

ISSN 1561-2430 (Print)
ISSN 2524-2415 (Online)
УДК 519.63
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-4-413-424>

Поступила в редакцию 02.05.2019
Received 02.05.2019

А. Н. Гуревский

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕКУРСИВНЫХ ЦИФРОВЫХ ФИЛЬТРОВ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ВЫСОКИХ ПОРЯДКОВ ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Аннотация. Исследованы двухслойные разностные схемы высоких порядков для нестационарного уравнения Шредингера. С использованием методов цифровой обработки сигналов доказан критерий консервативности разностных схем любого порядка для уравнения Шредингера. С помощью достигнутых теоретических результатов вычислены аналитические выражения для коэффициентов разностной схемы восьмого порядка. Получены условия эквивалентности разностных схем восьмого порядка представлению в виде каскада всепропускающих цифровых фильтров первого порядка. На основе численного анализа показано превосходство разностной схемы восьмого порядка при решении линейного уравнения Шредингера над схемой повышенного порядка точности на шеститочечном шаблоне. На примере моделирования двухсолитонного решения нелинейного уравнения Шредингера посредством метода дробных шагов второго порядка точности установлено, что схемы высоких порядков не позволяют радикально улучшить точность полученного решения. Исследован вопрос о вычислительной сложности разностных схем высоких порядков. Полученные результаты могут быть использованы при конструировании эффективных численных алгоритмов численного анализа как линейных, так и нелинейных задач для уравнений шредингеровского типа при применении метода дробных шагов соответствующего порядка точности.

Ключевые слова: разностные схемы, восьмой порядок, уравнение Шредингера, рекурсивный цифровой фильтр, всепропускающий фильтр

Для цитирования. Гуревский, А. Н. Использование рекурсивных цифровых фильтров для построения разностных схем высоких порядков для нестационарного уравнения Шредингера / А. Н. Гуревский // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2019. – Т. 55, № 4. – С. 413–424. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-4-413-424>

A. N. Hureuski

Belarusian State University, Minsk, Belarus

USING IIR FILTERS TO BUILD HIGH-ORDER FINITE DIFFERENCE SCHEMES FOR THE UNSTEADY SCHRÖDINGER EQUATION

Abstract. High-order finite difference schemes for the time-dependent Schrödinger equation are investigated. Digital signal processing methods allowed proving the conservativeness of high-order finite difference schemes for the unsteady Schrödinger equation. The eighth-order scheme coefficients were found with the help of the proved theoretical results. The conditions for equivalence between the eighth-order finite difference scheme and the scheme in the form of a cascade of all-pass first-order filters were found. The numerical analysis of the proposed scheme was made. It was shown that the high-order finite difference schemes gave better results on solving the linear Schrödinger equations comparing to the well-known fourth-order scheme on the six-point stencil, however, the high-order schemes in couple with the second-order splitting algorithm to the nonlinear Schrödinger equation do not lead to a radical improvement in the quality of numerical results. Practical issues implementing the proposed numerical technique are considered. The obtained results can be used to construct efficient solvers for linear and nonlinear Schrödinger-type equations by applying the splitting schemes of adequate accuracy order.

Keywords: finite-difference schemes, eighth order, Schrödinger equation, IIR filter, all-pass filter

For citation. Hureuski A. N. Using IIR filters to build high-order finite difference schemes for the unsteady Schrödinger equation. *Vesti Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2019, vol. 55, no. 4, pp. 413–424 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-4-413-424>

Введение. Теория разностных схем гласит, что схемы высоких порядков должны обеспечить лучшую аппроксимацию дифференциальной задачи и, следовательно, давать лучшую точность решения [1]. Очевидно, что в общем случае схемы высоких порядков проигрывают схемам

более низких порядков с точки зрения вычислительной сложности, однако их повышенная точность позволяет выбирать намного более крупные шаги сетки по пространственным и эволюционным переменным, что в свою очередь компенсирует некоторый проигрыш в скорости работы. В связи с этим представляет интерес построение компактных разностных схем высоких порядков для нестационарного уравнения Шредингера.

Для уравнения Шредингера классической схемой считается двухслойная схема с весами на шеститочечном шаблоне [1]. При определенных соотношениях на параметры схемы она может обеспечивать четвертый порядок аппроксимации. Под высоким порядком в контексте уравнения Шредингера будем понимать порядок аппроксимации от шестого и выше.

Схемы высоких порядков в основном рассматривались для уравнения теплопроводности [2]. В [3] были рассмотрены компактные разностные схемы высоких порядков для уравнения теплопроводности и уравнения Шредингера. Примечательно, что во всех исследованиях построение схем высоких порядков производится одинаковым способом: аппроксимация невязки дискретной модели на заданном шаблоне методом неопределенных коэффициентов. В [4] было показано, что с не меньшим успехом можно использовать методы теории цифровой обработки сигналов для аппроксимации разностных схем. Также теория фильтров позволяет получать разностные схемы с заданными характеристиками как, например, консервативность [5].

В настоящей работе исследованы критерии консервативности двухслойных разностных схем для нестационарного уравнения Шредингера. Полученные теоретические результаты использованы для построения разностных схем восьмого порядка. Рассмотрена возможность применения схем высоких порядков при решении линейного уравнения Шредингера, а также при вычислении линейной части метода дробных шагов для нелинейного уравнения Шредингера.

