Symplectic Methods for the Nonlinear Schrödinger Equation

Miao Xu
Advisor:Quandong Feng

April 27,2016

目录

我们考虑非线性薛定谔方程 (NLSE)

$$\begin{cases} iW_t = W_{xx} + a|W|^2 W = 0 \\ W(x,0) = W_0(x), \end{cases} \tag{1}$$

其中 $x \in R, a > 0$ 且 a 为常数. 该方程是孤立子理论中完全可积模型中最重要的方程之一, 它在物理学中的很多领域像非线性光学和等离子物理中有着广泛的应用.

在上次报告中我给大家简单介绍过辛算法的一些基本概念, 我们也知道辛算法能保持连续的 Hamilton 流的内在的一些典则特征. 保结构、稳定性强、不含人为耗散, 是目前最稳定高效的计算方法. 大量的数值实验也表明辛积分优于非辛积分, 特别是对于长期模拟和保持不变量的特征方面.

下面我们考虑NLSE(1)的空间离散化:

$$\begin{cases} iW_t^{(l)} + \dfrac{1}{h^2}\left[W^{(l+1)} - 2W^{(l)} + W^{(l-1)}\right] + a|W^{(l)}|^2 W^{(l)} = 0 \\ W^{(l)}(0) = W_0(lh), \end{cases} \tag{2}$$

其中 h 是空间步长, 且 $W^{(l)} \equiv W^{(l)}(t) = W(lh, t)$.

我们就会得到下面的定理:

定理 1:假设初始条件 $W_0(x)$ 是平方可积的, 即 $\int_{-\infty}^{+\infty} |W_0(x)|^2 dx < +\infty$. 那么当 $h \to 0$ 时, 空间离散化方程 (2) 的解收敛到原始的 $NLSE(1)(a > 0)$ 的解.

证明:不妨设 $w(x, t)$ 是方程 (1) 的解, 且设 $w^{(l)} = w(lh, t)$, 则

$$iw_t^{(l)} + w_{xx}^{(l)} + a|w^{(l)}|^2 w^{(l)} = 0,$$

$$iw_t^{(l)} + \frac{w^{(l+1)} - 2w^{(l)} + w^{(l-1)}}{h^2} + a|w^{(l)}|^2 w^{(l)} = M_l, \tag{3}$$

其中 $M_l=(w^{(l+1)}-2w^{(l)}+w^{(l-1)})/h^2-W_{xx}^{(l)}$, $M_l(t)=h^2B_l(t)$.
(3)-(2) 得:

$$i(w_t^{(l)}-W_t^{(l)})+\frac{w^{(l+1)}-W^{(l+1)}-2(w^{(l)}-W^{(l)})+w^{(l-1)}-W^{(l-1)}}{h^2}$$
$$+a(|w^{(l)}|^2w^{(l)}-|W^{l)}|^2W^{(l)})=M_l$$

令 $\varepsilon_l=w^{(l)}-W^{(l)}$, 则有

$$i\frac{d\varepsilon_l}{dt}+\frac{\varepsilon_{l+1}-2\varepsilon_l+\varepsilon_{l-1}}{h^2}+a\left\{\left[|w^{(l)}|^2+|W^{(l)}|^2\right]\varepsilon_l+w^{(l)}W^{(l)}\bar{\varepsilon}_l\right\}=M_l \tag{4}$$

(4) 两边乘以 $\bar{\varepsilon}_l$, 并对 l 求和取虚部得:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\sum_{t}|\varepsilon_l|^2 + aIm\Big[\sum_{l} w^{(l)}\, W^{(l)}\bar{\varepsilon}_l^2\Big] = Im\Big[\sum_{l} M_l\bar{\varepsilon}_l\Big] \tag{5}$$

$$\begin{aligned}\therefore \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\varepsilon\|^2 &\le h^2\|B\|\|\varepsilon\| + a\frac{1}{2}(\|w\|^2 + \|W\|^2)\|\varepsilon\|^2 \\ &\le \frac{1}{2}h^4c_1^2 + \frac{1}{2}(1+2ac_2^2)\|\varepsilon\|^2,\end{aligned} \tag{6}$$

其中 c_1, c_2 为常数, $\|\cdot\|$ 定义为 $\|\varepsilon(t)\|^2 = h\sum_{l}|\varepsilon_l|^2$.

$$\therefore \|\varepsilon(T)\|^2 \le e^{(1+2ac_2^2)\cdot T}\cdot\Big(\frac{c_1^2h^4}{1+2ac_2^2}\Big), \tag{7}$$

也即是给定一个 T, 当 h 充分小时方程 (2) 的解足够接近方程 (1) 的解, 故定理得证.

