

Программный комплекс численного продолжения по параметру CONTIN-NLIN

Земляная Е.В.

Программа CONTIN-NLIN реализует численное продолжение по параметру применительно к следующей системе двух нелинейных уравнений:

$$\begin{cases} \Phi_1 \equiv u_1''(x) + F_{11}(u_1, u_2, x, \vec{\alpha})u_1'(x) + F_{12}(u_1, u_2, x, \vec{\alpha})u_2'(x) + G_1(u_1, u_2, x, \vec{\alpha}) = 0, \\ \Phi_2 \equiv u_2''(x) + F_{21}(u_1, u_2, x, \vec{\alpha})u_1'(x) + F_{22}(u_1, u_2, x, \vec{\alpha})u_2'(x) + G_2(u_1, u_2, x, \vec{\alpha}) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где $a \leq x \leq b$, $\vec{\alpha}$ – вектор параметров, F_{ij} и G_i ($i, j = 1, 2$) – функции, обеспечивающие существование решения (они задаются пользователем), продолжение ведется по одному из элементов вектора $\vec{\alpha}$ (ниже он обозначается α^*), краевые условия на функции u_1 и u_2 имеют вид:

$$D_i u_i'(a) + Q_i u_i(a) = 0, \quad \tilde{D}_i u_i'(b) + \tilde{Q}_i u_i(b) = 0. \quad (2)$$

Здесь $i = 1, 2$, $D_i^2 + Q_i^2 > 0$, $\tilde{D}_i^2 + \tilde{Q}_i^2 > 0$.

В программе реализована описанная в [2] схема численного продолжения с возможностью продолжения по параметру через точки поворота. Для численного решения системы (1)-(2) на каждом шаге продолжения используется ньютоновская итерационная схема [1]. Этот пакет успешно использовался для численного исследования солитонных решений нелинейного уравнения Шредингера в различных постановках [3].

1 Описание вычислительной схемы.

Согласно [1] на каждом s -м шаге численного продолжения ньютоновская итерационная схема для численного интегрирования задачи (1)-(2) имеет следующий вид:

$$u_i^{(k+1)} = u_i^{(k)} + \tau_k v_i^{(k)}, \quad (3)$$

где $i = 1, 2$; $k = 0, 1, 2, \dots$ – номер ньютоновской итерации, τ – итерационный параметр, $v_i^{(k)}(x)$ – итерационная поправка, которая вычисляется путем численного решения граничной задачи

$$\begin{cases} v_1^{(k)''} + F_{11}^{(k)} v_1^{(k)'} + F_{12}^{(k)} v_2^{(k)'} + P_{11}^{(k)} v_1^{(k)} + P_{12}^{(k)} v_2^{(k)} = -\Phi_1^{(k)} \\ v_2^{(k)''} + F_{21}^{(k)} v_1^{(k)'} + F_{22}^{(k)} v_2^{(k)'} + P_{21}^{(k)} v_1^{(k)} + P_{22}^{(k)} v_2^{(k)} = -\Phi_2^{(k)}, \end{cases} \quad (4)$$

с краевыми условиями

$$\begin{cases} D_1 v_1^{(k)'}(a) + Q_1 v_1^{(k)}(a) = -[D_1 u_1^{(k)'}(a) + Q_1 u_1^{(k)}(a)] \\ D_2 v_1^{(k)'}(b) + Q_2 v_1^{(k)}(b) = -[D_2 u_1^{(k)'}(b) + Q_2 u_1^{(k)}(b)] \end{cases}, \quad (5)$$

$$\begin{cases} \tilde{D}_1 v_2^{(k)'}(a) + \tilde{Q}_1 v_2(k)(a) = -[\tilde{D}_1 u_2^{(k)'}(a) + \tilde{Q}_1 u_2(k)'(a)] \\ \tilde{D}_2 v_2^{(k)'}(b) + \tilde{Q}_2 v_2(k)(b) = -[\tilde{D}_2 u_2^{(k)'}(b) + \tilde{Q}_2 u_2(k)'(b)] \end{cases} \quad (6)$$

