ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11-2002-160

На правах рукописи
УДК 519.533.2; 517.986.7

СЕЛИН
Алексей Владимирович

МЕТОД АППРОКСИМАЦИИ ЭВОЛЮЦИОННЫХ ОПЕРАТОРОВ С ПОМОЩЬЮ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ И РАЦИОНАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ В ГИЛЬБЕРТОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Специальность: 01.01.07 — вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 2002

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна).

Научные руководители: доктор физико-математических наук, профессор
Пузынин Игорь Викторович

доктор физико-математических наук, профессор
Виницкий Сергей Ильич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Гулин Алексей Владимирович

кандидат физико-математических наук, доцент
Ловецкий Константин Петрович

Ведущая организация:
Московский государственный институт электроники и математики (технический университет).

Защита диссертации состоится "_____"__________________ 2002 г.
в _____ часов на заседании диссертационного совета Д720.001.04 Объединенного института ядерных исследований по адресу: 141980, г. Дубна, Московская область, ЛИТ, ОИЯИ.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "_____"__________________ 2002 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
кандидат физико-математических наук Ив З. М. Иванченко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

В прикладных задачах математической физики часто возникает потребность в приближенном решении с помощью ЭВМ уравнений эволюционного типа $x'(t) = A(t)x(t)$ с линейным дифференциальным оператором с частными производными $A(t)$ (уравнение Шредингера, волновое уравнение, уравнение теплопроводности, и т. п.). В настоящее время для решения такого рода задач наибольшее распространение получили методы, имеющие невысокий порядок (первый или второй) аппроксимации по временной переменной t, в которых существенным образом используется представление в расщепленном виде оператора $A(t) = \sum_\alpha A_\alpha(t)$. При возможности удачного выбора такого представления часто оказывается эффективным применение большой группы методов, включающих в себя методы дробных шагов, методы переменных направлений, методы расщепления и методы факторизации. Однако, на практике встречаются задачи, при решении которых низкий порядок аппроксимации по t указанных выше методов вынуждает выбирать крайне мелкий шаг по этой переменной для приемлемой точности приближенного решения. Примером такой ситуации могут служить задачи, требующие численного решения нестационарных уравнений Шредингера и Дирака, описывающих взаимодействие атомных систем с очень интенсивным электромагнитным полем. Требование обеспечить большую точность, как правило, приводит к существенному увеличению вычислительной работы. В таких задачах было бы желательно применение методов с высоким порядком аппроксимации по t для более рационального использования вычислительных ресурсов. Одним из подходов, позволяющих добиться увеличения порядка аппроксимации, является непосредственное применение методов высокого порядка для интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений, полученных из исходного уравнения путем той или иной конечномерной аппроксимации оператора $A(t)$. При этом, поскольку получаемая таким образом система уравнений является как правило жесткой, наиболее подходящими методами здесь оказываются одношаговые неявные методы Рунге–Кутты. Однако, в методах Рунге–Кутты вместе с увеличением порядка аппроксимации по t существенным образом увеличивается размерность матриц, которые необходимо обращать на каждом шаге по t. Это часто является практическим препятствием для широкого использования неявных методов Рунге–Кутты в рассматриваемом случае. Таким образом, создание экономичных методов высокого порядка для уравнений эволюционного типа и их надежное обоснование остается весьма актуальным направлением теории численных методов.

В работе развивается подход к приближенному интегрированию уравнений вида $x'(t) = A(t)x$ с переменным оператором $A(t)$ в гильбертовом пространстве, основанный на совместной аппроксимации эволюционного оператора с помощью экспоненциального представления и A-приемлемых рациональных функций $r(z)$, отображающих левую полуплоскость $\operatorname{Re} z \leq 0$ в единичный круг $|r(z)| \leq 1$ и имеющих заданный порядок касания с e^z в точке $z = 0$. Предложенный подход позволяет получить набор одношаговых неявных операторно-разностных схем с повышенным порядком аппроксимации по t, приводящих к более экономичным разностным схемам по сравнению с подходом, основанным на использовании методов Рунге–Кутты высокого порядка для линейных уравнений.

Целью работы является построение и теоретическое обоснование методов аппроксимации высокого порядка точности для линейных эволюционных операторов в гильбертовом пространстве, а также применение этих методов к численному решению нестационарного уравнения Шредингера, описывающего процесс надпороговой ионизации основного состояния атома водорода лазерным импульсом.

