بررسی روش گام – بشکافت روی معادلات ماکسول و معادلات شرودینگر غیرخطی تعمیم یافته

سید محمد حسینی[i]، مریم خیرمند[ii]

چکیده

عملیات گام – بشکافت در سیستمهای هامیلتونی مانند معادلات موج غیر خطی بطور موفقیت آمیزی بکار برده شده است. در بیشتر موارد دلیل استفاده از عملیات گام – بشکافت این است که می‌توان با استفاده از این عملیات، یک معادله دیفرانسیل معمولی (ODE) را به دو معادله ODE شکافت که حل ساده تری نسبت به معادله اولیه دارند. این عملیات در مورد معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی (PDE) نیز می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. انتخاب عملگر شکافت بستگی به مسأله دارد و بطور کلی مشخص نمی‌باشد.

در این مقاله عملیات گام – بشکافت روی معادلات ماکسول سه بعدی و معادلات شرودینگر غیرخطی تعمیم یافته بررسی خواهد شد و نشان داده می‌شود که استفاده از این عملیات این امکان را فراهم می‌سازد که بتوان مرتبه دقت در مکان وزمان را بطور دلخواه تعیین کرد.

کلمات کلیدی

گام- بشکافت، سری فوریه، شبه طیفی، معادلات ماکسول، معادلات شرودینگرغیر خطی

Analysis of Split Step Method on the Maxwell's Equations and Generalized Nonlinear Schrodinger Equations

S. M. Hosseini, M.khairmand

ABSTRACT

Split-step processes have been successfully applied to Hamiltonian systems such as nonlinear wave equations. In most cases, the reason for using the split-step processes is that it can be split an ordinary differential equation (ODE) into two ODEs which are easily solved comparing to the original equation. These processes are also applicable to partial differential equations, and the selection of the split operator depends on the problem.

In this paper, it is investigated the effect of split-step processes on D3 Maxwell equations and generalized nonlinear Schrodinger equations. It was shown that by using these processes arbitrary order of accuracy in time and space are obtained.

KEYWORDS

Split-step, series Fourier, Pseudo spectral, Maxwell equation, Nonlinear Schrodinger equation

[i] استاد بخش ریاضی دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس Email: :hossei_m@modares.ac.ir

[ii] کارشناسی ارشد، دانشکده علوم پایه، بخش ریاضی، دانشگاه تربیت مدرس Email: ma_khairmand@yahoo..com.

۱- مقدمه

عملیات گام – بشکافت در روشهای عددی برای سیستمهای هامیلتونی توسط روث [۱]، فارست [۲] و یوشیدا [۳] مانند معادلات موج غیرخطی[۲] بطور موفقیت آمیزی بکار برده شده است. جوابهای تفاضلات متناهی وابسته به زمان (FDTD) معادلات ماکسول نقش مهمی در بسیاری از مسائل کاربردی دارند.بیشتر مسائل FDTD دارای دو متغیر طول موج و دیگری اندازه‌ی جسم با مقیاس های مکانی متفاوت می‌باشند. در بیشتر موارد طول موج خیلی بزرگتر از اندازه ی جسم است، بنابراین طبیعی است که تمایل به استفاده از طول گامهای مکانی کوچک با طول گامهای زمانی بزرگ وجود داشته باشد و Δt بوسیله دقت مورد نظر برای انتگرالگیری تعیین شود. پس باید روشی را یافت که شرط پایداری، برای طول گام زمانی محدودیتی ایجاد نکند. در این راستا روش گام- بشکافت روی معادلات ماکسول پیاده می‌شود و نشان داده می‌شود که با بکاربردن این روش، کافیست در هر گام ۳ جفت معادله ی موج یک بعدی حل شود[۳]،[۴] . که این زیر مسأله ها با روش طیفی حل می‌شوند. برای مقایسه بیشتر، یک روش شبه طیفی نیز روی معادلات ماکسول پیاده می‌شود.

بهمین صورت با استفاده از عملیات گام-بشکافت، معادلات شرودینگر غیرخطی تعمیم یافته به دو معادله خطی و غیرخطی شکافته می‌شود که حل ساده تری نسبت به معادله ی اولیه دارند[۵]، [۶].

به منظور اینکه الگوریتم پیاده سازی روش گام-بشکافت برای خوانندگان قابل استفاده باشد در این مقاله جزئیات بیشتری از پیاده سازی عملیات گام-بشکافت روی معادلات، نسبت به سایر مقاله ها آورده شده است. شرح پیاده سازی این عملیات بطور کامل برای معادله ماکسول در بخش های ۲و۳ و برای معادله شرودینگر در بخش ٤-۲ آمده است .

۲- روش گام – بشکافت

در ساده ترین حالت اگر دقت مرتبه اول در زمان مورد نظر باشد، برای تعیین جواب یک معادله دیفرانسیل معمولی (ODE) بصورت $u_t = Au+Bu$ در زمان $t+\Delta t$ با استفاده از جواب در زمان t، به شیوه رابطه ۱ عمل می‌گردد

$$\begin{cases} u_t = ۲A(u) & \left[t, t+\frac{۱}{۲}\Delta t\right] \\ u_t = ۲B(u) & \left[t+\frac{۱}{۲}\Delta t, t+\Delta t\right] \end{cases} \qquad (۱)$$

که A و B بطورکلی عملگرهای غیرخطی هستند و لزومی ندارد که نسبت به ضرب تعویض پذیر باشند.

