

非线性四阶 Schrödinger 方程的 半显式多辛拟谱格式

黄浪扬

(华侨大学 数学科学学院, 福建 泉州 362021)

摘要: 将空间方向的 Fourier 拟谱方法与时间方向的辛欧拉方法结合在一起, 构造出了非线性四阶 Schrödinger 方程的一个半显式多辛拟谱格式. 数值结果表明: 所构造的格式在长时间计算后, 能很好地保持原方程的电荷守恒性质, 是有效可行的数值方法.

关键词: 四阶 Schrödinger 方程; 半显式; 辛欧拉方法; 多辛拟谱格式; 守恒律; 数值实验

中图分类号: O 241.82

文献标志码: A

自提出 Hamilton 系统的辛几何算法^[1]及多辛几何算法^[2-3]后, 人们对 Hamilton 系统, 特别是具广泛应用的非线性 Schrödinger 方程的保辛算法做了很多的研究工作^[4-9], 但对于显式及半显式的保辛算法还很少^[9-11], 因此对非线性四阶 Schrödinger 方程半显式多辛算法的研究具有重要的意义. 本文构造出了非线性四阶 Schrödinger 方程的一个多辛方程组, 再通过数值离散, 提出了一个半显式的多辛拟谱格式, 此格式具有全离散的多辛守恒律.

1 多辛方程组

由 Bridges 和 Reich 引入的多辛方程组的形式为

$$\mathbf{M}z_t + \mathbf{K}z_x = \nabla_z S(z), \quad z \in \mathbf{R}^n, \quad (x, t) \in \mathbf{R}^2. \quad (1)$$

式(1)中: \mathbf{M}, \mathbf{K} 是 \mathbf{R}^n ($n \geq 3$) 上的反对称矩阵; ∇_z 表示光滑函数 $S: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ 的梯度算子.

方程组(1)具有重要的多辛守恒律, 即

$$\partial_t \omega + \partial_x \kappa = 0. \quad (2)$$

式(2)中: ω 和 κ 是预辛形式, $\omega = \frac{1}{2} dz \Lambda \mathbf{M} dz$, $\kappa = \frac{1}{2} dz \Lambda \mathbf{K} dz$.

Bridges 和 Reich 称能保持多辛守恒律(2)离散形式的格式为多辛格式^[2]. 考虑如下非线性四阶 Schrödinger 方程的初边值问题

$$iu_t + \alpha u_{xx} - \beta |u| u_{xxx} + \gamma |u|^2 u = 0, \quad (x, t) \in [x_L, x_R] \times [0, T], \quad (3)$$

$$u|_{t=0} = u_0(x), \quad x \in [x_L, x_R], \quad (4)$$

$$\lim_{x_L \rightarrow -\infty} u(x_L, t) = \lim_{x_R \rightarrow +\infty} u(x_R, t) = 0, \quad t \in [0, T]. \quad (5)$$

问题(3)~(5)中: $i = \sqrt{-1}$; $u = u(x, t)$ 为一光滑的复值函数; α, β 及 γ 为实数.

若 $\beta = 0$, 式(3)即为标准的二阶 Schrödinger 方程. 问题(3)~(5)具有以下电荷守恒性质, 即

$$E(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} |u(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |u_0(x)|^2 dx = E(0) (\text{常数}). \quad (6)$$

收稿日期: 2012-09-01

通信作者: 黄浪扬 (1974-), 男, 副教授, 主要从事偏微分方程数值解法的研究. E-mail: hly6@163.com.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11271171, 11126330); 福建省自然科学基金资助项目(2011J01010); 中央高校基本科研业务费专项资金资助, 华侨大学侨办科研基金资助项目(10QZR21)

令 $u = a + ib$, a 和 b 都是实函数, 则式(3)可改写为

$$\left. \begin{aligned} -b_t + \alpha a_{xx} - \beta a_{xxxx} + \gamma(a^2 + b^2)a &= 0, \\ a_t + \alpha b_{xx} - \beta b_{xxxx} + \gamma(a^2 + b^2)b &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

引入正则变量 $a_x = p, b_x = q$, 则式(7)可进一步写成

$$\left. \begin{aligned} -b_t + \alpha p_x &= \beta a_{xxxx} - \gamma(a^2 + b^2)a, \\ a_t + \alpha q_x &= \beta b_{xxxx} - \gamma(a^2 + b^2)b, \\ -\alpha a_x &= -\alpha p, \\ -\alpha b_x &= -\alpha q. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

