

Моделирование связанного нелинейного уравнения Шрёдингера конечно-разностными методами

Д.А. БУРОВ

Аннотация. В работе освещается численный анализ связанного нелинейного уравнения Шрёдингера в приложении к моделированию поверхностных плазмон-поляритонов. Для решения системы уравнений в частных производных применялись конечно-разностные схемы высоких порядков, в том числе, с использованием схем Паде (компактных разностных производных) и методов Дормана-Принса. Основной акцент сделан на применимости конечно-разностных методов к данной задаче. Рассмотрены различные типы граничных условий (Дирихле, Неймана, периодические). Помимо этого, представлены результаты моделирования, изучено усложнение динамики при изменении одного из системных параметров. Сделан вывод о начальных стадиях перехода к хаотическим режимам.

Ключевые слова: *нелинейное уравнение Шрёдингера, уравнение Гинзбурга-Ландау, поверхностный плазмон-поляритон, метод Кранка-Николсона, компактные разности, схема Паде, устойчивость по фон Нейману, сценарий ФШМ, сценарий Ландау-Хопфа, трехмерный тор, субкритическая бифуркация Хопфа, мультистабильность.*

1. Введение

Коллективная динамика большого числа заряженных частиц является причиной многих нетривиальных эффектов в физике плазмы. Рассмотрение возникающих в таких системах плазменных колебаний невозможно на уровне отдельных элементарных объектов, в следствие чего приходится прибегать к абстракции – квазичастице, являющейся квантом этих колебаний и именуемой плазмоном. С другой стороны, известно, что коллективное возбуждение электронной плотности (в том числе, на границах раздела сред металл-диэлектрик), совмещенное с электромагнитными колебаниями – фотонами, является причиной многих явлений [1], составляющих предмет исследования другого раздела физики – плазмоники. Квант подобных колебаний называется поляритоном и также рассматривается в виде квазичастицы. Следует отметить, что в общем случае поляритоном считается не только пара «фотон + плазмон», но и другие сочетания, такие как «фотон + фонон», «фотон + магнон» и т.д.

Начало исследований в области плазмоники пришлось на пятидесятые годы двадцатого века, когда были впервые проведены эксперименты, касающиеся вопросов колебаний электронных плотностей именно на поверхности металлов и связанных с ними меньших, чем ожидалось, энергетических потерь. Научный интерес к этому феномену остается по-прежнему высоким, несмотря на то, что исследования ведутся уже больше пятидесяти лет. В первую очередь это связано с мно-

гообещающими перспективами в области практического применения [2]. В частности, одним из основных направлений прикладной плазмоники является преодоление дифракционного предела для нужд телекоммуникационной индустрии и производителей компьютерного оборудования, которое позволило бы значительно уменьшить размеры передающих устройств. Феномен поверхностного плазмонного резонанса лежит в основе принципа работы большого числа биосенсоров, и в этом направлении также продолжают вестись исследования.

В связи с высоким практическим интересом, основное внимание уделяется экспериментальным, теоретическим вопросам, а также моделированию. Однако исследования с точки зрения динамических систем позволяют рассматривать вопросы существования и устойчивости нелинейных солитонов, которые и являются одним из основных объектов изучения плазмоники. При моделировании возможны два подхода: численное решение уравнений, непосредственно описывающих распространение электромагнитных возмущений в среде (уравнения Максвелла, квантово-механическая модель), либо предварительное аналитическое упрощение исходных уравнений и последующее моделирование полученной системы. Сложности, возникающие в первом подходе, вызваны необходимостью учитывать нелинейные эффекты, пренебрегая которыми невозможно получить результаты, согласующиеся с экспериментальными данными. При некоторых же, не слишком жестких

ограничениях на условия эксперимента, можно добиться значительного упрощения и, как следствие, ускорения расчетов.

При такой классификации данная работа относится к последним. Также было рассмотрено усложнение динамики с позиции бифуркационной теории. Постановка задачи была предложена ранее [3, 4], в которой предметом исследования является модель распространения поверхностных плазмон-поляритонов, основанная на связанном нелинейном уравнении Шрёдингера, также встречающемся в литературе под названием «уравнение Гросса–Питаевского» [5]. Эти и подобные им уравнения (например, комплексное уравнение Гинзбурга–Ландау [6]) в области плазмоники встречаются довольно часто, в том числе и при компьютерном моделировании. Это объясняется тем, что уравнение Шрёдингера непосредственно выводится из уравнений Максвелла при подстановке условий монохроматичности волны и некоторых допущений относительно малости вторых производных некоторых функций [4]. В работе [7] проведено сопоставление численного исследования уравнения Максвелла и решений аналитических приближений, получающихся при вышеупомянутых допущениях.

Цель работы состояла в реализации численной схемы для решения выбранной системы уравнений; нахождении сценариев усложнения динамики для различных конфигураций начальных и граничных условий; интерпретации результатов с позиции бифуркационной теории [8]. Помимо этого, было проведено некоторое краткое аналитическое исследование, позволившее получить решение в явном виде и предсказать субкритическую бифуркацию Андронова–Хопфа.

Визуализация данных, за исключением рис. 1, осуществлена с помощью библиотеки matplotlib [9].

2. Постановка задачи

В работе исследуется система из двух связанных нелинейных уравнений Шрёдингера для комплекснозначных функций, подробный вывод которой можно найти в работе [3, с. 148–152]. Здесь же приводится лишь краткий вариант выкладок с точки зрения физического смысла задачи и строгая математическая формулировка исследовавшейся задачи в конце раздела.

Для получения исходных уравнений системы обратимся к нелинейным уравнениям Максвелла и рассмотрим следующий анзац, представляющий собой монохроматическую волну:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\mathbf{r}, t) &= \vec{A}(\mathbf{r})e^{-i\omega_0 t}, \\ \vec{H}(\mathbf{r}, t) &= \vec{B}(\mathbf{r})e^{-i\omega_0 t}, \end{aligned} \quad (1)$$

где \vec{A} , \vec{B} – неизвестные пространственные распределения напряженностей электрического и магнитного полей, соответственно, ω_0 – некоторая фиксированная частота.

После масштабирования пространственных координат на $k_0^{-1} = \lambda_0/2\pi$ и применения оператора ротор к одному из уравнений Максвелла получим уравнение следующего вида:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{A} = \varepsilon(\mathbf{r})\vec{A}. \quad (2)$$

Рассматриваемая область имеет вид, представленный на рис. 1, где тонкая пластинка металла зажата между двумя пластинами диэлектриков. Направив ось x так, как изображено на рисунке, будем считать область бесконечной вдоль оси y и в положительном направлении оси z .

В постановке задачи эти три области различаются лишь диэлектрической проницаемостью, которая задается следующими выражениями:

$$\varepsilon_a(\mathbf{r}) = (\varepsilon_d + \alpha/2) + i\varepsilon_a'' + \chi_3 |\vec{A}(\mathbf{r})|^2, \quad (3a)$$

$$\varepsilon_m = \varepsilon_m' + i\varepsilon_m'', \quad (3b)$$

$$\varepsilon_p = (\varepsilon_d - \alpha/2), \quad (3c)$$

где ε_a , ε_m , ε_p обозначают, соответственно, проницаемости активного диэлектрика, металла и пассивного диэлектрика. Кроме того, ε_d – средняя проводимость постоянной действительной части для обоих диэлектриков, α – малый параметр сдвига ($|\alpha| \ll \varepsilon_d$), и $\varepsilon_m' < 0$, $\varepsilon_m'' > 0$ – постоянные действительная и комплексная части проводимости металла, соответственно.

Активный диэлектрик, помимо этого, описывается малой, но отрицательной постоянной комплексной частью проводимости ε_a'' , играющей роль линейного коэффициента усиления, а также нели-

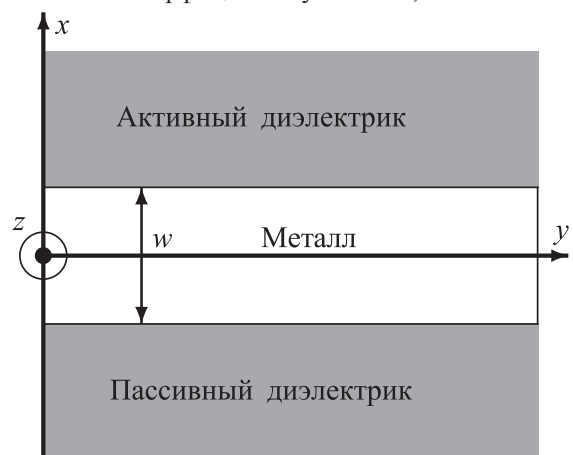


Рис. 1. Физическая область задачи: левосторонняя система координат, w – толщина металлической пластины

нейной частью $\chi_3 \left| \vec{A}(r) \right|^2$, где $\chi_3 = \chi'_3 + i\chi''_3$ есть комплексная диэлектрическая восприимчивость (коэффициент при третьем члене разложения вектора поляризации в ряд Тейлора по степеням напряженности электрического поля), $\left| \vec{A}(r) \right|^2$ – независящая от времени амплитуда напряженности электрического поля. Стоит отметить, что активные диэлектрики (также «усиливающие среды») не являются физически реализуемыми без подведения некоторого внешнего источника энергии и используются в моделях для удобства. Как правило, их применяют для преодоления потерь при распространении поверхностных плазмон-поляритонов [10–12]. Возможность генерации солитонов, а также повышение необходимых характеристик при использовании таких сред были продемонстрированы как экспериментально [13–15], так и теоретически [16].

Последний член в уравнении (3а) называется нелинейностью Керра и отвечает за так называемый электрооптический эффект Керра [17].