در هر دو مرحله $u_t = ۲A(u)$ و $u_t = ۲B(u)$ طول گام برابر $\frac{۱}{۲}\Delta t$ می‌باشد، که با $\{\frac{۱}{۲}, \frac{۱}{۲}\}$ نمایش داده می‌شود. برای رسیدن به دقت مرتبه دوم از طرح $A، B، A$ و گامهای زمانی $\{\frac{۱}{۴}, \frac{۱}{۲}, \frac{۱}{۴}\}$ استفاده می‌شود، برای رسیدن به دقتهای مرتبه بالاتر باید از دنباله طول گام طولانی تر و از طرح $\{A، B، A، B، ...\}$ استفاده شود[۱۰]،[۱۲].

۳- فرمولبندی گام – بشکافت معادلات ماکسول سه بعدی

برای یک رسانای همگن با ثابت دی الکتریک ε و نفوذپذیری مغناطیسی μ، معادلات ماکسول سه بعدی بصورت رابطه (۲) می‌باشد

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{۱}{\varepsilon}\Delta \times H$$
$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{۱}{\mu}\Delta \times E \qquad (۲)$$

که $E = (E_x, E_y, E_z)$، $H = (H_x, H_y, H_z)$
صورت مؤلفه ای معادلات (۲) رابطه(۳) می‌باشد :

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \\ H_x \\ H_y \\ H_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{۱}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial y}H_z \\ \frac{۱}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial z}H_x \\ \frac{۱}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}H_y \\ \frac{۱}{\mu}\frac{\partial}{\partial z}E_y \\ \frac{۱}{\mu}\frac{\partial}{\partial x}E_z \\ \frac{۱}{\mu}\frac{\partial}{\partial y}E_x \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{۱}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial z}H_y \\ -\frac{۱}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}H_z \\ -\frac{۱}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial y}H_x \\ -\frac{۱}{\mu}\frac{\partial}{\partial y}E_z \\ -\frac{۱}{\mu}\frac{\partial}{\partial z}E_x \\ -\frac{۱}{\mu}\frac{\partial}{\partial x}E_y \end{bmatrix} \qquad (۳)$$

بطورمختصر

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Au + Bu$$

که $u = (E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z)$.

با استفاده از عملیات گام- بشکافت معادلهٔ بالا چندبار بصورت $\frac{\partial u}{\partial t} = ۲Au$ و $\frac{\partial u}{\partial t} = ۲Bu$ با Δt های خاص پیش برده می‌شود، این دو زیر مسأله می‌توانند بصورت رابطه (۴) نوشته شوند.

$$\left\{\begin{array}{l}\left\{\begin{array}{l}\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{۲}{\varepsilon}\frac{\partial H_z}{\partial y}\\ \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{۲}{\mu}\frac{\partial E_x}{\partial y}\end{array}\right\}\\ \left\{\begin{array}{l}\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{۲}{\varepsilon}\frac{\partial H_x}{\partial z}\\ \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{۲}{\mu}\frac{\partial E_y}{\partial z}\end{array}\right\}\\ \left\{\begin{array}{l}\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{۲}{\varepsilon}\frac{\partial H_y}{\partial x}\\ \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{۲}{\mu}\frac{\partial E_z}{\partial x}\end{array}\right\}\end{array}\right\}, \left\{\begin{array}{l}\left\{\begin{array}{l}\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{۲}{\varepsilon}\frac{\partial H_y}{\partial z}\\ \frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{۲}{\mu}\frac{\partial E_x}{\partial z}\end{array}\right\}\\ \left\{\begin{array}{l}\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{۲}{\varepsilon}\frac{\partial H_z}{\partial x}\\ \frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{۲}{\mu}\frac{\partial E_y}{\partial x}\end{array}\right\}\\ \left\{\begin{array}{l}\frac{\partial E_z}{\partial t} = -\frac{۲}{\varepsilon}\frac{\partial H_x}{\partial y}\\ \frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{۲}{\mu}\frac{\partial E_z}{\partial y}\end{array}\right\}\end{array}\right\} \qquad (۴)$$

به این ترتیب در هر مرحله ۲ زیر مسأله وجود دارد که همانطور که دیده می‌شود هر زیر مسأله شامل ۳ جفت معادلهٔ موج یک بعدی می‌باشد.

۳-۱- حل زیر مسأله یک بعدی

روشهای عددی مختلفی برای حل زیر مسأله خطی یک بعدی در رابطه(۴) وجود دارد، به دلیل تمرکز روی طول گام زمانی، توجه می‌کنیم که زیر مسأله می‌تواند هم روی بازهٔ نامتناهی و هم روی بازهٔ متناهی ومتناوب، بطورتحلیلی حل شود.

می‌توان هر زیر مسأله در (۴) را بطور کلی بصورت رابطه (۵) نوشت :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha\frac{\partial v}{\partial x}, \qquad \frac{\partial v}{\partial t} = \beta\frac{\partial u}{\partial x} \qquad (۵)$$

با شرایط اولیه

$$u(x,۰) = u_۰(x), \qquad v(x,۰) = v_۰(x)$$

که α و β ثابتهای هم علامت می‌باشند.