Функции $P_{ij}^{(k)}(x, u_1, u_2, \vec{\alpha})$ определяются как

$$\begin{aligned} P_{11}^{(k)} &= [dF_{11}/du_1 \cdot u_1' + dF_{12}/du_1 \cdot u_2' + dG_1/du_1]^{(k)}, \\ P_{12}^{(k)} &= [dF_{11}/du_2 \cdot u_1' + dF_{12}/du_2 \cdot u_2' + dG_1/du_2]^{(k)}, \\ P_{21}^{(k)} &= [dF_{21}/du_1 \cdot u_1' + dF_{22}/du_1 \cdot u_2' + dG_2/du_1]^{(k)}, \\ P_{22}^{(k)} &= [dF_{21}/du_2 \cdot u_1' + dF_{22}/du_2 \cdot u_2' + dG_2/du_2]^{(k)}, \end{aligned}$$

Численное решение задачи (4-6) осуществляется с помощью подпрограммы PROGS2H4¹ [4], в которой реализована трехточечная конечно-разностная аппроксимация четвертого порядка согласно обобщению метода Нумерова. (Используется равномерная дискретная сетка с шагом h .) Исходная система (1)-(2) аппроксимируется с помощью пятиточечных конечно-разностных схем, также имеющих порядок $O(h^4)$ [6].

Ньютоновский итерационный процесс останавливается при выполнении соотношения

$$\delta_k = \max_{i=1,2} \|\Phi_i^{(k)}\| < \epsilon, \quad (7)$$

где ϵ – заданное малое положительное число, $\|\cdot\|$ – невязка, вычисляемая в сеточной норме.

Для вычисления итерационного параметра τ_k в программе реализованы три алгоритма:

$$1. \quad \tau_k \equiv \tau_0; \quad 0 < \tau_0 \leq 1. \quad (8)$$

$$2. \quad \tau_k = \begin{cases} \min(1, 2\tau_{k-1}), & \text{если } \delta_k < \delta_{k-1}, \\ \max(\tau_0, \tau_{k-1}/2), & \text{если } \delta_k \geq \delta_{k-1}, \end{cases} \quad (9)$$

$$3. \quad \tau_k = \begin{cases} \min(1, \tau_{k-1} \frac{\delta_{k-1}}{\delta_k}), & \text{если } \delta_k < \delta_{k-1}, \\ \max(\tau_0, \tau_{k-1} \frac{\delta_{k-1}}{\delta_k}), & \text{если } \delta_k \geq \delta_{k-1} \end{cases} \quad (10)$$

При устойчивой сходимости итераций во время численного продолжения эффективным является выбор $\tau \sim 1$. На начальных этапах вычислений следует выбирать алгоритм (10) с малым значением τ_0 , обеспечивающий расширение области сходимости ньютоновских итераций [5].

Начальное приближение $u_i^{(0)}$ для каждого $(s+1)$ -го набора параметров строится по схеме Эйлера с использованием результатов, полученных на $(s-1)$ -м s -м шагах численного продолжения.

Шаг движения по параметру $\Delta\alpha_s^* = \alpha_s^* - \alpha_{s-1}^*$ может быть постоянным или вычисляется по формуле

$$\Delta\alpha_{s+1}^* = \Delta\alpha_{s-1}^* \cdot [\Delta E]_{s-1} / [\Delta E]_s, \quad (11)$$

¹<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/progs2h4>

где $[\Delta E]_s = E(\alpha_s^*) - E(\alpha_{s-1})$, E – какая-либо скалярная характеристика решения, задаваемая пользователем ("бифуркационная мера").

На каждом шаге продолжения проверяется выполнение соотношения

$$\Delta\alpha_s/[\Delta E]_s < \varepsilon, \quad (12)$$

(где $\varepsilon > 0$ – заданное малое число), которое является признаком точки поворота. При выполнении этого соотношения шаг движения по параметру меняет знак, т.е. движение по параметру меняет направление с выходом на новую ветку решений. При "скатывании" на ветку с уже известными решениями следует повторить расчет с уменьшенным значением ε .

2 Программная реализация

Программа написана на языке Fortran. Входные параметры считываются из файла с именем PARAM в свободном формате.

Первая строка входного файла содержит: NPAR – число параметров вектора $\vec{\alpha}$, (ALPHA(i), i=1,NPAR) – значения всех этих параметров и номер параметра NC, по которому ведется продолжение.

Во второй строке содержатся параметры схемы продолжения: STEPН – начальный шаг численного продолжения; NSTEP – параметр алгоритма вычисления шага (при NSTEP=0 шаг постоянный, при отличном от нуля значении этого параметра шаг вычисляется по формуле (11)); EPS_S – значение ε из формулы (12); NSMAX – число шагов численного продолжения.

