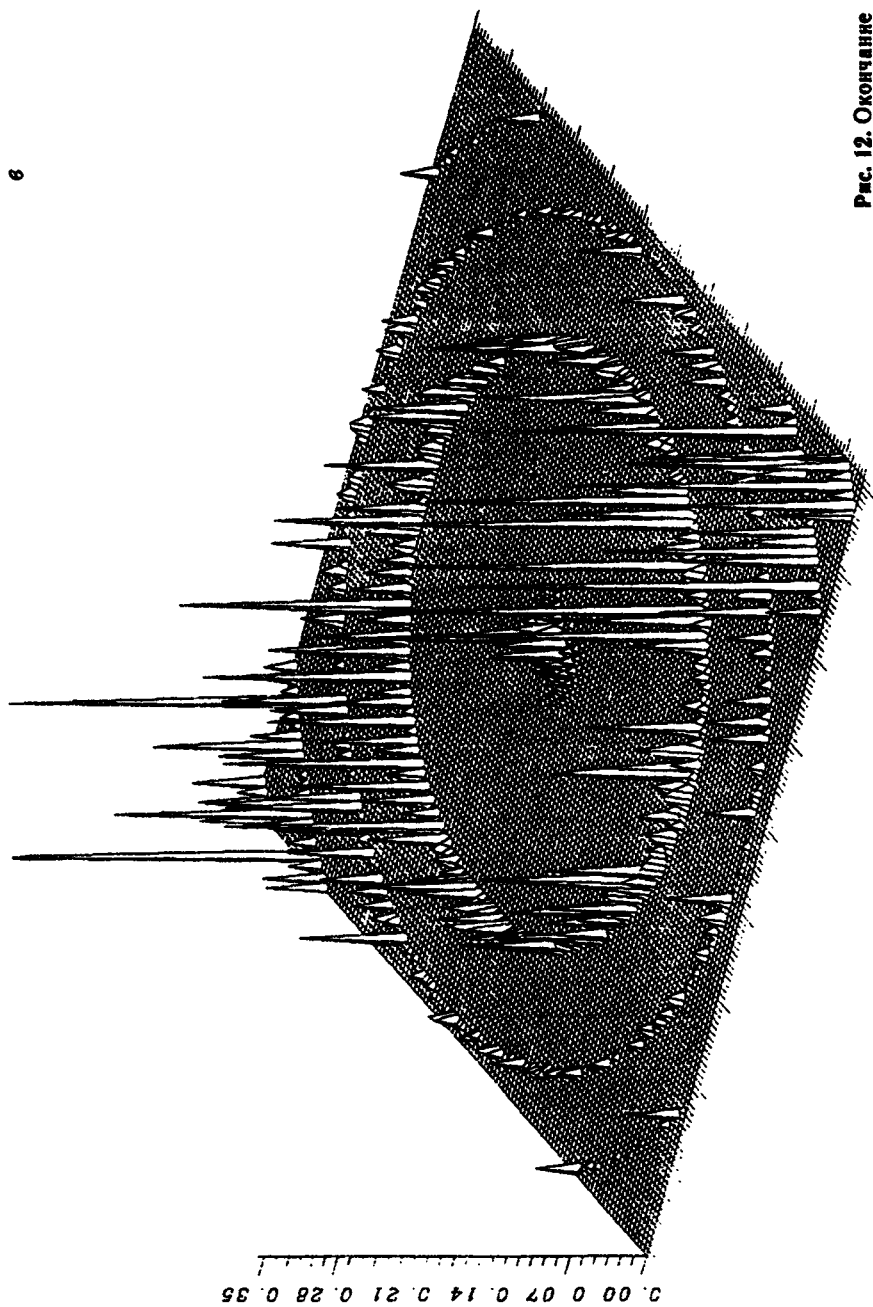
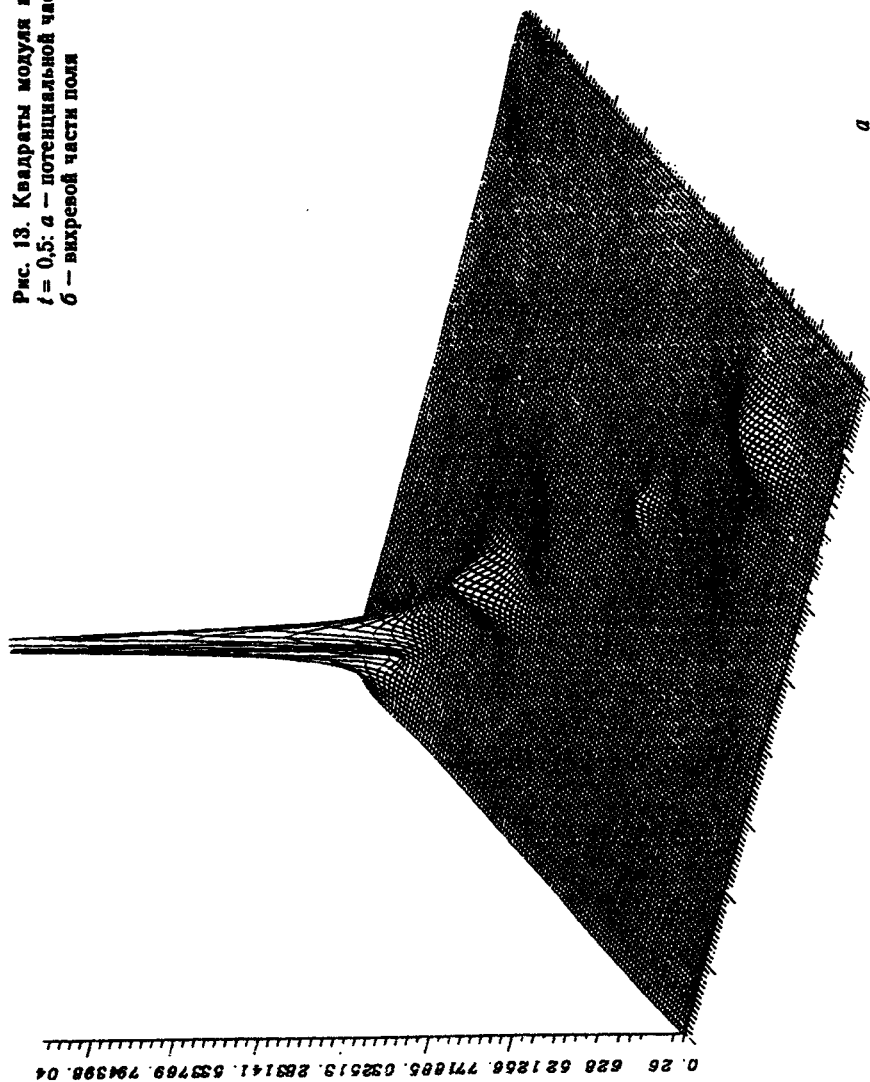


Рис. 12. Окончание

Рис. 13. Квадраты модуля в момент $t = 0,5$: а — потенциальной части поля, б — вихревой части поля



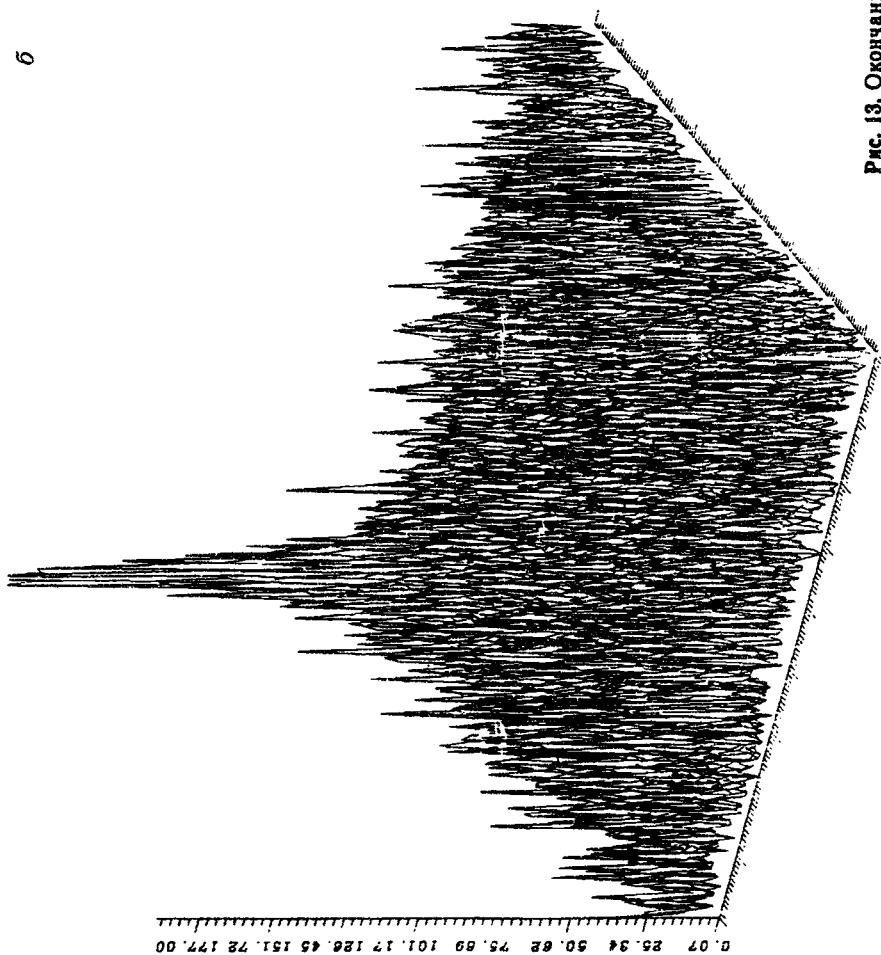


Рис. 13. Окончание

Рис. 14. Квадрат модуля образа Фурье
 поля для начального диагонально распо-
 ложенного солитона при $t = 0.55$, посчи-
 танный по области $-32 \leq k, l \leq 32$

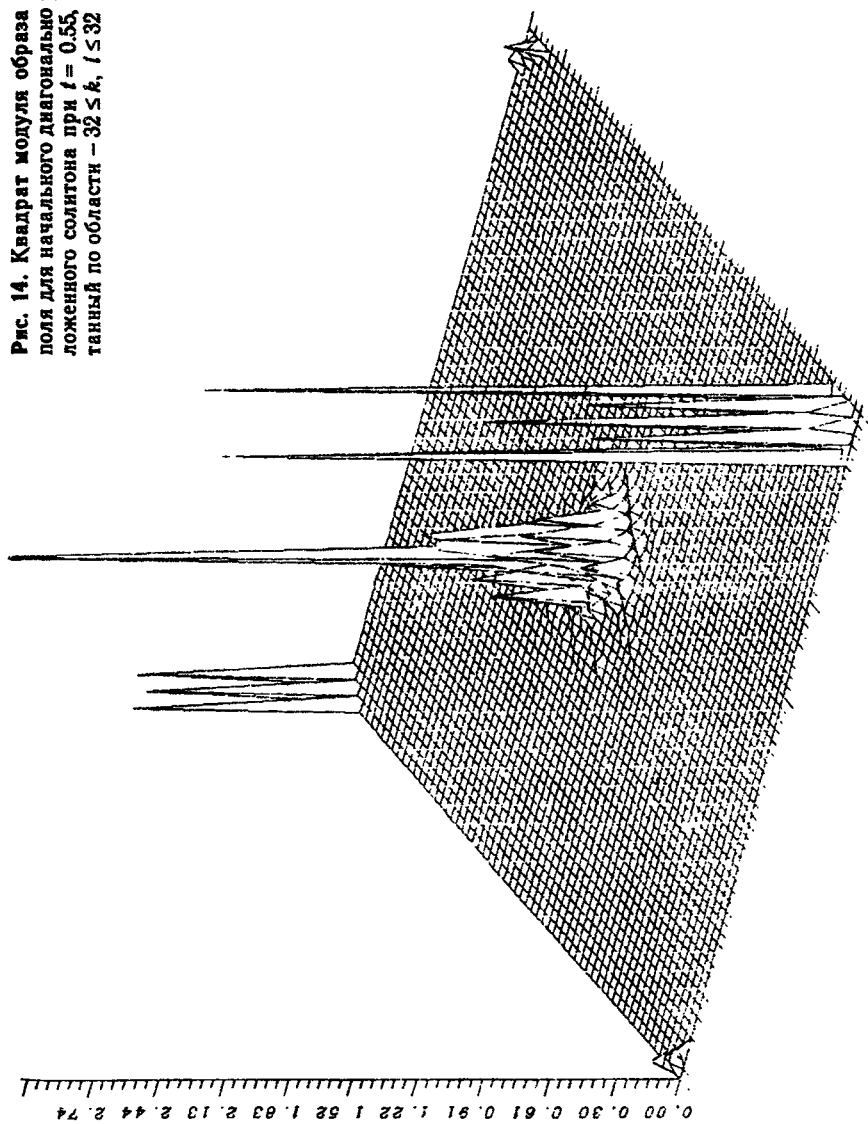


Рис. 15. Квадрат модуля образа Фурье поля при $t = 0,8$, посчитанного при введённом затухании