جواب دالامبر مسأله یادشده برای بازهٔ نامتناهی عبارتست از:

$$u(x,t) = \left\{\frac{۱}{۲}\left[u_۰(x+ct) + u_۰(x-ct) + \operatorname{sgn}(\alpha)\sqrt{\frac{\alpha}{\beta}}\,[v_۰(x+ct) + v_۰(x-ct)]\right]\right\}$$

$$v(x,t) = \left\{\frac{۱}{۲}\left[v_۰(x+ct) + v_۰(x-ct) + \operatorname{sgn}(\beta)\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}\,[u_۰(x+ct) + u_۰(x-ct)]\right]\right\}$$

درحالتی که در بعد مکان دارای دوره تناوب L باشیم، با توجه به سری فوریه $u_۰, v_۰, u, v$، جواب در فضای فوریه بصورت رابطه ۵ خواهد بود

$$\hat{u}(\omega,t) = \hat{u}_۰(\omega)\cos(\delta_\omega ct) + i\,\operatorname{sgn}(\alpha)\sqrt{\frac{\alpha}{\beta}}\,\hat{v}_۰(\omega)\sin(\delta_\omega ct)$$
$$\hat{v}(\omega,t) = \hat{v}_۰(\omega)\cos(\delta_\omega ct) + i\,\operatorname{sgn}(\beta)\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}\,\hat{u}_۰(\omega)\sin(\delta_\omega ct)$$

(۶) که

$$\delta_\omega = ۲\pi\omega/L$$
$$\delta_\omega = ۲\pi(\omega - N)/L$$

($\hat{V}$ و $\hat{u}$ ضرایب فوریه V و u می‌باشند)

در این حالت برای ادامه حل، ابتدا مقادیر اولیه از فضای فیزیکی به فضای فوریه تبدیل می‌شود، سپس رابطه(۶) بکاربرده می‌شود، درنهایت دوباره جواب به فضای فیزیکی برگردانده می‌شود.

برای تبدیل فوریه گسسته (DFT) مورد نیاز

$$\hat{f}(\omega) = \frac{۱}{N}\sum_{j=۰}^{N-۱} f(x_j)\, e^{-i(۲\pi/N)j\omega}, \quad \omega = ۰,۱,\dots,N-۱$$

$$f(x_j) = \sum_{\omega=۰}^{N-۱} \hat{f}(\omega)\, e^{i(۲\pi/N)j\omega}, \quad j = ۰,۱,\dots,N-۱$$

از الگوریتم تبدیل فوریه سریع (FFT) استفاده می‌شود.

۳-۲- جواب دقیق معادلات ماکسول سه بعدی تناوبی

فرض کنید $K = (۲\pi/L)(k,l,m)$ برای k, l, m داده شده ای که $k^۲+l^۲+m^۲ \neq ۰$ و بردار غیر صفر n در مکان که $K.n = ۰$. اگر فرض شود $r = (x, y, z)$، سپس توابع زیر یک مجموعه جواب دقیق برای معادلات ماکسول سه بعدی با دوره تناوب L تشکیل می‌دهند.

$$E = (E_x, E_y, E_z) = E_۰\cos(Kr - |K|ct + \delta)\,\overline{n},$$
$$H = (H_x, H_y, H_z) = E_۰\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}\cos(Kr - |K|ct + \delta)\,(\overline{K}\times\overline{n}) \qquad (۷)$$

که $E_۰$ و δ ثابت هستند و $c = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}$ و $\overline{K} = K/|K|$ و $\overline{n} = n/|n|$.

این معادلات یک مثال از میدان های الکتریکی ومغناطیسی در یک موج تخت با بردار انتشار $\overline{K}$ و بردار قطبیده $\overline{n}$ می‌باشند.

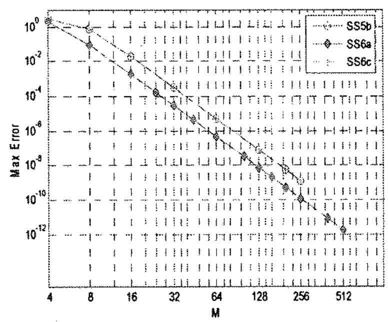
برای امتحان روش، در این مسأله قرار داده می‌شود $n = (۱,-۲,۱)$, $\delta = ۰$, $L = ۱$, $K = ۲\pi(۱,۱,۱)$ و $E_۰ = \sqrt{۶}$.

۳-۳- پیاده سازی عددی

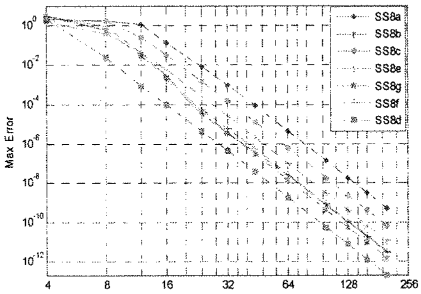
در اینجا روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴و ۶و ۸ روی مسأله پیاده می‌شود. چون دنباله طول گامها که در بخش (۲) ذکر شد،برای روشهای مرتبه ۶و ۸ منحصر بفرد نیستند و چندین روش گام بشکافت مرتبه ۶ وجود دارد، با SS٦ a , SS٦b , SS٦c نشان داده می‌شوند، بهمین ترتیب چون چندین روش مرتبه ۸ وجود دارد، با SS٨a ,...,SS٨g نشان داده می شوند (البته بطور دقیق نمی‌توان گفت چند روش مرتبه ۶و ۸ وجود دارد[۱۲]). به منظور مقایسه روشهای گام – بشکافت با روشهای تفاضلات متناهی وابسته به زمان (FDTD) متداول، روش YEE هم روی معادلات ماکسول، پیاده می‌شود [۷]،[۱۱]. روش YEE برای تقریب مشتقات از تفاضلات مرکزی استفاده می‌کند، البته در اینجا برای تقریبات مکانی از روش شبه طیفی استفاده می‌شود و با YS نمایش داده می‌شود[۸]،[۱۳].