Для того чтобы получить окончательный вид искомого уравнений, необходимо воспользоваться еще одной подстановкой для \vec{A} , \vec{B} , которая включает в себя множитель $e^{-q_{m,p}(x \pm w/2)}$, соответствующий экспериментально наблюдаемому экспоненциальному затуханию величины электрического поля вдоль оси x , и медленно изменяющиеся комплексные амплитуды ψ_a и ψ_p распространяющихся вдоль границ раздела электромагнитных волн (точный вид подстановки см. [3, с. 149–151]). Здесь $q_{m,p} = \sqrt{\beta^2 - \text{Re}(\varepsilon_{m,p})}$ и $\beta = \sqrt{\frac{\varepsilon_d \varepsilon'_m}{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}}$ – безразмерная константа распространения поверхностного плазмон-поляритона. Используя полученные решения для ψ_a и ψ_p , можно однозначно восстановить значения напряженности электрического поля. Наконец, необходимо пренебречь некоторыми малыми величинами после подстановки выражений в уравнение (2), и тогда мы получим следующие уравнения:

$$i \frac{\partial \psi_p}{\partial z} + \frac{1}{2\beta} \frac{\partial^2 \psi_p}{\partial y^2} + (il - \Delta\beta) \psi_p + \kappa \psi_a = 0, \quad (4a)$$

$$i \frac{\partial \psi_a}{\partial z} + \frac{1}{2\beta} \frac{\partial^2 \psi_a}{\partial y^2} + [i(l - g) + \Delta\beta] \psi_a + f\Upsilon |\psi_a|^2 \psi_a + \kappa \psi_p = 0, \quad (4b)$$

где $\psi_a(y, z)$, $\psi_p(y, z)$ – упомянутые выше комплекснозначные амплитуды распространения поверхностных плазмон-поляритонных волн вдоль границ раздела металла и активного и пассивного диэлектриков, соответственно. Действительные параметры l , g и κ являются нормированными коэффициентами потерь, усиления и связи; $\Delta\beta$ – ко-

эффициент сдвига, линейно зависящий от параметра α (в данной работе исследовался только случай $\alpha = 0$, что соответствует $\Delta\beta = 0$); f – безразмерный масштабный параметр. Наконец, комплексный параметр $\Upsilon = \Upsilon' + i\Upsilon''$ является следствием нелинейности Керра. В качестве бифуркационного, как и в оригинальных работах [3, 4], рассматривался параметр накачки g .

Следует заметить, что в канонической форме как нелинейного уравнения Шрёдингера, так и уравнений Гинзбурга-Ландау неизвестные функции явно зависят от времени, здесь же роль времени выполняет переменная z , поэтому всюду далее, если не указано явно, функции считаются зависящими от времени и употребляется обозначение $\frac{\partial}{\partial t}$.

Далее необходимо сформулировать начально-краевую задачу для системы уравнений в частных производных (4). В той работе, где помимо вывода приводятся также результаты численных расчетов [3], не указаны использованные граничные условия. Однако, исходя из допущений и физического смысла задачи (области вдоль оси y предполагаются бесконечными), можно предположить, что наиболее подходящими условиями являются периодические, на которых и был сделан основной упор при исследовании. Помимо этого были рассмотрены задачи Дирихле и Неймана, формулировка которых здесь не приводится. В качестве начальных значений брались либо гауссиана, либо пространственно-однородное решение, либо решения из предыдущих расчетов.

Резюмируя все вышесказанное, математическая постановка формулируется следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} i \frac{\partial \psi_p}{\partial t} + \frac{1}{2\beta} \frac{\partial^2 \psi_p}{\partial y^2} + il\psi_p + \kappa\psi_a = 0, \\ i \frac{\partial \psi_a}{\partial t} + \frac{1}{2\beta} \frac{\partial^2 \psi_a}{\partial y^2} + i(l - g)\psi_a + f\Upsilon |\psi_a|^2 \psi_a + \kappa\psi_p = 0, \end{array} \right. \quad (5a)$$

$$\left. \begin{array}{l} \psi_p(-L/2 + y, t) = \psi_p(L/2 + y, t), \\ \psi_a(-L/2 + y, t) = \psi_a(L/2 + y, t), \end{array} \right\} \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall y \in \mathbb{R} \quad (5b)$$

$$\left. \begin{array}{l} \psi_p(y, 0) = \psi_p^0(y), \\ \psi_a(y, 0) = \psi_a^0(y). \end{array} \right\} \quad \forall y \in [-L/2, L/2] \quad (5c)$$

Предполагается, что уравнения (5а) выполняются при $\forall y \in [-L/2, L/2]$, $\forall t \in [0, T]$, действительные и комплексные части функций $\psi_p^0(y)$, $\psi_a^0(y)$ принадлежат классу $C^2(-L/2, L/2)$, и, кроме того, $\psi_p^0(-L/2) = \psi_p^0(L/2)$, $\psi_a^0(-L/2) = \psi_a^0(L/2)$. Здесь L – это ширина области по оси y , величина которой, как оказалось в ходе исследования, играет существенную роль в порядке формирования решений и может рассматриваться как дополнительный бифуркационный параметр. В работе использовались значения $L = 30$ и $L = 10$. Остальные зафиксированные параметры: $\beta = 1.43$, $l = 0.0026$, $\kappa = 0.0028$,

$f\Upsilon = 3.5 \cdot 10^{-3} (1 + i0.1)$. Область исследованных значений параметра g обозначим $\mathcal{G} = [0.001, 0.015]$.

3. Линейный анализ

Для удобства введем следующие обозначения:

$$D = \frac{1}{2\beta} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} l & 0 & 0 & \kappa \\ 0 & l & -\kappa & 0 \\ 0 & \kappa & l-g & 0 \\ -\kappa & 0 & 0 & l-g \end{pmatrix},$$

$$G(\vec{x}) = f \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Upsilon'' & \Upsilon'' \\ 0 & 0 & -\Upsilon' & \Upsilon' \\ 0 & 0 & -\Upsilon' & \Upsilon' \end{pmatrix} \cdot (x_3^2 + x_4^2), \quad (6)$$

$$\vec{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^T.$$

Тогда уравнение (5а) переписывается следующим образом:

$$\vec{x}_t = D\vec{x}_{yy} - B\vec{x} - G(\vec{x})\vec{x}. \quad (7)$$

Это уравнение было исследовано с позиции устойчивости стационарных решений, являющихся особыми точками уравнения, в котором отброшены члены с пространственной производной:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = -B\vec{x} - G(\vec{x})\vec{x}. \quad (8)$$

Приравняв правую часть системы (8) к нулю, получим уравнения относительно x_3 и x_4 , которые решались численно. Единственной особой точкой этой системы при $g \in \mathcal{G}$ и заданных остальных параметрах является нулевое решение. Характеристический многочлен якобиана в точке $\vec{x}_0 = (0, 0, 0, 0)^T$ равен:

$$\begin{aligned} & \lambda^4 + 2\lambda^3(2l - g) + \lambda^2(g^2 - 6gl + 6l^2 + 2\kappa^2) + \\ & + 2\lambda(g - 2l)[l(g - l) - \kappa^2] + \\ & + l^2(g - l)^2 + 2\kappa^2l(l - g) + \kappa^4 = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Данное уравнение также решалось численно. При $g < 0.0056$ имеется два комплексно-сопряженных корня кратности два, при $g \geq 0.0056$ – один действительный корень кратности четыре (собствен-

ные значения, параметризованные параметром g , изображены на рис. 2а). Нулевое решение теряет устойчивость при $g = 0.0052$, когда собственные значения пересекают мнимую ось (рис. 2б).

Полученные аналитические выводы полностью совпадают с численными результатами для всех вариантов задач (периодической, Дирихле, Неймана), так как потеря устойчивости происходит при найденном значении g .

Кроме того, удалось найти семейство решений системы (8) в явном виде, для чего использовалась следующая подстановка:

$$\vec{x}(t) = \begin{pmatrix} U \cos \omega t \\ U \sin \omega t \\ V \cos(\omega t + \varphi_0) \\ V \sin(\omega t + \varphi_0) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

В результате приходим к системе уравнений и неравенств относительно неизвестных величин U, V, ω, φ :

$$M_V V = \kappa U, \quad M_U U = \kappa V,$$

$$\varphi_0 = \arcsin \frac{l}{M_U}, \quad \omega = \frac{l f V^2 \Upsilon'}{2l + f V^2 \Upsilon'' - g}, \quad (11a)$$

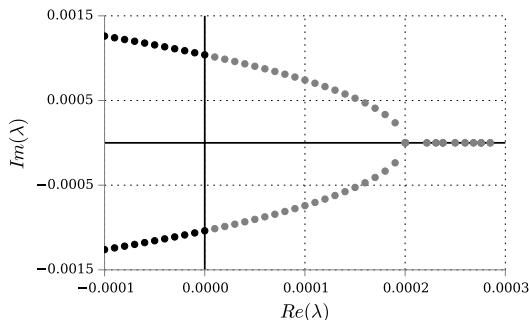
$$\omega - f V^2 \Upsilon' \geq 0, \quad g - l - f V^2 \Upsilon'' \geq 0, \quad (11b)$$

где

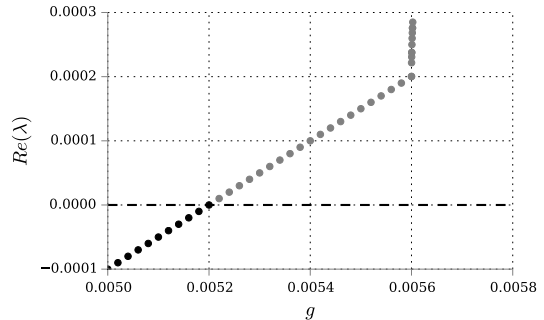
$$M_U = \sqrt{\omega^2 + l^2}, \quad (12)$$

$$M_V = \sqrt{(\omega - f V^2 \Upsilon')^2 + (g - l - f V^2 \Upsilon'')^2}.$$

Решая (11) и (12) численно, получим, что при $g \in (0.00357, 0.0052)$ система имеет два решения, при $g < 0.00357$ – ни одного, а при $g > 0.0052$ – одно решение. Это согласуется с полученными численными результатами. Например, для периодической задачи ($L = 30$) при $g \approx 0.00357$ происходит седло-узловая бифуркация, при которой рождаются два цикла, один неустойчивый и один устойчивый. Неустойчивый цикл далее исчезает в результате субкритической бифуркации Хопфа [8] одновре-



(а) Собственные значения на комплексной плоскости



(б) Действительная часть в зависимости от g

Рис. 2. Собственные значения якобиана правой части (8) в точке $\vec{x}_0 = (0, 0, 0, 0)^T$; $g \in [0.0050, 0.0056025]$

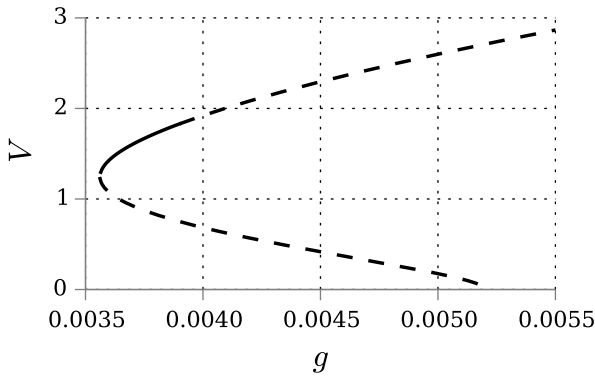


Рис. 3. Бифуркационная диаграмма

менно с потерей устойчивости нулевого решения. Зависимость амплитуды V от параметра g представлена на рис. 3, при этом построенные кривые являются решением (11) и (12), пунктиром же обозначены неустойчивые решения периодической задачи при $L = 30$.