Для достижения этой цели решаются следующие основные задачи:

- выяснение условий устойчивости и сильной сходимости совместной аппроксимации эволюционного оператора с помощью экспоненциального представления и рациональных функциямй в гильбертовом пространстве;
- построение одношаговых неявных абсолютно-устойчивых разностных схем повышенного порядка точности на основе предложенного метода аппроксимаций эволюционного оператора и метода конечных элементов;
- сравнение эффективности предложенного метода и неявных методов Рунге–Кутты на примере нестационарного уравнения Шредингера.

Научная новизна и практическая ценность

Разработан и обоснован новый абсолютно устойчивый метод высокого порядка точности приближенного интегрирования задачи Коши для линейного эволюционного уравнения с переменным оператором в гильбертовом пространстве. Теоремы об устойчивости и сходимости предложенного метода, доказанные непосредственно для абстрактного дифференциального уравнения, создают качественную основу для применения разработанного метода к уравнениям эволюционного типа в конкретных функциональных пространствах.

Предложенный метод аппроксимации эволюционных операторов позволяет строить семейство неявных одношаговых абсолютно устойчивых разностных схем произвольного порядка точности по времени для большого класса линейных уравнений математической физики эволюционного типа. Такие разностные схемы требуют меньшего объема вычислительных затрат, чем разностные схемы того же порядка точности по времени, полученные путем применения неявных методов Рунге–Кутты к системам линейных обыкновенных дифференциальных уравнений.

Разностные схемы, полученные на основе предложенного метода аппроксимации эволюционных операторов применялись для численного решения трехмерного нестационарного уравнения Шредингера в задаче о фотоионизации атома водорода лазерным импульсом большой интенсивности. При этом был прослежен ряд закономерностей в энергетическом распределении фотоэлектронов, связанных с ангармоничностью переменного электрического поля, описываемого моделью движущегося зеркала при отражении лазерного импульса от поверхности твердого тела.

Для вычисления энергетического распределения фотоэлектронов был предложен и использован новый метод, основанный на процедуре сшивания численной волновой функции с асимптотическим решением на сфере ограниченного радиуса в конфигурационном пространстве. Это позволяет существенным образом уменьшить область конфигурационного пространства, в которой требуется знание численной волновой функции, по сравнению с традиционным способом получения этой характеристики процесса ионизации.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на I и II International Conferences "Modern Trends in Computational Physics", Dubna, Russia, June 15-20, 1998; July 24-29, 2000, а также на семинарах Лаборатории информационных технологий, ОИЯИ, Дубна.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в пяти научных работах.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, приложения и списка литературы. Содержит 103 страницы, включая 1 таблицу, 9 рисунков и список литературы из 91 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении показана актуальность темы, формально изложен предлагаемый метод построения аппроксимаций произвольного порядка точности для

эволюционного оператора $U(t,s)$, разрешающего задачу Коши для уравнения

$$x'(t) = A(t)x(t), \quad t \in [0,T] \tag{1}$$

в гильбертовом пространстве X с заданным линейным полуограниченным оператором $A(t) : X \to X$, обсуждается связь предлагаемого метода с неявными методами Рунге–Кутты интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений и кратко перечислены полученные результаты.

В первой главе вводится класс $\mathcal{K}_l^q([0,T])$ операторных коэффициентов $A(t)$ уравнения (1) в гильбертовом пространстве X, играющих роль оператор-функций повышенной гладкости, и обсуждаются свойства операторов этого класса. Показывается разрешимость задачи Коши для уравнения (1) с такими операторами единственным образом. Именно для операторов этого класса в дальнейшем проводится доказательство сходимости аппроксимаций эволюционного оператора уравнения (1), построенных с помощью экспоненциального представления оператора эволюции и A-приемлемых рациональных функций.

Определение. Замкнутый линейный оператор $A(t) : X \to X$, действующий в гильбертовом пространстве X и зависящий от параметра $t \in [0,T]$ принадлежит классу $\mathcal{K}_l^q([0,T])$, если выполнены следующие условия:

(a) для каждого $t \in [0,T]$ оператор $A(t)$ является производящим оператором сжимающей полугруппы;

(b) для $k = 1, 2, ..., l$ области определения степеней $A^k(t)$ не зависят от t, $D(A^k(t)) = D_k$;

(c) операторы $B_k(t,s) = [I - A(t)]^k[I - A(s)]^{-k}$ равномерно ограничены по норме при $t, s \in [0,T]$;

(d) операторы $B_k(t,s)$ имеют q непрерывных сильных производных по t хотя бы для одного значения $s \in [0,T]$.