设 $W^{(l)}=p^{(l)}+iq^{(l)}$, 方程 (2) 可分解为

$$\begin{cases} p_t^{(l)}+\dfrac{q^{(l+1)}-2q^{(l)}+q^{(l-1)}}{h^2}+a\left[(p^{(l)})^2+(q^{(l)})^2\right]q^{(l)}=0 \\ q_t^{(l)}-\dfrac{p^{(l+1)}-2p^{(l)}+p^{(l-1)}}{h^2}-a\left[(p^{(l)})^2+(q^{(l)})^2\right]p^{(l)}=0, \end{cases} \tag{8}$$

假设边界条件 $W(N_1h,t)=W(N_2h,t)=0$, $[N_1h,N_2h]$ 是总的区间. (8) 也可以写成下面的 Hamilton 系统的形式:

$$\frac{d}{dt}z=\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix}0 & -B\\ B & 0\end{pmatrix}z+a\begin{pmatrix}0 & -D\\ D & 0\end{pmatrix}z, \tag{9}$$

其中

$$z=\begin{pmatrix}p\\ q\end{pmatrix}, p=\begin{pmatrix}p^{(1)}\\ \vdots\\ p^{(n)}\end{pmatrix}, q=\begin{pmatrix}q^{(1)}\\ \vdots\\ q^{(n)}\end{pmatrix}.$$

而

$$B = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{pmatrix},$$

$$D = diag\left\{(p^{(1)})^2 + (q^{(1)})^2, \ldots, (p^{(n)})^2 + (q^{(n)})^2\right\}.$$

这时 Hamilton 函数为:

$$H(p,q) = \frac{1}{2h^2}[p^T BP + q^T Bq] + \frac{a}{4}\sum_{k=1}^{n}[(p^{(k)})^2 + (q^{(k)})^2]^2 \qquad (10)$$

此因

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{1}{h^2}\cdot Bp + a\cdot\sum_{i=1}^{n} p^{(k)} = \frac{dz}{dp}$$

$$\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{1}{h^2}\cdot Bq + a\cdot\sum_{i=1}^{n} q^{(k)} = -\frac{dz}{dq}$$

原 NLSE 的守恒律

原 NLSE 有无限多个守恒律. 我们现在来考虑以下几个:

- 电荷 $Q = \int_{-\infty}^{+\infty} |W|^2 dx$
- 能量 $E = \int_{-\infty}^{+\infty} (\frac{a}{2}|W|^4 - |W_x|^2) dx$
- 动量 $P = \int_{-\infty}^{+\infty} W \cdot \overline{W}_x dx$

我们选其中两个证明一下.

$$\because iW_t + W_{xx} + a|W^2| \cdot W = 0,$$

$$\begin{aligned}
\therefore \frac{dQ}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dW \cdot \overline{W}}{dt} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} (W_t \cdot \overline{W} + W \cdot \overline{W_t}) dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} (\frac{-a|W^2| \cdot W - W_{xx}}{i} \overline{W} + W \cdot \frac{a|\overline{W}|^2 \cdot W + \overline{W_{xx}}}{i}) dx \\
&= i \int_{-\infty}^{+\infty} (a|W^2| \cdot W + W_{xx}) \overline{W} - W \cdot (a|\overline{W}|^2 \cdot W + \overline{W_{xx}}) dx \\
&= 0
\end{aligned}$$

故电荷守恒.

动量: $P=\int_{-\infty}^{+\infty} W\cdot \overline{W}_x dx$, 若 $\frac{dp}{dt}=0$, 则 $\frac{dp'}{dt}=0$. 其中 $p'=\int_{-\infty}^{+\infty}(W\cdot \overline{W}_x-\overline{W}\cdot W_x)dx$, 又

$$
\begin{aligned}
\frac{dp'}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty}(W_t\cdot \overline{W}_x + W\cdot \overline{W}_{xt} - \overline{W}_t\cdot W_x + \overline{W}\cdot W_{xt})dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\Big[i\overline{W_x}(W_{xx}+a|W|^2\cdot W) + W\cdot \overline{W}_{xt} \\
&\qquad - W_x(-i\overline{W_{xx}} - a|W|^2\overline{W}) + \overline{W}\cdot W_{xt}\Big]dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} id\overline{W_x}\cdot W_x + ia|W|^2 d\overline{W}\cdot W \\
&\qquad + \int_{-\infty}^{+\infty}(W\cdot \overline{W}_{xt} + \overline{W}\cdot W_{xt})dx \\
&= W\cdot \overline{W}_t + \overline{W}\cdot W_t = 0
\end{aligned}
$$

故动量 P 也守恒.

