

О ПРИБЛИЖЕННОМ РЕШЕНИИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ ПЕРЕПОЛНЕННЫХ СИСТЕМ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ

Т. Г. Богомолова, Л. А. Минин

Воронежский государственный университет

Поступила в редакцию 14.03.2018 г.

Аннотация. В работе рассматривается метод Фурье разделения переменных для приближенного решения нестационарных уравнений математической физики. Особенностью данного метода является использование переполненных систем функций, представляющих собой когерентные состояния на прямоугольной решетке. Предложен способ аппроксимации дифференциальных операторов по пространственным переменным, позволяющий разложить их по системе когерентных состояний. Тем самым, линейные дифференциальные уравнения сводится к алгебраическим относительно коэффициентов разложения по когерентным состояниям искомого решения. Нет необходимости работать с сеточными функциями, не требуется согласования числа уравнений и неизвестных, поскольку алгебраически данная процедура равносильна применению метода наименьших квадратов. При оценке устойчивости метода используются известные результаты о границах фреймов Габора, а также о факторизации индексов при специальном выборе параметров частотно-временного окна.

Ключевые слова: когерентные состояния, фреймы Габора, метод Фурье разделения переменных, метод наименьших квадратов.

ON THE APPROXIMATE SOLUTION OF DIFFERENTIAL EQUATIONS BY MEANS OF OVERCOMPLETE COHERENT STATE SYSTEMS

T. G. Bogomolova, L. A. Minin

Abstract. The paper considers the Fourier method of separation of variables for the approximate solution of non-stationary equations of mathematical physics. A special feature of this method is the use of an overcomplete systems of functions that are coherent states on a rectangular lattice. A method for approximating differential operators with respect to spatial variables is proposed, which makes it possible to expand them over a system of coherent states. Thus, the linear differential equations reduces to algebraic coefficients of the expansion in the coherent states of the desired solution. It is not necessary to work with grid functions, there is no need to match the number of equations and unknowns, since algebraically this procedure is equivalent to applying the method of least squares. In assessing the stability of the method, we use known results about the boundaries of Gabor frames, as well as the factorization of indices in the special choice of the time-frequency window parameters.

Keywords: coherent states, Gabor frames, Fourier method of separation of variables, method of least squares.

ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных методов решения линейных нестационарных уравнений (эволюционных, волновых, Шредингера) является метод разделения переменных Фурье, согласно которому решение $u(x,t)$ ищется в виде ряда

$$u(x,t) = \sum_k c_k(t) \varphi_k(x). \quad (1)$$

Здесь k — индекс или мультииндекс, x — скалярная или векторная пространственная переменная. В качестве $\varphi_k(x)$ выбираются собственные функции дифференциального оператора по пространственным переменным. Если соответствующая задача Штурма–Лиувилля не решается аналитически, то согласно теории возмущений искомое решение раскладывается по собственным функциям более простой задачи. При численном решении такой подход близок к методу применения операторов, эквивалентных по спектру [1, §14].

Используемая система функций может быть и не связана с дифференциальным оператором. В этом случае естественно потребовать выполнения следующих условий:

- 1) функции $\varphi_k(x)$ образуют ортогональную систему или допускают легко реализуемую процедуру разложения по ним;
- 2) образ дифференциального оператора по пространственным переменным, вычисленный точно или приближенно на этих функциях, может быть эффективно разложен по данной системе.

В качестве таких систем могут выступать, например, сплайны, конечные элементы, тригонометрические полиномы, всплески [1] — [4]. В настоящей работе изучается вопрос об использовании для этих целей дискретных систем когерентных состояний, заданных на прямоугольной решетке

$$g_{km}(x, \alpha_1, \alpha_2) = \exp\left(-\frac{(x - \alpha_1 k)^2}{2}\right) e^{i\alpha_2 m x}, \quad k, m \in \mathbb{Z}. \quad (2)$$

При выполнении условия $\alpha_1 \alpha_2 = 2\pi$ система функций (2) полна в $L_2(\mathbb{R})$, но при этом не существует устойчивой процедуры разложения по ней. Одним из основных способов достижения устойчивости является переход к переполненной системе — фрейму Габора [4, глава 3], [5]. Поэтому возникает вопрос о возможности применения метода разделения переменных Фурье в случае переполненных систем, т.е. при наличии неоднозначности разложения.

Предметом рассмотрения данной статьи являются ключевые моменты построения разностных схем по предложенной методике: разложение по когерентным состояниям, аппроксимация дифференциальных операторов, учет краевых условий. Основное внимание уделяется алгоритмическим аспектам реализации указанных процедур и их устойчивости.

1. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО КОГЕРЕНТНЫМ СОСТОЯНИЯМ

В серии статей Янссена [6] — [8] предложен эффективный способ разложения по переполненной системе когерентных состояний (2) в случае $\alpha_1 \alpha_2 = \pi/n$, $n \in \mathbb{N}$. Приведем в кратком изложении соответствующие формулы, следуя [9], [10]. Обозначим через $c_k(\omega)$ коэффициенты ряда Фурье

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k(\omega) e^{ikx} = \frac{1}{\vartheta_3(x/2, q)}, \quad q = \exp(-\omega^2/4). \quad (3)$$

Здесь $\vartheta_3(x, q)$ — третья тета-функция Якоби [11, глава 21]. Явные формулы для нахождения

коэффициентов $c_k(\omega)$ приведены в [12, глава 7]. Введем функцию

$$\tilde{g}(x, \omega_1, \omega_2) = \frac{1}{2n\sqrt{\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k(\omega_1) \exp\left(-\frac{(x - k\omega_1)^2}{2}\right) \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m(\omega_2) e^{im\omega_2 x}, \quad (4)$$

представляющую собой функцию окна двойственного к (2) фрейма [6]. Тогда разложение произвольной функции $f(x) \in L_2(\mathbb{R})$ по системе когерентных состояний (2) имеет следующий вид

$$f(x) = \sum_{k,m=-\infty}^{\infty} \tilde{f}_{km} \exp\left(-\frac{(x - \alpha_1 k)^2}{2}\right) e^{i\alpha_2 m x}. \quad (5)$$

Коэффициенты \tilde{f}_{km} задаются с помощью скалярных произведений

$$\tilde{f}_{km} = (f, \tilde{g}_{km}), \quad \tilde{g}_{km}(x, \alpha_1, \alpha_2) = \tilde{g}\left(x - \alpha_1 k, \frac{2\pi}{\alpha_2}, \frac{2\pi}{\alpha_1}\right) e^{i\alpha_2 m x}. \quad (6)$$

Представление (5) не единственно, поскольку используемая система когерентных состояний переполнена (в $2n$ раз). Справедливо следующее свойство [4, глава 3]: если функция $f(x)$ задана в виде ряда

$$f(x) = \sum_{k,m=-\infty}^{\infty} c_{km} \exp\left(-\frac{(x - \alpha_1 k)^2}{2}\right) e^{i\alpha_2 m x},$$

то набор коэффициентов (6) дает решение задачи на минимум

$$\sum_{k,m=-\infty}^{\infty} |c_{km}|^2 \rightarrow \min.$$

С точки зрения численной реализации наиболее существенным обстоятельством является то, что в формуле для функции $\tilde{g}(x, \omega_1, \omega_2)$ двойной ряд по индексам k и m есть произведение двух рядов. Следовательно, вычисление коэффициентов \tilde{f}_{km} сводится к умножению $f(x)$ на оконную функцию Гаусса с последующим разложением в ряд Фурье. Для ускорения процесса возможно применение методов быстрого преобразования Фурье.

Разложение по системе когерентных состояний позволяет совершить переход от исходной произвольной сетки к равномерной прямоугольной сетке. Возможны и другие сетки, например, гексагональные. Главное, чтобы сохранялась регулярная структура, позволяющая применять эффективные алгоритмы разложения. Обобщение на случай двух или трех переменных также не вызывает затруднений, поскольку сама многомерная функция Гаусса факторизуется в произведение одномерных функций.

2. АППРОКСИМАЦИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ

Производные функций (2) уже не будут когерентными состояниями. В рамках пакета "Гауссиан" [13], [14] и других аналогичных пакетов в качестве базисных функций применяются помимо функций Гаусса также их произведения на многочлены невысоких степеней (например, квадратичных, если мы работаем со вторыми производными). В настоящей статье предлагается другой подход, позволяющий при аппроксимации производных не выходить за рамки когерентных состояний.

Рассмотрим функцию $g(x) = \exp(-x^2/2)$. Для заданного $\varepsilon > 0$ определим разностный оператор дифференцирования D_ε ,

$$D_\varepsilon g(x) = \exp(-x^2/2) \sum_{m=-N}^N d_m e^{i\alpha_2 m x}. \quad (7)$$

Обозначим через $T_N(x)$ тригонометрический полином в правой части формулы (7). Покажем, что можно так подобрать степень полинома N и коэффициенты d_m , чтобы выполнялась оценка

$$|D_\varepsilon g(x) - g'(x)| < \varepsilon, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (8)$$

Поскольку $g'(x) = -x \exp(-x^2/2) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$, то существует такое число a , что при всех $|x| > a$

$$|g'(x)| < \varepsilon/2.$$

В качестве $T_N(x)$ выберем отрезок ряда Фурье для функции $f(x) = -x$ на отрезке $[-a, a]$, обеспечивающий равномерную оценку

$$|T_N(x) + x| < \varepsilon, \quad x \in [-a, a].$$

Отсюда следует также, что при $|x| > a$ справедлива оценка $|T_N(x)| < a + \varepsilon$. Поэтому для получения (8) при $|x| > a$ достаточно оценить модуль разности в левой части неравенства суммой модулей.