4. Методы

Все численные расчеты были выполнены с помощью программы, написанной с использованием сторонних библиотек, в частности, NumPy и SciPy [18, 19]. Введем следующие обозначения: N – число узлов сетки по пространственной переменной; Δy – шаг дискретизации, $N\Delta y = L$; Δt – шаг дискретизации по времени; $\{Q\}_{j,k}$ – элемент матрицы Q с номером (j,k) . Условимся, что всюду в этом разделе полужирным начертанием будем обозначать сеточную функцию (\mathbf{x} или \mathbf{u}), определенную в узлах (j, n) , где $j = 0 \dots N - 1, n \in \mathbb{N}$; при этом, опуская нижний индекс j , будем иметь в виду функцию целиком на некотором слое по времени. В случае, если приближаемых функций несколько, запись \mathbf{x}_j^n будет обозначать вектор соответствующих значений в узле (j, n) .

Для моделирования решений системы (7) использовались конечно-разностные методы, а именно применялась так называемая схема с расщеплением. Однако расщепление производится не по физическому принципу, как, например, в задачах гидродинамики, а по математическому: на локальную часть и часть с пространственным оператором. Такой подход в некотором роде напоминает схему «предиктор-корректор»: сначала вычисляется промежуточная функция \mathbf{x}^* , используя линейный и нелинейный член правой части и функцию \mathbf{x}^n с предыдущего шага:

$$\left\{ \frac{d\vec{x}}{dt} = -\mathbf{B}\vec{x} - \mathbf{G}(\vec{x}) \cdot \vec{x}, \mathbf{x}^n \right\} \rightarrow \mathbf{x}^*. \quad (13)$$

Здесь применяется явный метод Рунге-Кутты Дормана-Принса восьмого порядка $\text{DOP 8}(5, 3)$ (функция из библиотеки SciPy, которая использует реализацию на языке программирования «Фортран», подробнее см. [19, 20]).

Далее производится второй полушаг, на котором решается уравнение в частных производных:

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \mathbf{D} \frac{\partial^2 \vec{x}}{\partial y^2}, \quad (14)$$

где функции \mathbf{x}^* и \mathbf{x}^n , полученные ранее, используются для вычисления \mathbf{x}^{n+1} , чем и завершается шаг метода.

Второй полушаг является критическим с точки зрения устойчивости и точности всего метода, поэтому были реализованы и проанализированы несколько вариантов. Сразу отметим, что поскольку в уравнении (14) все коэффициенты являются постоянными, то для всех использованных схем является возможным заранее, до начала расчетов составить операторное уравнение вида:

$$C_l \mathbf{x}^{n+1} = C_r \mathbf{x}^*, \quad (15)$$

которое позволяет затем выразить оператор перехода на втором полушаге $C = C_l^{-1} C_r$ и исследовать уже его. Заметим также, что уравнение (14) не является ни параболического, ни гиперболического типа, так как распадается на две независимые системы вида:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = -\frac{1}{2\beta} \frac{\partial^2 u_2}{\partial y^2}, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2}, \end{cases} \quad (16)$$

каждая из которых, в свою очередь, приводит к уравнению:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + c^2 \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} = 0, \quad c^2 = \frac{1}{4\beta^2}. \quad (17)$$

Как известно, ни для систем линейных уравнений в частных производных второго порядка, ни для скалярных линейных уравнений в частных производных порядка выше второго классификации не существует. Тем не менее, так как уравнение (17) демонстрирует некоторые черты, характерные для гиперболических уравнений (например, множества собственных функций оператора Д’Аламбера и дифференциального оператора из уравнения (17) имеют непустое пересечение, в частности, ему удовлетворяет решение $u = A_0 e^{ik(y \pm ckt)}$), то для каждой предложенной схемы введем по аналогии число Куранта μ , а также условия, ограничивающие выбор шага по времени (условия Куранта-Фридрихса-Леви, КФЛ).

Для рассмотрения вопросов устойчивости необходимо сделать следующие замечания. Во-первых, сформулируем определение устойчивости, несколько более строгое, чем принято давать в таких случаях.

Определение. Схема является устойчивой, если все собственные значения оператора перехода S по модулю меньше либо равны единице, и, кроме того, хотя бы одно из них строго меньше единицы.

Во-вторых, для поиска условий КФЛ в этой работе применяется дискретный метод фон Неймана анализа устойчивости линейных разностных схем (также известный, как спектральный метод, метод гармоник, метод Фурье). Известно, что для большинства конечно-разностных задач данный метод дает лишь необходимое условие устойчивости [21, 22]. Однако в некоторых случаях – когда учитываются граничные условия – можно говорить и о достаточности, то есть, доказывать устойчивость и находить точную верхнюю грань допустимых чисел Куранта. Такими условиями являются: 1) линейные уравнения с постоянными коэффициентами, 2) линейная схема, 3) периодическая краевая задача с периодически согласованными начальными данными, 4) схема должна быть не более, чем двухслойной по времени и 5) содержать не более одной пространственной переменной [21]. Другими словами, справедлива следующая

Теорема [22, т. 3.2.3]. *Разностная схема для начальной задачи на бесконечной прямой с периодическими начальными условиями (периода L) устойчива в норме l_2 тогда и только тогда, когда она удовлетворяет дискретному критерию устойчивости фон Неймана.*

Будем рассматривать задачу на отрезке $u \in [0, L]$ с периодическими граничными условиями. Легко видеть, что в таком случае все предложенные далее схемы удовлетворяют перечисленным требованиям. Поэтому для задач с периодическими граничными условиями (и подразумевающимися согласованными начальными данными) критерий устойчивости будет необходимым и достаточным, для остальных задач – лишь необходимым.

Наконец, покажем, что дискретный оператор Лапласа Λ_3 с трехточечным шаблоном $\langle 1, -2, 1 \rangle$ Λ_3 , удовлетворяющий периодическим условиям ($\{\Lambda_3\}_{1,N} = \{\Lambda_3\}_{N,1} = 1$), при дискретном преобразовании Фурье (ДПФ) эквивалентен простому домножению каждого коэффициента разложения на константу H_k . В самом деле, для произвольной функции $u(y)$ имеем:

$$u(j\Delta y) = \mathbf{u}_j = \sum_k \hat{u}_k e^{i\eta_k j}, \quad \eta_k = \frac{2\pi k \Delta y}{L} = \frac{2\pi k}{N}, \quad \text{откуда}$$

$$(\Lambda_3 \mathbf{u})_j = \mathbf{u}_{j-1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1} = \sum_k \hat{u}_k (e^{-i\eta_k} - 2 + e^{i\eta_k}) e^{i\eta_k j} =$$

$$= \sum_k \hat{u}_k H_k e^{i\eta_k j}, \quad \text{при этом } H_k = 2(\cos \eta_k - 1).$$
(18)

Очевидно, степеням оператора Λ_3 в силу линейности будут соответствовать степени H_k . Данный факт имеет простое объяснение: каждый базисный вектор $(1, e^{i\eta_k}, \dots, e^{i\eta_k(N-1)})^T$ является собственным вектором оператора Λ_3 , которому соответствует собственное значение H_k .

Теперь приступим к рассмотрению методов.

4.1. Схема Кранка–Николсона

Схема представляет собой классический вариант решения уравнения теплопроводности с применением трёхточечного шаблона для аппроксимации производной по пространству, которая для уравнения (14) может быть записана следующим образом:

$$\frac{x_j^{n+1} - x_j^*}{\Delta t} = \frac{1}{2} D \frac{x_{j+1}^{n+1} - 2x_j^{n+1} + x_{j-1}^{n+1} + x_{j+1}^* - 2x_j^* + x_{j-1}^*}{\Delta y^2}. \quad (19)$$

Как известно, данная схема обладает вторым порядком аппроксимации по времени [22]. Но несмотря на то, что схема является неявной и, следовательно, абсолютно устойчивой, она оказалась непригодной для решения задачи (5). На рис. 4 изображен спектр для значения $\mu_{CN} = \frac{\Delta t}{4\beta \Delta y^2} = 1.0$, а на рис. 5 приведен пример решения, полученный с применением схемы КН, и для сравнения – решение задачи при том же значении параметра обратным методом Эйлера.

Для доказательства неприменимости схемы КН к уравнению (14) воспользуемся дискретным методом фон Неймана. Справедливо следующее

Утверждение 1. *Схема (19) не является устойчивой при любом μ_{CN} (то есть, не обеспечивает уменьшение ошибки аппроксимации при переходе от n -го шага к $(n+1)$ -му).*

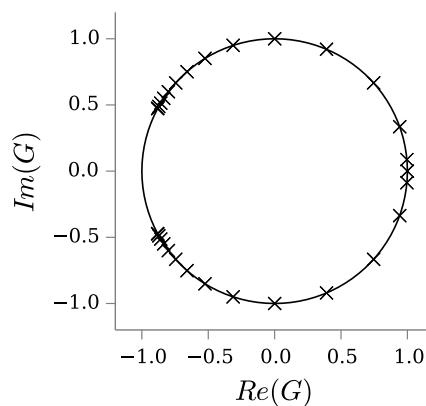


Рис. 4. Спектр оператора перехода для метода КН при $\mu_{CN} = 1.0$. Крестами обозначены с. зн., по модулю большие или равные единице, серыми точками – меньше единицы. Здесь и далее спектры построены для задачи (16) при $L = 3$ и $\Delta y = 0.1$ для упрощения восприятия (60 с. зн.)

