

سه روایت از نوسان شدید*

آریه ایزرلس

مترجم: حسن مجیدیان و خدیجه ندائی اصل

چکیده

در مدل‌سازی عددی پدیده‌های نوسانی مشکلاتی وجود دارد که در پدیده‌های غیرنوسانی ظاهر نمی‌شوند. بسط‌های مجانبی، دسته‌ای مهم از راه‌حل‌های این مشکلات را فراهم می‌کنند که در این مقاله، نویسنده به شرح کلی آنها در مورد سه نوع از مهم‌ترین مسائل نوسانی می‌پردازد: انتگرال‌های شدیداً نوسانی، معادلهٔ آونگ با جملهٔ وادارندهٔ شدیداً نوسانی و معادلهٔ شرودینگر خطی.

۱. سراسری فکر کنید، سراسری عمل کنید!

آنالیز عددی - در واقع آنالیز ریاضی - تا اندازهٔ زیادی روایتی از تقریب‌های موضعی است. تابع‌های به‌اندازهٔ کافی هموار را می‌توان در یک همسایگی کوچک با چندجمله‌ای‌ها و در واقع حتی با تابع‌های خطی تقریب زد. روش اویلر که ریشهٔ تمام روش‌های گسسته‌سازی برای معادلات دیفرانسیل است، مثالی از این گونه تقریب‌ها است: فرض کنید دستگاه معادلات دیفرانسیل عادی $y' = f(x, y)$ داده عبارات و کلمات کلیدی. انتگرال نوسانی؛ روش‌های از نوع فیلون؛ معادلهٔ دیفرانسیل نوسانی واداشته؛ روش‌های زیرفضای کریلوف؛ معادلهٔ شرودینگر.

آریه ایزرلس استاد روش‌های عددی در معادلات دیفرانسیل در دانشگاه کمبریج است. او در سال ۱۹۹۹ برندهٔ مدال لارس اونسباگر و در سال ۲۰۱۲ برندهٔ مدال دیوید کرایتون و یکی از سخنرانان مدعو ششمین کنگرهٔ اروپایی ریاضیدانان بود. ایزرلس مدیر اجرایی مجلهٔ *Acta Numerica* و سردبیر مجلهٔ *IMA Journal of Numerical Analysis* است. همچنین دبیر انجمن میانی ریاضیات محاسباتی بود. علاقه‌مندی‌های پژوهشی او شامل روش‌های عددی در معادلات دیفرانسیل، نظریهٔ تقریب، دینامیک محاسباتی و نظریهٔ معادلات دیفرانسیل و تابعی است.

* نام و نشان مقالهٔ اصلی از این قرار است:

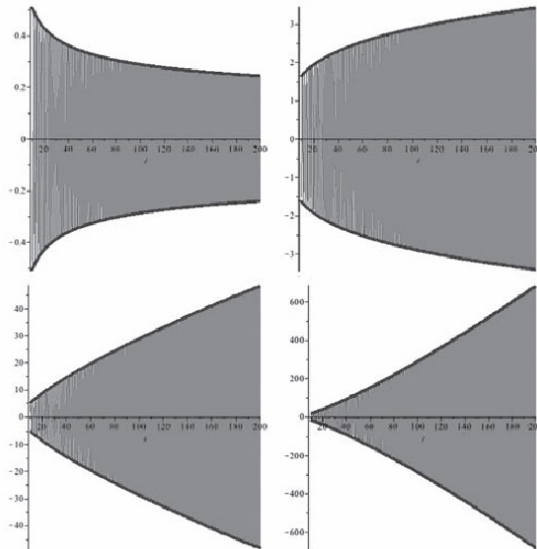
Iserles, Arieh, Three stories of high oscillation, *Eur. Math. Soc. Newsletter*, **87** (2013), 18–23.

شده و $y_n \approx y(t_n)$ از پیش معلوم است؛ می‌خواهیم $y(t_{n+1})$ را که در آن، $t_{n+1} = t_n + h$ با $y_n + hf(x_n, y_n)$ تقریب بزنیم. به بیان دیگر، از t_n به سمت t_{n+1} پیش می‌رویم با این فرض که جواب موضعاً خطی است و به‌طور یکتا با دانستن مقدار و شیب آن در t_n مشخص می‌شود. اگر f دو بار به‌طور هموار مشتق‌پذیر باشد، خطا از مرتبه $O(h^2)$ است و می‌توان با کوچک انتخاب کردن اندازه گام $h > 0$ ، آن را به اندازه کافی کوچک کرد. البته به‌جای تابع‌های خطی، می‌توانیم مثلاً از چندجمله‌ای‌ها یا تابع‌های گویا استفاده کنیم که کاری حرفه‌ای‌تر با درجه پیچیدگی بالاتر است ولی همان اصل به‌کار می‌رود: روی یک همسایگی به‌اندازه کافی کوچک تمرکز می‌کنیم. آنچه روش برهان خلف در آنالیز عددی برای ما باقی می‌گذارد، یک عبارت است: «قضیه تیلور».

مادام که تابع‌ها «خوب» باشند، قضیه تیلور یک سنگ‌بنای منطقی برای الگوریتم‌های عددی است. تصور دنیای امروزی بدون محاسبات علمی و دستاوردهای بسیار آن دشوار است: بیشتر وقت‌ها موضعی عمل کردن و سراسری فکر کردن راهکاری درست است. با این حال، استثناهای مهم فراوان هستند و به دو صورت ظاهر می‌شوند. برخی از تابع‌ها به اندازه کافی هموار نیستند تا با مثلاً چندجمله‌ای‌ها خوب تقریب زده شوند و صورت‌های هوشمندانه‌تری از گسسته‌سازی را نیاز دارند. تابع‌های دیگر ممکن است به اشتباه «خوب» به نظر برسند، ولی مشتقاتشان بزرگ باشد که در واقع تقریب موضعی آنها با قضیه تیلور خیلی ضعیف می‌شود. این وضعیت به‌ویژه در مورد تابع‌های شدیداً نوسانی برقرار است، زیرا وقتی سری تیلور قطع می‌شود، خطا مقیاسی مانند مشتق (های مرتبه بالا) پیدا می‌کند ولی هر بار که مشتق می‌گیریم، دامنه نوسان در بسامد ضرب می‌شود.