۳-٤- نتایج عددی

در مثال عددی، از توابع داده شده (۷) با $\varepsilon = \mu = ۱$ و $t = ۰$ بعنوان شرایط اولیه استفاده می‌شود. طول گام مکانی برابر $h = \Delta x = \Delta y = \Delta z = {}^{1}\!/_{N}$ که N توانی از ۲ می‌باشد، خواهد بود. طول گام زمانی برابر $\Delta t = {}^{1}\!/_{M}$، فرض می‌شود، که M تعداد گامها از زمان $t = 0$ تا $t = ۱$ است. شکل ۱و۲ همگرایی و دقت روشهای مرتبه ٦و٨ را بعنوان تابعی از M نشان می‌دهد. دیده می‌شود دنباله های متفاوت با M یکسان دقتهای متفاوتی را ارائه مي دهند اما سرعت همگرايي آنها یکسان می‌باشد. با توجه به نمودارها مشخص می‌شود که در این مثال بین روشهای مرتبه ۶، روش SS٦a و در بین روشهای مرتبه٨، SS٨ d از نظر کارآیی بهتر می‌باشند، البته بدلیل نزدیک بودن دنباله ضرایب روشهای مرتبه ۶ دیده می‌شود که خطاها اختلاف زیادی باهم ندارند(همچنین در مورد روش مرتبه ۸).

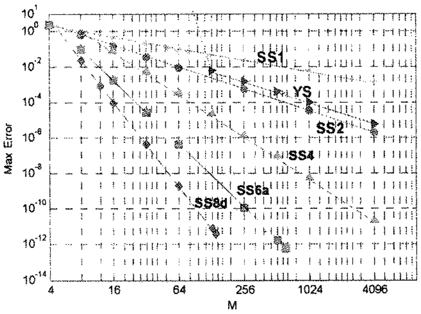


شکل (۱): ماکزیمم خطا روشهای مرتبه ۶ برای N=۳۲ در زمان t=۱.

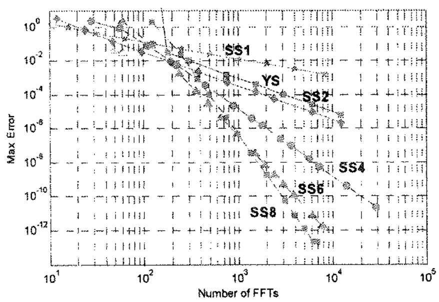


شکل (۲): ماکزیمم خطا روشهای مرتبه ۸ برای N=۳۲ در زمان t=۱.

شکل ۳ ماکزیمم خطا را بعنوان تابعی از M نشان می‌دهد. شکل ۴ ماکزیمم خطا را بعنوان تابعی از تعداد FFT هائیکه هر روش برای رسیدن به دقتی خاص نیاز دارد، نشان می‌دهد.



شکل (۳): ماکزیمم خطا روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴و ۶و ۸و روش YS برای N=۳۲ در زمان t=۱.



شکل (۴): هزینه محاسبات روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴و ۶و ۸و روشYS برای N=۳۲ در زمان t=۱.

نمودارها سرعت همگرایی هر روش را تأیید می‌کنند، دیده می‌شود که روش YS برای Δt هاییکه خیلی کوچک نیستند کارآیی ندارد. بدلیل بالا بودن هزینه محاسبات (نمودار[۴])، محاسبات در زمان t=۱ انجام شده است، البته با افزایش زمان، روشها همچنان کارآیی دارند.

٤- معادله شرودینگر غیرخطی تعمیم یافته

معادله شرودینگر غیرخطی تعمیم یافته (GNLS) یک معادله بامشتقات جزئی بصورت رابطه(۸) می‌باشد

$$i\,\omega_t + \omega_{xx} + q_1|\omega|^2\omega + q_2|\omega|^4\omega + i\,q_3\left(|\omega|^2\right)_x\omega + i\,q_4|\omega|^2\omega_x = 0 \tag{۸}$$

که $i^2 = -1$. ω یک تابع مختلط از متغیر مکانی x ومتغیر زمانی t می‌باشد. q_1 و q_2 و q_3 و q_4 ثابتهای حقیقی می‌باشند. فرض می‌شود ω وهمه مشتقاتش وقتیکه $X \to \infty$، به صفر میل کنند، معادله (۸) با این شرایط مرزی در تعدادی قوانین پایستگی صدق می‌کند، مطابق با این قوانین، کمیتهای

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\omega|^2 dx \tag{۹}$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Big(|\omega|^2 - \frac{1}{2}(2q_3+q_4)|\omega|^2 \operatorname{Im}(\omega\,\omega_x^*) - \frac{1}{2}q_1|\omega|^4 + \frac{1}{6}\left(q_3(2q_3+q_4)-2q_2\right)|\omega|^6\Big)dx \tag{۱۰}$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty}\left[2\operatorname{Im}(\omega\,\omega_x^*) - q_4|\omega|^4\right]dx \tag{۱۱}$$

باید در زمان پایسته بمانند.(علامت * نشان دهنده مزدوج مختلط می‌باشد)[۵]،[۱۰].

٤-۱- گسسته سازی مکانی

بکاربردن روشهای عددی احتیاج دارد به اینکه بازه‌ی نامتناهی به بازه ی متناهی [a,b] محدود شود. در مثالهای عددی ثابتهای a, b به اندازه ی کافی بزرگ انتخاب می‌شوند تا تأثیری روی انتشار موج تک فام نگذارند. فرض میکنیم $\omega(x,t)$ در شرط مرزی تناوبی $\omega(a,t) = \omega(b,t) \quad \forall t \in [0,T]$ صدق کند.