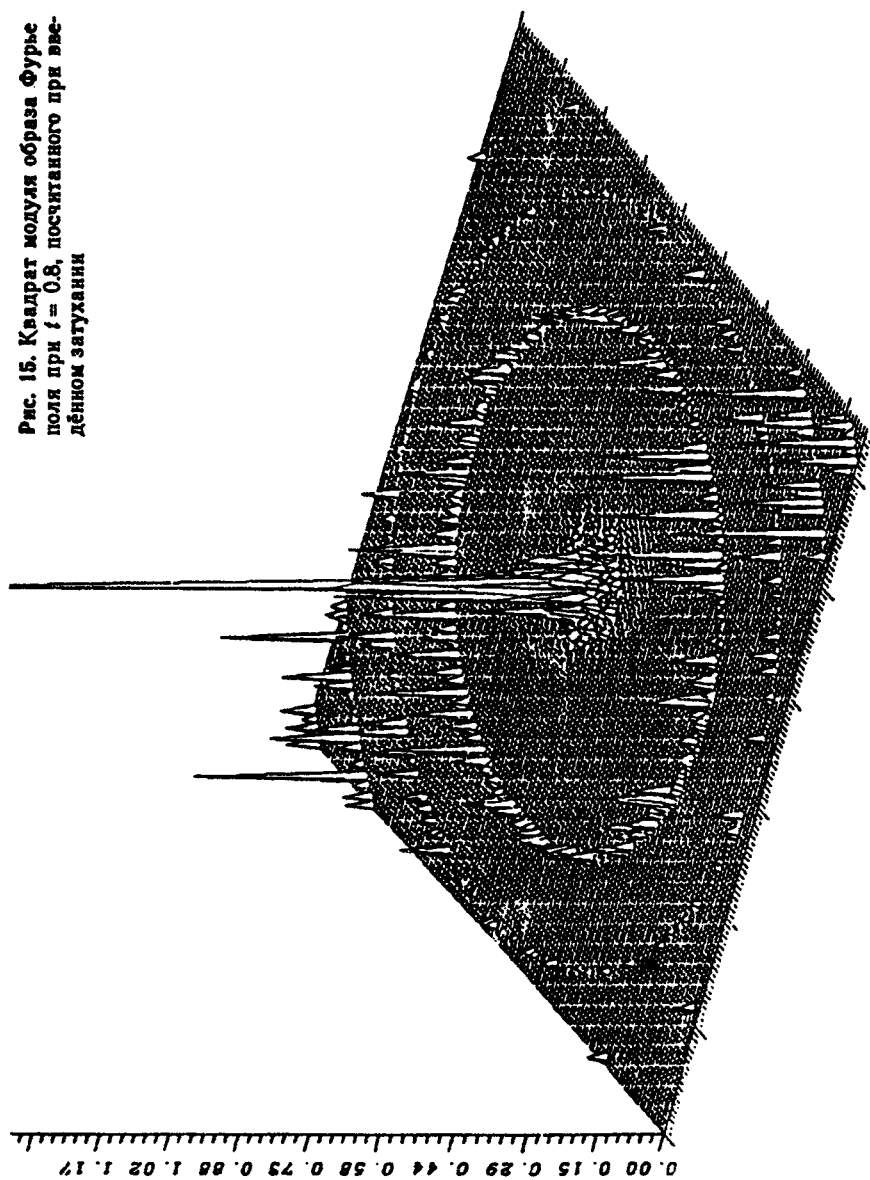


Рис. 16. Квадрат модуля поля при $t = 0,8$, посчитанного при введённом затухании

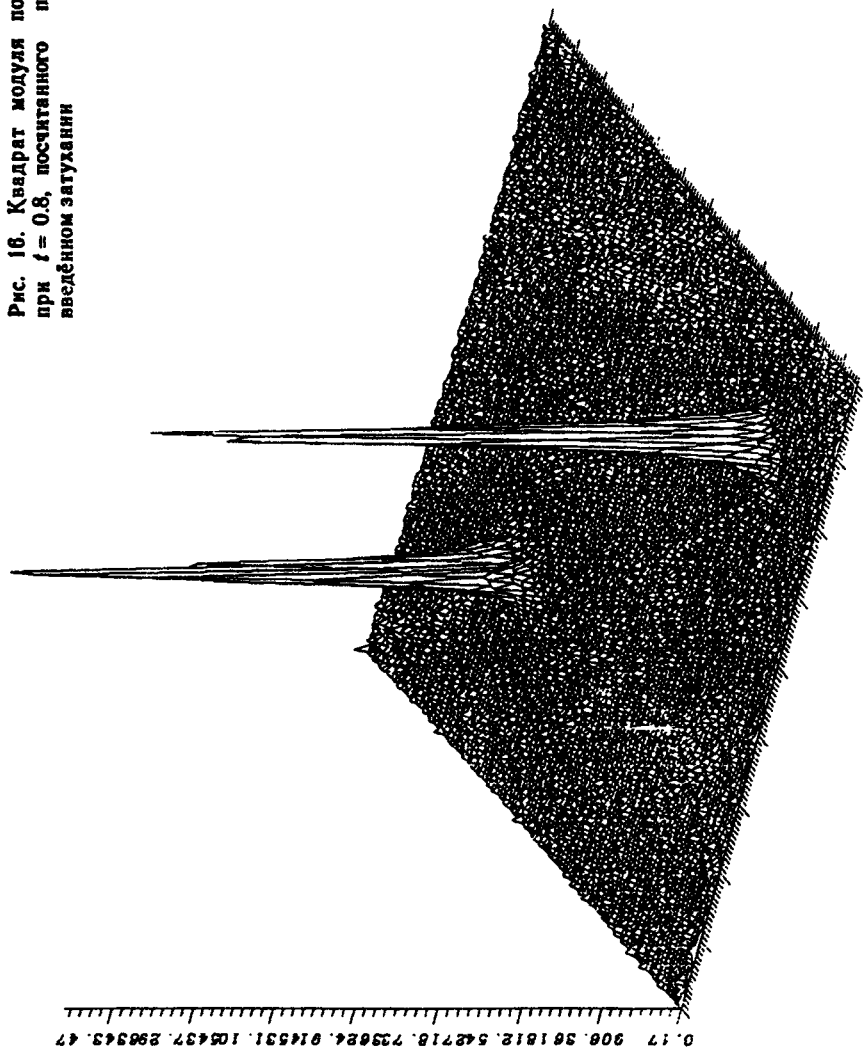
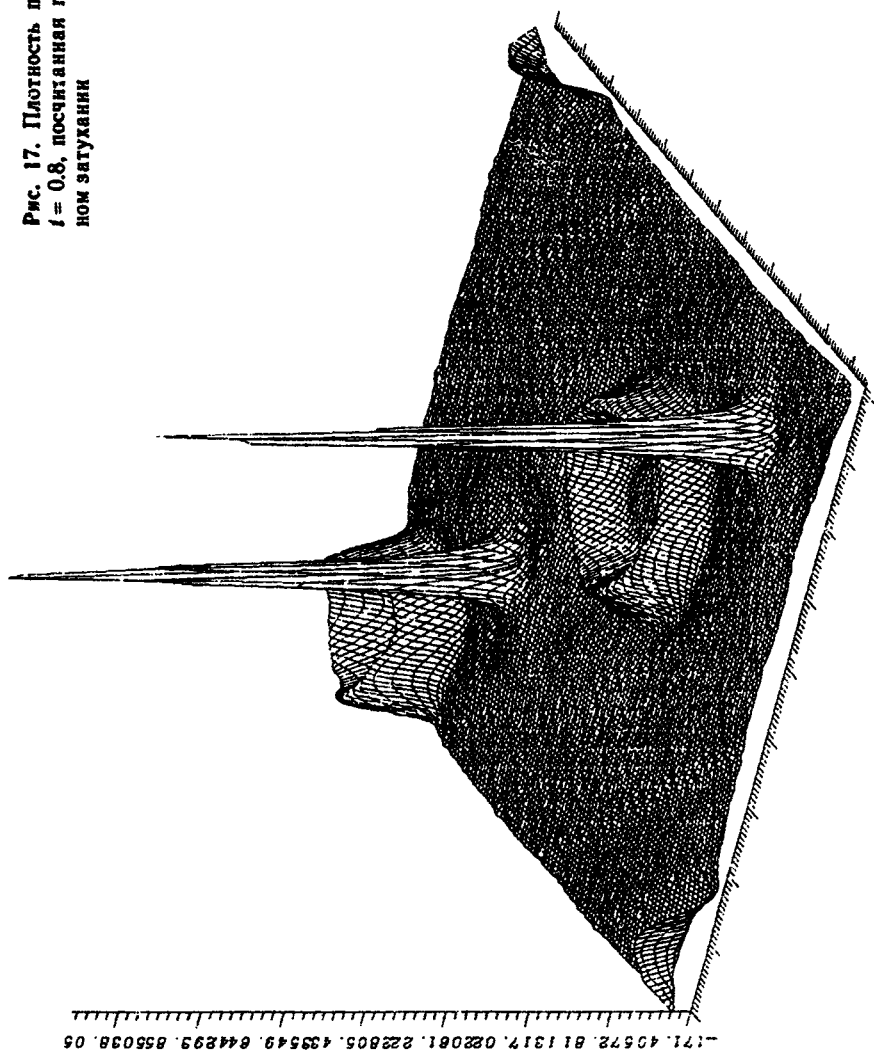


Рис. 17. Плотность плазмы при $f = 0,8$, посчитанная при введении затухания



волны. Передний фронт их очерчен достаточно чётко. Получение подобного распространения цилиндрических волн сеточными методами потребовало бы существенно большего количества расчётных точек. Это связано с тем, что волны в сеточной среде ведут себя более сложным образом, чем в сплошной. Возникает дисперсия скорости "сеточных" волн, их специфическая групповая скорость, обусловленная дискретными свойствами сетки. Подробное исследование см. в [50].

Все приведённые в этом разделе рисунки получены на основании работ [51, 52]. Целью данных иллюстраций является демонстрация достоинств и недостатков метода, а не обсуждение физических результатов.

Глава 8

ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ АНАЛОГИЯ

Нестационарное уравнение Шредингера, если его рассматривать как систему уравнений в частных производных относительно действительной и мнимой частей неизвестной функции, формально не является ни системой уравнений параболического типа, ни гиперболической системой. Рассмотрим здесь ещё один подход к уравнению (1.1) с граничными условиями (1.2) и начальными условиями (1.3), развитый в [53] и позволяющий более четко проследить "гидродинамическую аналогию" уравнения Шредингера и интерпретировать явление коллапса. Для этого неизвестную функцию $E(r, t)$ представим в амплитудно-фазовом виде

$$E = A e^{i\varphi}. \quad (8.1)$$

После подстановки (8.1) в (1.1), сокращения получившегося уравнения на $e^{i\varphi}$ и разделения действительной и мнимой частей будем иметь систему уравнений относительно A и φ :

$$\begin{aligned} 2 \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + A \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \varphi}{\partial r} &= 0, \\ 2 \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial A}{\partial r} + A \left(\frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)^2 - A^3 &= 0. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Поделим второе уравнение этой системы на $2A$ и продифференцируем его по r . Введем новые неизвестные функции

$$\rho = A^2, \quad v = \frac{\partial \varphi}{\partial r}. \quad (8.3)$$

Для них наша система приобретет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{\rho}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv) = 0,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\partial B}{\partial r} = 0, \quad (8.4)$$

где

$$B = \frac{1}{4r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial r} \right) + \frac{1}{8} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial r} \right)^2 + \frac{\rho}{2}.$$

Перейдем теперь к так называемым массовым переменным. Вместо переменных (r, t) введем массовую переменную m и лагранжево время t_A :

$$m = \int_0^{r(t)} \rho r \, dr, \quad \frac{\partial}{\partial t_A} = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial r}, \quad (8.5)$$

т. е. перейдем от системы (8.4) к системе характеристик и функций на характеристиках:

$$\frac{\partial r}{\partial t_A} = v,$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t_A} + \rho^2 \frac{\partial}{\partial m} (\rho v) = 0,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t_A} + r \frac{\partial P}{\partial m} + \frac{r}{4} \left(\frac{\partial \rho}{\partial m} \right)^2 = 0. \quad (8.6)$$

Здесь

$$P = -\frac{1}{4} \rho^2 \left[\frac{\partial}{\partial m} \left(r^2 \frac{\partial \rho}{\partial m} \right) + 1 \right]$$

имеет смысл давления в обычной гидродинамике. Новая переменная m меняется в конечных пределах

$$0 \leq m \leq M = \int_0^{\bar{r}} \rho r \, dr.$$

Граничные условия (1.2) при $r \rightarrow 0$ переходят в

$$\frac{\partial A}{\partial r} = 0, \quad A \frac{\partial \Phi}{\partial r} = 0.$$

В новых неизвестных (8.3) и новых переменных (8.5) эти условия принимают следующий вид:

$$v = 0 \text{ и } r \frac{\partial \rho}{\partial t} \rightarrow 0 \text{ при } t \rightarrow 0. \quad (8.7)$$

Отметим, что это условие практически означает, что производная $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ остается ограниченной вплоть до точки возникновения особенности решения (см. гл. 1). При этом функция $A(r, t)$ может быть продолжена четно относительно точки $r = 0$ с сохранением достаточной гладкости. Это позволяет определить третью производную от функции ρ , входящую в (8.6), в точке $t = 0$. Действительно,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 A}{\partial r^3} &= \frac{1}{4} \rho^{5/2} r \frac{\partial}{\partial t} r \frac{\partial}{\partial t} r \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{7}{8} \rho^{3/2} r \frac{\partial \rho}{\partial t} \cdot r \frac{\partial}{\partial t} r \frac{\partial \rho}{\partial t} + \\ &+ \frac{1}{4} \rho^{1/2} \left(r \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^3 \end{aligned}$$

и тогда из граничного условия (8.7) следует обращение в нуль $r \frac{\partial}{\partial t} r \frac{\partial}{\partial t} r \frac{\partial \rho}{\partial t}$ при $t \rightarrow 0$ одновременно с $\frac{\partial^3 A}{\partial r^3}$.

Из (8.5) следует автоматическое сохранение инварианта (1.4). Второй инвариант (1.5) в новых переменных преобразуется к виду

$$\begin{aligned} H &= \int_0^M \left(\left| \frac{\partial A}{\partial r} \right|^2 + A^2 \left| \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|^2 - \frac{1}{2} A^4 \right) r dr = \\ &= \int_0^M \left(\frac{r^2}{4} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^2 + v^2 - \frac{\rho}{2} \right) dt. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Разница типов поведения коллапсов (см. гл. 1) лучше всего демонстрируется на их лучевой структуре (см. [12]), т. е. на поведении системы характеристик из (8.4). У так называемого сильного коллапса, лучевая структура которого представлена на рис. 18, *a*, коллапсирующая особенность носит мгновенный (безаберрационный) характер и представляется на временной оси отдельной точкой, в которую приходит целое семейство лучей (характеристик). При этом естественно ожидать, что сосредоточенная в окрестности этой точки энергия (наша массовая переменная) $m = \int_{|r| < \varepsilon} |E|^2 r dr$ конеч-

на и определяется суммированием величины $|E|^2$ по попадающим в точку особенности характеристикам.

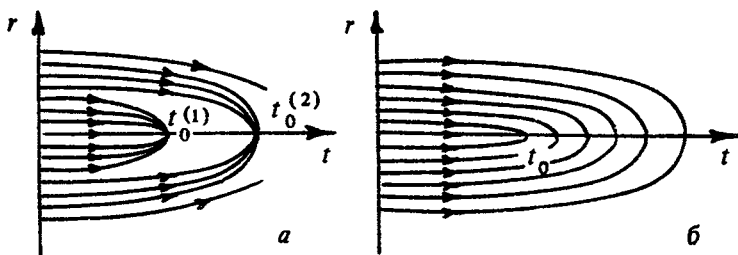


Рис. 18. Пространственно-временная фокусировка в критической (а) и закритической (б) областях

Коллапс, при котором число захваченных частиц (т. е. характеристик системы (8.6), идущих в точку особенности) стремится к нулю при $t \rightarrow t_0$, был назван слабым, в отличие от критического случая [54], представленного на рис. 18, а. В общем случае при самопересечении семейства характеристик системы дифференциальных уравнений образуется огибающая этого семейства [55], которая также является решением системы. Её частный случай — особая точка — и есть сильный коллапс. Слабому коллапсу, найденному в сферически симметричном случае (более подробно см. [12, 14]), с формально нулевой поглощаемой в особенности энергией, соответствует общий случай появления огибающей, которая, образовавшись при $0 < t < t_0$, заканчивается на оси в особой точке слабого коллапса. За начальной точкой особенности лучи при $r \neq 0$ остаются ориентированными к центру каверны и после возникновения в ней особенности поля. Это показано на рис. 18, б картиной пространственно-временных лучей и значит, что поток энергии в особенность сохраняется и за точкой начального фокуса $t = t_0$. Образующаяся "фокальная нить" не является огибающей семейства характеристик, а есть особое решение системы (8.6), причём особым это решение становится только после точки t_0 . Чтобы иметь возможность численными методами корректно просчитать область появления огибающей и пройти за точку начального коллапса, в уравнение вводится поглощение. Одна из сферически симметричных моделей, когда в окрестности $r = 0$ сосредоточено так называемое сильнолокализованное многофотонное поглощение, описывается уравнением

$$2i \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial^2 E}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial E}{\partial r} + |E|^2 E + i\alpha |E|^n E = 0 \quad (8.9)$$

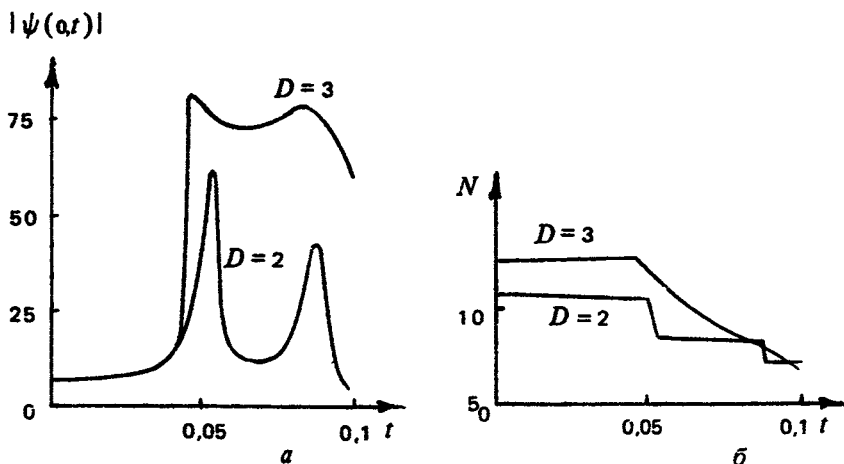


Рис. 19. Зависимость амплитуды поля в центре каверы от времени (а) и зависимость полной энергии каверы от времени (б). D – размерность пространства

при достаточно малом α . На рис. 19 показаны изменения амплитуды поля в точке $r = 0$ в зависимости от времени t при $n = 8$, $\alpha = 3.9 \cdot 10^{-11}$ и начальном условии $E = 7e^{-1.125r^2}$. Для сравнения там же приведена аналогичная зависимость для двумерного коллапса при том же начальном условии. Видно, что трёхмерный коллапс имеет распределённый характер, а двумерный – типичный многофокусный характер. Дальнейшие продвижения в анализе устойчивости сильного и слабого волновых коллапсов см. в [14].

Глава 9

РАЗНОСТНОЕ УРАВНЕНИЕ ВТОРОГО ПОРЯДКА

На практике чаще всего приходится иметь дело с разностными уравнениями второго порядка. В случае, когда коэффициенты разностного уравнения постоянные, решение может быть найдено в общем виде. Разностное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами легко приводится к виду

$$y_{n+1} - cy_n + ay_{n-1} = f_n. \quad (9.1)$$

Будем искать частные решения однородного уравнения из (9.1) в виде $y_k = z^k$, где z — неизвестное пока число. После подстановки этого выражения в (9.1) с $f_n = 0$ получим для z квадратное уравнение

$$z^2 - cz + a = 0. \quad (9.2)$$

Оно имеет два корня:

$$z_{1,2} = \frac{c \pm \sqrt{c^2 - 4a}}{2}.$$

В зависимости от величины дискриминанта $D = c^2 - 4a$ возможны три случая:

1) $D = c^2 - 4a > 0$. Квадратное уравнение имеет различные и действительные корни, которым соответствуют различные частные решения

$$y_k^{(1)} = z_1^k, \quad y_k^{(2)} = z_2^k.$$

Общее решение однородного уравнения имеет вид

$$y_k = C_1 z_1^k + C_2 z_2^k.$$

2) $D = c^2 - 4a = 0$. В этом случае корни совпадают, а в качестве линейно независимых решений можно взять

$$y_k^{(1)} = z^k, \quad y_k^{(2)} = kz^k.$$

В этом случае общее решение имеет вид

$$y_k = (C_1 + kC_2) z^k.$$

3) $D = c^2 - 4a < 0$. Квадратное уравнение имеет комплексно сопряженные корни, которые могут быть записаны в виде

$$z_1 = \rho(\cos\varphi + i \sin\varphi), \quad z_2 = \rho(\cos\varphi - i \sin\varphi),$$

где $\rho = \sqrt{a}$, $\varphi = \arctg(\sqrt{|D|}/c)$. Общее решение имеет вид

$$y_k = (C_1 \cos(k\varphi) + C_2 \sin(k\varphi)) \rho^k.$$

Найдем общее решение разностного уравнения (9.1) в случае двух различных корней. Для этого последовательно выразим y_{n+1} через y_{n-1} , y_{n-2} , подставив вместо y_n его выражение из соотношения (9.1) с номером на единицу меньшим и учитывая, что $c = z_1 + z_2$, $a = z_1 z_2$:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= (z_1^2 + z_1 z_2 + z_2^2) y_{n-1} - \\ &- a(z_1 + z_2) y_{n-2} + f_n + (z_1 + z_2) f_{n-1} = \\ &= \frac{z_1^3 - z_2^3}{z_1 - z_2} y_{n-1} - a \frac{z_1^2 - z_2^2}{z_1 - z_2} y_{n-2} + f_n + \frac{z_1^2 - z_2^2}{z_1 - z_2} f_{n-1}. \end{aligned}$$

Продолжая этот процесс, находим общее решение

$$y_n = \sum_{k=2}^n \frac{z_1^{k-1} - z_2^{k-1}}{z_1 - z_2} f_{n-k+1} + \frac{z_1^n - z_2^n}{z_1 - z_2} y_1 - a \frac{z_1^{n-1} - z_2^{n-1}}{z_1 - z_2} y_0. \quad (9.3)$$

Роль произвольных констант в этом общем решении выполняют значения функции y_0 и y_1 .