В разделе 1.1 даются некоторые определения теории дифференциальных уравнений в банаховом и гильбертовом пространствах, связанные с понятиями C_0-полугрупп и ограниченных эволюционных операторов. Описывается используемый в настоящей работе способ Като построения эволюционного оператора. В этом же разделе доказывается ряд вспомогательных утверждений, в частности об отображении C_0-полугруппой $\exp\{tA\}$ областей определения степеней своего производящего оператора A в себя. В разделе 1.2 это утверждение обобщается на случай зависящего от t оператора A, принадлежащего классу $\mathcal{K}_l^q([0,T])$:

Теорема (I). *Пусть замкнутый оператор $A(t)$ в гильбертовом пространстве X принадлежит $\mathcal{K}_l^q([0,T])$, $q, l \geq 1$. Тогда при $k = 1, 2, ..., l$ эволюционный оператор $U(t,s)$ уравнения (1) отображает D_k в D_k, причем для операторов $W_k(t,s) = [I - A(t)]^k U(t,s)[I - A(s)]^{-k}$ справедлива оценка $\|W_k(t,s)\| \leq \exp\{K(t-s)\}$ с некоторым конечным K при всех $0 \leq s \leq t \leq T$.*

Доказательство теоремы проводится с помощью обоснования существования сильного предела у разностных уравнений, аппроксимирующих операторы $W_k(t,s)$. Эта теорема обеспечивает выполнение условий устойчивости аппроксимаций эволюционных операторов для уравнений с переменным оператором класса $\mathcal{K}_l^q([0,T])$. В разделе 1.3, исходя из одной теоремы И. Неймана, получены оценки для норм A-приемлемых рациональных функций от максимальных диссипативных и полуограниченных операторов в гильбертовом пространстве, а также получены оценки, сравнивающие дискретную и непрерывную полугруппы, и приводятся некоторые примеры A-приемлемых рациональных функций.

Во второй главе проводится построение и обоснование сходимости предложенного метода, общая форма которого может быть представлена в виде p-стадийной одношаговой неявной операторно-разностной схемы,

$$(I - \mu_m F_j^{(q)}) y_{m+1} = (I - \nu_m F_j^{(q)}) y_m, \quad m = 1, 2, ..., p, \tag{2}$$

в которой каждому шагу j по t соответствуют операторные уравнения для последовательного определения элементов $y_i \in X$ Элементы y_m имеют вспомогательное значение, причем на j-ом шаге $y_1 \in X$ соответствует приближенному решению исходного уравнения в точке t_j, а $y_{p+1} \in X$ решению в точке t_{j+1}. Через I здесь обозначен тождественный оператор, а коэффициенты ν_m и μ_m определяются положением нулей и полюсов выбранной рациональной аппроксимации экспоненты $r(z)$. Операторные уравнения (2) можно использовать как отправную точку для получения окончательных систем алгебраических уравнений при конечномерных аппроксимациях исходного функционального пространства, например в рамках методов Галеркина или конечных элементов.

В разделе 2.1 применяются квадратурные интерполяционные правила для аппроксимации кратных интегралов хронологического ряда с необходимым порядком точности q в экспоненциальном представлении оператора эволюции. Общая квадратурная формула для оператора $F_j^{(q)}$ представляется в виде

$$F_j^{(q)} = \sum_{k=1}^{q} \sum_{i_1,...,i_k=1,...,p} w^k(i_1, ..., i_k) \mathfrak{g}_k(A\{i_1\}, ..., A\{i_k\}), \tag{3}$$

$$A\{i\} = (t_{j+1} - t_j) A(t_j + \beta_i (t_{j+1} - t_j)),$$

где коэффициенты w^k, $k = 1, 2, ..., q$ и узлы β_i, $i = 1, ..., p$ удовлетворяют системе алгебраических уравнений

$$\sum_{i_1,...,i_k=1,...,p} w^k(i_1, ..., i_k) \beta_{i_1}^{l_1} ... \beta_{i_k}^{l_k} = \int_0^1 \mathrm{d}\xi_1 \xi_1^{l_1} \int_0^{\xi_1} \mathrm{d}\xi_2 \xi_2^{l_2} ... \int_0^{\xi_{k-1}} \mathrm{d}\xi_k \xi_k^{l_k},$$