برای سادگی با استفاده از تبدیل $X = \dfrac{2\pi(x-a)}{(b-a)}$ بازه ی $[a,b]$ به بازه ی $[0,2\pi]$ انتقال داده می‌شود، به این ترتیب معادله (۸) بصورت (۱۲) بازنویسی می‌شود

$$i\,\omega_t + \bar{p}\,\omega_{XX} + q_1|\omega|^2\omega + q_2|\omega|^4\omega + i\,q_3\left(|\omega|^2\right)_X\omega + i\,q_4|\omega|^2\omega_X = 0 \tag{۱۲}$$

که

$$\bar{p} = \left(\frac{2\pi}{b-a}\right)^2, \quad \bar{q}_3 = \left(\frac{2\pi}{b-a}\right)q_3, \quad \bar{q}_4 = \left(\frac{2\pi}{b-a}\right)q_4$$

بازه ی $[0,2\pi]$ با $\Delta x = \dfrac{2\pi}{N}$ به N زیر بازه مساوی تقسیم می‌شود که N یک عدد زوج است.

$$X_j = \frac{2\pi j}{N} \quad j = 0,1,2,\ldots,N-1$$

جواب تقریبی $\omega(X_j,t)$ بوسیله $W_j(t)$ نمایش داده می‌شود و $\hat{W}_k$ ها ضرایب فوریه $\{W_j\}$ ها می‌باشند. مشتقات مکانی بوسیله روش فوریه شبه طیفی محاسبه می‌شود، به این ترتیب که مشتقات مکانی ω، بوسیله ضرب ضرایب فوریه در توانهای (ik) مطابق با مرتبه‌ی مشتق مکانی محاسبه می‌شوند وسپس تبدیل فوریه معکوس بکاربرده می‌شود .

٤-۲- انتگرال گیری نسبت به زمان

با استفاده از عملیات گام - بشکافت معادله (۱۲) به دو معادله ی خطی و غیر خطی شکافته می‌شود

معادله ی خطی

$$\omega_t - i\bar{p}\,\omega_{XX} = 0 \tag{۱۳}$$

معادله ی غیر خطی

$$\omega_t - i\,q_1|\omega|^2\omega - i\,q_2|\omega|^4\omega + \bar{q}_3\left(|\omega|^2\right)_X\omega + q_4|\omega|^2\omega_X = 0 \tag{۱۴}$$

هر کدام از این معادلات مطابق با مرتبه روش گام- بشکافت با Δt های خاص پیش برده می‌شودکه دنباله این ضرایب در مرجع [۱۲] سآمده است. معادله خطی (۱۳) با استفاده تبدیل فوریه گسسته حل می‌شود و بصورت رابطه ۱۵ در زمان پیش برده می‌شود.

$$W_j^{m+1} = F_j^{-1}\left[\exp(-i\bar{p}k^2\Delta t)\; F_k\left[W_j^m\right]\right] \tag{۱۵}$$

که W_j^m نشان دهنده ی تقریب $\omega(x_j, m\Delta t)$ می‌باشد، F تبدیل فوریه و F^{-1} تبدیل فوریه معکوس را نشان می‌دهد. مشتقات مکانی معادله (۱۴) بوسیله ی روش شبه طیفی فوریه بصورت رابطه ۱۶ محاسبه می‌شود

$$\dot{W}_j = i\left(q_1|W_j|^2W_j + q_2|W_j|^4W_j\right) - F_j^{-1}\left[ik\bar{q}_3F_k\left[|W_j|^2\right]\right]W_j - F_j^{-1}\left[ik\bar{q}_4F_k[W_j]\right]|W_j|^2, \quad j = 0,1,2,\ldots,N-1 \tag{۱۶}$$

که علامت نقطه، نشان دهنده مشتق نسبت به زمان می‌باشد. برای انتگرالگیری نسبت به زمان این معادله از روش رونگه-کوتای مرتبه چهار استفاده می‌شود. بنابراین از آنجا که معادله خطی با تبدیل فوریه گسسته حل می شود شکافتن معادله (۱۲) به دو معادله خطی و غیر خطی سبب می‌شود که خطای انتگرالگیری از زمان t تا $t+\Delta t$ فقط شامل مجموع خطای زمانی روش گام-بشکافت و خطای گسسته سازی معادله (۱۶) باشد.

٤-٣- نتایج عددی

اینک کارایی روش بر روی یک مثال بررسی می‌گردد.

پایستگی روش مطرح شده بوسیله محاسبه گسسته کمیتهای I_1, I_2, I_3 بررسی می‌شود. خطای نسبی در تقریب گسسته ی انتگرالهای (۹) و(۱۰)و (۱۱) بوسیله $\delta_1, \delta_2, \delta_3$ نمایش داده می‌شود که بصورت رابطه ۱۷ تعریف می‌شوند

$$\delta_1 = \frac{|\bar{I}_1 - \bar{I}_{10}|}{|\bar{I}_{10}|}, \quad \delta_2 = \frac{|\bar{I}_2 - \bar{I}_{20}|}{|\bar{I}_{20}|}, \quad \delta_3 = \frac{|\bar{I}_3 - \bar{I}_{30}|}{|\bar{I}_{30}|} \tag{17}$$

$\bar{I}_1, \bar{I}_2, \bar{I}_3$ مقدار محاسبه شده ی کمیتهای I_1, I_2, I_3 در زمان ابتدا و $\bar{I}_{10}, \bar{I}_{20}, \bar{I}_{30}$ مقدار محاسبه شده ی کمیتهای I_1, I_2, I_3 در زمان نهایی می‌باشند. برای انتگرالگیری عددی از روش ذوزنقه ای استفاده می‌شود.