معادلهٔ ایری $y'' + ty = 0$ یک مثال قابل فهم فراهم می‌آورد. به‌ازای t ‌های بزرگ، جواب این معادله شبیه $y(t) = ct^{-1/4} \sin(\frac{2}{3}t^{3/2})$ رفتار می‌کند و وقتی t افزایش می‌یابد، نوسانش زیاد می‌شود [۱۳]. به‌سادگی می‌توان نشان داد که $y^{(m)}(t) \sim ct^{m/2-1/4} \sin(\frac{2}{3}t^{3/2})$ ، $m \geq 0$ و دامنه نوسان مشتق‌ها به‌ازای $t \gg 1$ به‌سرعت افزایش می‌یابد. این مطلب در شکل ۱ نشان داده شده است. بنابراین وقتی t افزایش می‌یابد، با چندجمله‌ای‌ها به‌طور ضعیف تقریب زده می‌شود و افزایش درجه چندجمله‌ای در واقع اوضاع را بدتر می‌کند!

نوسان شدید در گستره وسیعی از پدیده‌ها وجود دارد و مدل‌سازی عددی پدیده‌هایی که بسامد بالایی دارند، حیاتی است. با این حال، قضیه تیلور به‌تنهایی برای این هدف کافی نیست و نوعی کاملاً جدید از روش‌های گسسته‌سازی نیاز است. در یکی از این نوع روش‌ها کوشش می‌شود تا با پیوند رفتار موضعی با ویژگی‌های سراسری جواب، آنالیز عددی با بسط‌های مجانبی پیوند یابد. سه روایت از این گونه، در این مقاله توضیح داده می‌شوند: محاسبه انتگرال‌های شدیداً نوسانی، گسسته‌سازی معادلات دیفرانسیل عادی با جمله‌های وادارنده شدیداً نوسانی و محاسبه معادله شرویدینگر خطی. در هیچ‌یک از این موارد، سعی



شکل ۱. جواب $y'' + ty = 0$ ، $y(0) = 1$ ، $y'(0) = 0$ ، مشتقات اول، دوم و سوم آن. خط سیاه ضخیم، پوش $\pm 0.9t^{m/2-1/4}$ را نشان می‌دهد.

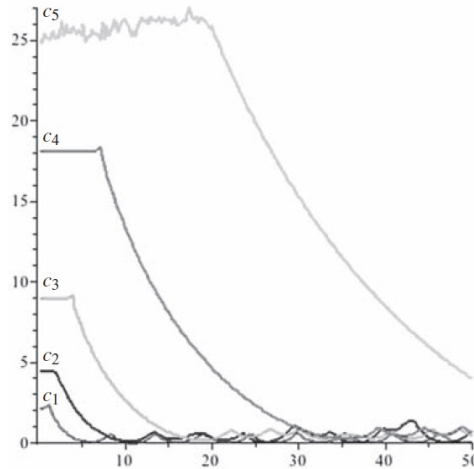
نمی‌کنیم تا به بیشترین کلیت یا پیچیدگی ممکن برسیم، بلکه بیان مثال‌هایی قابل فهم از روش‌های عددی را ترجیح می‌دهیم که در آنها رفتار سراسری، اطلاعاتی از چگونگی محاسبه به‌دست می‌دهد.

۲. روایت ۱: انتگرال‌های شدیداً نوسانی

محاسبه انتگرال‌ها، هنری است به قدمت خودِ انتگرال‌گیری و قدیمی‌ترین روش تعیین مساحت از آن سِر ایزاک نیوتن است (گرچه اگر بخواهیم انصاف را رعایت کنیم، ارشمیدس از چیزی بسیار شبیه به قواعد تعیین مساحت استفاده کرده بود تا مساحت یک قرص را حساب کند). این فوت و فن درس‌های آنالیز عددی در دوره کارشناسی است: با فرض اینکه تابع وزن $w(x) \geq 0$ متحد با صفر نیست و همه چیز هموار است،

$$\int_{a_-}^{a_+} f(x)w(x) dx \approx Q_\nu[f] = \sum_{m=1}^{\nu} b_m f(c_m)$$

که در آن، گره‌های c_1, c_2, \dots, c_ν عددهایی متمایز در $[a_-, a_+]$ و b_1, b_2, \dots, b_ν وزن‌های تعیین مساحت هستند. اگر سایر اجزاء انتگرال بی‌تغییر بمانند، بهترین گره‌ها صفرهای چندجمله‌ای متعامد



شکل ۲. تعداد رقم‌های بامعنی، $-\log_{10} |Q_\nu[f] - I[f]|$ ، برای $f(x) = (2+x)^{-1}$ ، به‌ازای $\nu = 2(c_1), 4(c_2), 8(c_3), 16(c_4), 32(c_5)$ افزایشی.

درجه ν نسبت به ضرب داخلی L_2 با تابع وزن w هستند و نتیجه، یعنی مساحت گاوسی، برای همه چندجمله‌ای‌های f از درجه کمتر یا مساوی $2\nu - 1$ دقیق است. فرض کنیم

$$I[f](\omega) = \int_{-1}^1 f(x)e^{i\omega x} dx. \quad (1.2)$$

وقتی ω بزرگ می‌شود، انتگرالده در (۱.۲) با سرعتی رو به افزایش، نوسان می‌کند. در شکل ۲ اندازه خطا را وقتی روش تعیین مساحت گاوسی به‌ازای $0 \leq \omega \leq 50$ برای $I[f](\omega)$ به‌کار می‌رود، نشان داده‌ایم. رفتار نمودار روشن است. به‌ازای ω های کوچک، روش تعیین مساحت گاوسی خیلی خوب عمل می‌کند و دقت قابل ملاحظه‌ای دارد: هرچه ν بزرگتر، بهتر. ولی وقتی ω رشد می‌کند؛ به بیان نادقیق وقتی $\omega\nu > 1$ ، دقت به‌تندی افول می‌کند و پس از مدتی کوتاه، (۱.۲) حتی یک رقم بامعنی نمی‌دهد! دلیل این رخداد روشن است: انتگرالده در (۱.۲) با چندجمله‌ای‌های از درجه مناسب، خیلی بد تقریب زده می‌شود. الان دقیقاً در وضعیتی هستیم که قضیه تیلور کاربرد چندانی ندارد! پس از ویژگی‌های مجانبی یاری می‌گیریم. به‌آسانی ثابت می‌شود که

$$I[f](\omega) \sim - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(-i\omega)^{n+1}} \left[f^{(n)}(1)e^{i\omega} - f^{(n)}(-1)e^{-i\omega} \right], \quad \omega \gg 1$$

