

含五次非线性项的 Schrödinger 方程的多辛算法

徐金平¹, 陈特清²

(1. 闽南理工学院 信息管理学院, 福建 石狮 362700;
2. 闽南理工学院 教育学院, 福建 石狮 362700)

摘 要:通过引入正则变量得到方程的多辛哈密顿系统的形式,然后在时空方向均用辛 Runge-Kutta 方法离散,构造了方程的多辛 Preissman 格式,最后用数值实验验证了该格式具有长时间的数值稳定性.

关 键 词:非线性 Schrödinger 方程;多辛 Preissman 格式;多辛守恒律;局部能量守恒律;局部动量守恒律
中图分类号:0241.82 **文献标识码:**A **文章编号:**1673-1670(2022)02-0001-04

0 引言

非线性 Schrödinger 方程在量子力学等领域有重要应用,近几十年来,科研工作者对此类方程在数值求解方面做了许多研究^[1-7]. 笔者将讨论一类更广泛的含五次非线性项的 Schrödinger 方程(简称 QNLS 方程)

$$iu_t + u_{xx} - (|u|^2 + |u|^4)u = f(x, t)u$$

的初值问题的多辛算法. 为此,先通过引入正则变量把此方程转化成多辛形式的方程组,再把得到的多辛方程组分别在时间方向和空间方向用二阶 Runge-Kutta 方法离散,可以得到其多辛 Preissman 格式,最后用数值实验验证了此格式具有较好的精度,且能保持长时间的稳定性.

1 NLS 方程的多辛方程组及其守恒律

考虑如下含五次非线性项的 Schrödinger 方程的初边值问题:

$$iu_t + u_{xx} - (|u|^2 + |u|^4)u = f(x, t)u, \quad (-L \leq x \leq L, t > 0), \quad (1)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), u(-L, t) = u(L, t) = 0. \quad (2)$$

其中, $u(x, t)$ 是复函数, $f(x, t)$ 是实函数, $i^2 = -1$.

为构造(1)的多辛方程组,令 $u(x, t) = a(x, t) + ib(x, t)$, 其中 $a(x, t)$ 、 $b(x, t)$ 均为实函数,代入式(1),并将虚部和实部分开,可得如下方程组:

$$\left. \begin{aligned} a_t + b_{xx} &= (a^2 + b^2)(1 + a^2 + b^2)b + bf, \\ -b_t + a_{xx} &= (a^2 + b^2)(1 + a^2 + b^2)a + af. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

引入正则变量 $a_x = p, b_x = -q$,代入式(3)可得多辛方程组:

$$\left. \begin{aligned} a_t - q_x &= (a^2 + b^2)(1 + a^2 + b^2)b + bf, \\ -b_t + p_x &= (a^2 + b^2)(1 + a^2 + b^2)a + af, \\ -a_x &= -p, \\ b_x &= -q. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$



令 $z = (a, b, p, q)^T$,

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, K = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

则式(4)为

$$Mz_t + Kz_x = \nabla_z S(z). \tag{5}$$

其中, Hamilton 函数为

$$S(z) = \frac{1}{4}(a^2 + b^2)^2 + \frac{1}{6}(a^2 + b^2)^3 + (a + b)f - \frac{1}{2}(p^2 + q^2). \tag{6}$$

多辛方程组(5)相应的多辛守恒律为

$$\frac{\partial}{\partial t}(-da \wedge db) + \frac{\partial}{\partial x}(da \wedge dp - db \wedge dq) = 0. \tag{7}$$

局部能量守恒律为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{4}(a^2 + b^2)^2 + \frac{1}{6}(a^2 + b^2)^3 + (a + b)f - \frac{1}{2}ap_x + \frac{1}{2}bq_x \right] + \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2}(ap_t + qb_t - bq_t - pa_t) \right] = 0. \end{aligned} \tag{8}$$

局部动量守恒律为

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2}aq + \frac{1}{2}bp \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{4}(a^2 + b^2)^2 + \frac{1}{6}(a^2 + b^2)^3 + (a + b)f - \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \frac{1}{2}(ab_t - ba_t) \right] = 0. \tag{9}$$