لازم به توضیح است در نمودارها و جدولهای این بخش، L_2 و L_∞ بصورت زیر تعریف شده است.

$$L_\infty = \max_{1 \le j \le N} \left| f(x_j) - \hat{f}(x_j) \right|$$

$$L_2 = \left(\sum_{j=1}^{N} \left| f(x_j) - \hat{f}(x_j) \right|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

که در آن $\hat{f}$ تقریب تابع f است.

در جدولها ازنماد (n-) به جای توانهای ده (10^{-n}) استفاده شده است.

معادله (۸) با انتخاب، $q_1 = \frac{1}{2}$، $q_2 = -1$، $q_3 = -\frac{7}{4}$ و $q_4 = -2$ دارای جواب یک موج تک فام رونده بصورت رابطه ۱۸ می‌باشد.

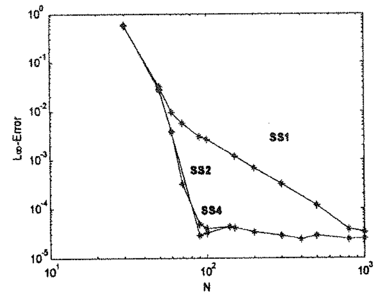
$$\omega(x,t) = \left[\frac{4}{4 + 3\sinh^2(x - 2t - 15)}\right]^{\frac{1}{2}} \exp[i\phi(x,t)]$$

$$\phi(x,t) = 2\tanh^{-1}\left[\frac{1}{2}\tanh(x - 2t - 15)\right] + x - 15 \tag{18}$$

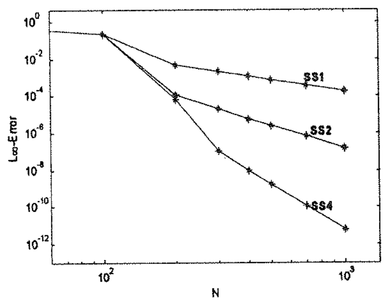
که یک موج تک فام می باشد که ابتدا در موقعیت $x=15$ قرار دارد و با سرعت ۲ به سمت راست حرکت می‌کند. مقدار دقیق کمیتهای I_1, I_2, I_3 برای این مسأله عبارتنداز

$$I_1 = 2\ln 3, \quad I_2 = -\frac{3}{2} + 3/875\ln 3, \quad I_3 = 4 - 9\ln 3$$

مسأله ابتدا روی بازه مکانی $5 \le x \le 35$ برای زمان نهایی $t=3$ حل می‌شود. درشکل (۵) خطای L_∞ روشهای مرتبه ۱و۲و۴ بعنوان تابعی از N در مقیاس $\log_{10} - \log_{10}$ نشان داده شده است. از رابطه $\Delta t = \nu (\Delta x)^2$ برای تعیین Δt استفاده می‌شود که $\Delta x = \frac{b-a}{N}$ و ν برابر مقدار ثابت ۰/۱ می‌باشد. مشاهده می‌شود که خطای L_∞ با افزایش N کاهش می‌یابد، البته اینکه خطا برای روشهای مرتبه ۲و۴ از N=۹۶ به بعد حالت نزولی ندارد مربوط به محدودیت بازه ی مکانی می‌باشد.این رفتار می‌تواند بوسیله متعادل کردن خطای مربوط به تأثیر مرزها و جواب درون بازه ی مکانی حذف شود. به این دلیل دوباره مثال روی بازه ی مکانی $-20 \le x \le 60$ پیاده می‌شود. شکل (۶) نتیجه را نشان می‌دهد، مشاهده می‌شود که خطای L_∞ بطورپیوسته با افزایش N کاهش می‌یابد.



شکل (۵): خطای L_∞ روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴ در زمان t=۳ بعنوان تابعی از تعداد نقاط گره ای $5 \le x \le 35$.



شکل (۶): خطای L_∞ روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴ در زمان t=۳ بعنوان تابعی از تعداد نقاط گره ای $-20 \le x \le 60$.

برای بررسی اینکه روشهای گام - بشکافت، سرعت همگرایی در زمان مورد انتظار را نشان می‌دهند، روشها با مقادیر مختلف Δt و مقدار ثابت N اجرا می‌شوند، سرعت

همگرایی هر روش از رابطه ۱۹ محاسبه می‌شود

$$\frac{\ln(E(N_2)/E(N_1))}{\ln(N_1/N_2)} \qquad (۱۹)$$

که $E(N_j)$ خطای L_∞ یا L_2 می‌باشد هنگامیکه N_j زیربازه وجود دارد.

با توجه به نتایج جدول های (۱)و(۲) مشاهده می شود که سرعت همگرایی با سرعت های مورد انتظار تطابق دارند.

برای بررسی سرعت همگرایی در مکان، محاسبات برای N متغیر و Δt ثابت اجرا می‌شود، در این مثالها برای مینیمم کردن خطای زمانی، $\Delta t = ۰/۶۱۰۳۸ \times ۱۰^{-۳}$ در نظر گرفته می‌شود، نتایج در جدول (۳)آورده شده است، نتایج نشان می‌دهد که جوابهای عددی بدست آمده با روش مرتبه چهار آنی به جواب دقیق در مکان همگرا می‌شوند، که نشانگر همگرایی نمایی است.