و این روش مجانبی

$$A_s[f](\omega) = - \sum_{n=0}^s \frac{1}{(-i\omega)^{n+1}} \left[f^{(n)}(1)e^{i\omega} - f^{(n)}(-1)e^{-i\omega} \right] \quad (2.2)$$

را نمایان می‌کند [۹]. توجه کنید که خطا، $O(\omega^{-s-2})$ ، با افزایش ω بهتر می‌شود! شکل ۳ خطای حاصل از (۲.۲) به‌ازای $s = 0, 1, 2, 3$ را (در قالبی یکسان با شکل ۲) نشان می‌دهد، با این تفاوت که دامنه‌ای خیلی بزرگتر برای ω در نظر گرفته‌ایم. مقایسه آن با روش تعیین مساحت گاوسی جالب است: برای ω های بزرگ، به اطلاعات خیلی کمتری نیاز داریم. با این حال، شگفت است که جوابی دقیق به‌دست می‌آوریم. بده و بیستان در اینجا است که وقتی همه چیزمان را برای جبران رفتار ناشی از ω های بزرگ اختصاص داده‌ایم، نمی‌توان شکایت کرد که روش مجانبی برای $\omega > \omega$ های کوچک بی‌استفاده است. به یک معنی، روش تعیین مساحت گاوسی و روش مجانبی، مکمل یکدیگرند. این مطلب ما را به قسمت پایین شکل ۳ می‌آورد. در آنجا می‌بینیم که برای ω های بزرگ، رفتار تا اندازه‌ای بهتر از (۲.۲) است ولی بررسی دقیق همسایگی مبدأ نشان می‌دهد که روش رازگونه مورد استفاده، برای ω های کوچک نیز خوب عمل می‌کند. چون هزینه اضافی روش رازگونه در مقایسه با (۲.۲) ناچیز است، در واقع در تمام حالت‌ها تقریب خوبی داریم: یک روش مجانبی-عددی.

حال این روش رازگونه چیست؟ با مفروض بودن نقاط

$$c_1 = -1 < c_2 < \dots < c_{\nu-1} < c_\nu = 1$$

که c_k دارای چندبارگی ۱ است، چندجمله‌ای درونیاب اِرمیتی یکتای p از درجه $1 - \sum m_k$ وجود دارد به طوری که $p^{(i)}(c_k) = f^{(i)}(c_k)$ ، $i = 0, \dots, m_k - 1$ و $k = 1, \dots, \nu$. یک روش از نوع فیلون^۱ عبارت است از تعویض f با p در انتگرال:

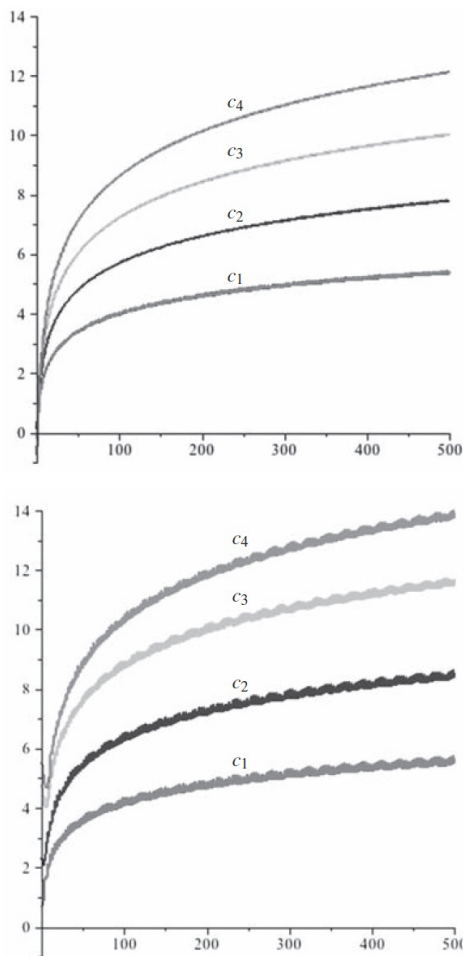
$$F_{c,m}[f](\omega) = I[p](\omega). \quad (3.2)$$

فرض کنیم $s = \min\{m_1, \dots, m_\nu\}$. با جایگذاری $I[p - f] = I[p] - I[f]$ در (۲.۲)، به‌سادگی دیده می‌شود که خطا $O(\omega^{-s-2})$ است [۹]: برای ω های بزرگ، رفتار با مجانبی‌ها تعیین می‌شود. از سوی دیگر، وقتی $\omega \rightarrow 0$ ، (۳.۲) تبدیل به یک روش تعیین مساحت متعارف (با استفاده از مقادیر f و مشتق‌هایش) می‌شود.

آن‌سوی روش‌های از نوع فیلون. توسیع روش فیلون به انتگرال‌های از نوع

$$\int_{a_-}^{a_+} f(x)e^{i\omega g(x)} dx$$

^۱Filon-type methods



شکل ۳. تعداد رقم‌های بامعنی وقتی از تعیین مساحت شدیداً نوسانی استفاده کنیم. در بالا، روش مجانبی $A_s[f]$ به‌ازای $(c_1), (c_2), (c_3), (c_4)$ در پایین، روش از نوع فیلون $F_{c,m}[f]$ با $(c_1) m = [1, 1], c = [-1, 1]$ ؛ $(c_2) m = [2, 1, 2]$ ؛ $(c_3) m = [3, 1, 1, 1, 3], c = [-1, -1/\sqrt{3}, 0, 1/\sqrt{3}, 1]$ ؛ $(c_4) m = [4, 1, 1, 1, 4], c = [-1, -\sqrt{3/11}, 0, \sqrt{3/11}, 1]$

ساده است به این شرط که $g' \neq 0$ در $[a_-, a_+]$. بررسی نقاط مانا^۱ $[a_-, a_+] \in \xi$ که در شرط $g'(\xi) = 0$ صدق می‌کنند، به کار بیشتری نیاز دارد. در این حالت نیاز است که f و تعدادی مناسب از مشتق‌های آن را در نقاط مانا درونیابی کنیم تا رفتار مجانبی روش از نوع فیلون «عادی» احیا شود [۹].