При повороте счетчик шагов обнуляется.

Третья строка содержит параметры ньютоновской схемы: TAU0 – начальное значение параметра τ из (3); NTAU – номер алгоритма выбора τ (при NTAU=1, 2, 3 используются соответственно формулы (8), (9), 10)); EPS – значение ϵ из формулы (7); EPS_MAX – максимальное значение невязки, при превышении которого программа прекращает работу; NMAX – максимальное число ньютоновских итераций на каждом шаге продолжения.

В четвертой строке задаются параметры дискретной сетки: N – число узлов равномерной дискретной сетки; A и B – границы интервала. Шаг сетки определяется как $H=(B-A)/(N-1)$. В этой же строке задается параметр INI, определяющий способ задания начального приближения на первом шаге численного продолжения. При INI=0 начальное приближение вычисляется с помощью подпрограммы F_INIT, которая должна быть составлена пользователем. При отличном от нуля значении параметра INI начальное приближение считывается из файла с именем INIT_GUESS. Этот файл должен иметь три колонки длиной N, вторая и третья из которых содержат значения функции u_1 и u_2 в узлах дискретной сетки ($X(I)=A+H*(I-1)$, i=1,N). Первая колонка не используется.

В пятой и шестой строках задаются граничные условия на концах интервала (см. выражения (2)). В пятой строке: $D_1; Q_1; \tilde{D}_1; \tilde{Q}_1$. В шестой строке: $D_2; Q_2; \tilde{D}_2; \tilde{Q}_2$.

Пользователь должен составить и включить в пакет ряд подпрограмм и функций. При необходимости они должны содержать общий блок COMMON /PARAM/ ALPHA(100).

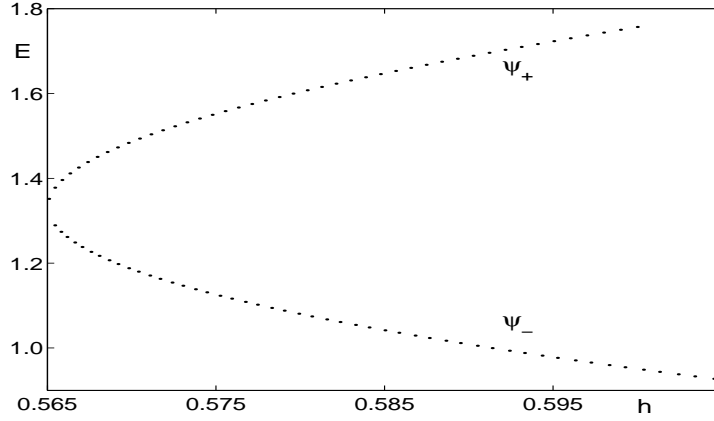


Рис. 1. Кривая $E(h)$ для случая $V = 0$, $\gamma = 0.565$. Численное продолжение решения ψ_+ из точки $h = 0.6$

Subroutine F_INIT(N,U1,U2,X) – подпрограмма для вычисления начального приближения. Здесь и далее X, U1, U2 – массивы размерности N. В X содержатся значения узлов дискретной сетки по пространственной переменной x . В U1 и U2 – значения функций u_1, u_2 в этих узлах.

Subroutine BIF_M(N,U1,U2,X,R1,E) – подпрограмма для вычисления бифуркационной меры E. R1 – вспомогательный массив размерности N.

Subroutine GGG(N,U1,U2,X,Y) – подпрограмма для вычисления функции G_i ($i = 1, 2$) из (1). Y – массив размерности $(2, N)$ со значениями $G_i(X(I))$.

Subroutine FFF(N,U1,U2,X,Z) – подпрограмма для вычисления функции F_{ij} ($i, j = 1, 2$) из (1). Z – массив размерности $(2, 2, N)$ со значениями $F_{ij}(X(I))$.

Subroutine DGDU(N,U1,U2,X,Z) – подпрограмма для вычисления функций dG_i/du_j ($i, j = 1, 2$). Z – массив размерности $(2, 2, N)$. Элементы $Z(i, j, I)$ должны содержать значения dG_i/du_j в узлах X(I).

Function df11du1(u1,u2,x); df12du1(u1,u2,x); df21du1(u1,u2,x); df22du1(u1,u2,x); df11du2(u1,u2,x); df12du2(u1,u2,x); df21du2(u1,u2,x); df22du2(u1,u2,x) – функции, возвращающие значения производных dF_{ij}/du_k ($i, j, k = 1, 2$).