Постановка задачи. Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in [-L, L], \quad (1)$$

с начальными и граничными условиями вида

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad u(-L, t) = u(L, t) = 0. \quad (2)$$

Пусть p – произвольное натуральное число. На прямоугольном $(4p + 2)$ -точечном шаблоне на равномерной сетке $\omega_x = \{x_k = -L + hk, k = \overline{1, N-1}, h = 2L/N, t_m = m\tau, m = \overline{0, 1, \dots}\}$ рассмотрим двухслойную разностную схему для задачи (1), (2):

$$i \frac{\hat{U}_k - U_k}{\tau} = - \frac{\sum_{j=-p}^p a_j \hat{U}_{k+j}}{h^2} - \frac{\sum_{j=-p}^p b_j U_{k+j}}{h^2}, \quad \hat{U}_0 = \hat{U}_N = 0, \quad (3)$$

причем $\forall j \in \overline{1, p} \ a_{-j} = a_j, \ b_{-j} = b_j; \ a_j, b_j \in \mathbb{C}, \ |a_p| + |b_p| \neq 0$.

Здесь $U_k = U(x_k, t_m)$, $\hat{U}_k = U(x_k, t_{m+1})$, набор коэффициентов $\{a_j\}$ используется на верхнем слое разностной схемы, а набор $\{b_j\}$, соответственно, на нижнем. Отметим, что данное определение является обобщением известной двухслойной разностной схемы с весами на шеститочечном шаблоне [1].

В работах [4–6] была показана связь между разностными схемами и рекурсивными цифровыми фильтрами. Так, полагая

$$r = \frac{\tau}{h^2} > 0,$$

передаточная функция цифрового фильтра, соответствующего разностной схеме (3), может быть представлена в виде

$$H_{FD}(\omega) = \frac{1 + ir \left(b_0 + 2 \sum_{j=1}^p b_j \cos j\omega \right)}{1 - ir \left(a_0 + 2 \sum_{j=1}^p a_j \cos j\omega \right)}, \quad -\pi \leq \omega < \pi. \quad (4)$$

Несложно видеть, что для консервативности схемы (3) требуется, чтобы $|H_{FD}(\omega)| \equiv 1$, что в свою очередь означает, что цифровой фильтр относится к классу всепропускающих. Покажем, что для выполнения данного условия необходимо и достаточно, чтобы выполнялось следующее утверждение:

$$\forall j \in \overline{0, p} \quad b_j = \overline{a_j}.$$

В данной записи горизонтальная черта над соответствующим коэффициентом разностной схемы обозначает комплексное сопряжение. Предварительно докажем две вспомогательные леммы.

Лемма 1. *Рекурсивный цифровой фильтр n -го порядка является всепропускающим тогда и только тогда, когда количество нулей совпадает с количеством полюсов, значения нулей являются обратными, комплексно-сопряженными значениям соответствующих полюсов, модуль коэффициента усиления фильтра равен произведению модулей всех полюсов.*

Доказательство. Передаточная функция рекурсивного цифрового фильтра может быть записана в следующем виде [7]:

$$H(z) = k \frac{\prod_{j=1}^m (1 - z_j z^{-1})}{\prod_{j=1}^n (1 - p_j z^{-1})}, \quad (5)$$

где $\{z_j\}$ – нули фильтра, $\{p_j\}$ – полюса фильтра, $k \in \mathbb{C}$ – коэффициент усиления. По определению всепропускающего фильтра $|H(e^{i\omega})| \equiv 1$, что равносильно следующей цепочке преобразований:

$$\begin{aligned} |H(e^{i\omega})| \equiv 1 &\Leftrightarrow H(e^{i\omega}) \overline{H(e^{i\omega})} \equiv 1 \Leftrightarrow |k|^2 \frac{\prod_{j=1}^m (1 - z_j e^{-i\omega})(1 - \overline{z_j} e^{i\omega})}{\prod_{j=1}^n (1 - p_j e^{-i\omega})(1 - \overline{p_j} e^{i\omega})} \equiv 1 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow |k|^2 \frac{\prod_{j=1}^m \overline{z_j} \cdot \prod_{j=1}^m (1 - z_j e^{-i\omega}) \left(1 - \frac{1}{z_j} e^{-i\omega}\right)}{\prod_{j=1}^n \overline{p_j} \cdot \prod_{j=1}^n (1 - p_j e^{-i\omega}) \left(1 - \frac{1}{p_j} e^{-i\omega}\right)} \equiv 1. \end{aligned} \quad (6)$$

Из выражения (6) следует, что комплексный полином, записанный в числителе дроби, должен тождественно равняться комплексному полиному, записанному в ее знаменателе. Применяя основную теорему алгебры, получим, что $n = m$, $|k| = \prod_{j=1}^m |p_j|$, а также, с точностью до перестановки, $p_j = \frac{1}{z_j}$. Случай $p_j = z_j$ не представляет интереса, так как приводит к вырождению фильтра.

Из эквивалентности преобразований следует необходимость и достаточность условий леммы. Лемма доказана.

Следствие 1. *Передаточные функции всепропускающих цифровых фильтров первого и второго порядков имеют соответственно следующий вид:*

$$H(z) = k \frac{1 - \frac{1}{p} z^{-1}}{1 - pz^{-1}}, \quad |k| = |p|, \quad (7)$$

$$H(z) = k \frac{\left(1 - \frac{1}{p_1} z^{-1}\right) \left(1 - \frac{1}{p_2} z^{-1}\right)}{(1 - p_1 z^{-1})(1 - p_2 z^{-1})}, \quad |k| = |p_1| |p_2|. \quad (8)$$

Следствие 2. Любой всепропускающий фильтр порядка $n \geq 2$ может быть представлен в виде каскада всепропускающих фильтров более низких порядков.

Лемма 2. Фазово-частотная характеристика всепропускающего фильтра второго порядка представима в виде

$$H(\omega) = c \frac{\cos \omega - a}{\cos \omega - b}, \quad (9)$$

где $a, b, c \in \mathbb{C}$ тогда и только тогда, когда

$$p_2 = \frac{1}{p_1}, \quad (10)$$

где p_1, p_2 – полюсы фильтра.