Доказательство. Достаточно рассмотреть систему (16), выпишем для неё схему (19):

$$\frac{(\mathbf{u}_{1,j}^n)_t}{\Delta t} = -\frac{1}{4\beta} \frac{(\mathbf{u}_{2,j}^{n+1})_{yy} + (\mathbf{u}_{2,j}^n)_{yy}}{\Delta y^2}, \quad (20a)$$

$$\frac{(\mathbf{u}_{2,j}^n)_t}{\Delta t} = \frac{1}{4\beta} \frac{(\mathbf{u}_{1,j}^{n+1})_{yy} + (\mathbf{u}_{1,j}^n)_{yy}}{\Delta y^2}. \quad (20b)$$

Здесь запись $(\mathbf{u}_j^n)_{yy}$ обозначает общепринятую вторую разностную производную по трёхточечному шаблону $\langle 1, -2, 1 \rangle$, $(\mathbf{u}_j^n)_t$ – первую разностную производную «вперёд» по времени.

Найдем уравнение для одной из сеточных функций, для определённости \mathbf{u}_j . Для этого трижды воспользуемся уравнением (20b) для узлов сетки $j+1, j, j-1$:

$$\left. \begin{aligned} (\mathbf{u}_{2,j+1}^n)_t &= \mu_{CN} [\dots] \\ -2(\mathbf{u}_{2,j}^n)_t &= -2\mu_{CN} [\dots] \\ (\mathbf{u}_{2,j-1}^n)_t &= \mu_{CN} [\dots] \end{aligned} \right\} \Rightarrow \quad (21)$$

$$\Rightarrow (\mathbf{u}_{2,j+1}^{n+1})_{yy} - (\mathbf{u}_{2,j}^{n+1})_{yy} = \mu_{CN} [(\mathbf{u}_{1,j}^{n+1})_{yyyy} + (\mathbf{u}_{1,j}^n)_{yyyy}],$$

где $(\mathbf{u}_j^n)_{yyyy}$ – обозначение общепринятой четвертой разностной производной по пятиточечному шаблону $\langle 1, -4, 6, -4, 1 \rangle$ с погрешностью аппроксимации $\mathcal{O}(\Delta y^2)$.

Прделаем теперь то же самое с уравнением (20a), выписанным для слоев $n, n-1$:

$$\left. \begin{aligned} (\mathbf{u}_{1,j}^n)_t &= -\mu_{CN} [\dots] \\ -(\mathbf{u}_{1,j}^{n-1})_t &= \mu_{CN} [\dots] \end{aligned} \right\} \Rightarrow \Rightarrow (\mathbf{u}_{1,j}^n)_{tt} = -\mu_{CN} [(\mathbf{u}_{2,j}^{n+1})_{yy} - (\mathbf{u}_{2,j}^{n-1})_{yy}]. \quad (22)$$

Наконец, чтобы выразить правую часть (22), сложим уравнение (21) для слоев n и $n-1$ и приравняем левой части (22). Окончательно получим:

$$(\mathbf{u}_j^n)_{tt} = -\mu_{CN}^2 [(\mathbf{u}_j^{n+1})_{yyyy} + 2(\mathbf{u}_j^n)_{yyyy} + (\mathbf{u}_j^{n-1})_{yyyy}],$$

или, что то же самое,

$$(\mathbf{u}^n)_{tt} = -\mu_{CN}^2 \Lambda_3^2 (\mathbf{u}^{n+1} + 2\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1}). \quad (23)$$

Здесь опущен индекс, так как уравнение одинаково справедливо для \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 . Это и есть схема, которая аппроксимирует уравнение (17),

$$\mu_{CN}^2 = c^2 \frac{\Delta t^2}{4\Delta y^4}.$$

Далее, подставим выражение для сеточной функции через точное значение функции в этом узле и ошибку, $\mathbf{u}_j^n = \bar{\mathbf{u}}_j^n + \epsilon_j^n$, в схему (23) и, прене-

брегая членами $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ и $\mathcal{O}(\Delta y^2)$ порядка малости, получим уравнение для динамики ошибки ϵ_j^n , которое совпадает с (23). Применим ДПФ к ошибке на $(n-1)$ -м шаге (считая, что ϵ^{n-1} непрерывна и периодична на отрезке $y \in [0, L]$), и пусть G – произвольное собственное значение оператора перехода, тогда получим следующие выражения:

$$\epsilon_j^{n+1} = G\epsilon_j^n, \quad \epsilon_j^n = G\epsilon_j^{n-1}, \quad \epsilon_j^{n-1} = F_k e^{i\eta_k j}, \quad (24)$$

где F_k – коэффициенты Фурье, знак суммирования опущен.

Подставим теперь эти выражения в уравнение для динамики ошибки (другими словами, применим ДПФ к уравнению (23)). Учтем, что оператор Λ_3^2 заменяется на константу H_k^2 . В силу ортогональ-

ности базиса $\left\{ (1, \dots, e^{i\eta_k(N-1)})^T \right\}_{k=0}^{N-1}$ следующее уравнение должно выполняться для любого k :

$$\begin{aligned} F_k [G^2 - 2G + 1] e^{i\eta_k j} + F_k \mu_{CN}^2 H_k^2 [G^2 + 2G + 1] e^{i\eta_k j} = 0 &\Rightarrow \\ G^2 - 2G + 1 + \mu_{CN}^2 H_k^2 (G^2 + 2G + 1) = 0 &\Rightarrow \\ G^2 (1 + H_{CN}^2) - 2G (1 - H_{CN}^2) + 1 + H_{CN}^2 = 0, & \end{aligned} \quad (25)$$

где $H_{CN} = \mu_{CN} H_k$, индекс k опущен для удобства.

Наконец, решая квадратное уравнение (25) относительно G , получим необходимое ограничение:

$$|G|^2 = \left(\frac{1 - H_{CN}^2}{1 + H_{CN}^2} \right)^2 + \frac{4H_{CN}^2}{(1 + H_{CN}^2)^2} \leq 1. \quad (26)$$

Если неравенство (26) не выполняется для любого η_k и, кроме того, одновременно хотя бы для одного η_{k_0} не выполняется строгое неравенство, то гарантировать уменьшение ошибки при переходе со слоя n на слой $n+1$ нельзя. Однако очевидно, что

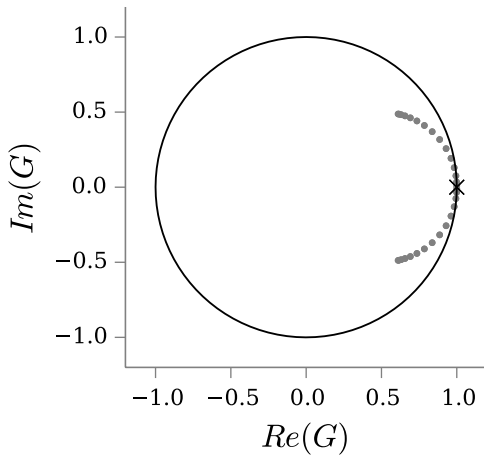
$$|G|^2 \equiv 1 \quad (27)$$

при любых значениях H_{CN} . Утверждение доказано.

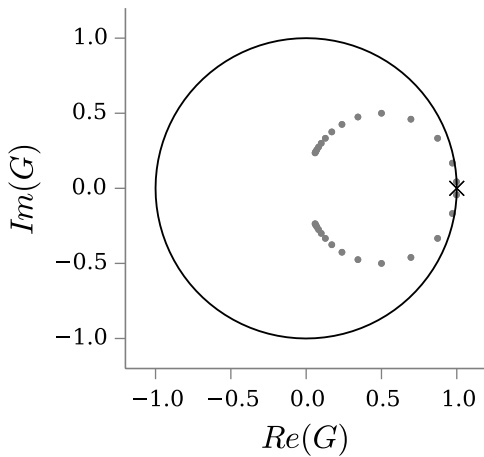
Хорошей иллюстрацией этого утверждения служит численно построенный спектр оператора перехода C_{CN} , приведенный на рис. 4 при $\mu_{CN} = 1$. Для любого другого значения числа Куранта спектр сгущается либо разрежается, но по-прежнему остается симметричным и на единичной окружности.

Схема Кранка-Николсона оказывается неприемимой к системе уравнений (16), как и к системе (14). Некоторое объяснение этому заключается в том, что каждое из четырех уравнений (17) аппроксимируется схемой (23), в частности, четвертая производная приближается суммой разностных производных с разных слоев схемы:

$$\frac{\partial^4 u}{\partial y^4} = \frac{1}{4} \left((\mathbf{u}_j^{n-1})_{yyyy} + 2(\mathbf{u}_j^n)_{yyyy} + (\mathbf{u}_j^{n+1})_{yyyy} \right) + \mathcal{O}(\Delta y^2, \Delta t^2), \quad (28)$$



(a) $\mu_{BE} = 0.2$



(b) $\mu_{BE} = 1.0$

Рис. 5. Спектры оператора перехода для метода Эйлера. Обозначения прежние

что и приводит к доказанному результату. Заметим, что на практике в силу машинной точности и ошибок округления решение, полученное по схеме КН, может «напоминать» точное решение, так как $|G| = 1 \pm \varepsilon_{\text{comp}}$, где $\varepsilon_{\text{comp}}$ – минимально разрешимая точность вычислительного устройства, то есть, ошибка может уменьшаться при распространении со слоя n на слой $n+1$. Пример такого поведения представлен на рис. 6а и 6б.