定理 1 如果对方程(1)的多辛方程组(4)在时间和空间方向分别用 s 级和 r 级的 Runge-Kutta 方法离散,且这些格式的系数分别满足条件 $c_{nm}g_n + c_{mn}g_m - g_n g_m = 0$ 和 $\bar{c}_{ij}\bar{g}_j + \bar{c}_{ji}\bar{g}_i - \bar{g}_i\bar{g}_j = 0$,则得到的格式为多辛格式. 特别地,当 $r = s = 1$ 时,满足条件 $c_{nm}g_n + c_{mn}g_m - g_n g_m = 0$ 和 $\bar{c}_{ij}\bar{g}_j + \bar{c}_{ji}\bar{g}_i - \bar{g}_i\bar{g}_j = 0$ 的格式为 Euler 中点格式:

$$\frac{1}{\tau}M(z_{l+\frac{1}{2}}^{n+1} - z_{l+\frac{1}{2}}^n) + \frac{1}{h}K(z_{l+1}^{n+\frac{1}{2}} - z_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) = \nabla_z S(z_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}). \tag{10}$$

把此格式应用于 QNLS 方程的多辛方程组(4), 得到如下格式:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau}(a_{l+\frac{1}{2}}^{n+1} - a_{l+\frac{1}{2}}^n) - \frac{1}{h}(q_{l+1}^{n+\frac{1}{2}} - q_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) = \\ [(a_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})^2 + (b_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})^2]b_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + [(a_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})^2 + (b_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})^2]b_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + b_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}f_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \tag{11}$$

$$-\frac{1}{\tau}(b_{l+\frac{1}{2}}^{n+1} - b_{l+\frac{1}{2}}^n) - \frac{1}{h}(p_{l+1}^{n+\frac{1}{2}} - p_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) =$$

$$[(a_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})^2 + (b_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})^2]a_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + [(a_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})^2 + (b_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})^2]a_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + a_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}f_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \tag{12}$$

$$-\frac{1}{h}(a_{l+1}^{n+\frac{1}{2}} - a_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) = -p_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \quad \frac{1}{h}(b_{l+1}^{n+\frac{1}{2}} - b_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) = -q_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}. \tag{13}$$

在式(11) ~ (13)中消去中间变量 p, q , 得

$$\frac{i}{\tau}(u_{l+\frac{1}{2}}^{n+1} - u_{l+\frac{1}{2}}^n + u_{l-\frac{1}{2}}^{n+1} - u_{l-\frac{1}{2}}^n) + \frac{2}{h^2}(u_{l+1}^{n+\frac{1}{2}} - 2u_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + u_{l-1}^{n+\frac{1}{2}}) =$$

$$(|u_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}|^2 + |u_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}|^4)u_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + (|u_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}|^2 + |u_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}|^4)u_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + f_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}u_{l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + f_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}u_{l-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}. \tag{14}$$

式(14)为本文的多辛 Preissman 格式.



2 数值实验

本节用一个具体算例来考查多辛 Preissman 格式的数值模拟能力. 为此,在 QNLS 方程(1)~(2)中取

$$f(x,t) = 4(x-2t)^2 - \exp[-2(x-2t)^2] - \exp[-4(x-2t)^2], u_0(x) = \exp(-x^2 + ix),$$

此时 QNLS 方程(1)~(2)有解析解: $u(x,t) = \exp[(x+2t)^2 + i(x-3t)]$.

取空间方向的计算区间为 $[-15, 15]$, 固定空间步长 $h=0.1$, 分析不同时间步长 $\tau=0.01$ 和 $\tau=0.001$ 两种情况. 用多辛 Preissman 格式(14)模拟到 $t_n=1.0$. 表1列出了 τ 在上述两种取法下的数值解和真解在几个时刻的最大误差和平方模误差的比较.