Доказательство. Воспользуемся следствием 1 и формулой (8) и представим передаточную функцию всепропускающего фильтра второго порядка в следующем виде:

$$H(e^{i\omega}) = k \frac{\left(1 - \frac{1}{p_1} e^{-i\omega}\right) \left(1 - \frac{1}{p_2} e^{-i\omega}\right)}{(1 - p_1 e^{-i\omega})(1 - p_2 e^{-i\omega})} = k \frac{e^{i\omega} + \frac{1}{p_1 p_2} e^{-i\omega} - \frac{1}{p_1} - \frac{1}{p_2}}{e^{i\omega} + p_1 p_2 e^{-i\omega} - p_1 - p_2}, \quad |k| = |p_1| |p_2|. \quad (11)$$

Из условия (11) и того, что $\cos \omega = \frac{e^{-i\omega} + e^{i\omega}}{2}$, и следует выполнение условия (10). Лемма доказана.

Следствие 3. Для формулы (9) верны следующие соотношения:

$$b = \bar{a}, \quad |c| = 1. \quad (12)$$

Интересно отметить, что при подстановке формулы (10) в формулу (7) получим тот самый сопряженный фильтр, определенный в [5], т. е. такой фильтр, процедура реализации которого состоит в использовании стандартного алгоритма рекурсивного фильтра, реализуемого в обратном направлении дискретных отсчетов. Данный факт следует из следующей цепочки равенств:

$$H_1(z) = k_1 \frac{1 - \frac{1}{p} z^{-1}}{1 - pz^{-1}}, \quad |k_1| = |p|,$$

$$H_2(z) = k_2 \frac{1 - \overline{pz^{-1}}}{1 - \frac{1}{p} z^{-1}} = k_2 \frac{z - \bar{p}}{z - \frac{1}{p}} = k_2 |p|^2 \frac{1 - \frac{1}{p} z}{1 - pz} = k_1 \frac{1 - \frac{1}{p} z}{1 - pz} = H_1(z^{-1}).$$

Применим полученные утверждения для доказательства критерия консервативности разностных схем (3) для решения нестационарного уравнения Шредингера.

Передаточная функция цифрового фильтра, соответствующего дифференциальной задаче (1), (2), имеет вид

$$H(\omega) = e^{-i\omega^2}. \quad (13)$$

Заметим, что $H(0) = 1$. В связи с этим является естественным выполнение следующего условия для разностных схем:

$$H_{FD}(0) = 1. \tag{14}$$

Сформулируем и докажем следующую теорему.

Теорема. *Разностная схема (3), для которой выполняется условие (14), является консервативной тогда и только тогда, когда $\forall j \in \overline{0, p} b_j = a_j$.*

Доказательство. Достаточность данного утверждения очевидна, так как при подстановке значений b_j в передаточную функцию фильтра (4), соответствующего разностной схеме (3), получим дробь, числитель и знаменатель которой являются комплексно-сопряженными функциями. Следовательно, модуль данной функции тождественно равен единице, что в свою очередь означает, что данный фильтр относится к классу всепропускающих, а значит, и разностная схема (3) является консервативной.

Для доказательства необходимости применим полученные ранее леммы и следствия. Для начала отметим, что, рассматривая передаточную функцию (4) как полином относительно $\cos \omega$, в силу основной теоремы алгебры можно получить следующее представление передаточной функции:

$$H_{FD}(\omega) = k \frac{\prod_{j=1}^p (\cos \omega - c_j)}{\prod_{j=1}^p (\cos \omega - d_j)}. \tag{15}$$

Согласно следствию 3, верны следующие равенства: $d_j = \overline{c_j}$, $|k| = 1$. Тогда, подставив выражение (15) в условие (14), получим

$$H_{FD}(0) = k \frac{\prod_{j=1}^p (1 - c_j)}{\prod_{j=1}^p (1 - \overline{c_j})} = 1 \Leftrightarrow k = \frac{\prod_{j=1}^p (1 - \overline{c_j})}{\prod_{j=1}^p (1 - c_j)}. \tag{16}$$

Отсюда имеем

$$H_{FD}(\omega) = \frac{\prod_{j=1}^p (1 - \overline{c_j})}{\prod_{j=1}^p (1 - c_j)} \cdot \frac{\prod_{j=1}^p (\cos \omega - c_j)}{\prod_{j=1}^p (\cos \omega - \overline{c_j})}. \tag{17}$$

Таким образом, передаточная функция (17) представляет собой отношение двух комплексно-сопряженных функций. Тогда, возвращаясь к исходной записи (4) и приравнявая соответствующие коэффициенты, можем констатировать, что $\forall j \in \overline{0, p} b_j = a_j$. Теорема доказана.

В частности, из теоремы 1 следует, что двухслойная схема с весами на шеститочечном шаблоне является консервативной тогда и только тогда, когда $\sigma = 1 - \sigma \Leftrightarrow \operatorname{Re} \sigma = 0,5$. Это является широко известным результатом [1], однако методы цифровой обработки сигналов позволили получить его иным способом, отличным от традиционных методов.