$$l_1, ..., l_k = 0, 1, ...; \quad \sum_{i=1}^{k} l_i \leq q - k.$$

Под $\mathfrak{g}_k(A_1, A_2, ..., A_k)$, $k = 1, 2, ...$ в выражении (3) подразумевается некоторая универсальная последовательность полиномов от некоммутирующих переменных A_i, причем каждый полином $\mathfrak{g}_k$ однороден первой степени по каждой своей переменной и является коммутаторным полиномом, т. е. выражается в виде линейной комбинации переменных $A_1, ..., A_k$, их коммутаторов $[A_i, A_k] = A_iA_k - A_kA_i$, коммутаторов от всех полученных до рассматриваемого шага выражений и т. д. Рассмотрены некоторые частные случаи представления (3) для порядков аппроксимации $q = 2,4,6$. Например для $q = 2,4$ операторы $F_j^{(q)}$ могут быть выбраны в виде

$$F_j^{(2)} = A\{1\}, \quad p=1, \quad \beta_1 = \frac{1}{2},$$

$$F_j^{(4)} = \frac{1}{2}A\{1\} + \frac{1}{2}A\{2\} + \frac{\sqrt{3}}{12}[A\{2\}, A\{1\}], \quad p=2, \quad \beta_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{6},$$

$$F_j^{(4)} = \frac{1}{6}A\{1\} + \frac{4}{6}A\{2\} + \frac{1}{6}A\{3\} + \frac{1}{12}[A\{3\} - A\{1\}, A\{2\}],$$

$$p=3, \quad \beta_{1,2,3} = 0, 1/2, 1.$$

В разделе 2.2 сравниваются точный эволюционный оператор $U(t_{j+1}, t_j)$ и его приближение экспоненциальным представлением, порожденное оператором $F_j^{(q)}$, а в разделе 2.3 доказывается основная теорема о сходимости:

Теорема (II). *Пусть замкнутый оператор $A(t)$ в гильбертовом пространстве X принадлежит классу $\mathcal{K}_l^q([0,T])$, $l = q(q+1)$, и пусть для некоторого $\delta > 0$ операторы $F_j^{(q)}$, заданные на разбиениях $\Omega = \{0 = t_0 < t_1 < ... < t_n = T\}$ с шагом $\tau < \delta$ таковы, что*

$$\mathrm{Re}(x, F_j^{(q)}x) \le \omega\tau\|x\|^2, \quad x \in D_q, \quad \omega < +\infty.$$

Тогда оператор $Y^{(q)}(\Omega)$, построенный с помощью максимальных полуограниченных расширений $\widetilde{F}_j^{q)} \supset F_j^{(q)}$ и произвольной A-приемлемой рациональной функции $r(z)$,

$$Y^{(q)}(\Omega) = r(\widetilde{F}_{n-1}^{(q)})r(\widetilde{F}_{n-2}^{(q)})...r(\widetilde{F}_0^{(q)}),$$

сильно сходится к эволюционному оператору $U(0,T)$ при $\tau \to 0$, причем при достаточно малых τ справедлива оценка

$$\|Y^{(q)}(\Omega)x - U(T,0)x\| \le C\tau^q\|A^l(0)x\|, \quad x \in D_l,$$

где постоянная C не зависит от разбиения Ω.

В разделе 2.4 основная теорема применяется к нестационарному уравнению Шредингера, в котором оператор Гамильтона $H(t)$ представляет собой самосопряженный дифференциальный оператор в частных производных, действующий в гильбертовом пространстве $L_2(\mathbb{R}^m)$

$$H(t) = (-\Delta)^d + \sum_{|\beta| \le 2d-1} a_\beta(x,t)\partial^\beta, \quad d \ge 1, \quad x \in \mathbb{R}^m, \quad t \in [0,T],$$

$$\beta = (\beta_1, ..., \beta_m), \quad |\beta| = \beta_1 + ... + \beta_m, \quad \partial^\beta = \frac{\partial^{\beta_1}}{\partial x_1^{\beta_1}} \cdots \frac{\partial^{\beta_m}}{\partial x_m^{\beta_m}}.$$

Здесь через Δ обозначен оператор Лапласа в $\mathbb{R}^m$. Показано, что при выполнении требований

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^m} |\partial^\alpha a_\beta(x,t)| < \infty, \quad t \mapsto \partial^\alpha a_\beta(x,t) \in C^q[0,T], \quad |\beta| \le 2d-1.$$

относительно функций $a_\beta(x,t)$ при всех мультииндексах $|\alpha| \ge 0$, а также при условии равномерной непрерывности $\partial_t^i \partial^\alpha a_\beta(x,t)$ по $x \in \mathbb{R}^m$, $i \le q$, для нормы разности приближенного и точного решений уравнения Шредингера $i\psi'(t) = H(t)\psi$ с начальным условием $\psi(t_0) = \psi_0$ выполняется оценка $\|\psi(t_j) - \psi_j\| \le C\tau^q\|\psi_0\|_l$, $\quad l = 2dq(q+1)$, где через $\|\cdot\|_l$ обозначена норма в пространстве Соболева $W_l^2(\mathbb{R}^m)$, а C есть некоторая независящая от разбиения Ω постоянная.