将式(8)改写成式(1)的形式, 则

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha \\ -\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{bmatrix} a \\ b \\ p \\ q \end{bmatrix}.$$

其 Hamilton 函数 $S(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}[\beta(a_{xx}^2 + b_{xx}^2) - \alpha(p^2 + q^2) - \frac{1}{2}\gamma(a^2 + b^2)^2]$, 相应的多辛守恒律为

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

2 半显式多辛拟谱格式

将 Fourier 拟谱方法用于多辛系统^[4,12]. 假设 $\mathbf{z}(x, t)$ 是以 L 为周期的光滑函数组, $\mathbf{z}(x, t)$ 在配置点 $(x_j = L/Nj, j = 0, 1, \dots, N-1, \text{其中 } N \text{ 为偶数})$ 处的插值近似用 $I_N \mathbf{z}(x, t)$ 表示, 且其形式为

$$I_N \mathbf{z}(x, t) = \sum_{j=0}^{N-1} \mathbf{z}_j \left(\frac{1}{N} \sum_{l=-N/2}^{N/2} \frac{1}{c_l} \exp(il\mu(x - x_j)) \right) = \sum_{l=-N/2}^{N/2} \left(\frac{1}{Nc_l} \sum_{j=0}^{N-1} \mathbf{z}_j \exp(-il\mu x_j) \exp(il\mu x) \right). \quad (9)$$

式(9)中: $\mathbf{z}_j = \mathbf{z}(x_j, t); c_l = 1(|l| \neq N/2); c_{-N/2} = c_{N/2} = 2; \mu = 2\pi/L$.

若记 $g_j(x) = \frac{1}{N} \sum_{l=-N/2}^{N/2} \frac{1}{c_l} \exp(il\mu(x - x_j))$, 则 $g_j(x_k) = \delta_j^k$, 有 $I_N \mathbf{z}(x_j, t) = \mathbf{z}_j (j = 0, 1, \dots, N-1)$.

为了得到关于 \mathbf{z}_j 的方程, 将式(9)代入式(1), 并要求式(1)在配置点精确成立, 即有

$$[\mathbf{M}(I_N \mathbf{z}(x, t))_t + \mathbf{K}(I_N \mathbf{z}(x, t))_x] |_{x=x_j} = \nabla \mathbf{z} \mathbf{S}(\mathbf{z}_j), \quad j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (10)$$

这里关键是用 \mathbf{z}_j 来表示偏导数 $\partial^k I_N \mathbf{z}(x, t) / \partial x^k$ 在配置点 x_j 处的值. 对式(9)求微分, 并计算它在点 x_j 处的值, 可得

$$\frac{\partial^k I_N \mathbf{z}(x, t)}{\partial x^k} = \sum_{n=0}^{N-1} \mathbf{z}_n \frac{d^k g_n(x_j)}{dx^k} = (\mathbf{D}_k \mathbf{z})_j. \quad (11)$$

式(11)中: $\mathbf{z} = (\mathbf{z}_0; \mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{N-1})^T, \mathbf{D}_k$ 为 $N \times N$ 矩阵, 称之为 k 阶谱微分矩阵, 即

$$(\mathbf{D}_k)_{j,n} = \frac{d^k g_n(x_j)}{dx^k}. \quad (12)$$

通过计算可得

$$(\mathbf{D}_1)_{j,n} = \begin{cases} \frac{1}{2} \mu (-1)^{j+n} \cot(\mu \frac{x_j - x_n}{2}), & j \neq n, \\ 0, & j = n. \end{cases} \quad (13)$$

且谱微分矩阵 \mathbf{D}_k 与 \mathbf{D}_1^k 有如下关系, 即

$$(\mathbf{D}_k)_{j,n} = (\mathbf{D}_1^k)_{j,n} + (-1)^{j+n} \frac{\mu^k}{2N} \left[(i \frac{N}{2})^k + (-i \frac{N}{2})^k \right]. \quad (14)$$

对式(10)在时间方向不离散, 在空间方向用 Fourier 拟谱方法进行离散, 利用谱微分矩阵, 可得式(3)的多辛拟谱半离散格式

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{z}_j}{dt} + \mathbf{K} \sum_{k=0}^{N-1} (\mathbf{D}_1)_{j,k} \mathbf{z}_k = \nabla \mathbf{z} \mathbf{S}(\mathbf{z}_j), \quad j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (15)$$