Аналогичным образом для случая $z_1 = z_2 = z$ найдем

$$y_n = \sum_{k=2}^n (k-1) z^{k-2} f_{n-k+1} + n z^{n-1} y_1 - a(n-1) z^{n-2} y_0. \quad (9.4)$$

Для решения краевой задачи не требуется каких-либо новых приемов, достаточно использовать общее решение задачи (9.3) или (9.4), подставляя его в заданные граничные условия.

Рассмотрим теперь задачу на собственные значения:

$$y_{n+1} - c y_n + a y_{n-1} = \lambda y_n. \quad (9.5)$$

Пусть граничные условия имеют вид

$$y_0 = 0, \quad y_{N-1} - b y_N = 0. \quad (9.6)$$

Допустим, что корни уравнения

$$z^2 - (c + \lambda)z + a = 0$$

различны, т. е. мы ищем не кратное собственное значение. Воспользовавшись представлением решения в виде (9.3) при $f_k = 0$ и граничными условиями (9.6), получаем

$$y_{N-1} = \frac{z_1^{N-1} - z_2^{N-1}}{z_1 - z_2} y_1 = b \frac{z_1^N - z_2^N}{z_1 - z_2} y_1 = b y_N.$$

Так как по предположению $z_1 \neq z_2$, то можно домножить на знаменатель, учитывая в дальнейшем, что в полученном уравнении имеется лишний корень. Обозначим

$$x = z_1 / a^{1/2}, \quad \delta = 1 / b a^{1/2}.$$

Тогда $z_2 = a / z_1 = a^{1/2} / x$ и получим уравнение относительно x :

$$x^{2N} - \delta x^{2N-1} + \delta x - 1 = 0. \quad (9.7)$$

Напоминаем, что здесь есть лишний множитель $x^2 - 1$. Поведение корней уравнения типа (9.7) при возмущении параметра δ было исследовано Уилкинсоном [56]. Им было показано, что малые возмущения параметра δ приводят к большим изменениям корней этого полинома.

Ситуация упрощается для случая $b \rightarrow \infty$, т. е. для граничных условий задачи Дирихле:

$$y_0 = 0, \quad y_N = 0. \quad (9.8)$$

Здесь $x_k = e^{i\pi k/N}$ и для λ_k получаем

$$\lambda_k = -c + 2a^{1/2} \cos(\pi k / N). \quad (9.9)$$

Глава 10

МЕТОД БУНЕМАНА

Метод Бунемана [22] предназначен для быстрого прямого решения разностного аналога уравнения Пуассона с граничными условиями Дирихле. Этот прямой метод позволяет найти решение разностной задачи в прямоугольнике за $O(N^2 \log_2 N)$ арифметических действий, где N — число узлов сетки по каждому направлению. Его алгоритм является для данного аналитического решения тем, чем является быстрое преобразование Фурье для математического преобразования.

Пусть $u(x, y)$ — решение уравнения

$$\Delta u(x, y) = f(x, y)$$

в области

$$0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b$$

с граничными условиями

$$u(0, y) = u(a, y) = u(x, 0) = u(x, b) = 0.$$

Рассмотрим разностный аналог нашего уравнения

$$\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta y^2} = f_{i,j},$$

$$0 \leq i \leq I, 0 \leq j \leq J.$$

Эта система разностных уравнений при нулевых граничных условиях становится блочно-трехдиагональной. Домножив каждое уравнение системы на Δx^2 и обозначив

$$\alpha = \Delta x^2 / \Delta y^2, \beta = -2(1 + \alpha), g_{i,j} = f_{i,j} \cdot \Delta x^2,$$

получим систему

$$\begin{pmatrix}
 \beta & \alpha & 0 & \cdot & 1 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\
 \alpha & \beta & \alpha & \cdot & 0 & 1 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\
 0 & \alpha & \beta & \cdot & 0 & 0 & 1 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 1 & 0 & 0 & \cdot & \beta & \alpha & 0 & \cdot & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & \cdot & \alpha & \beta & \alpha & \cdot & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & \cdot & 0 & \alpha & \beta & \cdot & 0 & 0 & 1 \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 0 & 0 & 0 & \cdot & 1 & 0 & 0 & \cdot & \beta & \alpha & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 1 & 0 & \cdot & \alpha & \beta & \alpha \\
 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 1 & \cdot & 0 & \alpha & \beta
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 u_{11} \\
 u_{21} \\
 u_{31} \\
 \cdot \\
 u_{12} \\
 u_{22} \\
 u_{32} \\
 \cdot \\
 u_{13} \\
 u_{23} \\
 u_{33}
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 g_{11} \\
 g_{21} \\
 g_{31} \\
 \cdot \\
 g_{12} \\
 g_{22} \\
 g_{32} \\
 \cdot \\
 g_{13} \\
 g_{23} \\
 g_{33}
 \end{pmatrix}
 .$$

здесь взято $l = 3, J = 3$.

Блочнотрёхдиагональная матрица устроена достаточно просто. Все ненулевые внедиагональные блоки являются единичными матрицами. Нужно, чтобы число блоков по переменной i было равно $l = 2^i - 1$, где l — целое число. Хотя исходная задача теперь полностью дискретна, она всё ещё не представлена в том виде, в котором может быть легко решена. Прежде всего запишем эту задачу в векторно-матричной форме. При проведении последующих выкладок для простоты положим $l = 3$. Для $l = 2^3 - 1 = 7$ разностное уравнение может быть записано в виде

$$\begin{pmatrix}
 A - I & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 -I & A - I & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & -I & A - I & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & -I & A - I & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & -I & A - I & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -I & A - I & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -I & A
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 v_1 \\
 v_2 \\
 v_3 \\
 v_4 \\
 v_5 \\
 v_6 \\
 v_7
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 h_1 \\
 h_2 \\
 h_3 \\
 h_4 \\
 h_5 \\
 h_6 \\
 h_7
 \end{pmatrix}, \quad (10.1)$$

где A — трёхдиагональная матрица порядка J . Здесь I — единичная матрица того же порядка, v_i представляет собой решение вдоль i -й сеточной строки, h_i есть правые части соответствующей i -й сеточной строки.

Редуцируем получившуюся блочную систему. Для этого домножим её четные строки на матрицу A . Получим

$$\begin{pmatrix} A - I & . & . & . & . & . & . \\ -A & A^2 - A & . & . & . & . & . \\ . & -I & A - I & . & . & . & . \\ . & . & -A & A^2 - A & . & . & . \\ . & . & . & -I & A - I & . & . \\ . & . & . & . & -A & A^2 - A & . \\ . & . & . & . & . & -I & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1 \\ Ah_2 \\ h_3 \\ Ah_4 \\ h_5 \\ Ah_6 \\ h_7 \end{pmatrix}.$$

После прибавления к четным строкам двух прилежащих строк получаем систему

$$\begin{pmatrix} A - I & . & . & . & . & . & . \\ 0 & A_2 & 0 & -I & . & . & . \\ . & -I & A - I & . & . & . & . \\ . & -I & 0 & A_2 & 0 & -I & . \\ . & . & . & -I & A - I & . & . \\ . & . & . & -I & 0 & A_2 & 0 \\ . & . & . & . & . & -I & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1^{(2)} \\ h_2^{(2)} \\ h_3^{(2)} \\ h_4^{(2)} \\ h_5^{(2)} \\ h_6^{(2)} \\ h_7^{(2)} \end{pmatrix},$$

где

$$A_2 = A^2 - 2I, \quad (10.2)$$

$$h_i^{(2)} = Ah_i + h_{i-1} + h_{i+1}, \quad i = 2, 4, 6. \quad (10.3)$$

Так как четные строки получившейся системы независимы от нечетных, то можно выделить подсистему

$$\begin{pmatrix} A_2 - I & . \\ -I & A_2 - I \\ . & -I & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_2 \\ v_4 \\ v_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_2^{(2)} \\ h_4^{(2)} \\ h_6^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (10.4)$$

Нечетные строки при этом запишутся в виде

$$\begin{aligned} Av_1 &= h_1 + v_2, \\ Av_3 &= h_3 + v_2 + v_4, \\ Av_5 &= h_5 + v_4 + v_6, \\ Av_7 &= h_7 + v_6. \end{aligned} \quad (10.5)$$

Получившуюся для четных строк систему редуцируем дальше, умножая её вторую строку на матрицу A_2 и прибавляя первую и третью строки. Получим

$$\begin{pmatrix} A_2 - I & . & . \\ 0 & A_2 & 0 \\ . & -I & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_2 \\ v_4 \\ v_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_2^{(2)} \\ h_4^{(3)} \\ h_6^{(2)} \end{pmatrix},$$

где

$$A_3 = (A_2)^2 - 2I, \tag{10.6}$$

$$h_4^{(3)} = A_2 h_4^{(2)} + h_2^{(2)} + h_6^{(2)}. \tag{10.7}$$

Второе уравнение системы может быть выделено:

$$A_3 v_4 = h_4^{(3)}. \tag{10.8}$$

Первое и третье уравнения могут быть переписаны:

$$\begin{aligned} A_2 v_2 &= h_2^{(2)} + v_4, \\ A_2 v_6 &= h_6^{(2)} + v_4. \end{aligned} \tag{10.9}$$

Таким образом решение исходной системы (10.1) порядка $I \cdot J$ может быть получено путем последовательного решения нескольких систем линейных уравнений порядка I в последовательности (10.8), (10.9) и (10.5). Система (10.5) может быть легко решена, когда известны её правые части, так как матрица A трехдиагональная. В системах (10.8) и (10.9) матрицы A_2 и A_3 не являются трехдиагональными, но соответствующие решения могут быть получены путем последовательного обращения трехдиагональных матриц. В общем случае матрица A_n удовлетворяет рекуррентному соотношению

$$\begin{aligned} A_1 &= A, \\ A_2 &= (A_1)^2 - 2I, \\ &\dots\dots\dots \\ A_n &= (A_{n-1})^2 - 2I. \end{aligned}$$

Далее покажем, что матрица A_n может быть факторизована в виде

$$A_n = \prod_{k=1}^{2^n-1} G_k^{(n)}, \quad (10.10)$$

где $G_k^{(n)}$ — трёхдиагональная матрица, задаваемая выражением

$$G_k^{(n)} = A - \lambda_k^{(n)} I,$$

$$\text{где } \lambda_k^{(n)} = 2 \cos \left[(2k-1) \frac{\pi}{2^n} \right].$$

Таким образом, уравнение (10.8) может быть решено четырехкратным обращением трехдиагональных матриц

$$v_4 = \left(G_1^{(3)} \right)^{-1} \left(G_3^{(3)} \right)^{-1} \left(G_2^{(3)} \right)^{-1} \left(G_4^{(3)} \right)^{-1} h_4^{(3)}.$$

Описанный здесь алгоритм требует перемножения матриц для вычисления неоднородных членов. Неоднократное перемножение матриц может привести к появлению больших чисел среди матричных элементов, что является причиной роста ошибок округления. Перемножения матриц можно избежать посредством модификации, предложенной Бунеманом.

Допустим, что уравнения (10.4) и (10.8) записаны в форме

$$\begin{pmatrix} A_2 & -I & . \\ -I & A_2 & -I \\ . & -I & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_2 \\ v_4 \\ v_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_2 p_2^{(2)} + q_2^{(2)} \\ A_2 p_4^{(2)} + q_4^{(2)} \\ A_2 p_6^{(2)} + q_6^{(2)} \end{pmatrix} \quad (10.11)$$

и, соответственно,

$$A_3 v_4 = A_3 p_4^{(3)} + q_4^{(3)}. \quad (10.12)$$

Если $p_4^{(3)}$ и $q_4^{(3)}$ могут быть вычислены без применения каких-либо матричных перемножений, то умножения не потребуются и во всем процессе, потому что умножения, включающие $A_n p_k^{(n)}$, взаимно сокращаются с A_n в левой стороне.

Обозначив $q_i^{(1)} = h_i$, для $n = 2$ запишем

$$\begin{aligned} h_i^{(2)} &= A_2 p_i^{(2)} + q_i^{(2)} = A^2 p_i^{(2)} - 2p_i^{(2)} + q_i^{(2)} = A q_i^{(1)} + \\ &+ q_{i-1}^{(1)} + q_{i+1}^{(1)}. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Здесь было использовано второе уравнение из (10.2) для получения

второго равенства и (10.3) — для получения третьего. Определим $p_i^{(2)}$ из

$$A^2 p_i^{(2)} = A q_i^{(1)},$$

или эквивалентным образом

$$A p_i^{(2)} = q_i^{(1)}. \quad (10.14)$$

Тогда

$$q_i^{(2)} = 2p_i^{(2)} + q_{i-1}^{(1)} + q_{i+1}^{(1)}.$$

Из уравнения (10.14) $p_i^{(2)}$ находится обращением трехдиагональной матрицы как $p_i^{(2)} = A^{-1} q_i^{(1)}$. Вектора $p_i^{(2)}$ и $q_i^{(2)}$ могут быть выражены в терминах q :

$$q_i^{(2)} = 2A^{-1} q_i^{(1)} + q_{i-1}^{(1)} + q_{i+1}^{(1)},$$

$$p_i^{(2)} = (q_i^{(2)} - q_{i-1}^{(1)} - q_{i+1}^{(1)}) / 2. \quad (10.15)$$

Для $n = 3$ векторы $p_i^{(3)}$ и $q_i^{(3)}$ могут быть вычислены с помощью простой процедуры. Запишем

$$\begin{aligned} h_i^{(3)} &= A_3 p_i^{(3)} + q_i^{(3)} = (A_2)^2 p_i^{(3)} + q_i^{(3)} = \\ &= A_2 (A_2 p_i^{(3)} + q_i^{(3)}) + A_2 p_{i-2}^{(2)} + q_{i-2}^{(2)} + A_2 p_{i+2}^{(2)} + q_{i+2}^{(2)}, \end{aligned} \quad (10.16)$$

где уравнение (10.6) использовано для получения второго равенства, а (10.7) — для получения третьего. Для определения $p_i^{(3)}$ и $q_i^{(3)}$ рассмотрим обе стороны последнего уравнения и положим

$$(A_2)^2 p_i^{(3)} = A_2 (A_2 p_i^{(3)} + q_i^{(3)} + p_{i-2}^{(2)} + p_{i+2}^{(2)}), \quad (10.17)$$

$$q_i^{(3)} = 2p_i^{(3)} + q_{i-2}^{(2)} + q_{i+2}^{(2)}. \quad (10.18)$$

Разрешив уравнение (10.17) относительно $p_i^{(3)}$, находим

$$p_i^{(3)} = p_i^{(2)} + (A_2)^{-1} (q_i^{(2)} + p_{i-2}^{(2)} + p_{i+2}^{(2)}). \quad (10.19)$$

Подставив (10.19) в (10.18) и используя (10.15), получим

$$q_i^{(3)} = q_{i-2}^{(2)} - q_{i-1}^{(1)} + q_i^{(2)} - q_{i+1}^{(1)} + q_{i+2}^{(2)} +$$

$$+ (A_2)^{-1} \left(-q_{i-3}^{(1)} + q_{i-2}^{(2)} - q_{i-1}^{(1)} + 2q_i^{(2)} - q_{i+1}^{(1)} + q_{i+2}^{(2)} - q_{i+3}^{(1)} \right), \quad (10.20)$$

где $i = 4$ (или кратно четырем в общем случае). Уравнение (10.20) содержит только величины q_i . Обращение матрицы $(A_2)^{-1}$ может быть проведено с помощью обращения двух трехдиагональных матриц из факторизованного представления (10.10).

Этот метод применим к блочно-трехдиагональным матрицам порядка $2^l - 1$ с любым l . Вектора $q_i^{(n)}$ и $p_i^{(n)}$ при $n > 3$ задаются выражениями

$$\begin{aligned} q_i^{(n)} &= q_{i-2s}^{(n-1)} - q_{i-s}^{(n-2)} + q_i^{(n-1)} - q_{i+s}^{(n-2)} + q_{i+2s}^{(n-1)} + \\ &+ (A_{n-1})^{-1} \left(-q_{i-3s}^{(n-2)} + q_{i-2s}^{(n-1)} - q_{i-s}^{(n-2)} + \right. \\ &+ \left. 2q_i^{(n-1)} - q_{i+s}^{(n-2)} + q_{i+2s}^{(n-1)} - q_{i+3s}^{(n-2)} \right), \\ p_i^{(n)} &= \left(q_i^{(n)} - q_{i-m}^{(n-1)} - q_{i+m}^{(n-1)} \right) / 2, \end{aligned} \quad (10.21)$$

где $s = 2^{n-3}$, j кратно 2^{n-1} , $m = 2^{n-2}$, а те вектора, чьи индексы выходят за границы, берутся равными нулю. Надо отметить, что и $q_i^{(n)}$ и $p_i^{(n)}$ выражаются только через величины q_i . Необходимо хранить только величины $q_i^{(n)}$ во время процесса редукции, а p_i находятся из уравнения (10.21), когда это необходимо. Обращение $(A_{n-1})^{-1}$ производится с помощью методов обращения трехдиагональных матриц (например, методом прогонки (см. [37])) повторно с уравнением (10.10).