В третьей главе рассматривается приложение метода экспоненциальных представлений для аппроксимации эволюционных операторов к численному решению трехмерного нестационарного уравнения Шредингера, описывающего процесс ионизации атома водорода линейно-поляризованным лазерным импульсом. В разделе 3.1 проводится сравнение предложенных методов с неявными методами Рунге–Кутты на примере точно-решаемой двухуровневой квантовой системы с периодическим возмущением. В разделе 3.2 обсуждается методика дискретизации операторно-разностных схем (2) для уравнения Шредингера по пространственным переменным с помощью метода Галеркина. При этом в качестве базисных функций $L_2(\mathbb{R}^3)$ используется набор сферических функций по угловым переменным и кубических B-сплайнов по радиальной переменной. В разделе 3.3 рассматривается способ продолжения волновой функции, полученной численным интегрированием уравнения Шредингера в ограниченной области конфигурационного пространства. Продолженная на все конфигурационное пространство волновая функция используется затем для получения распределения фотоэлектронов по энергиям. В разделе 3.4 проводится численное исследование влияния амплитудной модуляции лазерного импульса большой интенсивности ($10^{14} - 10^{15}$ W/cm^2) на процесс надпороговой ионизации основного состояния атома водорода.

В приложении дается вывод альтернативной формы экспоненциального представления оператора эволюции $U(t,s)$, в котором $\log U(t,s)$ выражен в виде формального степенного ряда по параметру $(t-s)$.

На защиту выдвигаются следующие результаты:

1. Предложен новый метод аппроксимации эволюционных операторов, основанный на идее комбинирования разложения Магнуса для эволюционного оператора с рациональными аппроксимациями экспоненциальной функции.

2. Получены достаточные условия, обеспечивающие устойчивость и сильную сходимость предложенных аппроксимаций в гильбертовом пространстве при уменьшении шага по времени с произвольным наперед заданным порядком сходимости.

3. Показано существование сходящихся аппроксимаций предложенного типа для унитарного оператора эволюции, соответствующего классу дифференциальных операторов Шредингера в пространстве $L_2(\mathbb{R}^n)$.

4. Предложен ряд операторно-разностных схем, аппроксимирующих исходное эволюционное уравнение до шестого порядка включительно.

5. Проведено сравнение предложенных методов с неявными методами Рунге–Кутты на примере численного решения нестационарного уравнения Шредингера, которое показало преимущество предложенных методов с точки зрения экономичности.

6. Предложен новый способ вычисления спектральной плотности фотоэлектронов с помощью численного решения нестационарного уравнения Шредингера для задачи о фотоионизации атома водорода лазерным импульсом большой интенсивности.

7. Путем численных экспериментов показано, что увеличение степени ангармоничности лазерного импульса при фотоионизации атома водорода приводит к сдвигу пиков надпороговой ионизации в энергетическом распределении фотоэлектронов, а также к относительному увеличению выхода фотоэлектронов в области высоких энергий.

ПУБЛИКАЦИИ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ДИССЕРТАЦИИ

1. А. В. Селин, Метод приближенного решения линейного эволюционного уравнения в гильбертовом пространстве, ЖВМ и МФ, Т. 42, N 7, с. 937-949 (2002).

2. I. V. Puzynin, A. V. Selin, S. I. Vinitsky, Magnus-factorized method for numerical solving the time-dependent Schrödinger equation, Comput. Phys. Commun. **126**, 158-161 (2000).

3. A. M. Ermolaev, A. V. Selin, Integral boundary conditions for the time-dependent Schrödinger equation: superposition of a laser field and a long range atomic potential, Phys. Rev A**62**, 15401 (2000).

4. I. V. Puzynin, A. V. Selin, S. I. Vinitsky, A high-order accuracy method for numerical solving of the time-dependent Schrödinger equation, Comput. Phys. Commun. **123**, 1-6 (1999).

5. A. M. Ermolaev, I. V. Puzynin, A. V. Selin, S. I. Vinitsky, Integral boundary conditions for the time-dependent Schrödinger equation: atom in a laser field, Phys. Rev. A**60**, 4831-4845 (1999).

Получено 8 июля 2002 г.