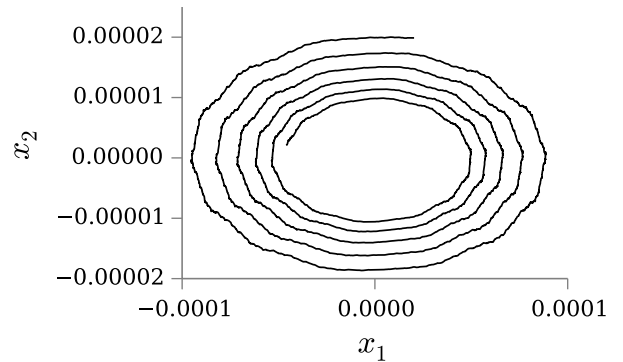
4.2. Неявный метод Эйлера

Во втором подходе использовался обратный метод Эйлера для интегрирования ОДУ, получен-

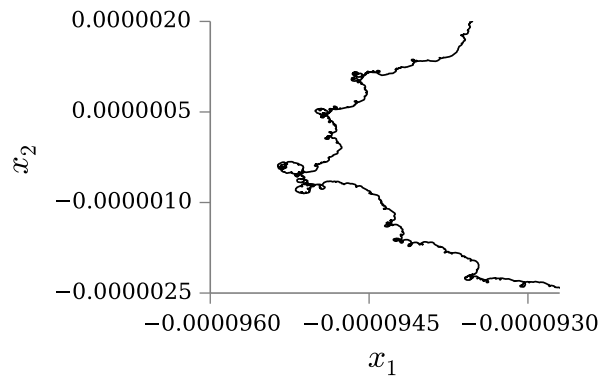
ного после дискретизации по пространству трехточечным шаблоном $\langle 1, -2, 1 \rangle$. Схема выглядит следующим образом:

$$\frac{x_j^{n+1} - x_j^*}{\Delta t} = D \frac{x_{j+1}^{n+1} - 2x_j^{n+1} + x_{j-1}^{n+1}}{\Delta y^2}. \quad (29)$$

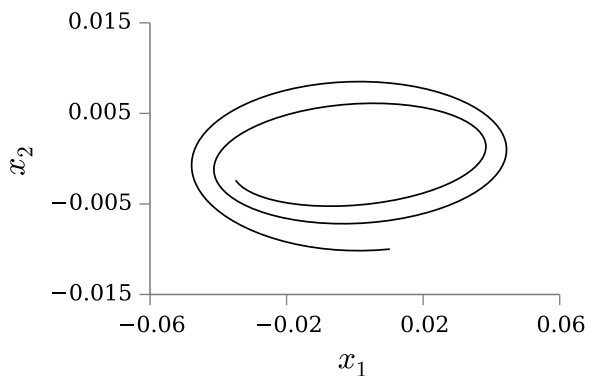
В применении к уравнению теплопроводности данная схема известна также как «назад-по-времени, центральная-по-пространству»



(a) Решение, полученное методом CN



(b) Решение, полученное методом CN (увеличено)



(c) Решение, полученное методом BE

Рис. 6. Характерный «шум» схемы Кранка–Николсона

(англ. *Backward Time, Centered Space*, BTCS [22]). Схема обладает точностью $\mathcal{O}(\Delta t, \Delta y^2)$, является неявной, число Куранта для нее равно $\mu_{BE} = \frac{\Delta t}{2\beta\Delta y^2}$.

Сформулируем для данной схемы аналогичное утверждение относительно устойчивости.

Утверждение 2. *Схема (29) является устойчивой при любом μ_{BE} .*

Доказательство. Аналогично предыдущему пункту, выпишем рассматриваемую схему для уравнения (16):

$$(\mathbf{u}_{1,j}^n)_t = -\mu_{BE} (\mathbf{u}_{2,j}^{n+1})_{yy}, \quad (30a)$$

$$(\mathbf{u}_{2,j}^n)_t = \mu_{BE} (\mathbf{u}_{1,j}^{n+1})_{yy}. \quad (30b)$$

Складывая второе уравнение для узлов сетки $j+1, j, j-1$, получим:

$$\left. \begin{aligned} (\mathbf{u}_{2,j+1}^n)_t &= \mu_{BE} (\mathbf{u}_{1,j+1}^{n+1})_{yy} \\ -2(\mathbf{u}_{2,j}^n)_t &= -2\mu_{BE} (\mathbf{u}_{1,j}^{n+1})_{yy} \\ (\mathbf{u}_{2,j-1}^n)_t &= \mu_{BE} (\mathbf{u}_{1,j-1}^{n+1})_{yy} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$(\mathbf{u}_{2,j}^{n+1})_{yy} - (\mathbf{u}_{2,j}^n)_{yy} = \mu_{BE} (\mathbf{u}_{1,j}^{n+1})_{yyy}. \quad (31)$$

Аналогично воспользуемся уравнением (30a) для слоев $n, n-1$:

$$(\mathbf{u}_{1,j}^n)_{tt} = -\mu_{BE} [(\mathbf{u}_{2,j}^{n+1})_{yy} - (\mathbf{u}_{2,j}^n)_{yy}], \quad (32)$$

откуда уже окончательно следует уравнение для схемы, аппроксимирующей (17):

$$(\mathbf{u}_j^n)_{tt} = -\mu_{BE}^2 (\mathbf{u}_j^{n+1})_{yyy}. \quad (33)$$

Точно так же, как и при доказательстве Утверждения 1, подставим ДПФ-выражение для ошибки в уравнение для динамики ошибки (которое опять совпадает с численной схемой), и получим квадратное уравнение ($H_{BE} = \mu_{BE} H_k$):

$$G^2 - 2G + 1 + H_{BE}^2 G^2 = 0, \quad (34)$$

решая которое относительно G , приходим к условию устойчивости схемы:

$$|G|^2 = \frac{1}{(1 + H_{BE}^2)^2} + \frac{H_{BE}^2}{(1 + H_{BE}^2)^2} \leq 1 \Rightarrow H_{BE}^2 \geq 0, \quad (35)$$

что, очевидно, выполняется для любого μ_{BE} . Кроме того, $\cos \eta_k = 1$ выполняется только для $k = 0$ поэтому для всех остальных k справедливо строгое неравенство $|G| < 1$. Утверждение доказано.

Как и в предыдущем пункте, хорошей иллюстрацией доказанного утверждения является численно построенный спектр оператора перехода C_{BE} , изображенный на рис. 5. Видно, что единственное собственное значение, равное единице, соответствует тому самому случаю $H_{BE} = 0 \iff \cos \eta_k = 1$.

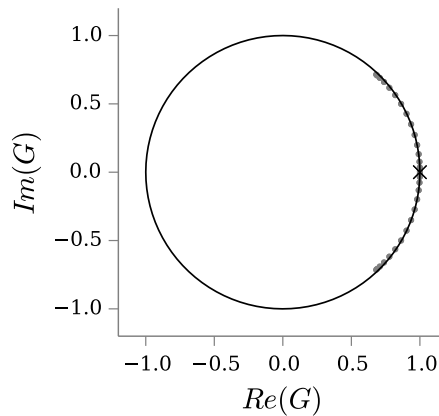
4.3. RK3 SSP

Третья, четвертая и пятая схемы являются явными, но также и более высоких порядков аппроксимации. При построении схемы используется тот же прием, что и раньше: сначала получаем полудискретную систему, состоящую из N ОДУ, где $N\Delta y = L$; затем интегрируем эту систему по времени. В данном случае был использован метод Рунге-Кутты 3-го порядка из семейства так называемых «сохраняющих сильную устойчивость» методов (англ. *Strong Stability-Preserving, SSP*).

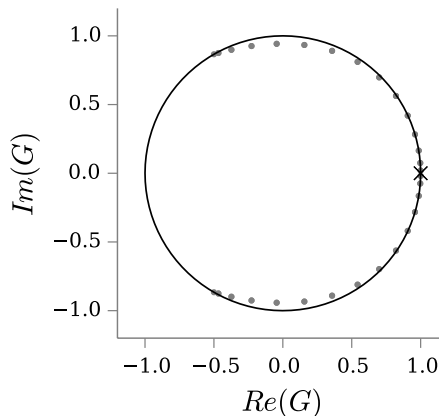
Рассмотрим гиперболическое уравнение, записанное в виде закона сохранения некоторой величины:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} S^*(u). \quad (36)$$

Допустим, имеется некоторая дискретизация $-S$ всего оператора правой части, тогда прихо-



(a) $\mu_{RK} = 0.2$



(b) $\mu_{RK} = \frac{\sqrt{3}}{4}$

Рис. 7. Спектры оператора перехода для метода RK3 SSP. Обозначения прежние

дим к системе обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{du}{dt} = S(u), \quad (37)$$

Известно, что для таких уравнений схемы SSP сохраняют сильную устойчивость, коль скоро она гарантируется при интегрировании этого уравнения явным методом Эйлера с соблюдением условия КФЛ $\Delta t \leq \Delta t_{FE}$. Более того, зная лишь коэффициенты SSP схемы, можно вычислить константу, показывающую, во сколько раз ухудшается условие КФЛ [23]. Поэтому, а также в следствие некоторой отмеченной «схожести» решаемого уравнения с гиперболическими уравнениями, и была выбрана схема из этого семейства. К сожалению, доказанными леммами об условиях КФЛ воспользоваться напрямую не удастся, поэтому доказательство устойчивости схемы и нахождение условий КФЛ производилось самостоятельно.

Введем обозначение $R \equiv I + \Delta t S$, где I – единичный оператор. Для уравнения (37) трехстадийный метод третьего порядка выглядит следующим образом:

$$\mathbf{u}^{(1)} = R(\mathbf{u}^n), \quad (38a)$$

$$\mathbf{u}^{(2)} = \frac{1}{4} \left[3\mathbf{u}^n + R(\mathbf{u}^{(1)}) \right], \quad (38b)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \frac{1}{3} \left[\mathbf{u}^n + 2R(\mathbf{u}^{(2)}) \right]. \quad (38c)$$

В предположении, что S является линейным оператором (следовательно, и R тоже), получим в явном виде уравнение для перехода \mathbf{u}^n (опускаем скобки при действии оператора, $R(\mathbf{u}) = R\mathbf{u}$):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1} &= \frac{1}{3} \left[\mathbf{u}^n + \frac{1}{2} R \left(3\mathbf{u}^n + R\mathbf{u}^{(1)} \right) \right] = \frac{1}{3} \left[\mathbf{u}^n + \frac{1}{2} R \left(3\mathbf{u}^n + R^2\mathbf{u}^n \right) \right] = \\ &= \frac{1}{3} \left[\mathbf{u}^n + \frac{1}{2} \left(3R\mathbf{u}^n + R^3\mathbf{u}^n \right) \right], \end{aligned}$$

а так как $R^3 = I + 3\Delta t S + 3(\Delta t S)^2 + (\Delta t S)^3$, то

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1} &= \frac{1}{3} \left[\mathbf{u}^n + \frac{1}{2} \left(4\mathbf{u}^n + 6\Delta t S\mathbf{u}^n + 3(\Delta t S)^2\mathbf{u}^n + (\Delta t S)^3\mathbf{u}^n \right) \right] = \\ &= \mathbf{u}^n + \Delta t S\mathbf{u}^n + \frac{\Delta t^2}{2} S^2\mathbf{u}^n + \frac{\Delta t^3}{6} S^3\mathbf{u}^n. \end{aligned} \quad (39)$$