表1 数值解在不同时间步长下模拟得到的误差

t_n	$\tau=0.01$		$\tau=0.001$	
	$\ e^n\ ^2$	$\ e^n\ _\infty$	$\ e^n\ ^2$	$\ e^n\ _\infty$
0.1	0.013 9	0.028 5	7.837 2 E-5	0.002 1
0.2	0.012 6	0.029 9	1.892 0 E-4	0.003 1
0.3	0.012 7	0.031 8	3.615 1 E-4	0.004 6
0.4	0.013 6	0.033 0	5.611 0 E-4	0.006 1
0.5	0.014 8	0.033 5	8.548 4 E-4	0.008 4
0.6	0.015 8	0.033 7	1.285 7 E-3	0.011 5
0.7	0.016 3	0.033 8	1.805 2 E-3	0.014 5
0.8	0.016 0	0.033 6	2.275 8 E-3	0.016 1
0.9	0.015 1	0.033 7	2.596 6 E-3	0.016 2
1.0	0.013 6	0.031 7	2.855 5 E-3	0.015 8

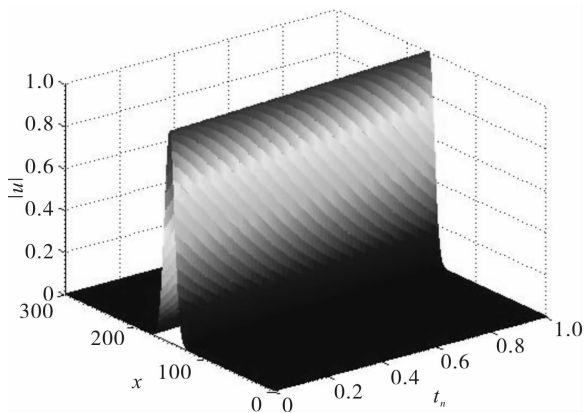


图1 $\tau=0.001, h=0.1$ 时 $|u|$ 的模拟图

从表1可以看出,当时间步长 τ 取 0.01 时,误差精度保持在 10^{-2} 左右. 如果把时间步长取得更小一些,当取 $\tau=0.001$ 时,数值解可以更好地逼近真解值.

下面给出格式(14)在初始条件 $f(x,t)=0$ 时的模拟图.

从图1可以看出,当 x 从坐标 150 向两边延伸时, $|u| \rightarrow 0$, 且在 100~200 之间出现了孤立波峰,波峰值控制在 0~1, 此模拟图基本上接近 $|u|$ 的真解图.

图2、3也能更好地模拟出 u 的实部、 u 的虚部、 u 在 $t=0, 0.5, 1$ 时刻的图形,并且模拟图在计算1 000 步后仍能保持原孤立波的波形不变. 这表明笔者所构造的多辛 Preissman 格式是有效的,适用于长时间的数值行为.

3 结论

从数值实验可以看出,笔者构造的多辛 Preissman 格式能够保持长时间的稳定性,即在计算了很多步后仍能保持误差基本不变. 另外,由于讨论的方程含有变系数项 $f(x,t)u$, 故在每一层迭代的时候都需要求解一个变系数的矩阵, 这样会耗用较多的计算时间. 但笔者构造的格式是两层隐格式, 与三层隐格式相比, 降低了迭代的难度, 从而也大大节省了计算机的运行时间.