Построение разностных схем высоких порядков. Покажем, как применить теорему 1 для построения консервативных разностных схем с локальным порядком аппроксимации $O(\tau^4 + h^8)$. Рассмотрим разностную схему (3) при $p = 2$ на десятиточечном шаблоне. Тогда передаточная функция (4) примет вид

$$H_8(\omega) = \frac{1 + ir(b_0 + 2b_1 \cos \omega + 2b_2 \cos 2\omega)}{1 - ir(a_0 + 2a_1 \cos \omega + 2a_2 \cos 2\omega)}, \quad -\pi \leq \omega < \pi. \tag{18}$$

Потребуем выполнения условия (14): $H_8(0) = 1$. Значит, верно равенство

$$a_0 + b_0 + 2a_1 + 2b_1 + 2a_2 + 2b_2 = 0. \quad (19)$$

Согласно теореме 1, $b_j = \overline{a_j}$, $j = 0, 2$. Представим коэффициенты разностной схемы следующим образом:

$$\begin{aligned} a_0 &= a_0^r + ia_0^i, \\ a_1 &= a_1^r + ia_1^i, \\ a_2 &= a_2^r + ia_2^i, \\ b_0 &= \overline{a_0} = a_0^r - ia_0^i, \\ b_1 &= \overline{a_1} = a_1^r - ia_1^i, \\ b_2 &= \overline{a_2} = a_2^r - ia_2^i. \end{aligned} \quad (20)$$

Тогда условие (19) примет вид

$$a_0^r = -2a_1^r - 2a_2^r. \quad (21)$$

В работе [4] было показано, что из аппроксимации передаточной функции фильтра, соответствующего дифференциальной задаче, передаточной функцией фильтра, соответствующего применению разностной схемы, следует, что и сама разностная схема аппроксимирует дифференциальную задачу. Приравнявая коэффициенты при соответствующих степенях ω разложений в ряд Тейлора функций (13) и (18) и последовательно исключая неизвестные, с учетом равенств (20) и (21) получим

$$\begin{aligned} \omega^0 : a_0^r &= -2a_1^r - 2a_2^r, \\ \omega^2 : a_1^r &= \frac{a_0^i r}{2} - 4a_2^r + a_1^i r + a_2^i r + \frac{1}{2}, \\ \omega^4 : a_2^r &= \frac{5a_1^i r}{12} - \frac{a_0^i r}{24} + \frac{23a_2^i r}{12} - \frac{1}{24}, \\ \omega^6 : a_0^i &= -\frac{1}{r} - \frac{124a_2^i r - 11a_1^i r + 30a_1^i r^3 + 30a_2^i r^3}{15r^3 + 2r}, \\ \omega^8 : a_2^i &= -a_1^i \frac{6300r^4 + 105r^2 - 23}{25200r^4 + 13020r^2 + 688}. \end{aligned} \quad (22)$$

Равенства (22) обеспечивают аппроксимацию передаточной функции (13) до ω^8 включительно. Попытка приравнять коэффициенты при ω^{10} соответствующих разложений в ряд Тейлора приводит к уравнению, зависящему только от r , следовательно, значение a_1^i не влияет на порядок аппроксимации и может быть выбрано произвольным, удобным для нас образом. Отметим также, что данное уравнение не разрешимо относительно r в действительных положительных числах, поэтому можно утверждать, что восьмой порядок аппроксимации – это максимально возможный порядок для данной разностной схемы.

Выражая все неизвестные в равенствах (22) через a_1^i , можно заметить, что в качестве a_1^i удобно положить $a_1^i = 2(25200r^4 + 13020r^2 + 688)$. Отсюда получим следующие выражения для коэффициентов разностной схемы (20):

$$\begin{aligned} a_0 &= -\frac{i}{r} - 75600r^4 i - 113400r^3 + 99540r^2 i - 4770r + 4716i, \\ a_1 &= 50400r^4 i + 50400r^3 + 26040r^2 i + 1920r + 1376i, \\ a_2 &= -12600r^4 i + 6300r^3 - 210r^2 i + 465r + 46i, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 b_0 &= \frac{i}{r} + 75600r^4i - 113400r^3 - 99540r^2i - 4770r - 4716i, \\
 b_1 &= -50400r^4i + 50400r^3 - 26040r^2i + 1920r - 1376i, \\
 b_2 &= 12600r^4i + 6300r^3 + 210r^2i + 465r - 46i.
 \end{aligned}
 \tag{23}$$

Таким образом, коэффициенты (23) обеспечивают разностной схеме (3) восьмой порядок аппроксимации на десятиточечном шаблоне.

Проводя полностью аналогичные рассуждения для построения разностной схемы четвертого порядка на шеститочечном шаблоне, можно получить следующие выражения для коэффициентов схемы, зависящие от произвольного параметра a_1^i :

$$\begin{aligned}
 a_0 &= -\frac{i}{r} - 12a_1^i r + 10a_1^i i, \\
 a_1 &= 6a_1^i r + a_1^i i, \\
 b_0 &= \frac{i}{r} - 12a_1^i r - 10a_1^i i, \\
 b_1 &= 6a_1^i r - a_1^i i.
 \end{aligned}
 \tag{24}$$

Примечательно, что если в равенствах (24) положить $a_1^i = \frac{1}{12r}$, то получим известную двухслойную разностную схему с весами на шеститочечном шаблоне. Данное замечание приведено для того, чтобы подчеркнуть – множество консервативных разностных схем четвертого порядка на шеститочечном шаблоне не описывается лишь известной схемой с весами, а содержит схемы и с другими соотношениями коэффициентов.

Эквивалентное представление разностной схемы на основе рекурсивных цифровых фильтров. В процессе применения разностной схемы (3) на десятиточечном шаблоне возникает симметричная пятидиагональная матрица. Существуют вариации метода прогонки для такой матрицы [8], однако соотношения (20), вообще говоря, не гарантируют выполнения необходимых условий для вычислительной устойчивости метода прогонки. В связи с этим представим разностную схему в виде каскада фильтров более низких порядков и используем данное представление для организации вычислений.