^۱stationary points

همه این مطالب به حالت چندمتغیره توسعه می‌یابد [۱۰]. ولی روش‌های از نوع فیلون، تنها یکی از انواع نوین روش‌های شدیداً نوسانی تعیین مساحت هستند و در کنار آنها، روش‌های لوبین [۱۲، ۱۴] و روش فاز مانای عددی [۸] قرار دارند. این آخری، روشی است که دیدگاهی از هر دو رویکرد نوع فیلون و فاز مانا را با نبوغی مثال‌زدنی، ترکیب می‌کند.

۳. روایت ۲: جمله وادارنده شدیداً نوسانی

یک نقطه آغاز خوب، معادله دیفرانسیل مربوط به آونگ بدون اصطکاک غیرخطی است که شکل بدون بُعد آن به صورت $y'' + \sin y = 0$ ، $y(0) = y_0$ ، $y'(0) = y'_0$ است. این یک دستگاه همیلتونی تک‌متغیره است و دینامیک آن به سادگی آنچه در ادامه می‌آید است: مبدأ یک مرکز است که در صفحه فاز، با مدارهای تناوبی پایدار احاطه شده است. ولی فرض کنید که نوسان‌های تندی را به پایه آونگ بدهیم: نتیجه معادله غیرخودگردان

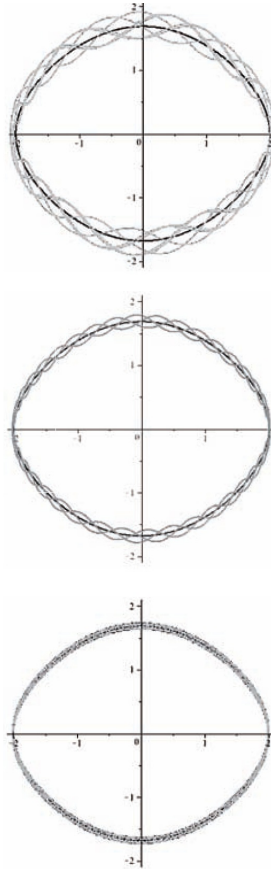
$$y'' + \sin y = c \cos \omega t, \quad t \geq 0, \quad y(0) = y_0, \quad y'(0) = y'_0 \quad (1.3)$$

است که در آن، $\omega \gg 1$. از جواب (۱.۳) چه انتظاری می‌توانیم داشته باشیم؟ شکل ۴ یک مسیر متناظر با $y_0 = 2$ ، $y'_0 = 0$ و $c = 1$ را در صفحه فاز به ازای $\omega = 5, 10, 20$ نشان می‌دهد. می‌توانیم خم ضخیمی را در پس‌زمینه ببینیم: این مسیر متناظر آونگ غیرخطی $y'' + \sin y = 0$ است و آشکار است که مسیر معادله وادارنده^۲، دور تا دور مسیر تناوبی معادله غیروادارنده می‌گردد. شگفت اینک دامنه نوسان این حرکت گردشی با ω کاهش می‌یابد (به همین دلیل است که در شکل ۴ چنین مقادیر متوسطی از ω را به کار برده‌ایم: اگر مقادیر خیلی بزرگتر بودند، این حرکت گردشی با چشم غیرمسلح دیده نمی‌شد). این اثر رشد ω با اهمیت است: نوسان سریع جمله وادارنده منجر به یک اختلال کوچکتر می‌شود و حرکت را پایدار می‌کند. به همین دلیل، کم کردن نوسان، حرکت را ناپایدار می‌کند: همین محاسبات را با $\omega = 2$ انجام دهید. در اینجا یک درس مهم وجود دارد: نوسان شدید برای دینامیک خوب است ولی برای کارهای عددی خام، بسیار مضر است. طبق الگوی فکری مان به جای تکیه بر سری تیلور (موضعی)، به دنبال یک بسط مجانبی می‌گردیم.

خوب است چارچوبی گسترده‌تر را در نظر بگیریم: به پیروی از [۳]، معادله زیر را بررسی می‌کنیم:

$$y'' + f(y) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m(t) e^{im\omega t}, \quad t \geq 0, \quad y(0) = y_0, \quad y'(0) = y'_0 \quad (2.3)$$

^۱numerical stationary phase method ^۲forced equation



شکل ۴. یک مسیر فاز صفحه‌ای از جواب $y' + \sin y = \cos \omega t$ با $y(0) = 3, y'(0) = 0$ ، $\omega = 5, 10, 20$. خم سیاه، مسیر دوره‌ای متناظر $y'' + \sin y = 0$ است.

که در آن، f و $a_m, m \in \mathbb{Z}$ ، تابع‌هایی تحلیلی هستند و $\sum_m |a_m(t)| < \infty, t \geq 0$. ادعای ما این است که می‌توانیم جواب را به صورت

$$y(t) \sim p_{\circ, \circ}(t) + \sum_{r=2}^{\infty} \frac{1}{\omega^r} \sum_{m=-\infty}^{\infty} p_{r,m}(t) e^{im\omega t}, \quad t \geq 0 \quad (3.3)$$

بسط دهیم که در آن، تابع‌های $p_{r,m}$ را که مستقل از ω هستند، می‌توان به‌طور صریح به‌شیوه‌ای بازگشتی به‌دست آورد. در واقع باید هر چیز در (۲.۳) را به‌صورت یک سری مجانبی بسط دهیم. این کار برای $y''(t)$ تا اندازه‌ای ساده است ولی برای $f(y(t))$ خیلی دشوارتر (و پر دردسرت‌ر) است و در پایان این کار

جبری پر حجم، بسطی برحسب دو مقیاس خواهیم داشت: مرتبه‌های بزرگی ω^{-r} و نوسانگرهای $e^{im\omega t}$. با تفکیک بسط برحسب مرتبه بزرگی آغاز می‌کنیم. به‌ازای $r = 0$ داریم

$$p''_{0,0} - \sum_{m=-\infty}^{\infty} m^2 p_{2,m} e^{im\omega t} + f(p_{0,0}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m e^{im\omega t}$$

و با تفکیک برحسب نوسانگرها، داریم

$$p''_{0,0} + f(p_{0,0}) = 0, \quad t \geq 0, \quad p_{0,0}(0) = y_0, \quad p'_{0,0}(0) = y'_0, \\ p_{2,m} = -\frac{a_m}{m^2}, \quad m \neq 0. \quad (4.3)$$