Легко видеть, что правая часть формулы (7) представляет собой линейную комбинацию когерентных состояний. Аналогичная конструкция применима и для второй производной. Здесь нам понадобится отрезок ряда Фурье для функции $f(x) = x^2$. Переход к частным производным не вызывает никаких проблем, кроме увеличения объема преобразований. Но это совершенно естественно, поскольку процедура построения разностных аппроксимаций для уравнений в частных производных всегда связана с серьезной подготовительной работой.

3. О СОГЛАСОВАНИИ ШАГОВ СЕТКИ

В основе рассматриваемой конструкции лежит разложение в ряд Фурье, скорость сходимости которого зависит от гладкости функций и согласования граничных условий на концах отрезка. Поэтому для построения эффективных разностных схем требуется постоянно уделять повышенное внимание согласованию параметров расчета. Приведем классический пример, имеющий самое прямое отношение к рассматриваемой задаче.

Если разложить функцию $f(x) = x$ на отрезке $[-1, 1]$ в ряд Фурье

$$f(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m e^{i\pi m x},$$

то $c_0 = 0$, $c_m = \frac{i(-1)^m}{\pi m}$. Следовательно, коэффициенты ряда Фурье убывают со скоростью $\frac{1}{m}$. Причина заключается в том, что $f(x)$, будучи периодически продолженной вне отрезка $[-1, 1]$, является разрывной функцией. Поэтому ряд Фурье, составленный из непрерывных функций $e^{i\pi m x}$ будет сходиться медленно. Разложим теперь $f(x)$ в ряд Фурье вида

$$f(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} d_m e^{i\pi(m-\frac{1}{2})x}.$$

Вычисляя d_m , получим, что

$$d_m = -\frac{i \sin \pi(m - \frac{1}{2})}{\pi^2(m - \frac{1}{2})^2}.$$

Таким образом, d_m убывают заметно быстрее. Мы фактически раскладываем в ряд Фурье функцию $g(x) = f(x)e^{i\frac{\pi}{2}x}$, периодическое продолжение которой уже непрерывно: $g(-1) = g(1) = i$. Поэтому в отрезках ряда Фурье для достижения требуемых оценок можно брать существенно меньше слагаемых.

Оконная структура базисных функций позволяет использовать ряды Фурье для учета граничных условий, поскольку механизм модификации вариантов дискретного преобразования Фурье при разных типах граничных условий хорошо разработан в вычислительной математике. И здесь переполненность фреймов Габора играет положительную роль, поскольку можно в достаточно широких пределах варьировать параметры сеток, оставаясь в области устойчивости. Так как разложение по фрейму в конечномерном случае равносильно применению метода наименьших квадратов, то нет необходимости жестко согласовывать число уравнений и число неизвестных. Конечно же, окончательные выводы об эффективности предлагаемого метода можно делать только после проведения вычислительных экспериментов, что и является предметом дальнейшего исследования авторов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Федоренко, Р. П. Введение в вычислительную физику / Р. П. Федоренко. — М. : Изд-во Моск. физ.-техн. ин-та, 1994. — 528 с.
2. Бахвалов, Н. С. Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. — М. : Наука, Физматлит, 1987. — 600 с.
3. Никифоров, А. Ф. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния / А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров. — М. : Физматлит, 2000. — 400 с.
4. Добеши, И. Десять лекций по вейвлетам / И. Добеши. — Ижевск : НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2004. — 464 с.
5. Christensen, O. An Introduction to Frames and Riesz Bases. — Appl. Numer. Harmon. Anal., Birkhauser Verlag AG, 2016. — 704 p.
6. Janssen, A. J. E. M. Some Weyl-Heisenberg frame bound calculations / A. J. E. M. Janssen // Indag. Math. — 1996. — V. 7. — P. 165–183.
7. Janssen, A. J. E. M. Characterization and computation of canonical tight windows for Gabor frames / A. J. E. M. Janssen, T. Strohmer // J. Fourier Anal. Appl. — 2002. — V. 8(1). — P. 1–28.
8. Janssen, A. J. E. M. On generating tight Gabor frames at critical density / A. J. E. M. Janssen // J. Fourier Anal. Appl. — 2003. — V. 9(2). — P. 175–214.
9. Минин, Л. А. О разложении по фреймам Габора, порожденным функцией Гаусса / Л. А. Минин, И. Я. Новиков, С. Н. Ушаков // Математические заметки. — 2016. — Т. 100, № 6. — С. 951–953.
10. Минин, Л. А. О вычислительных особенностях разложения по когерентным состояниям / Л. А. Минин // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2017. — № 3. — С. 21–35.
11. Уиттекер, Э. Т. Курс современного анализа : Ч. 2. Трансцендентные функции / Э. Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон. — М. : Физматлит, 1963. — 515 с.
12. Maz'ya, V. Approximate approximations / V. Maz'ya, G. Schmidt. — University of Linköping, Sweden, 2007. — 350 p.
13. Gill, P. The Prism Algorithm for Two-Electron Integrals / P. Gill, J. Pople // International Journal of Quantum Chemistry. — 1991. — V. 40. — P. 753–772.
14. Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry / F. Jensen. — John Wiley and Sons Ltd, West Sussex, England, 2007. — 620 p.