С точки зрения цифровых фильтров передаточная функция (18) соответствует всепропускающему фильтру четвертого порядка. Согласно следствию 2 и лемме 2, данный фильтр четвертого порядка можно представить в виде пары всепропускающих фильтров второго порядка, причем каждый из фильтров второго порядка является каскадом пары сопряженных всепропускающих фильтров первого порядка. Таким образом, верно равенство

$$H_8(\omega) = k_1 k_2 \frac{e^{i\omega} + e^{i\omega} - \left(\frac{\overline{p_1} + \frac{1}{p_1}}{p_1} \right) e^{i\omega} + e^{i\omega} - \left(\frac{\overline{p_2} + \frac{1}{p_2}}{p_2} \right)}{e^{i\omega} + e^{i\omega} - \left(p_1 + \frac{1}{p_1} \right) e^{i\omega} + e^{i\omega} - \left(p_2 + \frac{1}{p_2} \right)}, \quad |k_1 k_2| = 1.
 \tag{25}$$

Для дальнейшего удобства сделаем некоторые замены переменных:

$$\begin{aligned}
 q_1 &= p_1 + \frac{1}{p_1}, \\
 q_2 &= p_2 + \frac{1}{p_2}.
 \end{aligned}
 \tag{26}$$

Преобразуя выражение (25) и приравнявая соответствующие коэффициенты в выражениях (18) и (25), а также с учетом замен (26) и равенства $H_8(0) = 1$, получим систему уравнений относительно q_1 и q_2 :

$$\begin{cases} \left(4 + \overline{q_1 q_2} - 2(\overline{q_1} + \overline{q_2})\right)(2 + q_1 q_2) = 1 - ira_0, \\ \left(4 + \overline{q_1 q_2} - 2(\overline{q_1} + \overline{q_2})\right)(-2(q_1 + q_2)) = -2ira_1, \\ \left(4 + \overline{q_1 q_2} - 2(\overline{q_1} + \overline{q_2})\right) \cdot 2 = -2ira_2. \end{cases} \quad (27)$$

Разделив первое и второе уравнения системы (27) на третье уравнение, имеем

$$\begin{cases} q_1 + q_2 = -\frac{a_1}{a_2}, \\ q_1 q_2 = -2 - \frac{1 - ira_0}{ira_2}. \end{cases} \quad (28)$$

Следовательно, q_1 и q_2 являются корнями квадратного уравнения с комплексными коэффициентами

$$q^2 + \frac{a_1}{a_2}q - \left(2 + \frac{1 - ira_0}{ira_2}\right) = 0. \quad (29)$$

Решая уравнение (29), получим

$$q_{1,2} = -\frac{a_1 \pm \sqrt{a_1^2 + 8a_2^2 - 4a_0 a_2 - \frac{4a_2 i}{r}}}{2a_2}. \quad (30)$$

Найдем значения p_1 и p_2 из системы (26):

$$\begin{aligned} p_1 &= \frac{q_1 \pm \sqrt{q_1^2 - 4}}{2}, \\ p_2 &= \frac{q_2 \pm \sqrt{q_2^2 - 4}}{2}. \end{aligned} \quad (31)$$

Таким образом, с учетом леммы 1 равенства (31) и (30) позволяют представить разностную схему (3) на десятиточечном шаблоне в виде всепропускающего фильтра четвертого порядка с полюсами $p_1, \frac{1}{p_1}, p_2, \frac{1}{p_2}$ и, соответственно, нулями $\frac{1}{p_1}, p_1, \frac{1}{p_2}, p_2$. В силу симметричности всех систем уравнений в выражениях (30) и (31) для простоты можно зафиксировать один из знаков.

Для устойчивости рекурсивного цифрового фильтра необходимо и достаточно, чтобы его полюса лежали внутри единичного круга. Но в силу того, что полюса сопряженных фильтров первого порядка являются взаимнообратными величинами, прямой ход будем реализовывать для фильтра с полюсом внутри единичного круга, а обратный – для полюса вне единичного круга. Данный алгоритм прямого-обратного хода широко применяется в теории цифровых фильтров [7]. Также отметим, что из леммы 1 следует невозможность того, что полюс всепропускающего фильтра расположен на единичной окружности, так как в таком случае он будет совпадать с нулем фильтра, и рекурсивный фильтр вырождается в константу.

В качестве любопытного факта заметим, что разностную схему на десятиточечном шаблоне можно рассматривать как «каскад» двух разностных схем на шеститочечном шаблоне. Данный процесс выглядит следующим образом: к известному временному слою применяется первая из разностных схем на шеститочечном шаблоне, и отсюда имеем некоторое прогнозное решение. Затем к этому прогнозному решению применяем вторую разностную схему, и полученное решение будем использовать в качестве решения на следующем временном слое. Эта процедура полностью аналогична известной схеме предиктор-корректор. Отметим, что данные разностные

схемы на шеститочечном шаблоне не обязаны иметь вид схемы с весами, а в общем виде описываются соотношениями (24).

Результаты численного моделирования. Исследуем возможность применения разностной схемы восьмого порядка для решения уравнения (1), (2) с начальным условием вида

$$u_0(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}. \tag{32}$$

Для начального условия (32) известно [9] аналитическое решение уравнения (1), (2):

$$u_a(x,t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2(1+4t^2)} + i\left(\frac{tx^2}{1+4t^2} - \frac{\arctg(2t)}{2}\right)}}{\sqrt[4]{1+4t^2}}. \tag{33}$$

Сравним относительные погрешности приближенных решений уравнения (1), (2), (32), полученных с помощью разностной схемы четвертого порядка на шеститочечном шаблоне, разностной схемы восьмого порядка на десятиточечном шаблоне, дискретного преобразования Фурье, с точным решением (33). Определим погрешность приближенного решения как

$$\delta = \frac{\|U - U_a\|_{l_2}}{\|U_a\|_{l_2}}, \tag{34}$$

где U – приближенное решение, U_a – точное решение (33) на сетке ω_x в момент времени t_f . Будем использовать следующие значения параметров: $L = 40$; $t_f = 1$; $r = 0,5$; $N = 32 \cdot 2^j$; $j = 1,5$. Результаты численного моделирования приведены на рис. 1.