برای مقایسه هزینه محاسبات روش مطرح شده، دو مجموعه متفاوت مثال عددی در نظر گرفته می‌شود. در مجموعه اول Δt و Δx ثابت در نظرگرفته می‌شود (N=۵۱۲) و خطای L_∞ و L_2 در زمان t=۳ محاسبه می‌شوند که نتایج آن در جدول (۳) آمده است، زمانها در این جدول نرمالیز شده است، به این ترتیب که زمان مورد نیاز برای روش مرتبه اول یک واحد در نظر گرفته شده است. نتایج جدول (۳) نشان می‌دهد که هر سه کمیت به خوبی پایسته مانده اند، به ویژه مشاهده می‌شود که با جایگزینی روش مرتبه۴ با روش مرتبه ۱ زمان محاسبه ۲/۱ برابر می‌شود در حالیکه خطا در فاکتور $۱۰^{-۴}$ ضرب می‌شود و بطور مشابه که با جایگزینی روش مرتبه ۲ با روش مرتبه ۱ زمان محاسبه ۱/۸ برابر می‌شود در حالیکه خطا در فاکتور $۱۰^{-۳}$ ضرب می‌شود .

جدول (۱): سرعت همگرایی خطای L_∞ روش گام- بشکافت مرتبه ۱و ۲و ۴ ($N=۵۱۲\ ,-۲۰ \le x \le ۶۰$)

Δt	مرتبه اول L_∞	مرتبه	مرتبه دو L_∞	مرتبه	مرتبه چهار L_∞	مرتبه
0.0500	1.601(-2)	-	1.027(-3)	-	2.042(-04)	-
0.0100	3.079(-3)	1.002	4.011(-5)	2.014	3.833(-07)	3.901
0.0050	1.535(-3)	1.004	1.002(-5)	2.001	2.406(-08)	3.994
0.0030	9.203(-4)	1.002	3.607(-6)	2.000	3.128(-09)	3.994
0.0010	3.064(-4)	1.001	4.007(-7)	2.000	3.887(-11)	3.994
0.0001	1.532(-4)	1.000	1.002(-7)	2.000	2.440(-12)	3.994

جدول (۲): سرعت همگرایی خطای L_2 روش گام- بشکافت مرتبه ۱و ۲و ۴ ($N=۵۱۲\ ,-۲۰ \le x \le ۶۰$)

Δt	مرتبه اول L_2	مرتبه	مرتبه دو L_2	مرتبه	رتبه چهار L_2	مرتبه
0.0500	7.124(-2)	-	3.948(-3)	-	8.642(-04)	-
0.0100	1.466(-2)	0.982	1.539(-4)	2.016	1.840(-06)	3.823
0.0050	7.317(-3)	1.002	3.834(-5)	2.005	1.155(-07)	3.994
0.0030	4.400(-3)	0.996	1.372(-5)	2.011	1.486(-08)	4.014
0.0010	1.436(-3)	1.019	1.505(-6)	2.011	1.797(-10)	4.018
0.0001	7.153(-4)	1.005	3.716(-7)	2.017	1.088(-11)	4.046

جدول (۳): سرعت همگرایی در مکان روش گام- بشکافت مرتبه ۴ ($\Delta t = ۰.۶۱۰۳۸ \times ۱۰^{-۳}, -۲۰ \le x \le ۶۰$)

N	L_∞	مرتبه	L_2	مرتبه
96	2.919(-01)	-	5.927(-01)	-
128	3.847(-02)	7.04	8.238(-02)	6.86
144	1.282(-02)	9.34	2.752(-02)	9.31
192	1.413(-04)	15.67	4.491(-04)	14.31
216	1.731(-05)	17.83	5.779(-05)	17.41
256	6.976(-07)	18.90	2.187(-06)	19.27
324	5.314(-09)	20.71	1.667(-08)	20.70
432	9.268(-12)	22.22	3.760(-11)	21.18

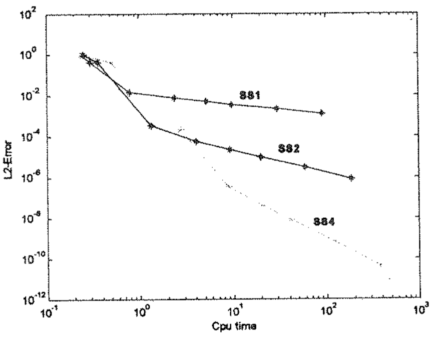
جدول(۴): مقایسه خطای L_2 و L_∞ ، خطای پایستگی $\delta_1, \delta_2, \delta_3$ و زمان محاسبه برای روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴

$$(N=۵۱۲, \Delta t=۰.۶۱۰۳۸\times۱۰^{-۳}, -۲۰\le x\le۶۰)$$

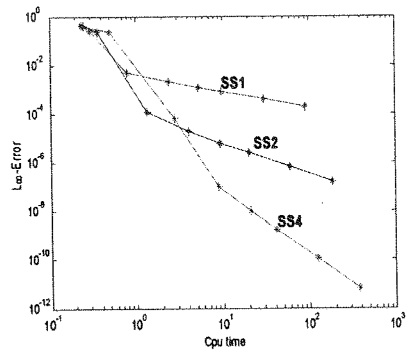
روش	L_2	L_∞	δ_1	δ_2	δ_3	زمان
First-order	1.871(-04)	8.732(-04)	5.237(-13)	2.244(-07)	9.990(-09)	1.0
Second-order	1.493(-07)	5.551(-07)	6.239(-13)	1.862(-13)	4.417(-13)	1.8
Fourth-order	4.835(-12)	2.155(-07)	1.405(-12)	2.629(-13)	1.174(-12)	3.8