Так как для системы (14) оператор $S(\mathbf{x}^n)_j = \mathbf{D}(\mathbf{L}\mathbf{x}^n)_j$, где $\mathbf{L} : \mathbb{R}^{4N} \rightarrow \mathbb{R}^{4N}$ – некоторое дискретное приближение второй производной (необязательно по трем точкам), то окончательно схема примет вид:

$$\mathbf{x}_j^{n+1} = \mathbf{x}_j^* + \Delta t \mathbf{D}(\mathbf{L}\mathbf{x}^*)_j + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{D}^2(\mathbf{L}^2\mathbf{x}^*)_j + \frac{\Delta t^3}{6} \mathbf{D}^3(\mathbf{L}^3\mathbf{x}^*)_j. \quad (40)$$

Поскольку мы будем рассматривать только разностные операторы Лапласа вида $\frac{1}{\Delta y^2} \Delta$, где $\Delta : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ не содержит Δy , то число Куранта

для метода RK3 SSP обозначим $\mu_{RK} = \frac{\Delta t}{2\beta\Delta y^2}$. Пусть также $\tilde{\Lambda} = \mu_{RK}\Lambda$. Возвращаясь к системе (16), запишем оператор S и его степени в явном виде:

$$\begin{aligned} S &= -\frac{1}{2\beta\Delta y^2} \begin{bmatrix} 0 & \Lambda \\ -\Lambda & 0 \end{bmatrix}, \quad S^2 = -\frac{1}{4\beta^2\Delta y^4} \begin{bmatrix} \Lambda^2 & 0 \\ 0 & \Lambda^2 \end{bmatrix}, \\ S^3 &= -\frac{1}{8\beta^3\Delta y^6} \begin{bmatrix} 0 & -\Lambda^3 \\ \Lambda^3 & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (41)$$

в результате чего схема представляется следующими выражениями:

$$\mathbf{u}_1^{n+1} = \mathbf{u}_1^n - \tilde{\Lambda}\mathbf{u}_2^n - \frac{1}{2}\tilde{\Lambda}^2\mathbf{u}_1^n + \frac{1}{6}\tilde{\Lambda}^3\mathbf{u}_2^n, \quad (42a)$$

$$\mathbf{u}_2^{n+1} = \mathbf{u}_2^n + \tilde{\Lambda}\mathbf{u}_1^n - \frac{1}{2}\tilde{\Lambda}^2\mathbf{u}_2^n - \frac{1}{6}\tilde{\Lambda}^3\mathbf{u}_1^n. \quad (42b)$$

Так же, как и в предыдущих пунктах, достаточно проанализировать схему (42) и сделать вывод об устойчивости всей схемы (40). Для этого опять выразим все через одну функцию. Представим (42) в виде рекуррентного соотношения:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{n+1} \\ \beta_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}\tilde{\Lambda}^2 & -\tilde{\Lambda} + \frac{1}{6}\tilde{\Lambda}^3 \\ \tilde{\Lambda} - \frac{1}{6}\tilde{\Lambda}^3 & 1 - \frac{1}{2}\tilde{\Lambda}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix}, \quad (43)$$

откуда получается соотношение $\alpha_{n+1} - 2a\alpha_n + (a^2 + b^2)\alpha_{n-1} = 0$. Таким образом, заменяя обратно обозначения a , b и α_n , приходим к следующему виду схемы для уравнения (17):

$$(\mathbf{u}^n)_{tt} + \tilde{\Lambda}^2\mathbf{u}^n - \frac{1}{12}\tilde{\Lambda}^4\mathbf{u}^{n-1} + \frac{1}{36}\tilde{\Lambda}^6\mathbf{u}^{n-1} = 0. \quad (44)$$

4.3.1. Трехточечный шаблон

Утверждение 3. *Схема (42) с $\Lambda = \Lambda_3$ является устойчивой при $\mu_{RK} \leq \frac{\sqrt{3}}{4}$.*

Доказательство. Воспользуемся уравнением (44). Проводя те же рассуждения, что и раньше, и обозначая $H_{RK} = \mu_{RK} H_k$, получим следующее уравнение на G :

$$\begin{aligned} G^2 - 2G + 1 + GH_{RK}^2 - \frac{1}{12}H_{RK}^4 + \frac{1}{36}H_{RK}^6 &= 0 \Rightarrow \\ G^2 - G(2 - H_{RK}^2) + 1 - \frac{1}{12}H_{RK}^4 + \frac{1}{36}H_{RK}^6 &= 0, \end{aligned} \quad (45)$$

откуда приходим к следующему неравенству:

$$\begin{aligned} |G|^2 &= \frac{(2 - H_{RK}^2)^2}{4} + \frac{H_{RK}^2(2 - \frac{1}{3}H_{RK}^2)^2}{4} \leq 1 \Rightarrow \\ H_{RK}^6 - 3H_{RK}^4 &\leq 0. \end{aligned} \quad (46)$$

Очевидно, что $H_{RK} = 2\mu_{RK}(\cos \eta_k - 1) = 0$ только при $k = 0$. Тогда, принимая во внимание, что $H_k^2 \leq 16$, в остальных случаях должно выполняться следующее:

$$\mu_{RK}^2 \leq \frac{3}{16} \leq \frac{3}{H_k^2} \Rightarrow \mu_{RK} \leq \frac{\sqrt{3}}{4}, \quad (47)$$

что и требовалось доказать.

Заметим, что $N = \frac{L}{\Delta y}$ возможно выбрать так, чтобы H_k не достигало значения 4. В самом деле,

$$\cos \eta_k = 0 \iff \frac{2\pi k}{N} = \frac{\pi}{2} + \pi m, \quad m \in \mathbb{Z} \iff \quad (48)$$

$$k = \frac{N}{4} + \frac{Nm}{2}, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Если N не делится на 4, то это означает, что $H_k < 4$, и оценку в условии КФЛ можно немного улучшить. На практике, однако, такой выбор не является оправданным, так как $N = \{100, 300, 700\}$ выбирается достаточно большим, чтобы подобное улучшение сыграло сколько-нибудь значительную роль.

Спектры оператора перехода C_{RK} представлены на рис. 7.

4.3.2. Схемы Паде

Схемы Паде, также известные как компактные разностные производные (англ. *Compact Finite Difference Schemes*), представляют собой неявный метод аппроксимации производной некоторой функции f . Симметричная схема для второй производной имеет следующий общий вид [24]:

$$\beta_p f''_{j-2} + \alpha_p f''_{j-1} + f''_j + \alpha_p f''_{j+1} + \beta_p f''_{j+2} =$$

$$= c_p \frac{f_{j+3} - 2f_{j+2} + f_{j+1} + f_{j-1} - 2f_{j-2} + f_{j-3}}{9\Delta y^2} + b_p \frac{f_{j+2} - 2f_{j+1} + f_{j-2}}{4\Delta y^2} + a_p \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{\Delta y^2}. \quad (49)$$

При $\beta_p = c_p = 0$ метод (49) сводится к однопараметрическому семейству, где $a_p = \frac{4}{3}(1 - \alpha_p)$, $b_p = \frac{1}{3}(-1 + 10\alpha_p)$, при этом выбором α_p можно обеспечить разный порядок получающихся схем. В данной работе использовались значения $\alpha_p = 1/10$ и $\alpha_p = 2/11$, которые дают четвертый и шестой порядки, соответственно [24].

Перепишем метод (49) с учетом вышесказанного и в операторном виде:

$$P_l d = \frac{1}{\Delta y^2} \left[\frac{b_p}{4} P_r + a_p \Lambda_3 \right] f, \quad (50)$$

где d – искомый вектор производных, P_l – трехдиагональный оператор с шаблоном $\langle \alpha_p, 1, \alpha_p \rangle$, P_r – пятидиагональный оператор с шаблоном $\langle 1, 0, -2, 0, 1 \rangle$. Заметим, что при рассмотрении периодических граничных условий (для которых метод фон Неймана дает необходимое и достаточное условие) будем подразумевать соответствующие аналоги операторов P_l и P_r : $\{P_l\}_{1,N} = \{P_l\}_{N,1} = \alpha_p$, $\{P_r\}_{1,N-1} = \{P_r\}_{2,N} = \{P_r\}_{N-1,1} = \{P_r\}_{N,2} = 1$. Отметим также, что они обладают свойством линейности и являются симметричными.

В итоге получаем, что дискретный оператор Лапласа с использованием компактной производной $\Lambda = \Lambda_{PADE} = P_l^{-1} \left[\frac{b_p}{4} P_r + a_p \Lambda_3 \right]$ (положим также $\mu_{PADE} = \mu_{RK} = \frac{1}{2\beta\Delta y^2}$ и $\tilde{\Lambda} = \mu_{PADE} \Lambda_{PADE}$).

Если теперь это выражение в таком виде подставить в схему (44), то отрицательные и положительные степени операторов будут идти попеременно, что затруднит анализ, так как в общем случае произведение матриц не является коммутативным.

Покажем, что базис $\left\{ (1, \dots, e^{i\eta_k(N-1)})^T \right\}_{k=0}^{N-1}$ является набором собственных векторов оператора P_l (соответственно, и P_l^{-1}), благодаря чему при применении ДПФ возможно будет просто возводить в нужную степень собственное значение, подобно тому, как мы делали это для Λ_3 .

Для симметричного оператора P_l и вектора \vec{e}_k справедливо

$$(P_l \vec{e}_k)_j = \alpha_p (\vec{e}_{k,j-1} + \vec{e}_{k,j+1}) + \vec{e}_{k,j} = \alpha_p (e^{i\eta_k(j-1)} + e^{i\eta_k(j+1)}) + e^{i\eta_k j} =$$

$$= (2\alpha_p \cos \eta_k + 1) e^{i\eta_k j} = \Theta_k e^{i\eta_k j}, \quad j = 0 \dots N-1, \quad \Rightarrow$$

$$P_l \vec{e}_k = \Theta_k \vec{e}_k. \quad (51)$$

Очевидно, Θ_k^{-1} являются собственными значениями оператора P_l^{-1} , поэтому в силу линейности всех операторов действие P_l^{-s} при ДПФ будет соответствовать домножению на Θ_k^{-s} . Заметим, что $\Theta_k > 0$ при $\alpha_p \in \left[\frac{1}{10}, \frac{1}{2} \right)$, поэтому Θ_k^{-1} при этом же условии всегда конечно.