Данные результаты показывают превосходство схемы восьмого порядка над схемой четвертого порядка при решении линейного уравнения Шредингера, что полностью согласуется с теоретическими результатами. Полученная линейная зависимость в логарифмическом масштабе

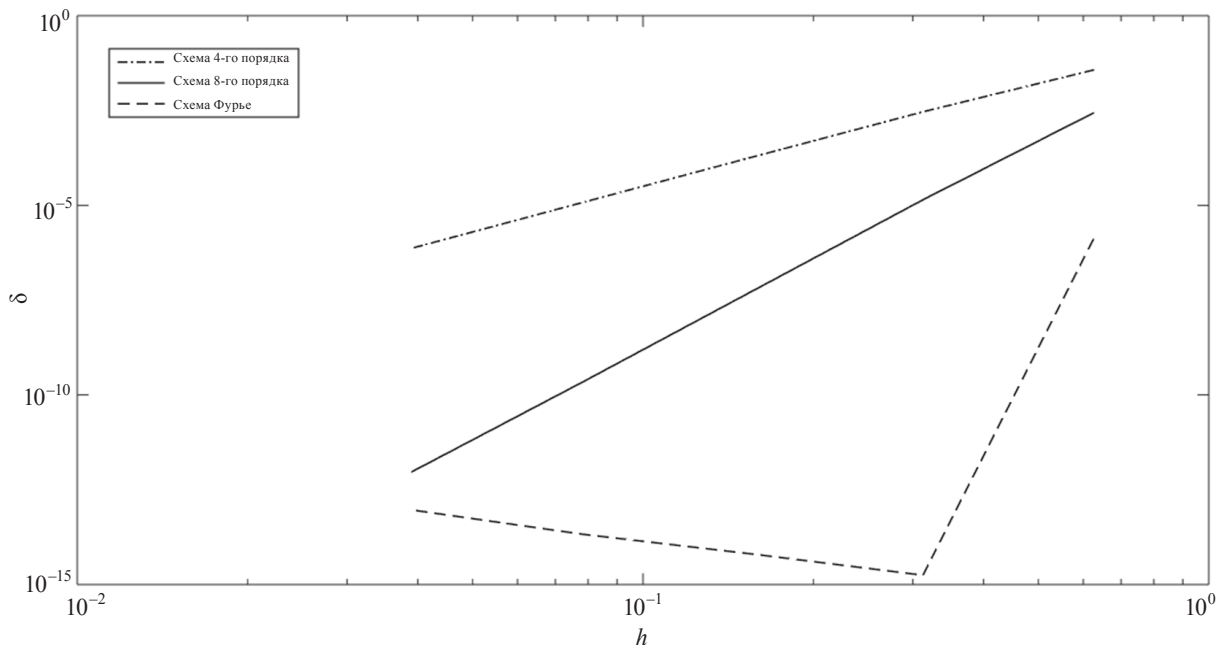


Рис. 1. Зависимости относительной погрешности численных решений линейного уравнения, полученных с помощью разностных схем четвертого и восьмого порядков, схемы Фурье, от размера шага по пространству

Fig. 1. Relative error dependences of the solutions of the linear equation obtained using the fourth- and eighth-order finite difference schemes and the Fourier method on the spatial step size

соответствует восьмому порядку аппроксимации. Отметим также, что при определенном размере шага разностная схема восьмого порядка практически сравнивается по точности с методом Фурье.

С точки зрения вычислительной сложности схема восьмого порядка уступает схеме четвертого порядка примерно в 2 раза, однако для достижения заданного уровня погрешности лучшие характеристики схемы восьмого порядка позволяют использовать более грубые размеры шага сетки по пространству и, следовательно, по эволюционной переменной. Несложно показать, что численное решение с помощью схемы четвертого порядка требует $4\frac{Lt_f}{rh^3}$ операций сложения и $6\frac{Lt_f}{rh^3}$ операций умножения, с помощью схемы восьмого порядка – $8\frac{Lt_f}{rh^3}$ и $10\frac{Lt_f}{rh^3}$ соответственно. Отсюда следует, что увеличение шага по пространству в k раз для схемы восьмого порядка позволяет сократить суммарное количество операций в $\frac{5k^3}{9}$ раз.

Решение линейного уравнения (1), (2) на практике является одним из этапов метода дробных шагов [10] для решения нелинейного уравнения Шредингера, которое моделирует многие физические процессы, например распространение оптических пучков [9]. При применении метода Фурье для решения линейной части метода дробных шагов возникают искусственные эффекты при переходе от дифференциальной задачи к дискретной [11]. Это приводит к падению точности численного решения нелинейного уравнения. Использование разностных схем для решения линейной части в некоторых случаях позволяет получить значительно лучшие результаты по сравнению с методом Фурье [12]. В связи с этим исследуем возможность применения схемы восьмого порядка при решении линейной части метода дробных шагов.

Рассмотрим нелинейное уравнение Шредингера с бикубической нелинейностью:

$$i\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2|u|^2 u = 0, \quad x \in [-L, L] \quad (35)$$

с начальными и граничными условиями вида (2).