در مجموعه دوم، برای مقادیر مختلف N ، زمان محاسبات و خطای L_∞ و L_2 محاسبه می‌شوند، در شکلهای (۷) و (۸) خطای L_2و L_∞ را بعنوان تابعی از زمان رسم شده اند. بهترین روش، روشی است که حداقل زمان برای رسیدن به دقتی خاص را دارا باشد. بطور مثال با توجه به شکل (۸) اگر خواسته شود خطای L_∞ در سطح 10^{-4} باشد، هزینه روش مرتبه ۲ کمتر از روش مرتبه ۴ است، بنابراین برای رسیدن به این خطا در سطح 10^{-4} بهتر است از روش مرتبه ۲ استفاده شود. اختلاف هزینه ی محاسبات وقتی که به دقتهای بالا احتیاج باشد معنی دارتر می‌شود.

با توجه به شکلهای (۷) و(۸) مشاهده می‌شود که خطای L_2 و L_∞ چقدر بهم وابسته اند، همچنین مشخص می‌شود که روش مرتبه ۴ وقتیکه به دقتهای بالا احتیاج است نسبت به روش مرتبه ۱و ۲ هزینه ی کمتری دارد.



شکل (۷): خطای L_2 روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴ در زمان t=۳ بعنوان تابعی از زمان CPU $5 \le x \le 35$



شکل (۸): خطای L_∞ روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴ در زمان t = ۳ بعنوان تابعی از زمان CPU $5 \le x \le 35$

۵- نتیجه گیری

در این مقاله روش گام – بشکافت از مراتب مختلف روی معادلات ماکسول پیاده شد و با روش YS مقایسه شد، مشاهده شد که روشهای مرتبه ۴و ۶و ۸ بهتر از روش YS می‌باشد.

همچنین روشهای مرتبه ۱و ۲و ۴ برای معادلات شرودینگر بکاربرده شد. بطور طبیعی برای تعداد نقاط گره ای مکانی ثابت، روش مرتبه چهار دارای هزینه ی محاسبات بیشتری نسبت به روشهای مرتبه یک و دو می‌باشد، اما مثال عددی معادله شرودینگر وماکسول نشان داد که برای رسیدن به دقتهای مرتبه بالا، روشهای مرتبه بالاتر نسبت به روشهای مرتبه پایین‌تر دارای هزینه ی کمتری می‌باشند. همچنین مثال عددی مشخص کرد که روشها بکاربرده شده دارای سرعت همگرایی مورد انتظار هستند و قوانین پایستگی هم به خوبی رعایت می‌شوند.

نتایج عددی بدست آمده در ۴- ۳ از مقایسه شرایط اولیه ی یکسان روی دامنه های متفاوت نشان داد که هنگامیکه مرتبه‌ی روش بالا برده می‌شود، انتگرالگیری باید روی بازه- ی بزرگتری انجام شود تا اینکه تأثیر خطای مرزها و خطای جواب داخل بازه در یک سطح باقی بمانند.

۶- مراجع

[۱] ایزاکسون، ال؛ "آنالیز عددی برای علوم کاربردی" ترجمه دکتر سید محمد حسینی و دکتر امیر خسروی، انتشارات دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ویرایش، ۱۳۸۰.

[۲] Fornberg, B.; Driscoll, T. A.; "A fast spectral algorithm for nonlinear wave equation with linear dispersion", J. Comput. Phys. 155, p.p. 456-467, 1999.

[۳] Lee, J.; Fornberg, B.;"A Split step approach for the 3-D Maxwell's equations", J. Comput. Appl. Math., 158, p.p. 485-505, 2003.

[۴] Lee, J.; Fornberg, B.; "Some unconditionally stable time stepping methods for the 3-D Maxwell's equations", J. Comput. Appl. Math., 166, p.p. 497-523, 2004.

[۵] Muslu, G. M.; Erbay, H. A.; "High-order split-step Fourier schemes for the generalized nonlinear Schrodinger equation" J. Math. Com., 67, p.p. 581-595, 2005.

[۶] Pathira, D.; Morris, J. Ll. ; "Pseudo-spectral solution of nonlinear Schrodinger equations ", J. Comput. Phys., 87, p.p. 108, 1990.

[۷] Taflove, A.; Hagness, S.; "Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time Domain Method ", Artech House, Boston, 2nd Edition, 2000.

[۸] Trefethen, L. N.; "Spectral Method in MATLAB ", SIAM, Philadelphia, 2000.

[۹] Walker, J. S.; "Fast Fourier Transform ", CRC Press, New York, 1996.

[۱۰] Weideman, J. A. C.; Herbst, B. M.; "Split-step methods for the solution of the nonlinear Schrodinger equation", SIAM J. Num. Anal. 23 , 1986.

[۱۱] Yee, K. S.; "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", IEEE Trans. Antennas and Propagation 14 p.p. 302-307, 1966.

[۱۲] Yoshida, H.; "Construction order symplectic integrators ", Phys. Lett. A 150 p.p. 262-268, 1990.

[۱۳] Zheng, F. ;Chen, Z.; Zhang, J.; "Toward the development of a three-dimensional unconditionally stable finite-difference time-domain method ", IEEE Trans. Microwave Theory Technol., 48, p.p. 1550-1558, 2000

۷- زیرنویس ها

[۱] Ruth
[۲] Forest
[۳] Yoshida