Опишем теперь способ факторизации матрицы A_n в (10.10), полученной рекуррентным образом и являющейся поэтому полиномом степени 2^{n-1} от матрицы A . Можно записать

$$A_n = \sum_{i=0}^{2^{n-1}} c_i^{(n)} \cdot A^i, \quad n > 1, \quad (10.22)$$

где

$$c_i^{(n)} = 1 \quad \text{для} \quad i = 2^n. \quad (10.23)$$

Рассмотрим полином от переменного a , имеющий те же самые коэффициенты, что и (10.22):

$$a_n = \sum_{i=0}^{2^n-1} c_i^{(n)} \cdot a^i, \quad n > 1. \quad (10.24)$$

Для этого полинома существует такая же рекуррентная формула, как и для полинома от матриц:

$$a_n = (a_{n-1})^2 - 2. \quad (10.25)$$

Если положить

$$a_1 = a = 2\cos\theta, \quad (10.26)$$

то легко получим, что соотношение (10.25) сведется к

$$a_n = 2\cos(2^{n-1}\theta).$$

Оно обращается в нуль при

$$\theta = \frac{2j-1}{2^n} \pi, \quad j = 1, \dots, 2^{n-1}.$$

Используя (10.26), найдем корни уравнения $a_n = 0$:

$$a = 2\cos\left(\frac{2j-1}{2^n} \pi\right), \quad j = 1, \dots, 2^{n-1}.$$

Таким образом, полином a_n может быть записан в форме

$$a_n = \prod_{j=1}^{2^{n-1}} \left[a - 2\cos\left(\frac{2j-1}{2^n} \pi\right) \right],$$

где соотношение (10.23) использовано для нормализации полинома. После замены скаляра a на матрицу A и единицы на единичную матрицу I получим

$$A_n = \prod_{j=1}^{2^{n-1}} \left[A - 2\cos\left(\frac{2j-1}{2^n} \pi\right) I \right]. \quad (10.27)$$

Таким образом, соотношение (10.10) доказано.

Метод Бунемана легко обобщается на случай, когда коэффициенты исходного оператора являются функциями только одной из переменных. Выбираем её так, чтобы матрица A в (10.1) была постоянной, т. е. не зависела от текущего индекса системы (10.1) (см. [21]). Это позволяет, например, рассматривать оператор Лапласа с цилиндрической симметрией.

Применение метода Бунемана для решения нестационарного уравнения Шредингера. Применим метод Бунемана для нахождения приближенного решения нестационарного уравнения Шредингера в случае двух пространственных переменных. Воспользуемся результатами гл. 4 и 6 и распишем схему расщепления для (4.17) или (6.18), как это было сделано в (4.20) и (4.21), но для двух пространственных переменных. Теперь нам нужно на интервале $0 \leq \tau \leq t$ найти решение уравнения

$$2i \frac{\partial E}{\partial \tau} = \Delta E = \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial y^2}. \quad (10.28)$$

Вместо применения преобразования Фурье, как это делалось раньше, используем идею метода Бунемана. Распишем разностную аппроксимацию (10.28) по схеме Крэнка — Никольсона:

$$2i \frac{\hat{E} - E}{\delta \tau} - \Lambda \frac{\hat{E} + E}{2} = 0,$$

здесь $\hat{E} = E(\tau + \delta \tau)$, $E = E(\tau)$, Λ — разностная аппроксимация оператора Лапласа по схеме "крест", распisanная, например, в начале этой главы.

Для нахождения \hat{E} получаем уравнение

$$4i\hat{E} - \delta \tau \cdot \Lambda \hat{E} = f = 4iE + \delta \tau \cdot \Lambda E. \quad (10.29)$$

Решение его может быть найдено методом Бунемана. Число шагов $\delta \tau$, необходимое для прохождения интервала t , находится из условия устойчивости разностной схемы (10.29) (см., например, [37]).

Описанный способ работает в случае цилиндрической системы координат, когда неприменима непосредственно методика дискретного преобразования Фурье.

Глава 11

РАЗНОСТНЫЕ МЕТОДЫ

Рассмотрим уравнение (4.1) с начальными условиями (4.3) на конечном интервале $0 \leq x \leq l$ с граничными условиями общего вида

$$\alpha E(0) + \beta \frac{\partial E(0)}{\partial x} = 0, \quad E(l) = 0. \quad (11.1)$$

Дискретное преобразование Фурье, неоднократно применявшееся нами ранее, использует разложение по функциям

$$\exp\left(i \frac{2\pi}{N} kj\right); \quad k, j = 1, 2, \dots, N,$$

не удовлетворяющим граничным условиям (11.1). Поэтому методы, использующие дискретное преобразование Фурье, не могут быть применены напрямую в случае граничных условий третьего рода без существенного ухудшения скорости сходимости аппроксимирующей функции к исходной и без потери главных достоинств этого метода — быстроты и точности счёта.

Заменим дифференциальные операторы конечно-разностными, используя идею операторного неявного компактного метода, предложенную в [57] и развитую в [58]. Сначала научимся заменять разностным соотношением уравнение

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = f \quad (11.2)$$

с граничными условиями (11.1). Для этого разобьём область изменения x на N отрезков длины $h = l/N$. Концы отрезков $x_i = ih$ называются узлами. Обозначим

$$E_i = E(x_i), \quad f_i = f(x_i). \quad (11.3)$$

Умножим уравнение (11.2) на функцию

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{h} & \text{при } x_{i-1} \leq x \leq x_i, \\ \frac{x_{i+1} - x}{h} & \text{при } x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ 0 & \text{при } x < x_i, x_{i+1} < x \end{cases} \quad i > 1 \quad (11.4)$$

и проинтегрируем по отрезку $0 \leq x \leq l$. Получим

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \varphi_i(x) dx &= \frac{\partial E}{\partial x} \varphi_i(x) \Big|_{x_{i-1}}^{x_i} + \frac{\partial E}{\partial x} \varphi_i(x) \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} - \\ &- \frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{\partial E}{\partial x} dx + \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial E}{\partial x} dx = \frac{1}{h} (E(x_{i+1}) - 2E(x_i) + E(x_{i-1})) = \\ &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) \varphi_i(x) dx. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Интеграл в правой части (11.5) вычислим приближенно. Для этого разобьем интервал интегрирования пополам и на каждом из получившихся подынтервалов применим формулу трапеций

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) \varphi_i(x) dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) \varphi_i(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) \varphi_i(x) dx = \\ &= \left(f(x_i) \varphi_i(x_i) + f(x_{i-1}) \varphi_i(x_{i-1}) \right) h/2 + \\ &+ \left(f(x_{i+1}) \varphi_i(x_{i+1}) + f(x_i) \varphi_i(x_i) \right) h/2 + O(h^3) = \\ &= f(x_i) h + O(h^3). \end{aligned}$$

Поделив на h и воспользовавшись обозначениями (11.2), получим

$$\frac{\partial^2 E(x_i)}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} (E_{i+1} - 2E_i + E_{i-1}) + O(h^2) = f_i, \quad i > 1. \quad (11.6)$$

При $i = 1$ возьмем функцию

$$\varphi_1(x) = G(x, h) = \begin{cases} \frac{\alpha x + \beta}{2\alpha h + \beta} h & \text{при } 0 \leq x \leq x_1, \\ \frac{\alpha h + \beta}{2\alpha h + \beta} (2h - x) & \text{при } x_1 \leq x \leq x_2, \\ 0 & \text{при } x_2 < x, \end{cases} \quad (11.7)$$

являющуюся функцией Грина задачи (11.2), (11.1) для интервала $0 \leq x \leq 2h$. После домножения на φ_1 и интегрирования получим

$$\int_0^{2h} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \varphi_1(x) dx = \frac{2\alpha h}{2\alpha h + \beta} E_0 - E_1 + \frac{\alpha h + \beta}{2\alpha h + \beta} E_2. \quad (11.8)$$

При вычислении правой части интегралы будем брать по частям так, чтобы подстановки в крайних точках 0 и $2h$ обращались в нуль. Тогда получим, что ошибка аппроксимации, записанная в интегральной форме, сосредоточена в окрестности центрального узла области интегрирования [59]:

$$\begin{aligned} \int_0^{2h} f(x) \varphi_1(x) dx &= \frac{h}{2\alpha(2\alpha h + \beta)} [(\alpha x + \beta)^2 - \beta^2] f(x) \Big|_0^h - \\ &- \frac{h}{2\alpha(2\alpha h + \beta)} \int_0^h f'(x) [(\alpha x + \beta)^2 - \beta^2] dx - \\ &- \frac{\alpha h + \beta}{2(2\alpha h + \beta)} (x - 2h)^2 f(x) \Big|_h^{2h} + \frac{\alpha h + \beta}{2(2\alpha h + \beta)} \int_h^{2h} f'(x) (x - 2h)^2 dx = \\ &= \frac{h^2}{2(2\alpha h + \beta)} [3\beta + 2\alpha h] f(h) + O(h^3). \end{aligned} \quad (11.9)$$

При $i = 0$ соответственно получаем, взяв в качестве φ_0 правую часть функции φ_1 из (11.7):

$$\varphi_0(x) = \beta(h - x) / (\alpha h + \beta),$$

$$\int_0^h \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \varphi_0(x) dx = \frac{\alpha h - \beta}{\alpha h + \beta} E_0 + \frac{\beta}{\alpha h + \beta} E_1, \quad (11.10)$$

$$\int_0^h f(x) \varphi_0(x) dx = \frac{\beta h^2}{2(\alpha h + \beta)} f(0) + O(h^3). \quad (11.11)$$

Поделив на соответствующие коэффициенты, находим

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E_1}{\partial x^2} = & \frac{4\alpha}{(2\alpha h + 3\beta)h} E_0 - \frac{2(2\alpha h + \beta)}{(2\alpha h + 3\beta)h^2} E_1 + \\ & + \frac{2(\alpha h + \beta)}{(2\alpha h + 3\beta)h^2} E_2 + O(h), \end{aligned} \quad (11.12)$$

$$\frac{\partial^2 E_0}{\partial x^2} = \frac{2(\alpha h - \beta)}{\beta h^2} E_0 + \frac{2}{\beta h^2} E_1 + O(h). \quad (11.13)$$

Подставляя (11.6), (11.12) и (11.13) в (4.1), получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений метода прямых

$$2i \frac{\partial E_l}{\partial t} + R E_l + N_l E_l = 0$$

с трехдиагональной матрицей R . Для нахождения решения этой системы можно использовать методы гл. 3 и 4.

Операторный компактный неявный метод. Существует несколько способов увеличения точности аппроксимации. Самый простой из них состоит в уменьшении шага h , что, однако, немедленно приводит к увеличению числа дискретных переменных и времени вычислений. Кроме того, получившаяся матрица R становится плохо обусловленной, так как, согласно например (9.9), с ростом N растет отношение $|\lambda_N / \lambda_1|$. При этом трудно обеспечить достаточную точность численного решения. Это является тем самым камнем преткновения для регулярных методов решения систем линейных дифференциальных уравнений большой размерности, который побуждает к постоянному поиску новых методов решения. С другой стороны, можно воспользоваться разностной аппроксимацией более высокого порядка, а также использовать вариационно-разностные методы (см., например, [21]).

Порядок аппроксимации оператора $\frac{\partial^2 E}{\partial x^2}$ можно увеличить, продолжив интегрирование по частям в (11.5), (11.9) и (11.11), и опять проводя его так, чтобы в подстановках остались производные от функции $f(x)$ только во внутреннем узле области интегрирования. Это позволяет при замене производных разностными соотношениями использовать формулы для внутренних узлов области, имеющие наибольший порядок аппроксимации. Кроме того, это даёт возможность легко обобщить результаты на случай переменных шагов:

$$\int_0^{2h} f(x) \varphi_1(x) dx = \frac{h^2}{2(2\alpha h + \beta)} (3\beta + 2\alpha h) f(h) - \frac{\beta h^3}{6(2\alpha h + \beta)} f'(h) +$$

$$+ \frac{5h^4}{24(2\alpha h + \beta)} (2\alpha h + 5\beta) f''(h) + O(h^5) = \frac{h^2}{24(2\alpha h + \beta)} \times$$

$$\times [(2\alpha h + 9\beta) f_0 + (8\alpha h + 14\beta) f_1 + (2\alpha h + \beta) f_2] + O(h^5), \quad (11.14)$$

$$\int_0^h f(x) \varphi_0(x) dx = \frac{\beta h^2}{2(\alpha h + \beta)} \left[f(h) - \frac{2h}{3} f'(h) + \frac{h^2}{4} f''(h) \right] + O(h^5) =$$

$$= \frac{\beta h^2}{4(\alpha h + \beta)} \left(\frac{7}{6} f_0 + f_1 - \frac{1}{6} f_2 \right) + O(h^5). \quad (11.15)$$

Здесь производные заменены центральными разностями.
В общем случае

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) \varphi_i(x) dx = \frac{h}{12} \left(f_0 + \frac{5}{6} f_1 + f_2 \right) + O(h^5). \quad (11.16)$$

Таким образом получили соотношения

$$\frac{\alpha h - \beta}{(\alpha h + \beta) h} E_0 + \frac{\beta}{(\alpha h + \beta) h^2} E_1 =$$

$$= \frac{\beta}{4(\alpha h + \beta)} \left(\frac{7}{6} f_0 + f_1 - \frac{1}{6} f_2 \right) + O(h^3), \quad i = 0, \quad (11.17)$$

$$\frac{2\alpha}{(2\alpha h + \beta) h^2} E_0 - \frac{1}{h^2} E_1 + \frac{\alpha h + \beta}{(2\alpha h + \beta) h^2} E_2 =$$

$$= \frac{1}{24(2\alpha h + \beta)} [(2\alpha h + 9\beta) f_0 + (8\alpha h + 14\beta) f_1 + (2\alpha h + \beta) f_2] +$$

$$+ O(h^3), \quad i = 1, \quad (11.18)$$

$$\frac{1}{h^2} (E_{i+1} - 2E_i + E_{i-1}) =$$

$$= \frac{1}{12} \left(f_0 + \frac{5}{6} f_1 + f_2 \right) + O(h^4), \quad i > 1. \quad (11.19)$$

Эти соотношения можно переписать в матричной форме

$$RE = Qf, \quad (11.20)$$

где R — трёхдиагональная матрица, а матрица Q отличается от трёхдиагональной дополнительным ненулевым элементом q_{03} в первой строке, соответствующей узлу $x = 0$. При заданной функции f соотношение (11.20) может быть интерпретировано как вариант интегрального тождества Марчука (см. [21]). Умножив (11.20) на матрицу Q^{-1} , в результате получим аппроксимацию второй производной в виде произведения матрицы, обратной к почти трёхдиагональной, на трёхдиагональную

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = Q^{-1} R E \quad (11.21)$$

с точностью $O(h^4)$ для $i = 2, \dots, N-1$ и $O(h^3)$ для $i = 0, 1$. В случае граничных условий первого и второго рода матрица Q , как и в [58], строго трёхдиагональна.

Аппроксимируем теперь в уравнении (4.1) производную по времени в точке $\tau = (t_{k+1} + t_k)/2$, производную по пространственной переменной с помощью соотношения (11.21), а чтобы все члены разностного уравнения представляли собой аппроксимацию в одной и той же точке, заменим с той же точностью

$$E(\tau, x_i) = (E(t_{k+1}, x_i) + E(t_k, x_i))/2 + O(\Delta t^2).$$

Обозначив

$$E(t_{k+1}) = \hat{E}, \quad E(t_k) = E, \quad \tilde{N} = N(\tau) = (\hat{N} + N)/2 + O(\Delta t^2), \quad (11.22)$$

получаем разностную схему так называемого операторного неявного компактного метода (см. [58]) для уравнения (4.1):

$$2i \frac{\hat{E} - E}{\Delta t} + Q^{-1} R \frac{\hat{E} + E}{2} + \tilde{N} \frac{\hat{E} + E}{2} = 0. \quad (11.23)$$

Домножив (11.23) на матрицу Q и на скалярный множитель Δt , получим разностное уравнение

$$\begin{aligned} 4iQE + \Delta t RE + \Delta t Q(\tilde{N}E) &= \\ = 4iQE - \Delta t RE - \Delta t Q(\tilde{N}E) &= G. \end{aligned} \quad (11.24)$$

Для нахождения \hat{E} из (11.24) нам нужно обращать почти трёхдиагональную матрицу. Это можно сделать, используя идею метода левой прогонки (см., например, [37]) с очевидной дополнительной коррекцией первой строки после первого прохода справа налево.

Напомним, что если в (11.1) хотя бы один из коэффициентов комплексный, то вместо φ_0 и φ_1 (см. (11.7)) нужно брать комплексно-сопряженную функцию.

После нахождения \hat{E} из (11.24) необходимо вычислить \hat{G} , т. е. выражение, стоящее в правой части (11.24), но для верхнего слоя. Очевидно (см. (11.6) и (11.16)), что наибольшую погрешность даёт оператор R , являющийся разностным. Оператор Q имеет все коэффициенты одного знака и является сглаживающим, усредняющим [46]. Зная \hat{E} , можно найти $R\hat{E}$ из (11.24). Тогда

$$\hat{G} = 8i Q \left[1 - \Delta t (N_{k+1} - N_k) / 2 \right] \hat{E} - G. \quad (11.25)$$

В итоге получено значение функции \hat{G} на верхнем слое без учета разностей функции \hat{E} , т. е. без потери точности.