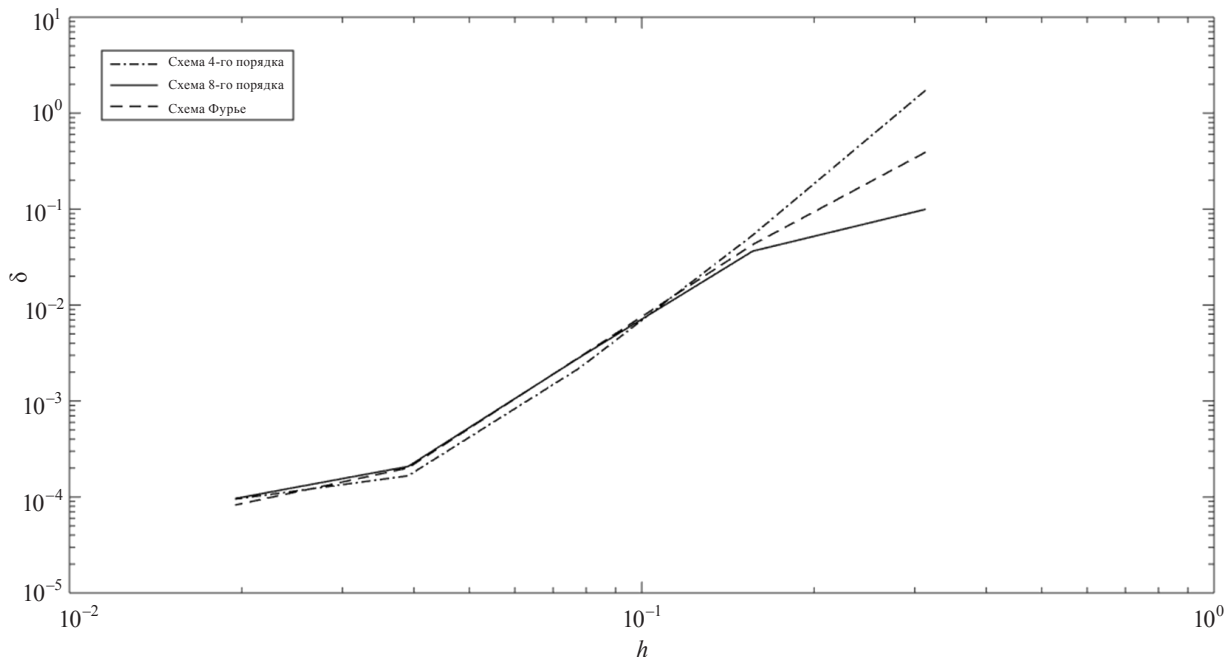


Рис. 2. Зависимости относительной погрешности численных решений нелинейного уравнения, полученных с помощью разностных схем четвертого и восьмого порядков, схемы Фурье, от размера шага по пространству

Fig. 2. Relative error dependences of the solutions of the nonlinear equation obtained using the fourth- and eighth-order finite difference schemes and the Fourier method on the spatial step size

Оценим эффективность разностных схем четвертого и восьмого порядков в сравнении с методом Фурье на примере моделирования двухсолитонных решений уравнения (35) методом дробных шагов. Двухсолитонное решение уравнения (35) имеет вид финитной, периодической по времени, бесконечно дифференцируемой функции [10]:

$$u(t, x) = 4 \frac{\cosh(3x) + 3 \exp(8it) \cosh(x)}{\cosh(4x) + 4 \cosh(2x) + 3 \cos(8t)} e^{it}. \quad (36)$$

Будем использовать следующие значения параметров: $L = 20$; $t_f = 1$; $r = 0,5$; $N = 32 \cdot 2^j$; $j = \overline{1,5}$. Результаты численного моделирования приведены на рис. 2.

Из рис. 2 видно, что схема восьмого порядка дает лучшие результаты при достаточно крупных шагах сетки, но при уменьшении размера шага различия в точности всех методов нивелируются, а на определенных участках графика разностная схема четвертого порядка показывает даже лучшую точность. Близость погрешности всех методов можно объяснить тем, что с некоторого значения размера шага по пространству погрешность расщепления метода дробных шагов начинает доминировать над погрешностью решения линейной части метода. Данное обстоятельство не позволяет рассматривать схему восьмого порядка в качестве замены известным методам для решения нелинейного уравнения Шредингера.

Заключение. Представленные выше теоретические результаты показывают, что методы цифровой обработки сигналов могут быть успешно использованы для построения консервативных двухслойных разностных схем сколь угодно высоких порядков для решения линейного нестационарного уравнения Шредингера. В частности, были получены аналитические выражения для разностной схемы восьмого порядка. Также было показано, что представление разностных схем в виде каскада рекурсивных цифровых фильтров низких порядков позволяет организовать вычисления особым способом, который с точки зрения теории алгоритмической сложности превосходит известный метод Фурье.

Что касается нелинейных уравнений Шредингера, установлено, что применение схем высоких порядков не приводит к радикальному улучшению точности полученных решений. В связи с этим при решении нелинейного уравнения Шредингера рекомендуется использовать разностные схемы более низких порядков, которые при меньшей вычислительной сложности дают сравнимые по точности результаты.

Для дальнейших исследований представляет интерес оптимизация параметров разностных схем высоких порядков. В работах [4–5, 12–14] было неоднократно показано, что схемы с более низким порядком аппроксимации способны давать более точные решения при оптимальном наборе своих параметров.

Благодарности. Автор выражает благодарность профессору В. М. Волкову за внимание, проявленное к работе.

Acknowledgements. The author would like to thank Professor V. M. Volkov for attention to the paper.

Список использованных источников

1. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
2. Han, F. New higher-order compact finite difference schemes for 1D heat conduction equations / F. Han, W. Dai // Appl. Math. Modell. – 2013. – Vol. 37, № 16/17. – P. 7940–7952. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2013.03.026>
3. Gordin, V. A. Compact differential schemes for the diffusion and Schrödinger equations. Approximation, stability, convergence, effectiveness, monotony / V. A. Gordin, E. A. Tsymbalov // J. Comput. Math. – 2014. – Vol. 32, № 3. – P. 348–370. <https://doi.org/10.4208/jcm.1403-cr14>
4. Волков, В. М. Спектральная согласованность разностных схем для уравнения теплопроводности / В. М. Волков, А. Н. Гуревский // Вестн. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 7–14.
5. Волков, В. М. Оптимизация компактных разностных схем спектрального разрешения для нестационарного уравнения Шредингера на основе методов цифровой обработки сигналов / В. М. Волков, А. Н. Гуревский, И. В. Жукова // Вестн. БГУ. – 2015. – № 3. – С. 84–89.
6. A time-domain optical transmission system simulation package accounting for nonlinear and polarization-related effects in fiber / A. Carena [et al.] // IEEE J. Selected Areas in Communications. – 1997. – Vol. 15, № 4. – P. 751–765. <https://doi.org/10.1109/49.585785>