توجه کنید که همان شرط آغازینی را بر $p_{0,0}$ اعمال کرده‌ایم که بر y اعمال کرده بودیم. این بدان معنی است که در ادامه، اعمال شرط $\sum_m p_{r,m}(0) = \sum_m p'_{r,m}(0) = 0$ نیاز است. سپس به‌ازای $r = 1$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} (2im p'_{1,m} - m^2 p_{3,m}) e^{im\omega t}$$

و تفکیک مقیاس‌ها نتیجه می‌دهد

$$p_{3,m} = \frac{2i}{m} p'_{1,m} = -\frac{2i}{m^3} a'_m, \quad m \neq 0. \quad (5.3)$$

به‌همین ترتیب، $r = 2$ نتیجه می‌دهد

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} (p''_{2,m} - 2im p'_{2,m} - m^2 p_{4,m}) e^{im\omega t} + f'(p_{0,0}) \sum_{m=-\infty}^{\infty} p_{2,m} e^{im\omega t} = 0.$$

بنابراین

$$p''_{2,0} + f'(p_{0,0}) p_{2,0} = 0, \quad t \geq 0, \quad \sum_{m=-\infty}^{\infty} p_{2,m}(0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} p'_{2,m}(0) = 0, \\ p_{4,m} = \frac{1}{m^4} [p''_{2,m} - 2im p'_{2,m} + f'(p_{0,0}) p_{2,m}], \quad m \neq 0. \quad (6.3)$$

یک قاعده کلی پدیدار می‌شود: برای هر مرتبه بزرگی مانند r ، $p_{r,0}$ را با حل یک معادله دیفرانسیل و $p_{r+2,m}$ که $m \neq 0$ را با یک رابطه بازگشتی به‌دست می‌آوریم. این معادلات دیفرانسیل باید به‌صورت عددی حل شوند که البته مشکل نیست، چراکه همگی غیرنوسانی هستند: جواب، تنها زمانی نوسانی

می‌شود که آن را به صورت بسط بریده مناسبی از نوع (۳.۳) بسازیم:

$$y^{[s]}(t) = p_{\circ,\circ}(t) + \sum_{r=2}^s \frac{1}{\omega^r} \sum_{m=-\infty}^{\infty} p_{r,m}(t) e^{im\omega t}, \quad t \geq \circ.$$

همه معادلات مرتبط را می‌توان به صورت صریح به دست آورد [۳].

معادلات (۳.۳-۱.۳) را به ویژه برای معادله آونگ غیرخطی واداشته (۱.۳) استفاده می‌کنیم و برای به دست آوردن تقریب بهتر، $r = 3, 4$ را نیز در نظر می‌گیریم. داریم $p_{r,m} \equiv \circ$

$$\begin{aligned} p''_{\circ,\circ} + \sin p_{\circ,\circ} &= \circ, \quad t \geq \circ, \quad p_{\circ,\circ}(\circ) = 2, \quad p'_{\circ,\circ}(\circ) = \circ, \\ p''_{2,\circ} + (\cos p_{\circ,\circ}) p_{2,\circ} &= \circ, \quad t \geq \circ, \quad p_{2,\circ}(\circ) = 1, \quad p'_{2,\circ}(\circ) = \circ, \\ p''_{4,\circ} + (\cos p_{\circ,\circ}) p_{4,\circ} &= \frac{1}{4}(1 + 2p_{\circ,\circ}^2) \sin p_{\circ,\circ}, \quad p_{4,\circ}(\circ) = \cos 2, \quad p'_{4,\circ}(\circ) = \circ \end{aligned}$$

و

$$y^{[2]}(t) = p_{\circ,\circ}(t) + \frac{1}{\omega^2} [p_{2,\circ} - \cos \omega t],$$

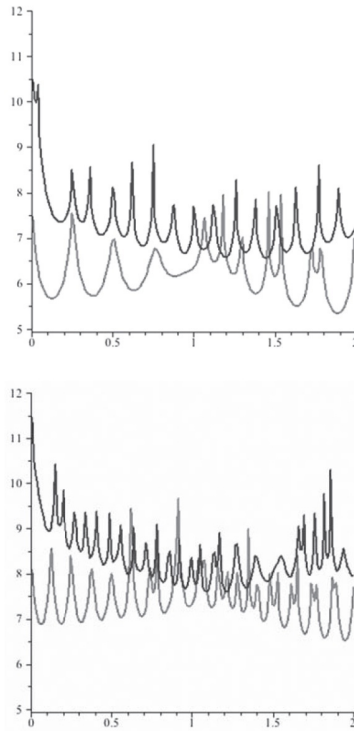
$$y^{[4]}(t) = p_{\circ,\circ}(t) + \frac{1}{\omega^2} [p_{2,\circ} - \cos \omega t] + \frac{1}{\omega^4} [p_{4,\circ} - \cos \omega t \cos p_{\circ,\circ}(t)].$$

شکل ۵ تعداد ارقام بامعنی بازایی شده توسط $y^{[2]}$ و $y^{[4]}$ را به ترتیب، به ازای $\omega = 25$ و $\omega = 50$ نمایش می‌دهد. همه چیز مطابق با نظریه است ولی اگر این میزان دقت را ناکافی می‌دانید، بسیار خوب! فقط ω را بزرگتر بگیرید

آنسوی معادلات دیفرانسیل عادی واداشته به شدت نوسانی. معادله (۲.۳) تنها یک مثال از معادلات دیفرانسیل عادی با جمله وادارنده به شدت نوسانی است که می‌توان با این ترکیب از استدلال مجانبی و عددی، برای آن بسط نوشت. به طور کلی تر می‌توان این تحلیل را به دستگاه‌های معادلات دیفرانسیل عادی

$$y' = f(y) + \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m(t) e^{im\omega t}, \quad t \geq \circ, \quad y(\circ) = y_{\circ} \quad (7.3)$$

[۴، ۱۵]) و فراتر از آن، تعمیم داد. معادلاتی از این دست در بسیاری از کاربردها مهم هستند؛ مثلاً در الکترونیک آنجا که نوسان توسط ورودی‌های با بسامد بالا تولید می‌شود.



شکل ۵. خطای $|y^{[s]}(t) - y(t)| - \log_{10}$ برای آونگ غیرخطی واداشته (۱.۳): $\omega = 25$ در بالا و $\omega = 50$ در پایین، $s = 2$ با خاکستری و $s = 4$ با سیاه.