Соединение операторного компактного неявного метода с методом Бунемана. Покажем теперь, как для схемы операторного компактного неявного метода может быть применена методика Бунемана. Идею метода изложим, как и в методе Бунемана, на примере решения задачи Дирихле с нулевыми граничными условиями. Тогда, согласно (11.21), получим разностный аналог уравнения Лапласа

$$Q_1^{-1} R_1 + Q_2^{-1} R_2 = F + O(h^4) \quad (11.26)$$

с трехдиагональными матрицами $Q_i, R_i, i = 1, 2$. Матрицы Q_1 и R_1 представляют собой разностные операторы по направлению оси x , а Q_2 и R_2 — по оси y . Естественно, что матрицы разных направлений перестановочны. Введем обозначения для ненулевых элементов матриц Q_1 и R_1 :

$$q_{j,j-1} = q_{j,j+1} = q, \quad q_{j,j} = -q_0; \quad r_{j,j-1} = r_{j,j+1} = r, \quad r_{j,j} = -r_0.$$

Домножим уравнение (11.26) на матрицу Q_1 и запишем результат в блочно-диагональном виде, как это сделано в (10.1). В покомпонентной записи получим

$$\begin{aligned} & \left(rI + qQ_2^{-1} R_2 \right) v_{i-1} - \left(r_0I + q_0Q_2^{-1} R_2 \right) v_i + \\ & + \left(rI + qQ_2^{-1} R_2 \right) v_{i+1} = Q_1 F = g_i. \end{aligned}$$

Здесь $v_i = (u_{i,j})$ — решение вдоль i -й сеточной строки, g_i — соответствующая правая часть. Теперь домножим обе части получившегося равенства на матрицу Q_2 :

$$\begin{aligned} & (rQ_2 + qR_2)v_{i-1} - (r_0Q_2 + q_0R_2)v_i + \\ & + (rQ_2 + qR_2)v_{i+1} = Q_2g_i. \end{aligned}$$

Домножив на матрицу $-(rQ_2 + qR_2)^{-1}$, получим систему уравнений относительно v_i , в точности аналогичную (10.1):

$$\begin{aligned} & -Iv_{i-1} + (rQ_2 + qR_2)^{-1}(r_0Q_2 + q_0R_2)v_i - Iv_{i+1} = \\ & = - (rQ_2 + qR_2)^{-1}Q_2g_i = h_i, \end{aligned} \quad (11.27)$$

но вместо трёхдиагональной матрицы A стоит матрица операторного компактного неявного метода, являющаяся произведением двух матриц: первой, обратной к трёхдиагональной, на вторую, трёхдиагональную:

$$A = \tilde{Q}^{-1}\tilde{R}, \quad \text{где } \tilde{Q} = rQ_2 + qR_2, \quad \tilde{R} = r_0Q_2 + q_0R_2.$$

Теперь уже можно полностью воспользоваться схемой по методу Бунемана. Вместо (10.27) получаем

$$A_n = \prod_{j=1}^{2^n-1} \tilde{Q}^{-1}(\tilde{R} - \lambda_j\tilde{Q}),$$

где $\lambda_j = 2\cos\left(\frac{2j-1}{2^n}\pi\right)$. Здесь, как и в (10.27), можно менять порядок сомножителей в произведении операторов, так как операторы $\tilde{Q}^{-1}(\tilde{R} - \lambda_j\tilde{Q})$ с разными j коммутируют. Соответственно находится матрица

$$(A_n)^{-1} = \prod_{j=1}^{2^n-1} (\tilde{R} - \lambda_j\tilde{Q})^{-1}\tilde{Q}.$$

Введем вместо соотношения (10.12) соотношение

$$A_3v_4 = A_3p_4^{(3)} + \tilde{Q}^{-1}\xi_4^{(3)}, \quad (11.28)$$

а вместо (10.14)

$$Ap_i^{(2)} = \tilde{Q}^{-1}\xi_i^{(1)} \quad \text{или} \quad \tilde{R}p_i^{(2)} = \xi_i^{(1)}. \quad (11.29)$$

Тогда, согласно обозначениям в (10.13), $\xi_j^{(1)} = Q_2 h_j$ и при $n > 2$ рекуррентное соотношение (10.21) заменится на

$$\begin{aligned} \xi_j^{(n)} &= \xi_{j-2s}^{(n-1)} - \xi_{j-s}^{(n-2)} + \xi_j^{(n-1)} - \xi_{j+s}^{(n-2)} + \xi_{j+2s}^{(n-1)} + \\ &+ B_{n-1} (-\xi_{j-3s}^{(n-2)} + \xi_{j-2s}^{(n-1)} - \xi_{j-s}^{(n-2)} + 2\xi_j^{(n-1)} - \\ &- \xi_{j+s}^{(n-2)} + \xi_{j+2s}^{(n-1)} - \xi_{j+3s}^{(n-2)}), \\ \tilde{Q} p_j^{(n)} &= \left(\xi_j^{(n)} - \xi_{j-m}^{(n-1)} - \xi_{j+m}^{(n-1)} \right) / 2, \end{aligned} \quad (11.30)$$

где

$$B_{n-1} = \prod_{j=1}^{2^{n-1}} \tilde{Q} (\tilde{R} - \lambda_j \tilde{Q})^{-1}.$$

По сравнению с (10.21) здесь незначительно усложнен процесс нахождения $\xi_j^{(n)}$ домножением на трёхдиагональную матрицу \tilde{Q} . При этом выигрыш получается на том, что точность аппроксимации возросла с $O(h^2)$ до $O(h^4)$, позволяя увеличить шаг h и соответственно уменьшить число расчётных точек.

Случай цилиндрической симметрии. На практике часто возникают задачи с оператором Лапласа в цилиндрической системе координат, как это было, например, в (1.1). В этом случае точка $r = 0$ является граничной точкой для соответствующего оператора и в ней задаётся граничное условие (см. (1.2)). В ней же, согласно (11.17) и (11.18), можно ожидать уменьшения порядка аппроксимации. Однако эта точка является внутренней для круговой области, т. е. обычной регулярной точкой. Поэтому можно построить разностную аппроксимацию оператора в этой точке, не ухудшающую общий порядок аппроксимации.

Для получения разностной аппроксимации оператора Лапласа в цилиндрической системе координат для уравнения

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} = f \quad (11.31)$$

с граничными условиями

$$\left. \frac{\partial E}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad E|_{r=R} = 0, \quad (11.32)$$

домножим это уравнение на функцию

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{\ln r - \ln r_{i-1}}{\ln r_i - \ln r_{i-1}} & \text{при } r_{i-1} \leq r \leq r_i, \\ \frac{\ln r_{i+1} - \ln r}{\ln r_{i+1} - \ln r_i} & \text{при } r_i \leq r \leq r_{i+1}, \quad i > 1 \\ 0 & \text{при } r < r_i, \quad r_{i+1} < r \end{cases} \quad (11.33)$$

и проинтегрируем с весом r по отрезку $0 \leq r \leq R$. Интеграл в левой части берётся точно, а при вычислении правой части, как и ранее, будем интегрировать по частям так, чтобы подстановки в крайних точках обращались в нуль:

$$\begin{aligned} \int_{r_{i-1}}^{r_{i+1}} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} \varphi_i(r) dr &= r_i^+ E_{i+1} - r_i^0 E_i + r_i^- E_{i-1} = \\ &= \int_{r_{i-1}}^{r_{i+1}} f(r) \varphi_i(r) r dr = - \left(a_1(r_i)^2 / 4 - a_2 / 4 \right) f(r_i) + \\ &+ \left(5a_1(r_i)^2 / 36 - a_2 r_i / 4 + a_3 / 9 \right) f'(r_i) - \\ &- \left(13a_1(r_i)^3 / 288 - a_2(r_i)^2 / 8 + a_3 r_i / 9 - a_4 / 32 \right) f''(r_i) + \\ &+ C f'''(\bar{r}) h^5. \end{aligned} \quad (11.34)$$

Здесь

$$\begin{aligned} r_i^+ &= \frac{1}{\ln r_{i+1} - \ln r_i}, \quad r_i^- = \frac{1}{\ln r_i - \ln r_{i-1}}, \quad r_i^0 = r_i^+ + r_i^-, \\ a_1 &= r_i^0, \quad a_2 = r_i^+ (r_{i+1})^2 + r_i^- (r_{i-1})^2, \quad a_3 = r_i^+ (r_{i+1})^3 + r_i^- (r_{i-1})^3, \\ a_4 &= r_i^+ (r_{i+1})^4 + r_i^- (r_{i-1})^4, \quad h = \max(r_{i+1} - r_i). \end{aligned}$$

При $i = 1$

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{\ln r}{\ln r_1} & \text{при } 0 \leq r \leq r_1, \\ \frac{\ln r_2 - \ln r}{\ln r_2 - \ln r_1} & \text{при } r_1 \leq r \leq r_2, \\ 0 & \text{при } r_2 < r \end{cases} \quad (11.35)$$

и получаем в точности такое же равенство, как и (11.34), но с $r_i^- = \frac{1}{\ln r_1}$ и, естественно, $r_{i-1} = 0$ в a_2, a_3 и a_4 .

Для $i=0$ $\varphi_0 = (\ln r - \ln r_1)$ при $r \leq r_1$ и равна нулю при остальных r . Соответственно $r_0^0 = 1, r_0^+ = 1$. После интегрирования по частям получаем

$$\begin{aligned} E_1 - E_0 &= \int_0^{r_1} f(r) \varphi_0(r) r dr = \\ &= - \left((r_1)^2 / 4 \right) f(0) - \left((r_1)^4 / 32 \right) f''(r_1) + C f'''(r) h^5. \end{aligned} \quad (11.36)$$

Так как в силу граничного условия (11.32) функция $E(r)$ чётная относительно точки $r=0$, то, так как

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial E}{\partial r} \Big|_{r=0} = 2 \frac{\partial^2 E}{\partial r^2} \Big|_{r=0},$$

и функция $f(r)$ тоже. Предполагая наличие достаточной гладкости в круге $r \leq R$, будем иметь $f'''(r) = h$. Следовательно, точность равенства (11.36) будет $O(h^6)$. После деления (11.36) на $(r_1)^2/4$ получаем

$$\frac{E_1 - E_0}{r_1^2} = f(0) + \frac{r_1^2}{8} f''(0) + O(h^4), \quad (11.37)$$

так что во всех точках порядок аппроксимации оператора Лапласа в (11.31) составляет $O(h^4)$. Мы оставили в правых частях (11.34) и (11.36) производные от функции $f(r)$, предоставляя читателю возможность воспользоваться привычной ему формой аппроксимации производных на неравномерной сетке.

Приложение

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

Преобразование Фурье является одним из наиболее часто используемых преобразований в общей и прикладной физике. Оно непосредственно связано с понятием спектра, частоты, линейного фильтра, и, возможно, не существует такой области физики, к которой не имело бы отношение это преобразование. Нашей целью является рассмотрение в рамках данной книги этого преобразования в качестве *средства представления некоторой функции*. Решающий перелом в пользу такого представления связан с появлением нового, очень экономичного метода реализации этого преобразования на ЭВМ, который приводит к ускорению процесса вычисления в сотни раз без увеличения быстродействия машины. Этот метод, называемый методом быстрого преобразования Фурье, в настоящее время широко используется для решения целого класса задач. Быстрота и точность этого метода позволили использовать его не только при обработке сигналов, для чего он первоначально и предназначался, но и применять его для решения дифференциальных уравнений в частных производных. Поскольку большая часть приведённых в книге алгоритмов может быть реализована с помощью дискретного преобразования Фурье, краткое изложение свойств этого преобразования может оказаться полезным. Кроме того, так как решение дифференциальных уравнений с помощью преобразования Фурье чаще всего сводится к вычислению свёрток, то имеет смысл напомнить, что же можно получить в результате и как правильно эти результаты интерпретировать. Помимо этого, приведём в конце приложения одну из наиболее "физичных" реализаций дискретного преобразования Фурье — Бесселя [60].

Конечные ряды Фурье

Если $f(x)$ — периодическая функция от x с периодом 2π , то теория рядов Фурье утверждает, что

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx) \quad (\text{П.1})$$

при условии, что на $f(x)$ наложены довольно слабые (с точки зрения вычислительной математики) ограничения. Величины a_k и b_k определяются по формулам

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos kx \, dx; \quad b_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin kx \, dx.$$

Ряды Фурье сыграли важную роль в развитии математики. Наряду с обычной теорией, в которой функции предполагаются известными на всем интервале длины 2π , существует теория, рассматривающая функции, заданные на дискретном множестве равноотстоящих точек.

Разложение в ряд Фурье основано на ортогональности функций $1, \cos kx, \sin kx$ по отношению к интегрированию на отрезке $[0, 2\pi]$:

$$\int_0^{2\pi} \cos kx \cos mx \, dx = \begin{cases} 0, & k \neq m, \\ \pi, & k = m \neq 0, \\ 2\pi, & k = m = 0, \end{cases}$$
$$\int_0^{2\pi} \sin kx \sin mx \, dx = \begin{cases} 0, & k \neq m, \\ \pi, & k = m \neq 0, \end{cases} \quad (\text{П.2})$$
$$\int_0^{2\pi} \sin kx \cos mx \, dx = 0.$$

Если вместо интегрирования используем суммирование, то функции

$$1, \cos x, \cos 2x, \dots, \cos(N-1)x, \cos Nx,$$
$$\sin x, \sin 2x, \dots, \sin(N-1)x$$

оказываются ортогональными на дискретном множестве точек

$$0, \frac{\pi}{N}, \frac{2\pi}{N}, \dots, \frac{(2N-1)\pi}{N}. \quad (\text{П.3})$$

Преобразование $x \leftrightarrow \frac{\pi}{N}x$ приводит к системе функций:

$$1, \cos \frac{\pi}{N}x, \cos 2 \frac{\pi}{N}x, \dots, \cos (N-1) \frac{\pi}{N}x, \cos N \frac{\pi}{N}x, \\ \sin \frac{\pi}{N}x, \sin 2 \frac{\pi}{N}x, \dots, \sin (N-1) \frac{\pi}{N}x, \sin N \frac{\pi}{N}x. \quad (\text{П.4})$$

Соотношения ортогональности между ними ($k \leq N, m \leq N$)

$$\sum_{x=0}^{2N-1} \sin \frac{\pi}{N}kx \sin \frac{\pi}{N}mx = \begin{cases} 0, & k \neq m, \\ N, & k = m \neq 0, \end{cases} \\ \sum_{x=0}^{2N-1} \sin \frac{\pi}{N}kx \cos \frac{\pi}{N}mx = 0, \quad (\text{П.5})$$

$$\sum_{x=0}^{2N-1} \cos \frac{\pi}{N}kx \cos \frac{\pi}{N}mx = \begin{cases} 0, & k \neq m, \\ N, & k = m \neq 0, N, \dots, \\ 2N, & k = m = 0, N, \dots \end{cases}$$

легко проверяются непосредственно. Если функция может быть записана в виде

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} \left(a_k \cos \frac{\pi}{N}kx + b_k \sin \frac{\pi}{N}kx \right) + \frac{a_N}{2} \cos \pi x, \quad (\text{П.6})$$

то можно использовать соотношения ортогональности для определения коэффициентов разложения. Чтобы получить a_k ($k = 1, 2, \dots, N-1$),

умножим обе части равенства на $\cos \frac{\pi}{N}mx$ и просуммируем по всем x . Получим

$$\sum_{x=0}^{2N-1} f(x) \cos \frac{\pi}{N}mx = Na_m, \quad (1 \leq m \leq N-1). \quad (\text{П.7})$$

Аналогично для $\sin \frac{\pi}{N}mx$

$$\sum_{x=0}^{2N-1} f(x) \sin \frac{\pi}{N}mx = Nb_m, \quad (1 \leq m \leq N-1). \quad (\text{П.8})$$

Окончательно для $m = 0$ и $m = N$ имеем

$$\sum_{x=0}^{2N-1} f(x) = 2N \left(\frac{a_0}{2} \right) = Na_0, \quad \sum_{x=0}^{2N-1} f(x) \cos \pi x = 2N \left(\frac{a_N}{2} \right) = Na_N. \quad (\text{П.9})$$

Последние две формулы имеют тот же вид, что и (П.7), и показывают, почему выгоднее писать разложение с $a_0/2$ и $a_N/2$, а не с a_0 и a_N . В нашем разложении $2N$ значений $f(x)$ ($x = 0, 1, \dots, 2N - 1$) определяют $2N$ коэффициентов a_k, b_k , и естественно считать, что сумма ряда в данных точках будет в точности равна значениям начальной функции (т. е. система функций является полной по отношению к группе используемых точек). Чтобы доказать это предположение, зафиксируем $x = \bar{x}$, перегруппируем сумму, подставив сначала в нее значения коэффициентов a_k и b_k :

$$\begin{aligned} f(\bar{x}) &= \frac{1}{N} \sum_{x=0}^{2N-1} f(x) \left[\frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} \left(\cos \frac{\pi}{N} kx \cos \frac{\pi}{N} k\bar{x} + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \sin \frac{\pi}{N} kx \sin \frac{\pi}{N} k\bar{x} \right) + \frac{1}{2} \cos \pi x \cos \pi \bar{x} \right] = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{x=0}^{2N-1} f(x) \left[\frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}) + \frac{1}{2} \cos \pi x \cos \pi \bar{x} \right]. \end{aligned}$$

Теперь запишем

$$\sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x})$$

и во второй сумме используем тот факт, что

$$\cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}) = \cos \frac{\pi}{N} (2N - k)(x - \bar{x}),$$

чтобы получить

$$\sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}) + \frac{1}{2} \sum_{k=N+1}^{2N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}).$$

Используя это, получим

$$f(\bar{x}) = \frac{1}{2N} \sum_{x=0}^{2N-1} f(x) \left[\sum_{k=0}^{2N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}) \right].$$

Но выражение в квадратных скобках равно

$$\sum_{k=0}^{2N-1} \cos \frac{\pi}{N} k(x - \bar{x}) = \begin{cases} 2N, & \text{если } x = \bar{x}, \\ 0, & \text{если } x \neq \bar{x}, \end{cases}$$

так что от суммы остается лишь член с $x = \bar{x}$ и

$$f(\bar{x}) = \frac{1}{2N} 2N f(\bar{x}) = f(\bar{x}).$$

Таким образом, обе части уравнения дают одно и то же число.