Аналогичное утверждение относительно собственных значений справедливо и для P_r :

$$(P_r \vec{e}_k)_j = \vec{e}_{k,j-2} + \vec{e}_{k,j+2} - 2\vec{e}_{k,j} = 2(\cos 2\eta_k - 1) e^{i\eta_k j} = Z_k e^{i\eta_k j},$$

$$j = 0 \dots N-1, \quad \Rightarrow \quad P_r \vec{e}_k = Z_k \vec{e}_k. \quad (52)$$

Обозначим $\Xi_k = \mu_{PADE} \left(\frac{b_p}{4} Z_k + a_p H_k \right) \Theta_k^{-1}$. Очевидно, $\Xi_0 = 0$, покажем также, что $\Xi_k < 0$ для любого $k \neq 0$ и при $\alpha_p \in \left[\frac{1}{10}, \frac{1}{2} \right)$. В самом деле, так как $Z_k = 4(\cos^2 \eta_k - 1)$, то

$$\Xi_k = \mu_{PADE} (b_p \cos^2 \eta_k + 2a_p \cos \eta_k - b_p - 2a_p) \Theta_k^{-1} < 0 \iff$$

$$\cos^2 \eta_k + 2\nu \cos \eta_k - (1 + 2\nu) < 0, \quad \nu = \frac{a_p}{b_p}. \quad (53)$$

Поскольку $\nu > 0$ при указанном интервале значений α_p , то неравенство $(\cos \eta_k + \nu)^2 < (1 + \nu)^2$ выполняется для любого $k \neq 0$.

Теперь все готово для того, чтобы найти необходимое и достаточное условие КФЛ устойчивости схем с применением оператора Λ_{PADE} .

Утверждение 4. *Схема (42) с $\Lambda = \Lambda_{PADE}$ является устойчивой при $-\Xi_k \leq \sqrt{3}$, $k \neq 0$.*

Доказательство. Так как $\tilde{\Lambda} = \mu_{PADE} \Lambda_{PADE} = \mu_{PADE} P_l^{-1} \left[\frac{b_p}{4} P_r + a_p \Lambda_3 \right]$, то в силу линейности и найденных собственных значений трех операторов действие $\tilde{\Lambda}^s$ при ДПФ будет эквивалентно домножению на Ξ_k^s . Тогда для схемы (44) имеем следующее уравнение:

$$G^2 - 2G + 1 + G \Xi_k^2 - \frac{1}{12} \Xi_k^4 + \frac{1}{36} \Xi_k^6 = 0, \quad (54)$$

которое в точности повторяет уравнение (45), если заменить H_{RK} на Ξ_k . Следовательно, критерий устойчивости сводится к неравенству

$$\Xi_k^6 - 3\Xi_k^4 \leq 0 \Rightarrow \Xi_k^2 \leq 3, \quad k = 1 \dots N-1, \quad (55)$$

откуда с учетом $\Xi_k < 0$ приходим к нужному неравенству. Утверждение доказано.

Найдем теперь ограничения на число Куранта μ_{PADE} в явном виде для двух выбранных случаев. Пусть $\alpha_p = 1/10$, тогда $a_p = 12/10$, $b_p = 0$, и условие устойчивости сводится к следующему:

$$\begin{aligned} \mu_{PADE} &\leq -\frac{\sqrt{3}\Theta_k}{a_p H_k} = \sqrt{3} \frac{\cos \eta_k + 5}{12(1 - \cos \eta_k)}, \quad \text{если } \eta_k = \pi, \text{ то} \\ \mu_{PADE} &\leq \frac{\sqrt{3} \cdot 4}{24} = \frac{\sqrt{3}}{6}. \end{aligned} \quad (56)$$

Выбором N можно добиться некоторого ослабления условия (56), однако так же, как и в случае с простым трехточечным шаблоном, в реальных расчетах количество узлов сетки слишком велико, чтобы это ослабление стало заметным.

Пусть $\alpha_p = 2/11$, тогда $a_p = 12/11$, $b_p = 3/11$, условие устойчивости выглядит несколько сложнее:

$$\mu_{PADE} \leq 3^{-1/2} \frac{4 \cos \eta_k + 11}{9 - \cos^2 \eta_k - 8 \cos \eta_k} \equiv \xi(\eta_k). \quad (57)$$

Вычисляя нули производной $\xi'(\eta_k) = 0$, приходим к следующему уравнению:

$$\cos^2 \eta_k \sin \eta_k + 5.5 \cos \eta_k \sin \eta_k + 31 \sin \eta_k = 0, \quad (58)$$

которое выполняется либо при $\sin \eta_k = 0$, то есть, при $\eta_k = \pi$ (так как вариант $k = 0$ не рассматривается), либо при $(\cos \eta_k + \frac{11}{4})^2 + \frac{375}{16} = 0$, что, очевидно, не имеет решений.

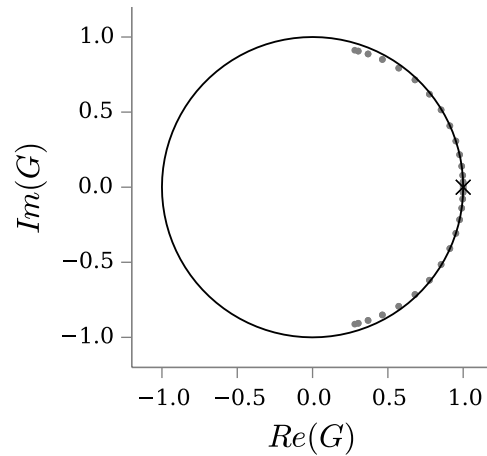
Так как $\xi(\pi) \leq \xi(\eta_k)$ для любого $k \neq 0$, то окончательно условие КФЛ выглядит так:

$$\mu_{PADE} \leq \frac{\sqrt{3} \cdot 7}{6 \cdot 8} \leq \xi(\pi). \quad (59)$$

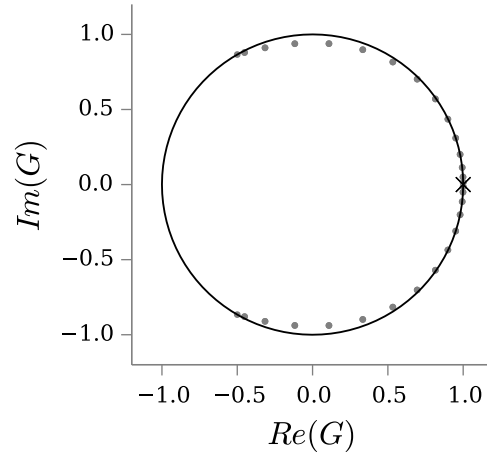
Соответствующие спектры оператора перехода C_{PADE} при $\alpha_p = 1/10, 2/11$ представлены на рис. 8.

5. Результаты

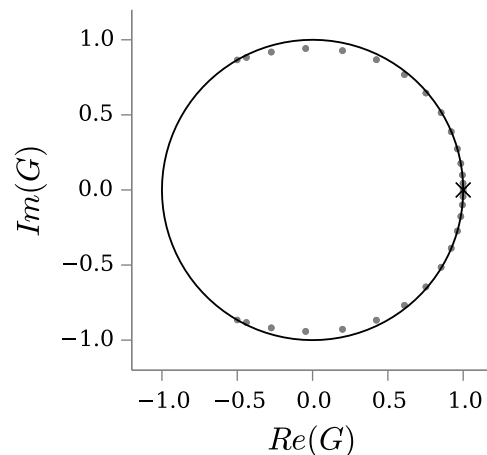
В данном разделе приводятся результаты численного моделирования и попытка некоторой интерпретации с точки зрения теории динамических систем. Во избежание ошибки все полученные численные решения проверялись несколькими схемами. На начальном этапе также было проведено сравнение схем между собой и проверка на соответствие теоретическим выкладкам. Например, на рис. 9 приведена норма разности одного и того же решения в некоторой точке j_0 , полученного неявной схемой Эйлера и схемой RK3 SSP. Величина шага по пространству была взята равной $\Delta u = 0.1$, так как в результате мас-



(a) $\alpha_p = 1/10, \mu_{PADE} = 0.2$



(b) $\alpha_p = 1/10, \mu_{PADE} = \frac{\sqrt{3}}{6}$



(c) $\alpha_p = 2/11, \mu_{PADE} = \frac{7\sqrt{3}}{8 \cdot 6}$

Рис. 8. Спектры оператора перехода для метода RK3 SSP с применением компактных производных. Обозначения прежние

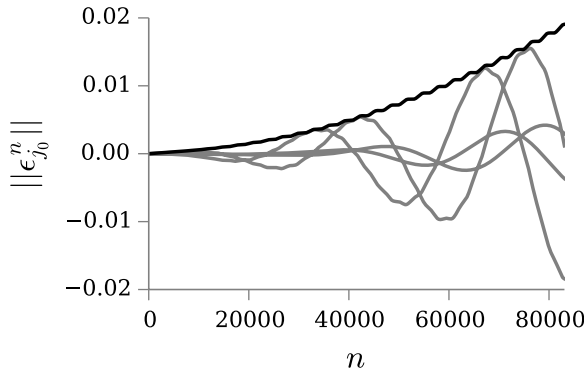


Рис. 9. Результат сравнения *BE* и *RK* схем. Серым обозначены покомпонентные разности $x^{RK} - x^{BE}$, черным – норма этих разностей в зависимости от шага по времени

штабирования при выведении уравнений характерный размер (длина волны) равен единице. Величина шага по времени определялась либо условиями КФЛ, либо также не превышала $\Delta t = 0.1$.

Как сказано выше, динамика усложнения исследовалась в шести различных конфигурациях: периодическая задача и задачи Дирихле и Неймана при размерах области $L = 10, 30$. В целом все сценарии довольно схожи, однако есть не только количественные (различные точки бифуркаций), но и качественные отличия.

Во всех трех задачах были обнаружены начальные стадии сценария Ландау-Хопфа, равно как и одновременное сосуществование нескольких аттракторов (мультистабильность). Так, при $g < 0.0095$ пространственно-однородное решение (10) сохраняет устойчивость, однако далее в его окрестности рождается неоднородный цикл. При $g \approx 0.0105$ происходит бифуркация Андронова-Хопфа, то есть, появляется квазипериодическое решение размерности два. Далее, при $g \approx 0.0139$ в результате бифуркации Хопфа рождается тор размерности три (рис.10а).