چارچوبی کلی‌تر را روش چندمقیاسی نامتجانس^۱ به دست می‌دهد [۱] که نه تنها جمله‌های وادارنده به شدت نوسانی، بلکه ضرایب به شدت نوسانی را نیز می‌پذیرد ولی در عوض، بسط‌ها عملاً فقط برای مقادیر به نسبت متوسط $r \geq 1$ می‌توانند تا مرتبه $\mathcal{O}(\omega^{-r})$ تولید شوند.

۴. روایت ۳: معادله شرودینگر خطی

معادله شرودینگر خطی

$$\partial_t u = i\varepsilon \partial_x^2 u + i\varepsilon^{-1} V(x)u, \quad t \geq 0, \quad -1 \leq x \leq 1 \quad (1.4)$$

که در آن، هم مقدار اولیه $u(0, 0)$ و هم پتانسیل برهم‌کنشی^۲ $V(x)$ تابع‌هایی هموار و تناوبی هستند، وضعیت کوانتومی یک تک‌ذره را توصیف می‌کند: این معادله اساساً همتای قانون نیوتن در یک محیط

^۱heterogeneous multi scale method ^۲interaction potential

کوانتومی است. پارامتر ε بسیار کوچک است که باعث می‌شود حل این معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی خطی که آسان به نظر می‌آید، نسبتاً دشوار شود.

در روش‌های عددی استاندارد، مسیر زیر دنبال می‌شود: با گسسته‌سازی معادله (۱.۴) در یک فضای M بُعدی شروع می‌کنیم؛ مثلاً با جایگزینی $\partial_x^2 u$ با یک ترکیب خطی از مقادیر تابع در یک تور (تفاضلات متناهی) یا ورود به یک فضای فوریه و در نظر گرفتن افکنش L_2 روی چندجمله‌ای‌های مثلثاتی از درجه N ، $M = 2N + 1$ (روش طیفی). حاصل کار، مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل عادی به صورت

$$\mathbf{u}' = i(\varepsilon\mathcal{K} + \varepsilon^{-1}D_V)\mathbf{u}, \quad t \geq 0, \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0. \quad (2.4)$$

است که در آن، \mathcal{K} و D_V به ترتیب، ماتریس‌های متناظر با تقریب مشتق‌گیری و ضرب در V هستند. انتظار داریم حل (۲.۴) اساساً آسان باشد. در واقع جواب صریح عبارت است از

$$\mathbf{u} = \exp(it(\varepsilon\mathcal{K} + \varepsilon^{-1}D_V))\mathbf{u}_0, \quad t \geq 0$$

جز اینکه وقتی ε خیلی کوچک است، همه چیز خراب می‌شود. بُعد M عددی بزرگ است (و علاقه واقعی ما هم مطالعه (۱.۴) در حالت چندمتغیره است که آن وقت بُعد، واقعاً بزرگ خواهد شد!) و تنها امید واقع‌بینانه برای محاسبه تابع نمایی ماتریسی با دقتی پذیرفتنی، استفاده از روش‌های زیرفضای کریلوف^۲ است [۶]. در این روش، امیدواریم که به جای محاسبه یک تابع نمایی ماتریسی «بزرگ»، یک تابع نمایی ماتریسی کوچک با اندازه $m \times m$ را محاسبه کنیم که هزینه این کار، $\mathcal{O}(m^2 M)$ تا عمل است. البته اگر ε بسیار کوچک باشد، امیدمان واهی خواهد بود، زیرا m بزرگ می‌شود، $m = \mathcal{O}(M)$ ، و هزینه کل محاسبات، $\mathcal{O}(M^3)$ ، چندان بزرگ می‌شود که پذیرفتنی نخواهد بود.

خبر خوب اینکه یک جایگزین مناسب در دسترس است: تفکیک نمایی^۳. ساده‌ترین شکل آن،

تفکیک استرانگ^۴

$$e^{it(\varepsilon\mathcal{K} + \varepsilon^{-1}D)} \approx e^{\frac{1}{2}it\varepsilon\mathcal{K}} e^{it\varepsilon^{-1}D_V} e^{\frac{1}{2}it\varepsilon\mathcal{K}} \quad (3.4)$$

است با خطای $\mathcal{O}(t^3)$ و محاسبه آن آسان است: مثلاً وقتی روش طیفی را به کار می‌گیریم، \mathcal{K} یک ماتریس قطری و D_V یک ماتریس گردشی می‌شود که تابع نمایی آنها را می‌توان با دو تبدیل سریع فوریه (FFT) تعیین کرد [۱۱]. متأسفانه خطای تفکیک استرانگ، $\mathcal{O}(t^3)$ ، بیش از آن بزرگ است که پذیرفتنی باشد. می‌توان تفکیک‌های مرتبه بالاتری طراحی کرد؛ مثلاً

$$e^{\frac{1}{3}\alpha t B} e^{\alpha t A} e^{\frac{1}{3}(1-\alpha)t B} e^{(1-2\alpha)t A} e^{\frac{1}{3}(1-\alpha)t B} e^{\alpha t A} e^{\frac{1}{3}\alpha t B} \quad (4.4)$$

^۱grid ^۲Krylov subspace methods ^۳exponential splitting ^۴Strang splitting

که در آن، $\mathcal{A} = i\varepsilon^{-1}D_V$ ، $\mathcal{B} = i\varepsilon\mathcal{K}$ و $\alpha = (\mathcal{Y} - \sqrt{\mathcal{Y}})^{-1}$ دارای خطای $\mathcal{O}(t^5)$ است. به طور کلی، می‌توانیم با تفکیک به $1 + \mathcal{Y} \times 3^{n-1}$ جمله، به خطای $\mathcal{O}(t^{2n+1})$ دست بیابیم اما در محاسبات عملی متضمن n ‌های خیلی بزرگ، این خطایی بسیار بزرگ خواهد بود؛ حتی اگر هر تابع نمایشی ماتریسی با هزینه کم محاسبه شود. به علاوه توجه کنید که همه اینها بسط‌هایی نسبت به طول گام t هستند ولی ما دو کمیت کوچک دیگر هم داریم: ε و M^{-1} . در یک بسط خوب باید همه آنها به حساب آیند.