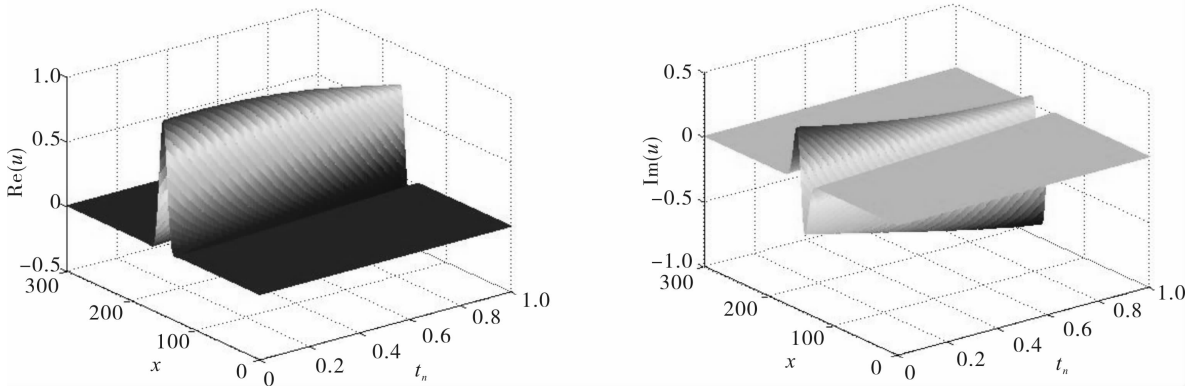


图2 u 的实部和虚部随时间演化的图形

参考文献:

[1] 张鲁明, 常谦顺. 非线性 Schrödinger 方程的一个新的守恒差分格式[J]. 高校应用数学学报 A 辑(中文版), 2000(1):72-78.

[2] 符芳芳, 孔令华, 王兰, 等. 一维 Gross-Pitaevskii 方程的高阶紧致分裂步多辛格式[J]. 计算物理, 2018(6):657-667.

[3] 王俊杰, 李胜平. 一类高阶 KdV 类型水波方程的多辛 Euler-box 格式[J]. 工程数学学报, 2018(1):55-68.

[4] 鲁百年. 一类非自共轭非线性 Schrödinger 方程的显式差分格式[J]. 计算数学, 1989(2):118-127.

[5] 曾文平. 高阶 Schrödinger 方程的哈密顿型蛙跳格式[J]. 高等学校计算数学学报, 1995(4):305-317.

[6] PERANICH L S. A finite difference scheme for solving a non-linear Schrödinger equation with a linear damping term[J]. J Comput Phys, 1987, 68:501-505.

[7] 徐金平, 单双荣. 带五次项的非线性 Schrödinger 方程的多辛 Fourier 拟谱算法[J]. 数值计算与计算机应用, 2010(1):55-63.

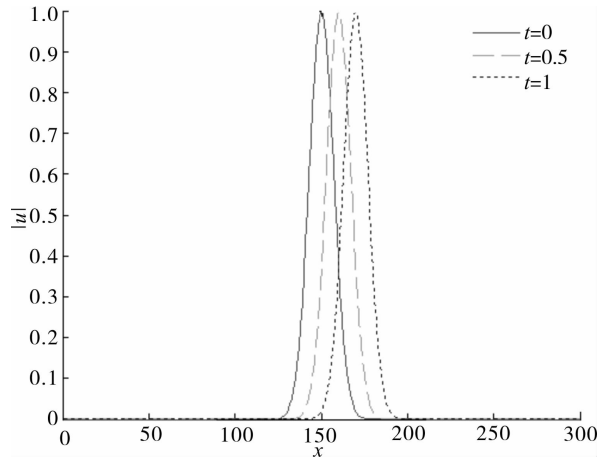


图3 $\tau = 0.001, h = 0.1$ 时, $|u|$ 在不同时刻的模拟图

(责任编辑:王彦江)

Multi-symplectic Algorithm for Schrödinger Equation with Quintic Nonlinear Term

XU Jinping¹, CHEN Teqing²

(1. School of Information Management, Minnan University of Science and Technology, Shishi, Fujian 362700, China; 2. School of Education, Minnan University of Science and Technology, Shishi, Fujian 362700, China)

Abstract: This study obtains the form of multi-symplectic Hamiltonian system of the equation by introducing regular variables, then discretizes the spatial and temporal directions with symplectic Runge-Kutta method, and constructs the multi-symplectic Preissman scheme. Finally, numerical experiments show that the scheme has long-term numerical stability.

Key words: nonlinear Schrödinger equation; multi-symplectic Preissman scheme; multi-symplectic conservation law; energy conservation law; momentum conservation law