REFERENCES

1. Fedorenko R.P. Introduction to Computational Physics. [Fedorenko R.P. Vvedenie v vychislitelnyuyu fiziku]. Moscow, Phys.-Tech. Inst., 1994, 528 p.
2. Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M. Numerical Methods. [Baxvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M. Chislennyye metody]. Moscow: Nauka, 1987, 600 p.

3. Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B. Quantum-statistical models of hot dense matter and methods for computation opacity and equation of state. [Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B. Kvantovo-statisticheskie modeli vysokotemperaturnoj plazmy i metody rascheta rosselandovykh probegov i uravnenij sostoyaniya]. Moscow: Fizmatlit, 2000, 400 p.
4. Daubechies I. Ten Lectures on Wavelets. [Dobeshi I. Desyat' lekcij po vejvletam]. Izhevsk, 2004, 464 p.
5. Christensen O. An Introduction to Frames and Riesz Bases. Appl. Numer. Harmon. Anal., Birkhauser Verlag AG, 2016, 704 p.
6. Janssen A.J.E.M. Some Weyl-Heisenberg frame bound calculations. Indag. Math., 1996, vol. 7, pp. 165–183.
7. Janssen A.J.E.M., Strohmer T. Characterization and computation of canonical tight windows for Gabor frames. J. Fourier Anal. Appl., 2002, vol. 8(1), pp. 1–28.
8. Janssen A.J.E.M. On generating tight Gabor frames at critical density. J. Fourier Anal. Appl., 2003, vol. 9(2), pp. 175–214.
9. Minin L.A., Novikov I.Y., Ushakov S.N. On expansion with respect to Gabor frames generated by the Gaussian function. [Minin L.A., Novikov I.Y., Ushakov S.N. O razlozhenii po frejmmam Gabora, porozhdennym funkciej Gaussa]. *Matematicheskie zametki — Mathematical Notes*, 2016, vol. 100, no. 6, pp. 951–953.
10. Minin L.A. On computational peculiarities of decomposition with coherent states. [Minin L.A. O vychislitelnyh osobennostyah razlozheniya po kogerentnym sostoyaniyam]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2017, no. 3, pp. 21–35.
11. Whittaker E.T., Watson G.N. A course of modern analysis. [Uitteker E'.T., Vatson Dzh.N. Kurs sovremennogo analiza: Ch. 2. Transcendentnye funkcii]. Moscow, 1963, 515 p.
12. Maz'ya V., Schmidt G. Approximate approximations. University of Linkoping, Sweden, 2007, 350 p.
13. Gill P., Pople J. The Prism Algorithm for Two-Electron Integrals. *International Journal of Quantum Chemistry*, 1991, vol. 40, pp. 753–772.
14. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. John Wiley and Sons Ltd, West Sussex, England, 2nd ed., 2007, 620 p.

Богомолова Татьяна Григорьевна, преподаватель кафедры вычислительной математики и прикладных информационных технологий, Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Российская Федерация
E-mail: bogovolova@amm.vsu.ru

Bogomoljva Tatyana Grigorjevna, University Lecturer, Department of Computational Mathematics and Applied Information Technologies, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: bogovolova@amm.vsu.ru

Минин Леонид Аркадьевич, доцент кафедры математической физики, Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Российская Федерация
E-mail: mininla@mail.ru

Minin Leonid Arcadieievich, Associate Professor, Department of Mathematical Physics, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: mininla@mail.ru