Существует хорошо известное соотношение между суммой квадратов коэффициентов и суммой квадратов значений функции

$$\sum_{x=0}^{2N-1} [f(x)]^2 = N \left[\frac{a_0^2}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} (a_k^2 + b_k^2) + \frac{a_N^2}{2} \right]. \quad (\text{П.10})$$

Чтобы доказать его, образуем сумму квадратов значений функции

$$\begin{aligned} \sum_{x=0}^{2N-1} [f(x)]^2 &= \sum_{x=0}^{2N-1} \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} \left(a_k \cos \frac{\pi}{N} kx + b_k \sin \frac{\pi}{N} kx \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{a_N}{2} \cos \pi x \right]^2 \end{aligned}$$

и выполним умножение. Соотношения ортогональности (П.7) – (П.9) дают

$$\sum_{x=0}^{2N-1} [f(x)]^2 = \left(\frac{a_0}{2} \right)^2 2N + \sum_{k=1}^{N-1} \left(a_k^2 N + b_k^2 N \right) + \left(\frac{a_N}{2} \right)^2 2N,$$

что и требовалось доказать. Этот результат может быть использован для вычисления суммы квадратов ошибок, когда используются члены лишь до $k = M < N - 1$. Пусть $f_M(x)$ – сумма первых M гармоник, так что

$$f_M(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^M \left(a_k \cos \frac{\pi}{N} kx + b_k \sin \frac{\pi}{N} kx \right).$$

Тогда

$$\begin{aligned} \sum_{x=0}^{2N-1} (f - f_M)^2 &= \sum_{x=0}^{2N-1} \left[\sum_{k=M+1}^{N-1} \left(a_k \cos \frac{\pi}{N} kx + \right. \right. \\ &+ \left. \left. b_k \sin \frac{\pi}{N} kx \right) + \frac{a_N}{2} \cos \pi x \right]^2 = N \left[\sum_{k=M+1}^{N-1} (a_k^2 + b_k^2) + \frac{a_N^2}{2} \right] = \\ &= \sum_{x=0}^{2N-1} f^2 - N \left[\frac{a_0^2}{2} + \sum_{k=1}^M (a_k^2 + b_k^2) \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

Другими словами, использование членов лишь до $k = M$ в разложении функции (П.6) дает нам приближение к $f(x)$, ошибка которого в смысле наименьших квадратов определяется равенством (П.11). Исследуя, как уменьшается (П.11) при увеличении M , можно оценить значение взятых дополнительно членов в разложении Фурье.

Мы показали, что коэффициенты разложения (П.6) задаются формулами

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{N} \sum_{x=0}^{2N-1} f(x) \cos \frac{\pi}{N} kx \quad (k = 0, 1, \dots, N), \\ b_k &= \frac{1}{N} \sum_{x=0}^{2N-1} f(x) \sin \frac{\pi}{N} kx \quad (k = 1, \dots, N-1). \end{aligned}$$

Для периодической функции $f(x)$ с периодом $2N$ будем обозначать a_k и b_k ее коэффициенты Фурье

$$a_k = \frac{1}{N} \int_0^{2N} f(t) \cos \frac{\pi}{N} kt dt; \quad b_k = \frac{1}{N} \int_0^{2N} f(t) \sin \frac{\pi}{N} kt dt, \quad (\text{П.12})$$

а через A_k и B_k коэффициенты конечного ряда Фурье, построенные по значениям в $2N$ точках: $0, 1, 2, \dots, 2N-1$:

$$A_k = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{2N-1} f(i) \cos \frac{\pi}{N} ki; \quad B_k = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{2N-1} f(i) \sin \frac{\pi}{N} ki. \quad (\text{П.13})$$

Покажем теперь, что между "дискретными" и "непрерывными" коэффициентами существуют следующие соотношения:

$$A_0 = a_0 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} a_{2Nj},$$

$$A_k = a_k + \sum_{j=1}^{\infty} (a_{2Nj-k} + a_{2Nj+k}), \quad (\text{П.14})$$

$$B_k = b_k + \sum_{j=1}^{\infty} (-b_{2Nj-k} + b_{2Nj+k}).$$

Для доказательства просуммируем обе части ряда Фурье

$$y(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos \frac{\pi}{N} kt + b_k \sin \frac{\pi}{N} kt \right) \quad (\text{П.15})$$

при $t = 0, 1, 2, \dots, 2N - 1$ и получим

$$\sum_{t=0}^{2N-1} y(t) = \frac{a_0}{2} \sum_{t=0}^{2N-1} 1 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{t=0}^{2N-1} \cos \frac{\pi}{N} kt + \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sum_{t=0}^{2N-1} \sin \frac{\pi}{N} kt.$$

Если $k \neq 0, 2N, 4N, \dots$, то

$$\sum_{t=0}^{2N-1} \cos \frac{\pi}{N} kt = 0; \quad \sum_{t=0}^{2N-1} \sin \frac{\pi}{N} kt = 0.$$

При $k = 0, 2N, 4N, \dots$, полагая $k = 2Nj$, получим

$$\sum_{t=0}^{2N-1} \cos \frac{\pi}{N} (2Nj) t = \sum_{t=0}^{2N-1} 1 = 2N; \quad \sum_{t=0}^{2N-1} \sin \frac{\pi}{N} (2Nj) t = \sum_{t=0}^{2N-1} 0 = 0.$$

Отсюда, используя значения непрерывных (П.12) и дискретных (П.13) коэффициентов Фурье, получим

$$2N \frac{A_0}{2} = 2N \frac{a_0}{2} + 2N \sum_{j=1}^{\infty} a_{2Nj},$$

что совпадает с первым из уравнений (П.14). Если умножить (П.15) на $\cos \frac{\pi}{N} mt$ ($0 < m < N$) и просуммировать, то аналогично получим

$$\begin{aligned}
 NA_m &= \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{t=0}^{2N-1} \cos \frac{\pi}{N} kt \cos \frac{\pi}{N} mt = \\
 &= \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{t=0}^{2N-1} \frac{1}{2} \left[\cos \frac{\pi}{N} (k+m)t + \cos \frac{\pi}{N} (k-m)t \right].
 \end{aligned}$$

Внутренняя сумма не равна нулю лишь при $k+m=2Nj$ и $k-m=2Ni$, откуда следует второе из соотношений (П.14); третье соотношение получается умножением на $\sin \frac{\pi}{N} mt$ и суммированием.

Соотношения (П.14) между коэффициентами разложений на непрерывном и дискретном множестве точек ясно показывают явление, которое можно назвать "мимикрия частот". Если мы представим частоты в виде точек бесконечной прямой, то явление "мимикрии" заключается в том, что прямая как бы складывается гармошкой. Первая частота, на которой происходит перегиб прямой, называется "частотой наложения" или "частотой Найквиста" и соответствует значению $k=N$. Последующие наложения будут происходить через такой же промежуток. Все точки кривой на рис. 20, расположенные над одной и той же точкой оси частот, в результате выборки проявляют себя как одна частота. Однажды произведя выборку, мы уже не сможем снова разделить частоты, которые "мимикрировали" друг на друга. На саму частоту наложения попадем один раз в два цикла, когда $\sin \pi t = 0$, $\cos \pi t = (-1)^t$, где t — целое число.

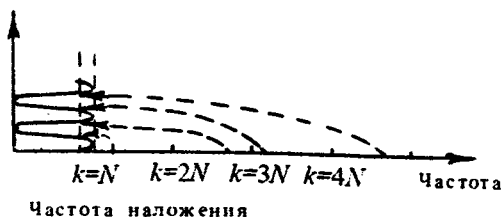


Рис. 20. Смешение частот

Отметим важный факт, что если у $y(t)$ отличны от нуля не более N первых гармоник, то формула

$$f(t) = \frac{A_0}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} \left(A_k \cos \frac{\pi}{N} kt + B_k \sin \frac{\pi}{N} kt \right) + \frac{A_N}{2} \cos \pi t,$$

где A_k и B_k задаются суммами (П.13), дает точное значение функции при любых t , $0 \leq t \leq 2N$, и наоборот, формулы (П.13) дают точные значения первых N коэффициентов Фурье.

Особенно интересно, что для таких функций при $k = N$, т. е. тогда, когда $\cos \frac{\pi}{N} kt$ в соседних точках меняет знак, формула (П.13) для A_k , совпадающая с составной формулой трапеций [57], дает точный результат, хотя формула трапеций в этом случае гарантирует точность лишь порядка h^4 . Представляет интерес также сравнение этих результатов с результатами, получающимися по методу Филона (см. [27], гл. 24).

Если коэффициенты непрерывного ряда Фурье уменьшаются при $N \rightarrow \infty$ довольно быстро, то коэффициент A_0 конечного ряда Фурье будет давать хорошую оценку интеграла $\int_0^{2N} y(t) dt = Na_0$ от периодической функции $y(t)$, поскольку из (П.14) следует, что ошибка, возникающая при оценке интеграла на основе равноотстоящих узлов, дается формулой $2 \sum_{j=1}^{\infty} a_{2Nj}$, в которой отражается неизбежное смешивание частот — результат дискретности узлов.

Быстрое преобразование Фурье (БПФ)

Будем рассматривать ряды Фурье от комплекснозначных функций $f(x)$ действительного аргумента x , периодических с периодом $2N$. Комплексные коэффициенты a_k и b_k определяются по тем же формулам (П.12). Если использовать комплексное представление тригонометрических функций

$$\cos \varphi = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}; \quad \sin \varphi = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i},$$

то получим ряд

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_k e^{i\frac{\pi}{N} kx}, \quad \text{где } c_k = \frac{1}{2N} \int_0^{2N} f(x) e^{-i\frac{\pi}{N} kx} dx.$$

Легко видеть, что

$$c_k = \begin{cases} \frac{a_k - ib_k}{2}, & k > 0, \\ \frac{a_0}{2}, & k = 0, \\ \frac{a_k + ib_k}{2}, & k < 0. \end{cases}$$

Заметим, что в комплексной форме существуют и положительные и отрицательные частоты k : для каждой положительной частоты k мы заменили две функции, синус и косинус, единой экспоненциальной, но имеющей как положительную, так и отрицательную частоту.

Перейдем к конечному преобразованию на множестве точек $x = 0, \dots, 2N - 1$:

$$c_k = \frac{1}{2N} \sum_{x=0}^{2N-1} f(x) e^{-i\frac{\pi}{N} kx},$$

или, если обозначить $N_1 = 2N$ и в дальнейшем индекс опускать, то

$$c_k = \frac{1}{N} \sum_{x=0}^{N-1} f(x) e^{-i\frac{2\pi}{N} kx}. \quad (\text{П.16})$$

Эта формула и называется "прямым конечным преобразованием Фурье". Заметив, что

$$e^{i\frac{2\pi}{N}(N-k)} = e^{i\frac{2\pi}{N}k},$$

восстановление функции по ее коэффициентам Фурье

$$f(x) = \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} c_k e^{i\frac{2\pi}{N} kx}$$

достигается точно таким же алгоритмом, как и (П.16), если разместить коэффициенты c_k в определенном порядке:

$$c_0, c_1, \dots, c_{N/2-1}, c_{N/2}, c_{-N/2+1}, c_{-N/2+2}, \dots, c_{-2}, c_{-1} \quad (\text{П.17})$$

и соответственно переобозначить

$$s_0, s_1, \dots, s_{N/2-1}, s_{N/2}, s_{N/2+1}, s_{N/2+2}, \dots, s_{N-2}, s_{N-1}. \quad (\text{П.18})$$

Тогда

$$f(x) = \sum_{k=0}^{N-1} s_k e^{i \frac{2\pi}{N} kx}. \quad (\text{П.19})$$

Эта формула является "обратным конечным преобразованием Фурье".

В вычислительной литературе практически во всех существующих стандартных программах множитель $1/N$ перенесен из формулы (П.17) в (П.19), и поэтому, чтобы не отличаться от общепринятых обозначений, будем в дальнейшем называть

$$s_k = \sum_{n=0}^{N-1} f_n e^{-i \frac{2\pi}{N} kn} \quad (\text{П.20})$$

"прямым дискретным преобразованием Фурье", а

$$f_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} s_k e^{i \frac{2\pi}{N} kn} \quad (\text{П.21})$$

"обратным дискретным преобразованием Фурье". То, что (П.20) и (П.21) парны относительно преобразования, т. е. что подстановка s_k из (П.20) в (П.21) дает снова f_n и наоборот, вытекает из следующего соотношения ортогональности:

$$\sum_{k=0}^{N-1} e^{i \frac{2\pi}{N} nk} e^{-i \frac{2\pi}{N} mk} = \begin{cases} N, & n = m \pm N_j, \\ 0, & n \neq m \pm N_j. \end{cases}$$

Показательная функция $e^{i \frac{2\pi}{N} kn}$ как функция n и k периодична с периодом N , т. е. $e^{i \frac{2\pi}{N} nk} = e^{i \frac{2\pi}{N} (n+N)k} = e^{i \frac{2\pi}{N} n(k+N)}$. Непосредственным следствием этого является то, что последовательности s_k и f_n , определяемые их преобразованиями (П.20) и (П.21), периодичны с периодом N . Отсюда следует, что последовательности s_k и f_n на основе определений (П.20) и (П.21) могут рассматриваться для всех целых чисел. Поэтому получаем последовательности f_n ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) и s_k ($k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), где

$$f_n = f_{N+j+n}; s_k = s_{N+j+k}; j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{П.22})$$

Периодическое распространение (П.22) конечной последовательности на бесконечный интервал является удобным. Оно упрощает доказательства свойств дискретного преобразования Фурье и позволяет представить результаты в более обозримом виде. Конечные последовательности могут быть восстановлены путем выбора значений бесконечной последовательности в любых последовательных N точках, в частности в N точках $0, 1, \dots, N-1$.

В дальнейшем широко будут использоваться следующие равенства, вытекающие как частный случай из (П.22):

$$s_{-k} = s_{N-k}; f_{-n} = f_{N-n}.$$

Следующее соглашение также будет широко использоваться. С помощью двусторонней стрелки, соединяющей две последовательности ($s_k \leftrightarrow f_n$), будет указываться то, что эти две последовательности пары при дискретном преобразовании Фурье. Приведем теперь без доказательства некоторые элементарные свойства дискретного преобразования Фурье (ДПФ). Доказательства просты и могут быть проведены в качестве упражнений самим читателем.

Фундаментальным свойством ДПФ будет то, что это преобразование является линейной операцией, т. е. если есть две пары последовательностей

$$s_k^1 \leftrightarrow f_n^1 \quad \text{и} \quad s_k^2 \leftrightarrow f_n^2$$

то для любых комплексных констант c и d

$$cs_k^1 + ds_k^2 \leftrightarrow cf_n^1 + df_n^2.$$

Если $s_k \leftrightarrow f_n$ то $s_{-k} \leftrightarrow f_{-n}$.

Последовательность s_k называется четной, если $s_k = s_{-k}$.

Последовательность s_k называется нечетной, если $s_k = -s_{-k}$.

Последовательность s_k четна тогда и только тогда, когда f_n четна.

Последовательность s_k нечетна тогда и только тогда, когда f_n нечетна.

Обозначим через \bar{s}_k комплексно-сопряженную величину к s_k .

Если $s_k \leftrightarrow f_n$, то $\bar{s}_{-k} \leftrightarrow \bar{f}_n$ и $\bar{s}_k \leftrightarrow \bar{f}_{-n}$.

s_k действительна тогда и только тогда, когда $f_n = \bar{f}_{-n}$
 (= \bar{f}_{N-n}).

f_n действительна тогда и только тогда, когда $s_k = \bar{s}_{-k}$
 (= \bar{s}_{N-k}).

s_k чисто мнима тогда и только тогда, когда $f_n = -\bar{f}_{-n}$
 (= $-\bar{f}_{N-n}$).

f_n чисто мнима тогда и только тогда, когда $s_k = -\bar{s}_{-k}$
 (= $-\bar{s}_{N-k}$).

Следующее утверждение описывает поведение фурье-пар, когда одна из последовательностей сдвинута по времени на j или по частоте на n .

Если $s_k \leftrightarrow f_n$, то $s_{k-j} \leftrightarrow e^{+i\frac{2\pi}{N}nj} f_n$ и $e^{-i\frac{2\pi}{N}kj} s_k \leftrightarrow f_{n-j}$.

Компактность и простота утверждений здесь достигнуты именно за счет введения бесконечных последовательностей. Отметим, что сдвиг последовательности s_k вдоль переменной k изменяет фазу, но не амплитуду компонент последовательности f_n .