类似地, 系统 (9) 也有两个不变量:

- 能量 $\tilde{E} = H(p, q)$
- 电荷 $\tilde{Q} = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\left[(p^{(k)})^2 + (q^{(k)})^2\right]$

此因,

$$\frac{d\tilde{E}}{dt} = \frac{dH(p,q)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}\cdot\frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p}\cdot\frac{dq}{dt} = \frac{dz}{dp}\cdot\frac{dp}{dt} - \frac{dz}{dq}\cdot\frac{dq}{dt} = 0$$

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{Q}}{dt} &= \sum_{k=1}^{n}[p^{(k)}\cdot\frac{dp^{(k)}}{dt} + q^{(k)}\cdot\frac{dq^{(k)}}{dt}] \\ &= \frac{1}{h^2}\sum_{k=1}^{n}\Big[q^{(k+1)}\cdot p^{(k)} + p^{(k)}q^{(k-1)} \\ &\qquad - [p^{(k+1)}\cdot q^{(k)} - p^{(k-1)}\cdot q^{(k)}\Big] = 0\end{aligned}$$

故 $\tilde{E}$, $\tilde{Q}$ 均守恒. 同时我们会发现仅有这两个不变量.

欧拉中点格式

中点格式: $G^z: \tilde{z} = z + \tau J\nabla H(\frac{\tilde{z}+z}{2})$, 其中 τ 为步长.
我们之前已经验证过该格式为二阶可逆的. 下面我们验证一下它是 H 的二次不变量.

$$\begin{aligned}
\tilde{z}^T s\tilde{z} &= \tilde{z}^T s\Big[z + \tau J\nabla H(\frac{\tilde{z}+z}{2})\Big] \\
&= \tilde{z}^T sz + (\tilde{z}+z)^T \cdot s\tau J\nabla H(\frac{\tilde{z}+z}{2}) - z^T s\Big[\tau J\nabla H(\frac{\tilde{z}+z}{2})\Big] \\
&= \tilde{z}^T sz - z^T s\Big[\tau J\nabla H(\frac{\tilde{z}+z}{2})\Big] \\
&= \tilde{z}^T sz + \Big[\tau J\nabla H(\frac{\tilde{z}+z}{2})\Big]^T sz - z^T s\Big[\tau J\nabla H(\frac{\tilde{z}+z}{2})\Big] \\
&= \tilde{z}^T sz
\end{aligned} \tag{11}$$

也即中点格式能保持电荷守恒.(因为 Hamilton 系统 (9) 只有一个二次不变量)

数值格式 (11) 有如下的形式能量:

$$\tilde{H} = H - \frac{\tau^2}{24} H_{z^2}(z^{[1]})^2 + \frac{7\tau^4}{5760} H_{z^4}(z^{[1]})^4 + \frac{\tau^4}{480} H_{z^3}(z^{[1]})^2 z^{[2]} + \frac{\tau^4}{160} H_{z^2}(z^{[2]})^2 + O(\tau^6) \tag{12}$$

其中 $z^{[1]} = J\nabla H, z^{[2]} = (z^{[1]})_z \cdot z^{[1]} = JH_{zz}J = \nabla H;$
$z \in R^{2p}, H_{z^q}(*)$ 定义为 $\forall q \geq 0$ 的 q 线性形式. 例如:

$$H_{z^2}(z^{[1]})^2 = (J\nabla H)^T H_{zz}(J\nabla H) = \sum_{i,j=1}^{2p} H_{z_j z_i} \cdot z_i^{[1]} z_j^{[1]}$$

四阶龙格库塔格式

四阶龙格库塔格式:

$$\begin{cases} \tilde{z} = z + \dfrac{\tau}{2} J\big[\nabla H(k_1) + \nabla H(k_2)\big] \\ k_1 = z + \dfrac{\tau}{12} J\big[3\nabla H(k_1) + (3 - 2\sqrt{3}\nabla H(k_2)\big] \\ k_2 = z + \dfrac{\tau}{12} J\big[(3 + 2\sqrt{3})\nabla H(k_1) + 3\nabla H(k_2)\big] \end{cases}$$

四阶的龙格库塔也是可逆的，它的形式能量如下:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = H - \frac{\tau^4}{4320} H_{z^4}(z^{[1]})^4 - \frac{\tau^4}{720} H_{z^3}(z^{[1]})^2 z^{[2]} \\ - \frac{\tau^4}{1440} H_{z^2}(z^{[2]})^2 + O(\tau^6) \end{aligned} \tag{13}$$

Thank You