Результаты расчета записываются в файлы E_OUT и F_OUT. Файл F_OUT содержит три колонки со значениями X(i), U1(I), U2(I). Этот файл обновляется на каждом s-м шаге продолжения. В файле E_OUT сохраняются значения параметра α_s^* и соответствующие им значения бифуркационной меры E_s .

3 Численные примеры

Движущиеся с постоянной скоростью солитоны нелинейного уравнения Шрёдингера с линейной диссипацией и параметрической накачкой удовлетворяют следующему обыкновенному дифференциальному уравнению:

$$-iV\psi_\xi + \psi_{\xi\xi} + 2|\psi|^2\psi - \psi = h\bar{\psi} - i\gamma\psi. \quad (13)$$

Здесь V – скорость, γ – коэффициент диссипации, h – амплитуда накачки.

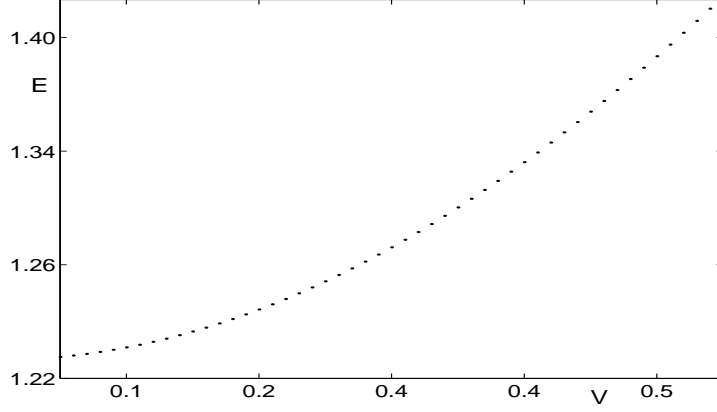


Рис. 2. Кривая $E(V)$, полученная в результате численного продолжения из точки $V = 0.05$ при $\gamma = 0$, $h = 0.05$

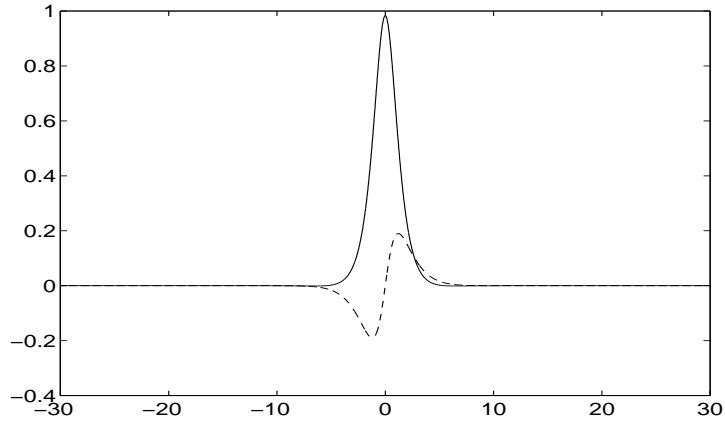


Рис. 3. Функция $\psi(x)$ при $V = 0.54$, $\gamma = 0$, $h = 0.05$. Сплошная линия - вещественная часть, штрихи - мнимая часть.

Перепишав уравнение (13) в вещественных переменных ($\text{Re}\psi = u_1$, $\text{Im}\psi = u_2$), можно привести его к виду (1), где

$$F_{11} = F_{22} = 0, \quad F_{12} = V; \quad F_{21} = -V;$$

$$G_1 = (-h - 1)u_1 + 2u_1^3 + 2u_1u_2^2 - \gamma u_2$$

$$G_2 = (+h - 1)u_2 + 2u_2^3 + 2u_2u_1^2 + \gamma u_1.$$

Граничные условия имеют вид

$$u_1(a) = u_2(a) = u_1(b) = u_2(b) = 0,$$

где $a \rightarrow -\infty$, $b \rightarrow +\infty$.