تا اینجا داستان، یک راه‌چاره بر ما عیان است: بسط مجانبی! با پیروی از ایده‌های موجود در [۲]، فرض می‌کنیم که $t \sim \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}})$ ، $M \sim \mathcal{O}(\varepsilon^{-\frac{1}{2}})$ و بسطی به صورت

$$e^{\mathcal{R}_0} e^{\mathcal{R}_1} \dots e^{\mathcal{R}_s} e^{T_{s+1}} e^{\mathcal{R}_s} \dots e^{\mathcal{R}_1} e^{\mathcal{R}_0} \quad (5.4)$$

را جستجو می‌کنیم که در آن،

$$\mathcal{R}_0 = \mathcal{O}(\varepsilon^{-\frac{1}{2}}), \mathcal{R}_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}}), \dots, \mathcal{R}_s = \mathcal{O}(\varepsilon^{s-\frac{1}{2}})$$

و $T_s = \mathcal{O}(\varepsilon^{s+\frac{1}{2}})$ ؛ یعنی یک تفکیک مجانبی.

نتیجه مهم در رابطه با (۵.۴-۳.۴) این است که همگی از دو سر یکی هستند: چه از راست بخوانیم و چه از چپ، به یک نتیجه می‌رسیم. این ویژگی چند مزیت دارد. این بار تقارن، در کمینه‌سازی تعداد جمله‌های خوب است، زیرا همه بسط‌ها توان‌هایی فرد از پارامتر کوچک هستند. همچنین از آنجا که هم $i\partial_x^2$ و هم ضرب در iV ، عملگرهایی پادارمیتی هستند، عملگر جواب (۱.۴) یکانی است و از دو سر یکی بودن، باعث می‌شود که بررسی این ویژگی (یکانی بودن) در گسسته‌سازی آسان‌تر شود.

رویکرد درست در جهت محاسبه تفکیک‌های مجانبی (۵.۴) این است که فعلاً از نیم‌گسسته‌سازی (۲.۴) دست بکشیم و عملگر جواب تحلیلی، $\exp(it(\varepsilon\partial_x^2 + \varepsilon^{-1}V))$ ، را تفکیک کنیم. تنها پس از آنکه چنین کردیم، هر چیزی را با یک تقریب متناهی بعد جایگزین می‌کنیم. سلاح اصلی ما فرمول بیکر-کمبل-هاوسدورف متقارن^۱ (sBCH) است: $e^{\frac{1}{2}X} e^Y e^{\frac{1}{2}Y} = e^{s\text{BCH}(X,Y)}$ که در آن،

$$\begin{aligned} s\text{BCH}(tX, tY) &= t(X + Y) - t^2 \left(\frac{1}{24} [[Y, X], X] + \frac{1}{12} [[Y, X], Y] \right) \\ &+ t^5 \left(\frac{1}{576} [[[[Y, X], X], X], X] + \frac{1}{144} [[[[Y, X], X], X], Y] \right) \\ &+ \frac{1}{18} [[[[Y, X], X], Y], Y] + \frac{1}{72} [[[[Y, X], Y], Y], Y] \\ &+ \frac{1}{48} [[[[Y, X], X], [Y, X]]] + \mathcal{O}(t^7). \end{aligned} \quad (6.4)$$

^۱Baker-Campbell-Hausdorff

توجه کنید که این بسط به صورت توان فردی از t است که نتیجه‌ای از مزیت «از دو سری یکی بودن» است! قرار می‌دهیم $\tau = i\Delta t$ که Δt گام زمان است. الگوریتم با قراردادن $\tau\epsilon\partial_x^\dagger$ (جمله‌ای که مایل به تفکیک آن هستیم) و $\mathcal{R}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\tau\epsilon^{-1}V$ (نصف جملهٔ مجانباً بزرگتری که مایل هستیم در این مرحله آن را حذف کنیم) آغاز می‌شود. بنابراین

$$e^{\tau\epsilon^{-1}V + \tau\epsilon\partial_x^\dagger} = e^{\mathcal{T}_0} = e^{\mathcal{R}_0} e^{\text{sBCH}(-2\mathcal{R}_0, \mathcal{T}_0)} e^{\mathcal{R}_0}.$$

توجه کنید که وقتی جملهٔ پیشرو را «قطع» می‌کنیم، داریم $\mathcal{T}_1 := \text{sBCH}(-2\mathcal{R}_0, \mathcal{T}_0) = \mathcal{O}(\epsilon^{\frac{1}{2}})$. سپس جملهٔ پیشرو (یعنی $\mathcal{O}(\epsilon^{\frac{1}{2}})$) از \mathcal{T}_1 را مشخص می‌کنیم و فرض می‌کنیم \mathcal{R}_1 نصف آن باشد. بنابراین

$$e^{\tau\epsilon^{-1}V + \tau\epsilon\partial_x^\dagger} = e^{\mathcal{R}_0} e^{\mathcal{R}_1} e^{\text{sBCH}(-2\mathcal{R}_1, \mathcal{T}_1)} e^{\mathcal{R}_1} e^{\mathcal{R}_0}.$$

و $\text{sBCH}(-2\mathcal{R}_1, \mathcal{T}_1) = \mathcal{O}(\epsilon^{\frac{3}{2}})$. سپس (بیش از هر وقت دیگری) با امید به اینکه شیطان در جلد جزئیات نرود، این روش را ادامه می‌دهیم تا دقت درست به دست آید. ظاهراً فرمول sBCH جابه‌جاگرهای فراوانی را وارد می‌کند و این می‌تواند کل کار را در باتلاق محاسبات پرهزینه بیندازد مگر اینکه با بررسی بیشتر، جابه‌جاگرها حذف شوند! برای مثال، به آسانی می‌توان نشان داد $\partial_x \partial_x^\dagger = -V'' - 2V' \partial_x$. به‌طور کلی، هر ترکیبی از جابه‌جاگرهای تودرتو از V و ∂_x^\dagger را می‌توان به صورت $\sum_{k=0}^n y_k(x) \partial_x^\dagger$ ، به‌ازای یک n و تابع‌های y_1, y_2, \dots, y_n نوشت که این تابع‌ها به V و مشتق‌های آن وابسته‌اند. جابه‌جاگرها کنار می‌روند اما مشکلی دیگر سر برمی‌آورد: توان‌های فرد ∂_x که ممکن است باعث ناپایداری شوند و بسط‌های ما را ویران کنند. راه‌حل، خلاص شدن از مشتق‌های فرد با یک ترفند ساده است؛ مثلاً

$$y(x) \partial_x = -\frac{1}{\sqrt{2}} \int_{x_0}^x y(\xi) d\xi \partial_x^\dagger - \frac{1}{\sqrt{2}} y'(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x^\dagger \left[\int_{x_0}^x y(\xi) d\xi \right].$$