Определим последовательность δ_k следующим образом:

$$\delta_k = \begin{cases} 1, & \text{если } k = 0 \pm Nj, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Тогда имеем $N\delta_k \leftrightarrow 1$; $1 \leftrightarrow \delta_n$.

Физической интерпретацией этого утверждения является то, что добавление постоянной составляющей к s_k влияет только на компоненту нулевой частоты f_0 последовательности f_n .

$$\text{Если } s_k \leftrightarrow f_n, \text{ то } s_0 \leftrightarrow \sum_{k=0}^{N-1} f_n \text{ и } f_0 \leftrightarrow \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} s_k.$$

Этот результат полезен для статистических применений. Если f_n — множество наблюдений случайной величины, то s_0/N — выборочное среднее.

$$\text{Если } s_k \leftrightarrow f_n, \text{ то } \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} |f_n|^2 = \sum_{k=0}^{N-1} |s_k|^2.$$

Это утверждение носит название "равенство Парсеваля" (см. (П.10)).

Непосредственное применение формулы (П.20) должно потребовать N^2 операций. Однако, если число N является произведением нескольких целых чисел, то имеется окольный путь вычисления s_k , требующий существенно меньшего числа операций и носящий название БПФ.

Заметим, что БПФ — это прежде всего эффективный численный алгоритм. Используется он или нет — на основных выводах статистического исследования это не скажется. Цель этого преобразования — радикальным образом сократить количество вычислений.

В настоящее время имеется несколько различных алгоритмов БПФ, которые приводят примерно к одинаковому сокращению времени вычислений. Здесь коротко изложим лишь один из них, а именно алгоритм, основанный на итеративном процессе вычисления коэффициентов Фурье числового ряда через коэффициенты Фурье четных и нечетных элементов этого ряда (метод Кули — Тьюки). Наиболее простой реализация этого метода становится в случае, когда число членов ряда является степенью числа 2: $N = 2^M$.

Будем исходить из дискретного преобразования Фурье в форме (П.20), (П.21). Разделим весь числовой ряд на две группы — с четными и нечетными номерами n . Тогда сумма, определяющая коэффициенты Фурье s_k , запишется так:

$$\begin{aligned} s_k &= \sum_{n=0}^{N-1} f_n e^{-i \frac{2\pi}{N} kn} = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2n} e^{-i \frac{2\pi}{N} k2n} + \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2n+1} e^{-i \frac{2\pi}{N} k(2n+1)} = \\ &= \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2n} e^{-i \frac{2\pi}{N/2} kn} + e^{-i \frac{2\pi}{N} k} \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2n+1} e^{-i \frac{2\pi}{N/2} kn}. \end{aligned} \quad (\text{П.23})$$

Пусть k меняется от 0 до $N/2 - 1$. Тогда величины

$$A_k = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2n} e^{-i \frac{2\pi}{N/2} kn}, \quad B_k = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2n+1} e^{-i \frac{2\pi}{N/2} kn} \quad (\text{П.24})$$

являются коэффициентами Фурье двух рядов, содержащих каждый по $N/2$ членов и полученных из ряда f_n выбором четных или нечетных номеров n . Из (П.23) и (П.24) получаем

$$S_k = A_k + e^{-i\frac{2\pi}{N}k} B_k; \quad 0 \leq k \leq N/2 - 1.$$

Для получения остальных коэффициентов s_k воспользуемся тем, что A_k и B_k есть периодически повторяющиеся функции с периодом $N/2$:

$$A_{k+N/2} = A_k; \quad B_{k+N/2} = B_k.$$

Тогда для остальных $N/2$ коэффициентов можно написать:

$$\begin{aligned} s_{k+N/2} &= \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2n} e^{-i\frac{2\pi}{N/2}(k+N/2)n} + \\ &+ e^{-i\frac{2\pi}{N}(k+N/2)} \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} f_{2n+1} e^{-i\frac{2\pi}{N/2}(k+N/2)n} = \\ &= A_k + e^{-i\frac{2\pi}{N}k - i\pi} B_k = A_k - e^{-i\frac{2\pi}{N}k} B_k. \end{aligned}$$

Таким образом, в общем случае справедлива формула

$$s_{\left\{ \begin{matrix} k \\ k+N/2 \end{matrix} \right\}} = A_k \pm e^{-i\frac{2\pi}{N}k} B_k. \quad (\text{П.25})$$

Итак, нахождение коэффициентов Фурье ряда длиной N сводится к вычислению коэффициентов Фурье двух рядов длины $N/2$ с четными и нечетными номерами n . При вычислении коэффициентов A_k и B_k можно поступить точно таким же образом, подразделяя каждый из получившихся рядов, перенумерованных заново, в свою очередь на два ряда длиной $N/4$, состоящих из четных и нечетных номеров, и т. д. Если N есть степень числа 2, то, продолжая эту процедуру, в конце концов придем к подразделению исходного ряда на $N/2$ рядов, каждый из которых состоит из двух членов, причем коэффициенты Фурье A_k и B_k этого ряда, согласно (П.24), просто равны самим значениям ряда f_n .

Таким образом, применяя рекуррентную формулу (П.25) к исходному ряду f_n (должным образом переставленному), можно за $M = \log_2 N$ шагов получить все N коэффициентов Фурье s_k . На каждом шаге требуется примерно N сложений и умножений (на $e^{-i\frac{2\pi}{N}kn}$), так что всего потребуется $\sim N \log_2 N$ операций вместо N^2 ,

требуемых при умножении вектора f_n на матрицу из $(e^{-i\frac{2\pi}{N}kn})$ (см. (П.20)).

Метод Кули — Тьюки имеет то дополнительное преимущество, что промежуточные вычисления на всех M этапах можно хранить в тех же ячейках памяти, в которых помещаются первоначальные значения ряда f_k . Результирующий набор коэффициентов s_k получается в тех же ячейках. Кроме уменьшения числа необходимых операций в $N / \log_2 N$ раз, метод БПФ приводит к уменьшению среднеквадратических ошибок во столько же раз (за счет округления), т. е. метод БПФ дает более точные значения коэффициентов Фурье.

Свертки

В теории рядов Фурье справедливы следующие утверждения.

Пусть $f(x)$ и $g(x)$ — две комплекснозначные периодические с периодом N функции, заданные своими разложениями в ряды Фурье:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_k e^{i\frac{2\pi}{N}kx}; \quad g(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} d_k e^{i\frac{2\pi}{N}kx}.$$

Свертка двух таких функций определяется соотношением

$$h(x) = \int_0^N f(s) g(x-s) ds.$$

Коэффициенты Фурье свертки $h(x)$ равны произведению коэффициентов Фурье функций $f(x)$ и $g(x)$:

$$e_k(h) = c_k d_k.$$

Коэффициенты Фурье для произведения $v(x) = f(x) g(x)$, если они существуют, задаются формулой

$$c_m(v) = c_m(f \cdot g) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_k d_{m-k} \quad (\text{П.26})$$

Аналогичные утверждения справедливы для периодических числовых последовательностей s_k и f_n (П.22).

Если $s_k^1 \leftrightarrow f_n^1$ и $s_k^2 \leftrightarrow f_n^2$, то

$$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-i} s_j^1 s_{k-j}^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} s_{k-j}^1 s_j^2 \leftrightarrow f_n^1 f_n^2 \quad (\text{П.27})$$

$$\text{и } s_k^1 s_k^2 \leftrightarrow \sum_{m=0}^{N-1} f_m^1 f_{n-m}^2 = \sum_{m=0}^{N-1} f_{n-m}^1 f_m^2. \quad (\text{П.28})$$

Важно отметить, что обе "свертки", определяемые в (П.27) и (П.28), циклические, т. е. когда одна последовательность проходит через конец другой, появляются не нули, а периодическое продолжение последовательности. В этом состоит свойство продолжения для дискретного преобразования Фурье, которое было отмечено ранее.

Если у $f(x)$ отличны от нуля только первые M_1 коэффициентов ($c_n = 0$ при $|n| > M_1$), а у $g(x) - M_2$, то из (П.26) следует, что у произведения $f(x)g(x)$ коэффициенты $c_m(fg) = 0$ при $|m| > M_1 + M_2$. Так как для таких функций, если $M_1 < N$ и $M_2 < N$, коэффициенты Фурье, посчитанные через интегралы (П.12) и суммы (П.13), согласно (П.14), совпадают, то циклическая свертка (П.20) также дает точный результат (естественно, с точностью до множителя $1/N$).

Если заданы первые N коэффициентов Фурье функций $f(x)$ и $g(x)$ и нужно найти по возможности точные значения коэффициентов Фурье их произведения $f(x)g(x)$, то поступаем следующим образом: добавляем по N нулевых коэффициентов в спектры c_k и d_k (добавлять нужно, согласно (П.17) и (П.18), между позициями с номерами $N/2$ и $N/2 + 1$), затем по (П.21), но с двойным числом гармоник, восстанавливаем значения функций $f(x)$ и $g(x)$ на том же интервале, но с половинным шагом, в $2N$ точках; перемножаем их и от произведения с параметром $2N$, согласно (П.20), находим точные значения коэффициентов Фурье произведения.

Отметим, что по ходу рассуждений мы получили возможность быстрой и точной интерполяции функции в промежуточных точках (с шагом $h/2$). Для этого исходную функцию преобразуем по БПФ, добавляем получившийся спектр нулями, а затем по (П.21) с $N_1 = 2N$ восстанавливаем функцию в $2N$ точках с шагом $h = h/2$ от исходного.

Теоремы Котельникова и Агеева

Пусть задана $f(t)$, $-\infty < t < \infty$.

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-ikt} dt, \quad f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikt} dk. \quad (\text{П.29})$$

Теорема Котельникова (Шеннона). Предположим, что функция $g(k)$ достаточно быстро убывает вне некоторого интервала $|k| > \frac{\Omega}{2}$ (выше граничной частоты $\Omega/2$). Тогда функцию $f(t)$ (временной процесс) можно полностью описать набором дискретных значений этой функции (процесса) в точках $t_n = \frac{2\pi}{\Omega} n$, и

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f\left(n \frac{2\pi}{\Omega}\right) \frac{\sin\left(\frac{\Omega}{2} t - \pi n\right)}{\frac{\Omega}{2} t - \pi n} \quad (\text{П.30})$$

(частота Ω называется частотой Найквиста) [61].

Подставляя (П.30) в (П.29) и производя интегрирование по t , получим

$$g(k) = \frac{1}{\Omega} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f\left(n \frac{2\pi}{\Omega}\right) e^{-i\frac{2\pi}{\Omega} kn}.$$

Так как $f(t)$ убывает при $|t| \rightarrow \infty$, то для приближенного вычисления $g(k)$ можно ограничиться конечной суммой. Пусть число членов этой суммы равно N . Тогда функцию (процесс) можно описать достаточно полно с помощью N значений $g(k)$ (спектра), разнесенных по частоте на $\Delta k = \frac{\Omega}{N}$.

Если $g(k)$ финитна (т. е. $g(k) = 0$ при $|k| > \frac{\Omega}{2}$), то $f(t)$ является целой функцией, т. е. $f(t) \neq 0$ ни на каком интервале, а следовательно, не является финитной.

Если сумма у нас конечна, то точек отсчета $t_n = n \Delta t = n \frac{2\pi}{\Omega}$

с отличными от нуля значениями $f_n = f\left(n \frac{2\pi}{\Omega}\right)$ конечное число и они занимают конечный интервал времени $T = (n_2 - n_1) \Delta t = (n_2 - n_1) \frac{2\pi}{\Omega}$.

Такой сигнал точно восстанавливается по $N = n_2 - n_1 + 1$ значениям f_n в точках отсчетов:

$$N = 2FT + 1 \approx 2FT,$$

где $F = \frac{\Omega}{2\pi}$ — ширина спектра сигнала в обычных (не круговых) частотах. Часто, к сожалению, это равенство трактуется неточно: например так, что отрезок сигнала длительности T , спектр которого лежит ниже частоты F (т. е. $|\omega| < T$), можно однозначно определить, задав $2FT$ отсчетов через интервалы $\Delta t = \frac{1}{2F}$. Это верно лишь в том случае, когда все остальные отсчеты (значения $f(t_n)$) равны нулю, т. е. фактически тоже заданы. Заметим, что в промежутках между точками отсчета сигнал не равен нулю. Из формулы (П.30) видно, что $f(t)$ ($t \neq t_n = n \Delta t$) определяется всеми отсчетами (в том числе и нулевыми), т. е. для точного восстановления сигнала нужно знать бесконечное множество его отсчетных значений f_n .

Часто приводится ошибочное пояснение этой теоремы. Поскольку спектр сигнала содержит частоты не выше F , то за время, равное половине самой высокой частоты спектра ($\Delta t = \frac{1}{2F}$), сигнал не может претерпеть существенных изменений. Поэтому кривая $f(t)$ должна изменяться между точками отсчета плавно, и, как следует из (П.30), определяется однозначно.

Однако это объяснение ошибочно.

Теорема Агеева. Пусть на интервале (t_1, t_2) задана любая непрерывная функция $f(t)$, и пусть задана произвольная частота F . Тогда можно построить функцию, спектр которой не содержит частот выше F , сколь угодно близкую (в среднеквадратическом смысле) к $f(t)$ на интервале (t_1, t_2) [62].

Пример: $t_1 = 0, t_2 = 1, F = 1, f(t) = \sin 10^6 t$ и ее можно продолжить вне отрезка $[0, 1]$ так, что спектр не "вылезет" за единицу (т. е. за

$\sin Ft$). Здесь функцию, имеющую на заданном интервале длиной в единицу 10^6 колебаний (смен знака), представляем в виде суммы функций, не имеющих на нем ни одного колебания (смены знака) [61].

Ослабленная (дискретная) теорема Агеева. Пусть на интервале (t_1, t_2) заданы N точек и значения величины $f(t)$ в этих точках. Тогда, каково бы ни было конечное число N , при сколь угодно малом числе F , можно построить сколько угодно различных функций $f(t)$, принимающих заданные значения в указанных точках, спектры которых не содержат частот выше F [63].

Парадокс здесь тот же. Как и в предыдущем примере, на интервале $t_1 = 0, t_2 = 1$, при $F = 1$ можно задать $\omega = 10^6$ и взять $f(t) = \sin \omega t$.

Для простоты выберем $t_i, i = 1, \dots, N$ так, чтобы $t_i \neq n \Delta t$ ни при каком n . Выберем произвольно N целых чисел n_j и обозначим неизвестные значения искомой функции $f(t)$ в точках $n_j \Delta t (j = 1, \dots, N)$ через $f_j = f(n_j \Delta t)$. С помощью ряда Котельникова (П.30) строим $f(t)$ такую, что:

- 1) ее спектр не содержит частот выше F ,
- 2) она принимает заданные значения f_j в точках t_j .
- 3) равна нулю в точках $n \Delta t$ при всех $n \neq n_j$.

По условию 3 ряд Котельникова вырождается в конечную сумму из N слагаемых

$$f(t) = \sum_{j=1}^N f_j \frac{\sin 2\pi F (t - n_j \Delta t)}{2\pi F (t - n_j \Delta t)}; \quad \Delta t = \frac{1}{2F}.$$

Здесь f_j — неизвестные, подлежащие определению. Для их нахождения подставим $t = t_i$ — заданные нам точки:

$$f(t_i) = \sum_{j=1}^N f_j \frac{\sin 2\pi F (t_i - n_j \Delta t)}{2\pi F (t_i - n_j \Delta t)}.$$

Для нахождения f_j необходимо и достаточно, чтобы матрица коэффициентов при f_j была невырожденной. Так как n_j мы задавали сами, то в случае вырожденности матрицы достаточно изменить хотя бы одно значение n_j для выполнения необходимого и достаточного

условия. Для каждого набора n_j найдем функцию $f(t)$. Меняя наборы n_j , можно получить сколько угодно функций, удовлетворяющих условиям теоремы. Все они будут различны, поскольку их значения в точках отсчета не совпадают.

Следствие: Существует бесконечное число функций, спектр которых не содержит частот выше F , принимающих заданные значения f_i ($i = 1, \dots, N$) в заданных точках отсчета $t_i = n_i \Delta t$ ($\Delta t = \frac{1}{2F}$).

Кроме того, можно отказаться от условия 3, задав в этих точках произвольные значения $f(t)$.

Быстрое преобразование Ханкеля

Преобразование Ханкеля порядка ν действительной или комплексной функции $f(r)$ на интервале $(0, \infty)$ определяется как

$$HFf(k) = \int_0^{\infty} r f(r) J_{\nu}(kr) dr \quad \text{для } k > 0, \quad (\text{П.31})$$

где J_{ν} — функция Бесселя первого рода порядка ν . Рассмотрим только действительные и положительные ν . Отметим, что преобразование Ханкеля является взаимно обратным. Замена (см. [60])

$$r = r_0 e^{-y} \quad \text{и} \quad k = k_0 e^x \quad (\text{П.32})$$

даёт

$$HFf(k_0 e^{-y}) = r_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2y} f(r_0 e^{-y}) J_{\nu}(r_0 k_0 e^{x-y}) dy. \quad (\text{П.33})$$

Выражение в правой части представляет собой свертку функций $e^{-2y} f(r_0 e^{-y})$ и $J_{\nu}(r_0 k_0 e^{x-y})$, для вычисления которой существует эффективный алгоритм, основанный на БПФ.