Помимо упомянутых решений, были найдены и другие устойчивые аттракторы, в частности, при $g \approx 0.009$ был обнаружен неоднородный цикл, который мог родиться из седло-узловой бифуркации.

Отличие сценария для задачи Неймана заключается в том, что однородный цикл теряет устойчивость уже при $g \approx 0.00445$. К тому же, не удалось обнаружить неоднородный цикл, так как из однородного сразу рождается неоднородный двухмерный тор, который существует вплоть до $g = 0.0057$. Однако далее его исследование становится затруднительным, так как вследствие ошибок вычислений траектория перескакивает на другое устойчивое решение. Этим решением является неоднородный устойчивый цикл, который возникает при $g \approx 0.0043$ и далее теряет устойчивость в результате бифуркации Хопфа при $g \approx 0.0095$. Родившийся тор, в свою очередь, также претерпевает бифуркацию Хопфа, в следствие чего при $g \approx 0.0130$ появляется трехмерный тор.

Граничные условия Дирихле рассматривались как однородные (все заданные значения на левой границе равны значениям на правой), так и неоднородные. Вид решений является намного более разнообразным, чем в двух других случаях (например, несимметричное квазипериодическое решение на рис. 10с), однако качественно сценарий усложнения не меняется; здесь также наблюдается мультистабильность. Очевидно, пространственно-однородного решения в данной задаче не существует, однако потеря устойчивости нулевым решением происходит при том же значении параметра, которая точно также сопровождается субкритической бифуркацией Хопфа. При $g = 0.0200$ обнаружен тор размерности два (рис. 10b), к тому же при $g = 0.0492$ из цикла также рождается тор. Последний сосуществует вместе с еще одним устойчивым циклом, появляющимся при $g = 0.0510$.

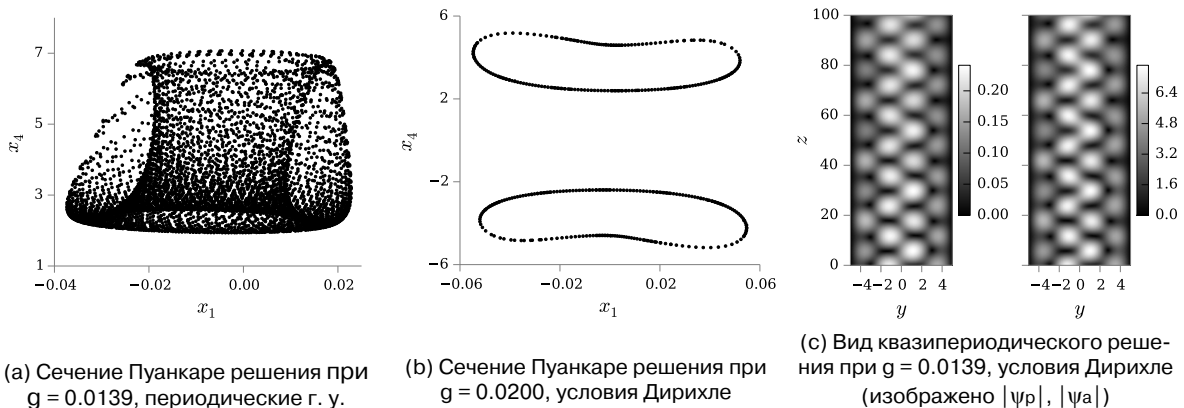


Рис. 10. Результаты моделирования при $L = 10$

При $L = 30$ основные моменты сценариев усложнения динамики остаются теми же самыми: потеря устойчивости однородного решения; рождение неоднородного цикла; рождение тора размерности два из однородного или неоднородного цикла; рождение трехмерного тора. Однако области устойчивости существенно сокращаются; так, для периодической задачи однородный цикл становится неустойчивым уже при $g = 0.0039$, при этом другой неоднородный цикл уже существует при $g = 0.003637$. Мультистабильность также наблюдалась во всех трех случаях.

6. Заключение

В работе представлены результаты исследования связанного нелинейного уравнения Шрёдингера. Подробно рассмотрены вопросы применимости некоторых конечно-разностных схем, использовавшихся при моделировании, в том числе высоких порядков, доказана устойчивость методом фон Неймана для периодических задач. Помимо этого, продемонстрировано наличие пространственно-однородного решения и аналитически предсказана субкритическая бифуркация Андронова-Хопфа, которая наблюдалась затем при моделировании. Были изучены начальные стадии усложнения динамики системы в различных постановках задачи, найдены устойчивые решения (циклы, торы), а также обнаружен эффект мультистабильности. Частично в данной системе реализуется сценарий Ландау-Хопфа, однако в целом все наблюдаемые каскады укладываются в обобщенный сценарий ФШМ [8].

Литература

1. *J. M. Pitarke, V. M. Silkin, E. V. Chulkov u P. M. Echenique.* «Theory of surface plasmons and surface-plasmon polaritons». В: Reports on Progress in Physics 70.1 (январь 2007), с. 1–87.
2. *D. Maystre.* «Survey of Surface Plasmon Polariton History». В: Plasmonics. Под ред. S. Enoch и N. Bonod. Т. 167. Springer Series in Optical Sciences. Springer Berlin Heidelberg, 2012, с. 3–37.
3. *A. Marini.* «Theory of nonlinear and amplified surface plasmon polaritons». Автореферат. University of Bath, Department of Physics, 2011.
4. *A. Marini, D. V. Skryabin и B. Malomed.* «Stable spatial plasmon solitons in a dielectric-metal-dielectric geometry with gain and loss». В: Optics Express 19.7 (2011), с. 6616–6622.
5. *X. Antoine, W. Bao u C. Besse.* «Computational methods for the dynamics of the nonlinear Schrödinger/Gross–Pitaevskii equations». В: Computer Physics Communications 184.12 (декабрь 2013), с. 2621–2633.
6. *A. Marini, M. Conforti, G. Della Valle, H. W. Lee, T. X. Tran, W. Chang, M. A. Schmidt, S. Longhi, P. S. J. Russell u F. Biancalana.* «Ultrafast nonlinear dynamics of surface plasmon polaritons in gold nanowires due to the intrinsic nonlinearity of metals». В: New Journal of Physics 15.1 (январь 2013), с. 013033–013051.
7. *A. R. Davoyan, I. V. Shadrivov u Y. S. Kivshar.* «Self-Focusing and Spatial Plasmon-Polariton Solitons». В: Optics Express 17.24 (2009), с. 21732–21737.
8. *Н. А. Магницкий.* Теория динамического хаоса. М.: ЛЕНАНД, 2011, с. 320.
9. *J. D. Hunter.* «Matplotlib: A 2D Graphics Environment». В: Computing In Science & Engineering 9.3 (2007), с. 90–95.
10. *D. J. Bergman u M. I. Stockman.* «Surface Plasmon Amplification by Stimulated Emission of Radiation: Quantum Generation of Coherent Surface Plasmons in Nanosystems». В: Physical Review Letters 90.2 (январь 2003), с. 027402–027405.
11. *M. A. Noginov, G. Zhu, M. Bahoura, J. Adegoke, C. E. Small, B. A. Ritzo, V. P. Drachev u V. M. Shalaev.* «Enhancement of surface plasmons in an Ag aggregate by optical gain in a dielectric medium». В: Optics Letters 31.20 (октябрь 2006), с. 3022–3024.
12. *M. A. Noginov, V. A. Podolskiy, G. Zhu, M. Mayy, M. Bahoura, J. A. Adegoke, B. A. Ritzo u K. Reynolds.* «Compensation of loss in propagating surface plasmon polariton by gain in adjacent dielectric medium». В: Optics Express 16.2 (2008), с. 1385–1392.
13. *A. B. Kozyrev, I. V. Shadrivov u Y. S. Kivshar.* «Soliton generation in active nonlinear metamaterials». В: Applied Physics Letters 104.8, 084105 (2014).
14. *A. V. Krasavin, T. P. Vo, W. Dickson, P. M. Bolger u A. V. Zayats.* «All-Plasmonic Modulation via Stimulated Emission of Copropagating Surface Plasmon Polaritons on a Substrate with Gain». В: Nano Letters 11.6 (2011), с. 2231–2235.
15. *M. Ambati, S. H. Nam, E. Ulin-Avila, D. A. Genov, G. Bartal u X. Zhang.* «Observation of Stimulated Emission of Surface Plasmon Polaritons». В: Nano Letters 8.11 (2008), с. 3998–4001.
16. *I. De Leon u P. Berini.* «Theory of surface plasmon-polariton amplification in planar structures incorporating dipolar gain media».

- В: *Physical Review B* 78.16 (окт. 2008), с. 161401–161404.
17. *P. Weinberger*. «John Kerr and his effects found in 1877 and 1878». В: *Philosophical Magazine Letters* 88.12 (дек. 2008), с. 897–907.
18. *S. v. d. Walt, S. C. Colbert u G. Varoquaux*. «The NumPy array: a structure for efficient numerical computation». В: *Computing in Science & Engineering* 13.2 (2011), с. 22–30.
19. *E. Jones, T. Oliphant u P. Peterson*. *SciPy: Open source scientific tools for Python*. 2001.
20. *E. Hairer, S. P. Nørsett u G. Wanner*. *Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems*. Т. 8. Springer Series in Computational Mathematics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1993, с. 528.
21. *G. D. Smith*. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. 3-е изд. Oxford Applied Mathematics and Computing Science Series. Clarendon Press, 1985, с. 352.
22. *J. W. Thomas*. *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Т. 22. Texts in Applied Mathematics. Springer-Verlag New York, 1995, с. 437.
23. *S. Gottlieb, C.-W. Shu u E. Tadmor*. «Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods». В: *SIAM Review* 43.1 (2001), с. 89–112.
24. *S. K. Lele*. «Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution». В: *Journal of Computational Physics* 103.1 (1992), с. 16–42.

Буров Дмитрий Анатольевич. Инженер-исследователь лаборатории ИСА ФИЦ ИУ РАН. Окончил в 2013 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Количество печатных работ: 5. Область научных интересов: хаос, дифференциальные уравнения, численные методы. E-mail: sarretdim@ya.ru.