7. Сергиенко, А. Г. Цифровая обработка сигналов / А. Г. Сергиенко. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 768 с.
8. Askar, S. S. On Solving Pentadiagonal Linear Systems via Transformations / S. S. Askar, A. A. Karawia // *Math. Problems Eng.* – 2015. – Vol. 2015. – P. 1–9. <https://doi.org/10.1155/2015/232456>
9. Ахманов, С. А. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов / С. А. Ахманов, В. А. Выслоух, А. С. Чиркин. – М.: Наука, 1988. – 312 с.
10. Агравал, Г. Нелинейная волоконная оптика / Г. Агравал. – М.: Мир, 1996. – 323 с.
11. Optimization of the split-step Fourier method in modeling optical-fiber communications systems / O. V. Sinkin [et al.] // *J. Lightwave Technol.* – 2003. – Vol. 21, № 1. – P. 61–68. <https://doi.org/10.1109/JLT.2003.808628>
12. Волков, В. М. Оптимизация компактных разностных схем спектрального разрешения в методе дробных шагов для нелинейного уравнения Шредингера / В. М. Волков, А. Н. Гуревский // *Вест. БГПУ. Сер. 3.* – 2016. – № 4. – С. 11–17.
13. Lele, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution / S. K. Lele // *J. Comput. Phys.* – 1992. – Vol. 103, № 1. – P. 16–42. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90324-r](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-r)
14. Гуревский, А. Н. Оптимизация спектральных характеристик разностных схем для нестационарного уравнения Шредингера / А. Н. Гуревский // *Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук.* – 2019. – Т. 55, № 1. – С. 62–68. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-1-62-68>

References

1. Samarskii A. A. *The theory of Finite Difference schemes*. Moscow, Nauka Publ., 1989. 616 p. (in Russian).
2. Han F., Dai W. New higher-order compact finite difference schemes for 1D heat conduction equations. *Applied Mathematical Modelling*, 2013, vol. 37, no. 16–17, pp. 7940–7952. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2013.03.026>
3. Gordin V. A., Tsymbalov E. A. Compact differential schemes for the diffusion and Schrödinger equations. Approximation, stability, convergence, effectiveness, monotony. *Journal of Computational Mathematics*, 2014, vol. 32, no. 3, pp. 348–370. <https://doi.org/10.4208/jcm.1403-cr14>
4. Volkov V. M., Hureuski A. N. Spectral-like resolution of finite-difference schemes for the heat conduction equation. *Vestsi Natsyional'nei akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 7–14 (in Russian).
5. Volkov V. M., Gurevskii A. N., Zhukova I. V. Optimization of compact finite difference schemes with spectral-like resolution for the non-stationary Schrodinger equation on the base of digital signal processing methods. *Vestnik BGU. Seriya I. Fizika. Matematika. Informatika = Vestnik BSU. Series I: Physics. Mathematics. Informatics*, 2015, no. 3, pp. 84–89 (in Russian).
6. Carena A., Curri V., Gaudino R., Poggiolini P., Benedetto S. A time-domain optical transmission system simulation package accounting for nonlinear and polarization-related effects in fiber. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, 1997, vol. 15, no. 4, pp. 751–765. <https://doi.org/10.1109/49.585785>
7. Sergienko A. G. *Digital Signal Processing*. Saint Petersburg, BHV-Petersburg Publ., 2011. 768 p. (in Russian).
8. Askar S. S., Karawia A. A. On Solving Pentadiagonal Linear Systems via Transformations. *Mathematical Problems in Engineering*, 2015, vol. 2015, pp. 1–9. <https://doi.org/10.1155/2015/232456>
9. Akhmanov S. A., Vysloukh V. A., Chirkin A. S. *Optics of Femtosecond Laser Pulses*. Moscow, Nauka Publ., 1988. 312 p. (in Russian).
10. Agrawal G. *Nonlinear Fiber Optics*. 3rd ed. Academic Press, 2001. 481 p.
11. Sinkin O. V., Holzlohner R., Zweck J., Menyuk C. R. Optimization of the split-step Fourier method in modeling optical-fiber communications systems. *Journal of Lightwave Technology*, 2003, vol. 21, no. 1, pp. 61–68. <https://doi.org/10.1109/JLT.2003.808628>
12. Volkov V. M., Gurevskii A. N. Optimization of compact finite difference schemes with spectral-like resolutions in the split-step method for the nonlinear Schrödinger equation. *Vestsi BDPU. Seriya 3, Fizika. Matematyka. Informatyka. Biyalogiya. Geografiya* [Bulletin of BSPU. Series 3, Physics. Mathematics. Informatics. Biology. Geography], 2016, no. 4, pp. 11–17 (in Russian).
13. Lele S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 1992, vol. 103, no. 1, pp. 16–42. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90324-r](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-r)
14. Hureuski A. N. Optimizing the spectral characteristics of the finite-difference schemes for the unsteady Schrödinger equation. *Vestsi Natsyional'nei akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2019, vol. 55, no. 1, pp. 62–68 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-1-62-68>

Информация об авторе

Гуревский Алексей Николаевич – старший преподаватель кафедры веб-технологий и компьютерного моделирования, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: gurevski@bsu.by

Information about the author

Aliaksei N. Hureuski – Senior Lecturer of the Department Web-Technologies and Computer Modeling, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gurevski@bsu.by