Функция f задается в N точках, где N есть степень двойки. Переменные x и y дискретизируются с постоянным шагом δ : $x, y = j\delta$ для $j = 0, 1, \dots, N-1$. Дискретная аппроксимация преобразования Ханкеля функции f задается выражением

$$HFf(k_0 e^{-l\delta}) = r_0^2 \delta \sum_{m=0}^{N-1} e^{-2m\delta} f(r_0 e^{-m\delta}) J_\nu(r_0 k_0 e^{(l-m)\delta}).$$

Использование дискретного (циклического) преобразования Фурье для вычисления непрерывной (нециклической) свертки требует расширения области определения функции f и доопределения её N нулями для отрицательных значений m . Это достигается определением

$$b_m = \begin{cases} 0, & \text{при } m = -N, \dots, -1, \\ e^{-2m\delta} f(r_0 e^{-m\delta}), & \text{при } m = 0, \dots, N-1, \end{cases} \quad (\text{П.34})$$

и

$$c_j = r_0^2 \delta J_\nu(r_0 k_0 e^{j\delta}) \quad \text{при } j = -N, \dots, N-1. \quad (\text{П.35})$$

Результирующее выражение

$$a_j = \sum_{m=0}^{N-1} b_m c_{j-m} \quad \text{при } j = -N, \dots, N-1 \quad (\text{П.36})$$

и есть $2N$ -членная дискретная циклическая свертка, которая может быть вычислена с помощью применения $2N$ -точечного БПФ к b и c , перемножения результатов и обратного преобразования. Первые N значений результата отбрасываются, а N значений $a_j = HFf(k_0 e^{j\delta})$ при $j = 0, \dots, N-1$ дают приближенное значение преобразования Ханкеля функции f . При многократном вычислении преобразования Ханкеля с одними и теми же параметрами образ Фурье функции c вычисляется, заносится в таблицу и сохраняется на время проведения вычислений.

Параметры N , δ , r_0 и k_0 выбираются по следующим критериям: параметр $r_0 = r_{\max}$ есть максимальное значение r в r -области. Соответственно $r_{\min} = r_0 e^{-(N-1)\delta}$ — минимальное значение r . Параметр $k_0 = k_{\min}$ есть минимальное значение k в k -области. Соответствующее $k_{\max} = k_0 e^{(N-1)\delta}$ — максимальное значение k . Параметры δ , r_0 , k_0 должны быть выбраны так, чтобы усеченные интервалы (r_{\min}, r_{\max}) и (k_{\min}, k_{\max}) содержали функции f (соответственно HFf) в r - (или k -) области. Значения r_{\max} и k_{\max} выбирают, основываясь на свойствах функции f , где требуемая точность может быть достигнута на пространственно-частотной полосе произведения $r_{\max} k_{\max}$. При

усечении есть ограничение, связанное с подвыбором функции Бесселя $J_\nu(r_0 k_0 e^x)$. Функция Бесселя J_ν имеет нули на расстоянии примерно равно π . Для адекватной выборки по крайней мере одна выбираемая точка должна находиться между двумя последовательными нулями функции J_ν . Это приводит к неравенству

$$\left| r_0 k_0 \left(e^{(N-1)\delta} - e^{(N-2)\delta} \right) \right| < \pi$$

или, приближенно,

$$r_0 k_0 e^{(N-1)\delta} \delta < \pi,$$

что может быть переписано как

$$r_{\max} k_{\max} \delta < \pi, \quad (\text{П.37})$$

и даёт критерий для определения δ . Как для функции Бесселя, так и для функции f выборка должна быть достаточно плотной. Расстояние между двумя последовательными выбираемыми точками функции f должно быть меньше $\left| e^{-m\delta} - e^{-(m+1)\delta} \right|$. Это расстояние должно быть меньше π/k_{\max} — минимального расстояния между двумя нулями функции f , представленной на логарифмической сетке. Легко видеть, что это условие ведёт к тому же самому критерию (П.37) для адекватной выборки для функции $f(r_0 e^{-\nu})$. Эмпирическое правило нахождения минимального значения сетки состоит в выборе первой сеточной точки так близко к нулю, чтобы минимальное расстояние между двумя значениями функции f на сетке было меньше

$$r_{\min} < \frac{\pi}{k_{\max}}.$$

Этот метод, предложенный в [60], хорошо работает при $\nu = 1, 2, \dots$. При $\nu = 0$ функции b_m в (П.34) и c_j в (П.35) становятся разрывными, поэтому конечные ряды Фурье от этих функций убывают медленно, и в результате свертка (П.37) даёт плохое приближение к (П.33). Воспользовавшись известными свойствами функций Бесселя, преобразуем (П.32) при $\nu = 0$:

$$\int_0^{\infty} J_0(kr) f(r) r dr = - \int_r^{\infty} f(\rho) \rho d\rho J_0(kr) \Big|_0^{\infty} -$$

$$- k \int_0^{\infty} J_1(kr) \int_r^{\infty} f(\rho) \rho d\rho dr.$$

Сделаем замену переменных под знаком интеграла:

$$k = k_0 e^x, \quad r = r_0 e^{-y}, \quad \rho = r_0 e^{-\tau}.$$

Получим

$$\int_0^{\infty} f(r) r dr - kr_0^3 \int_{-\infty}^{\infty} J_1(k_0 r_0 e^{x-y}) e^{-y} \int_{-\infty}^y f(r_0 e^{-\tau}) e^{-2\tau} d\tau dy.$$

Двойной интеграл представляет собой свертку и может быть вычислен с помощью преобразования Фурье:

$$\int_0^{\infty} f(r) r dr - kr_0^3 F^{-1} \left(F(J_1(k_0 r_0 e^y)) F \left(e^{-y} \int_{-\infty}^y f(r_0 e^{-\tau}) e^{-2\tau} d\tau \right) \right).$$

Отдельно посчитаем

$$F \left(e^{-y} \int_{-\infty}^y f(r_0 e^{-\tau}) e^{-2\tau} d\tau \right) = \int_{-\infty}^+ e^{-y} \int_{-\infty}^y f(r_0 e^{-\tau}) e^{-2\tau} d\tau e^{iky} dy.$$

Сменим порядок интегрирования

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^+ f(r_0 e^{-\tau}) e^{-2\tau} \int_{\tau}^+ e^{-y(1-ik)} dy d\tau = \\ & = \int_{-\infty}^+ f(r_0 e^{-\tau}) e^{-2\tau} \frac{e^{-\tau(1-ik)}}{1-ik} d\tau = \frac{1}{1-ik} F(f(r_0 e^{-\tau}) e^{-3\tau}). \end{aligned}$$

Теперь к медленно убывающему образу Фурье добавился дополнительный убывающий с ростом модуля k множитель, но появилось ограничение: функция $f(r) r^3$ должна стремиться к нулю при $r \rightarrow \infty$. Для повышения точности счёта образов Фурье функций можно воспользоваться оператором T из (7.29).

Литература

1. *Захаров В. Е.* Устойчивость периодических волн конечной амплитуды на поверхности глубокой жидкости // ЖПМТФ. 1968. Т. 6, № 3. С. 86–94.
2. *Кадошцев Б. Б.* Коллективные явления в плазме. М.: Наука, 1988. 304 с.
3. *Ахманов С. А., Сухоруков А. П., Хохлов Р. В.* Самофокусировка и дифракция света в нелинейной среде // УФН. 1967. Т. 93, № 1. С. 19–70.
4. *Абловиц М., Сигур Х.* Солитоны и метод обратной задачи. М.: Мир, 1987. 480 с.
5. *Додд Р., Эйлвен Дж., Гиббон Дж., Моррис Х.* Солитоны и нелинейные волновые уравнения. М.: Мир, 1988. 696 с.
6. *Кузнецов Е. А.* Коллапс электромагнитных волн в плазме // ЖЭТФ. 1974. Т. 66, № 6. С. 2037–2047.
7. *Захаров В. Е.* Коллапс плазменных волн // ЖЭТФ. 1972. Т. 62, № 5. С. 1745–1759.
8. *Таланов В. И.* О самофокусировке волновых пучков в нелинейных средах // Письма в ЖЭТФ. 1965. Т. 2, № 5. С. 218–222.
9. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 620 с.
10. *Заславский Г. М., Сагдеев Р. З.* Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса. М.: Наука, 1988. 368 с.
11. *Власов С. Н., Петрищев В. А., Таланов В. И.* Усреднённое описание волновых пучков в линейных и нелинейных средах (метод моментов) // Изв. вузов. Радиофизика. 1971. Т. 14, № 9. С. 1353–1364.
12. *Власов С. Н., Таланов В. И.* Распределённый волновой коллапс в модели нелинейного уравнения Шредингера // Нелинейные волны. Динамика и эволюция. М.: Наука, 1989. С. 218–227.
13. *Kosmatov N. E., Shvets V. E. and Zakharov V. E.* Computer simulation of wave collapses in the nonlinear Schrödinger equation // Phys. Rev. D. 1991. 52, № 1. P. 16–35.

14. *Luc Berg'e*. Dynamical stability analysis of strong/weak wave collapses // *J. Math. Phys.* 1994. V. 35, № 11. P. 5765–5781.
15. *Chiao R. Y., Garmire E., Townes C. H.* Self-Trapping of Optical Beams // *Phys. Rev. Lett.* 1964. V. 13, P. 469–472.
16. *Холоднюк М., Клич А., Кубичек М., Марек М.* Методы анализа нелинейных динамических моделей. М.: Мир, 1991. 365 с.
17. *Dyachenko A. I., Pushkarev A. N., Shvets V. E. and Zakharov V. E.* Computer simulation of Langmuir collapse // *Phys. Rev. D.* 1991. V. 52. P. 78–102.
18. *Самарский А. А., Гулин А. Н.* Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. 416 с.
19. *Марчук Г. И.* Методы расщепления. М.: Наука, 1988. 264 с.
20. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1976. 528 с.
21. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989. 608 с.
22. *Жаблон К., Симон Ж. К.* Применение ЭВМ для численного моделирования в физике. М.: Наука, 1983. 238 с.
23. *Гохберг И. Ц., Крейн М. Г.* Введение в теорию несамосопряженных операторов. М.: Наука, 1965. 448 с.
24. *Горбачук В. И., Горбачук М. Л.* Граничные задачи для дифференциально-операторных уравнений. Киев: Наук. думка, 1989. 284 с.
25. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Т. 2: Гармонический анализ. Самосопряженность. М.: Мир, 1987. 296 с.
26. *Feit M. D., Fleck Y. A. and Steiger.* Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method // *J. Comput. Phys.*, 1982. V. 47, № 4. P. 412–433.
27. *Богомолов Я. Л., Пелиновский Е. Н., Юнаковский А. Д.* Сравнение различных вариантов спектрального метода расщепления для решения нелинейного уравнения Шредингера: Препринт ИПФ АН СССР № 275, Н. Новгород, 1990.
28. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. М.: ГИТТЛ. 1953. 680 с.
29. *Хемминг Р. И.* Численные методы. М.: Наука, 1968. 400 с.
30. *Фильченков С. Е., Фрайман Г. М., Юнаковский А. Д.* Неустойчивость периодических решений нелинейного уравнения Шредингера // *Физика плазмы.* 1987. Т. 13, № 8. С. 961–966.

31. *Литвак А. Г., Петрова Т. А., Сергеев А. М., Юнаковский А. Д.* Об одном типе самовоздействия в плазме // *Физика плазмы*. 1983. Т. 9, №3. С. 495–500.

32. *Жарова Н. А., Литвак А. Г., Петрова Т. А., Сергеев А. М., Юнаковский А. Д.* Коллапс и множественные дробления нелинейных волновых структур // *Изв. вузов. Радиофизика*. 1986. Т. 29, № 9. С. 1137–1142.

33. *Жарова Н. А., Литвак А. Г., Петрова Т. А., Сергеев А. М., Юнаковский А. Д.* О множественном дроблении волновых структур в нелинейной среде // *Письма в ЖЭТФ*. 1986. Т. 44, № 1. С. 12–15.

34. *Литвак А. Г., Сергеев А. М.* Высоочастотный нагрев плазмы /ИПФ АН СССР. Горький: 1983. С. 324.

35. *Litvak A. G., Petrova T. A., Sergeev A. M., Yunakovskiy A. D.* On the Self Effect of Two Dimentional Gravity Wave Packets on the Deep Water Surface // *Nonlinear and Turbulent Processes in Physics / Edited by R. Z. Sagdeev. Harwood Academic Publisyers. New York, 1984. V. II. P. 861–871.*

36. *Шварц Л.* Комплексные многообразия. Эллиптические уравнения. М.: Мир, 1964. 212 с.

37. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. 616 с.

38. *Шокин Ю. И.* Метод дифференциального приближения. Новосибирск: Наука, 1979. 222 с.

39. *Рудаков Л. И.* Торможение электронных пучков в плазме с высоким уровнем ленгмюровской турбулентности // *ДАН*. 1973. Т. 207, № 4, С. 821–824.

40. *Payne G. L., Nicholson D. R. and Downie R. M.* Numerical solution of the Zakharov Equations // *J. Comput. Phys.* 1983. V. 50, № 1. P. 482–498.

41. *Lonngren K. E., P'ecseli H. L., Juui Rasmussen J. and Thomsen K.* Transient effects of nonlinear wave propagation in magnetized plasmas // *Phys. Scr.* 1982, T. 2: 2: *Int. Conf. Plasma Phys., Göteborg (June 9–15, 1982).* P. 541–545. *Ibid.* On the transient effects of nonlinear wave propagation in magnetized plasmas. P. 546–547.

42. *Дегтярёв Л. М., Захаров В. Е., Рудаков Л. И.* Два примера коллапса ленгмюровских волн // *ЖЭТФ*. 1975. Т. 66, № 1. С. 115–126.

43. *Литвак А. Г., Фрайман Г. М., Юнаковский А. Д.* О самофо-

кусировке ленгмюровских колебаний // Письма в ЖЭТФ. 1974. Т. 19, № 1. С. 23–26.

44. Дегтярёв Л. М., Кона-Овдиенко А. А. Скалярная модель ленгмюровского коллапса // Физика плазмы. 1984. Т. 10, № 1. С. 9–20.

45. Барышев М. Ю., Юнаковский А. Д. Численный метод исследования скалярной модели ленгмюровского коллапса: Препринт ИПФ АН СССР № 105. Горький, 1984. 22 с.

46. Ланцош К. Практические методы прикладного анализа М.: ГИФМЛ, 1961. 524 с.

47. Колоколов А. А., Суков А. Н. О векторной теории самофокусировки. ЖПМТФ. 1977. № 6. С. 3–5.

48. Sack Ch. and Schamel H. SUNION—An Algorithm for One-Dimensional Laser Plasma Interaction // J. Comput. Phys. 1984. V. 53, № 3. P. 395–428.

49. Litvak A. G., Petrova T. A., Fraiman G. M., Sher E. M. and Yunakovsky A. D. Numerical simulation of wave collapses // Phys. Rev. D. 1991. V. 52, № 1. P. 36–48.

50. Завадский В. Ю. Моделирование волновых процессов. М.: Наука, 1991. 248 с.

51. Yunakovsky A. D. Numerical simulation of the Langmuir wave collapse dynamics. Part I. Theory // J. Comput. Phys. (to appear).

52. Sher E. M., Yunakovsky A. D. Numerical simulation of the Langmuir wave collapse dynamics. Part II. Numerical solutions // J. Comput. Phys. (to be published).

53. Дегтярёв Л. М., Крылов В. И. Метод численного решения задач динамики волновых полей с особенностями // ЖВМиМФ. 1977. Т. 17, № 6. С. 1523–1530.

54. Захаров В. Е., Кузнецов Е. А. Квазиклассическая теория трёхмерного волнового коллапса // ЖЭТФ. 1986. Т. 91, № 4 (10). С. 1310–1324.

55. Курант Р. Уравнения с частными производными. М.: Мир, 1964. 832 с.

56. Уилкинсон Дж. Х. Алгебраическая проблема собственных значений. М.: Наука, 1970. 564 с.

57. Swartz B. K. The Construction of Finite Difference Analyses of Some Finite Elements // Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations / Ed. G. De Boor. Academic Press, New York, 1974. P. 412–433.

58. *Melvyn Ciment, Stephen H. Leventhal and Bernard C. Weinberg.* The Operator Compact Implicit method for parabolic equations // J. Comput. Phys. 1978. V. 28, № 1. P. 135–166.

59. Математическое моделирование физических процессов: Вычислительные аспекты. Часть I: Метод. указ. ННПИ / Сост.: Юнаковский А. Д.; Н. Новгород, 1990. 77 с.

60. *Bob Bisseling and Ronnie Kosloff.* The Fast Hankel Transform as a tool in the solution of the time dtended Schrodinger equation // J. Comput. Phys. 1985. V. 55, № 1. P. 136–151.

61. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров / Изд. 4-е. М.: Наука, 1977. 832 с.

62. *Агеев Д. В.* Активная полоса частотного спектра функции времени // Труды ГПИ. 1955. Т. 11, № 1. С. 5–10.

63. *Финк Л. М.* Сигналы, помехи, ошибки... М.: Радио и связь, 1984. 256 с.

A. D. Yunakovsky

**SIMULATION
OF THE NONLINEAR SCHRÖDINGER EQUATION**

Abstract

The monograph is dedicated to the problem of mathematical simulation of nonlinear Schrödinger equation which is highly universal and is used in many fields of physics for description of the wave processes. The basic principles of construction of the approximate solutions are stated. The examples of these algorithms based on the splitting-up in physical processes are presented and validated by spectral and grid methods. For reading the proofs of properties of the used algorithms, it is sufficient to know the elements of the functional analysis. The necessary knowledge about Discrete Fourier Transform is given in appendix. This book is intended for specialists in the field of the physical processes, advanced students and postgraduates.