В системе (4) имеем:

$$dF_{ij}du_k = 0, \quad i, j, k = 1, 2;$$

$$dG_1/du_1 = (-h - 1) + 6u_1^2 + 2u_2^2,$$

ТАБЛИЦА 1

V	E_{h_0}	$E_{h_0/2}$	$E_{h_0/4}$	σ
0.05	1.435962460	1.435962635	1.435962646	15.9
0.10	1.440122693	1.440122868	1.440122879	15.9
0.15	1.447028407	1.447028582	1.447028592	17.5
0.20	1.456637416	1.456637590	1.456637601	15.8
0.25	1.468890306	1.468890480	1.468890490	17.4
0.30	1.483710072	1.483710246	1.483710257	15.8
0.35	1.501001647	1.501001820	1.501001831	15.7
0.40	1.520651296	1.520651468	1.520651479	15.6
0.45	1.542525885	1.542526056	1.542526067	15.5
0.50	1.566471998	1.566472168	1.566472179	15.5

$$dG_2/du_2 = (+h - 1) + 6u_2^2 + 2u_1^2,$$

$$dG_1/du_2 = dG_2/du_1 = 4u_1u_2 - \gamma.$$

В качестве бифуркационной меры будем использовать интеграл энергии, который имеет вид

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} (|\psi_x|^2 + |\psi|^2 - |\psi|^4 + h \operatorname{Re} \psi^2) dx. \quad (14)$$

Для случая $V = 0$ два односолитонных решения известны в явном виде. Это

$$\psi_{\pm}(x) = e^{-i\theta_{\pm}} A_{\pm} \operatorname{sech}(A_{\pm}x), \quad (15)$$

где

$$A_{\pm} = \sqrt{1 \pm \sqrt{h^2 - \gamma^2}}, \quad \theta_+ = \frac{1}{2} \arcsin \frac{\gamma}{h}, \quad \theta_- = \frac{\pi}{2} - \theta_+.$$

В точке $h = \gamma$ солитоны ψ_+ и ψ_- совпадают.

Результат численного продолжения солитона ψ_+ по параметру h из точки $h = 0.6$ при $V = 0$, $\gamma = 0.565$ с поворотом на ветку ψ_- представлен на рис.1. Входные параметры: HSTEP=-0.001, NSTEP=2, EPS_S=0.015, NSMAX=50, TAU0=0.95, NTAU=1, EPS=1.e-9, EPS_MAX=1.e+3, NMAX=50, N=6001, A=-30, B=30.

Рис.2 демонстрирует бифуркационную кривую численного продолжения по параметру V из точки $V = 0.05$ при $\gamma = 0$, $h = 0.05$. На рис.3 показано решение $\psi(x)$ в конечной точке продолжения ($V = 0.54$, $\gamma = 0$, $h = 0.05$).

Входные параметры: HSTEP=0.01, NSTEP=1, EPS_S=0.015, NSMAX=50, TAU0=0.95, NTAU=1, EPS=1.e-9, EPS_MAX=1.e+3, NMAX=50, N=10001, A=-50, B=50.

Начальное приближение в обоих случаях рассчитано по формуле (15)

В таблице 1 даны результаты расчета на последовательности сгущающихся сеток $h = h_0 = 0.02$; $h = h_0/2$; $h = h_0/4$. Из таблицы видно, что величина σ , рассчитанная по формуле

$$\sigma = [E_{h_0} - E_{h_0/2}] / [E_{h_0/2} - E_{h_0/4}],$$

близка к 2^4 , что является подтверждением четвертого порядка сходимости вычислительной схемы.

Список литературы

- [1] Пузынин И.В., Амирханов И.В., Земляная Е.В. и др. ЭЧАЯ, Т.30, вып.1, 1999, сс.210-265
- [2] Е.В.Земляная, И.В.Барашенков. Математическое моделирование, Т.16, вып.10, сс.3-14, 2004.
- [3] I.V.Barashenkov and E.V.Zemlyanaya. Phys. Rev. Lett., Vol.83, 1999, pp.2568-2571; I.V.Barashenkov and E.V.Zemlyanaya. Physica D, Vol.132, No.3, 1999, pp.363-373; I.V.Barashenkov, E.V.Zemlyanaya, M.Bär. Phys. Rev. E, Vol.64, 2001, p.016603; I.V.Barashenkov, S.R.Woodford, E.V.Zemlyanaya. Phys. Rev. Lett. Vol.90, No.5 (2003) 054103
- [4] Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Сообщение ОИЯИ P11-97-414, Дубна, 1997.
- [5] Жанлав Т., Пузынин И.В. ЖВМиМФ, Т.32, Вып.6, (1992) с.846
- [6] И.С.Березин, Н.П.Жидков. Методы вычислений, Т.1, М.: Физматгиз, 1959, с.232-233.