در سمت راست، فقط عملگرهای مشتق از مرتبهٔ زوج را داریم و این خیلی خوب است! نتیجه این‌که

$$\mathcal{R}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \tau \epsilon^{-1} V = \mathcal{O}(\epsilon^{-\frac{1}{2}}),$$

$$\mathcal{R}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \tau \epsilon \partial_x^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} \tau^3 \epsilon^{-1} V'' = \mathcal{O}(\epsilon^{\frac{1}{2}}),$$

$$\mathcal{R}_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \tau^3 \epsilon \{ \partial_x^\dagger (V'' \cdot) + V''' \partial_x^\dagger \} + \frac{1}{\sqrt{2}} \tau^5 \epsilon^{-1} V''' V^2 = \mathcal{O}(\epsilon^{\frac{3}{2}})$$

و غیره، تفکیک مجانبی ما است. اکنون -و فقط در همین مرحله- مشتق‌ها را با یکی از روش‌های بسیار توانمند آنالیز عددی مثل هم‌محلی طیفی [۵]، گسسته می‌کنیم. کل این فرآیند را می‌توان، به‌طور

تناقض آمیزی، با کنار گذاشتن جمله کوچکتر $\tau \varepsilon \partial_x^2$ بسیار بهتر کرد، زیرا این گام بدور از شهود، به این معنی است که همه نمایی‌های $\mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{m}{3}})$ را به‌ازای $\frac{1}{3} \leq m$ ، می‌توان به‌آسانی محاسبه کرد چون یا قطری هستند و یا از روش تبدیل سریع فوریه محاسبه می‌شوند. بقیه نمایی‌ها را می‌توان با روش‌های زیرفضای کريلوف، به ابعاد بسیار کم کاهش داد؛ مثلاً به‌ازای $s = 2$ ، به بُعد ۳ برای \mathcal{R}_2 و به بُعد ۲ برای \mathcal{T}_3 نیاز داریم.

آن‌سوی معادله شرودینگر تک‌متغیره. معادله (۱.۴) ساده‌ترین مدل از معادلات شرودینگر خطی در شیمی کوانتومی است. به‌طور کلی تمایل داریم معادله چندمتغیره $i \varepsilon \nabla^2 u + i \varepsilon^{-1} V(x)u$ را در یک چنبره d -بُعدی حل کنیم. اگر d نسبتاً کوچک باشد، بسط مجانبی (۵.۴) تعمیم می‌یابد و با صرف هزینه $\mathcal{O}(N^d \log N)$ تا عمل، شدنی می‌ماند. اما اگر d بزرگ باشد، این رویکرد را باید با روش‌های تخصصی در چارچوب‌های با بُعد بالا مثل شبکه‌های تُنک، هماهنگ ساخت: این یک موضوع پژوهشی جدی است. تعمیمی دیگر که به پتانسیل‌های برهم‌کنشی زمان-وابسته مربوط می‌شود، چنانچه تأثیرات مغناطیسی در نظر گرفته شوند، مهم است.

گستره بالقوه روش «تفکیک‌کننده مجانبی» از این نیز بسیار وسیع‌تر است؛ نه‌تنها به‌دلیل آهنگ تقریبی (مجانبی) میرایی، بلکه به این دلیل که جابه‌جاگرها با عباراتی جایگزین می‌شوند که به‌آسانی قابل محاسبه هستند. در آینده محدودیت‌های این روش روشن خواهد شد.

مراجع

- [1] Abdulle, A., Engquist, W. E. B., Vanden-Eijnden, E., The heterogeneous multiscale method, *Acta Numerica*, **21** (2012), 1–87.
- [2] Bader, P., Iserles, A., Kropielnicka, K., Singh, P., *Effective approximation for the linear time-dependent Schrödinger equation*, Technical Report NA2012/05, DAMTP, University of Cambridge, 2012.
- [3] Condon, M., Deaño, A., Iserles, A., On second order differential equations with highly oscillatory forcing terms, *Proc. Royal Soc. A*, **466** (2010), 1809–1828.
- [4] Condon, M., Deaño, A., Iserles, A., On systems of differential equations with extrinsic oscillations, *Discr. & Cont. Dynamical Sys.*, **28** (2010), 1345–1367.
- [5] Hesthaven, J. S. Gottlieb, S., Gottlieb, D., *Spectral Methods for Time-Dependent Problems*, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [6] Hochbruck, M., Lubich, C., On Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator, *SIAM J. Numer. Anal.*, **34** (1997), 1911–1925.

- [7] Huybrechs, D., Olver, S., Superinterpolation in highly oscillatory quadrature, *Found. Comp. Maths*, **12** (2012), 203–228.
- [8] Huybrechs, D., Vandewalle, S., On the evaluation of highly oscillatory integrals by analytic continuation, *SIAM J. Numer. Anal.*, **44** (2006), 1026–1048.
- [9] Iserles, A., Nørsett, S. P., Efficient quadrature of highly oscillatory integrals using derivatives, *Proc. Royal Soc. A*, **461** (2005), 1383–1399.
- [10] Iserles, A., Nørsett, S. P., Quadrature methods for multivariate highly oscillatory integrals using derivatives, *Maths Comp.*, **75** (2006), 1233–1258.
- [11] Jin, S., Markowich, P., Sparbe, Ch., Mathematical and computational methods for semiclassical Schrödinger equations, *Acta Numerica*, **20** (2011), 121–210.
- [12] Levin, D., Fast integration of rapidly oscillatory functions, *J. Comput. Appl. Math.*, **67** (1996), 95–101.
- [13] Olver, F. W. J., *Asymptotics and Special Functions*, A K Peters Ltd, Wellesley, MA, 1997.
- [14] Olver, S., Moment-free numerical integration of highly oscillatory functions, *IMA J. Numer. Anal.*, **26** (2006), 213–227.
- [15] Sanz-Serna, J. M., Modulated Fourier expansions and heterogeneous multiscale methods., *IMA J. Numer. Anal.*, **29** (2009), 595–605.

حسن مجیدیان: بنیاد دانشنامه نگاری ایران

رایانامه: majidian@iecf.ir

خدیجه ندائی اصل: دانشگاه تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان

رایانامه: nedaiasl@iasbs.ac.ir