再对式(15)在时间方向应用辛欧拉方法进行离散,得到非线性四阶 Schrödinger 方程的一个半显式多辛拟谱格式

$$\mathbf{M}_+ D_t^- \mathbf{z}_j^n + \mathbf{M}_- D_t^+ \mathbf{z}_j^n + \mathbf{K} \sum_{k=0}^{N-1} (\mathbf{D}_1)_{j,k} \mathbf{z}_k^n = \nabla \mathbf{z} S(\mathbf{z}_j^n), \quad j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (16)$$

式(16)中: D_t^+ 和 D_t^- 分别是向前和向后差分算子, $D_t^+ \mathbf{z}_j^n = \frac{\mathbf{z}_j^{n+1} - \mathbf{z}_j^n}{\tau}$, $D_t^- \mathbf{z}_j^n = \frac{\mathbf{z}_j^n - \mathbf{z}_j^{n-1}}{\tau}$; τ 为时间步长; \mathbf{M}_+ 和 \mathbf{M}_- 分别是辛矩阵 \mathbf{M} 的分裂矩阵, $\mathbf{M} = \mathbf{M}_+ + \mathbf{M}_-$, $\mathbf{M}_+^T = -\mathbf{M}_-$, 矩阵 \mathbf{M} 的分裂方法并不唯一, \mathbf{M}_+ 为上三角矩阵.

$d\mathbf{z}_j^n$ 与式(16)的变分方程作外积,可得定理 1.

定理 1 半显式多辛拟谱格式(16)具有 N 个全离散的多辛守恒律,即

$$\frac{\omega_j^{n+1} - \omega_j^n}{\tau} + \sum_{k=0}^{N-1} (\mathbf{D}_1)_{j,k} \kappa_{j,k}^n = 0, \quad j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (17)$$

式(17)中: $\omega_j^n = d\mathbf{z}_j^{n-1} \wedge \mathbf{M}_- d\mathbf{z}_j^n$, $\kappa_{j,k}^n = d\mathbf{z}_j^n \wedge \mathbf{K} d\mathbf{z}_k^n$.

对式(16)消去变量 p 和 q ,可得

$$\left. \begin{aligned} b_j^n &= b_j^{n-1} + \tau [\alpha (\mathbf{D}_1^2 \mathbf{a}^n)_j - \beta (\mathbf{D}_1 \mathbf{a}^n)_j + \gamma ((a_j^n)^2 + (b_j^n)^2) \cdot a_j^n], \\ a_j^{n+1} &= a_j^n - \tau [\alpha (\mathbf{D}_1^2 \mathbf{b}^n)_j - \beta (\mathbf{D}_1 \mathbf{b}^n)_j + \gamma ((a_j^n)^2 + (b_j^n)^2) \cdot b_j^n]. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

式(18)中: $\mathbf{a} = (a_0, \dots, a_{N-1})^T$, $\mathbf{b} = (b_0, \dots, b_{N-1})^T$. 将式(18)第一行中的时间指标 n 用 $n+1$ 代入,可得与式(16)等价的一个多辛拟谱格式

$$\left. \begin{aligned} b_j^{n+1} &= b_j^n + \tau [\alpha (\mathbf{D}_1^2 \mathbf{a}^{n+1})_j - \beta (\mathbf{D}_1 \mathbf{a}^{n+1})_j + \gamma ((a_j^{n+1})^2 + (b_j^{n+1})^2) \cdot a_j^{n+1}], \\ a_j^{n+1} &= a_j^n - \tau [\alpha (\mathbf{D}_1^2 \mathbf{b}^n)_j - \beta (\mathbf{D}_1 \mathbf{b}^n)_j + \gamma ((a_j^n)^2 + (b_j^n)^2) \cdot b_j^n]. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

显然,式(19)不需要在每一时间步都解一个非线性代数方程组,可先计算完全显式的第二行得到 a_j^{n+1} ,再计算第一行得到 b_j^{n+1} ,它只需求解一个非线性方程,因此是一个半显式的多辛拟谱格式.

3 数值例子

采用半显式多辛拟谱格式(19)对非线性四阶 Schrödinger 方程的初边值问题

$$\left. \begin{aligned} iu_t + \frac{1}{4}u_{xx} - u_{xxxx} + 30|u|^2u &= 0, \\ u_0(x) &= \frac{1}{40} \operatorname{sech}^2\left(\frac{1}{4\sqrt{5}}x\right), \\ u(x_L, t) &= u(x_R, t) \end{aligned} \right\}$$

进行数值模拟.取周期边界条件为 $x_L = -40, x_R = 40$,时间步长 $\tau = 0.001$,空间步长 $h = 1$.

图 1 给出了用半显式多辛拟谱格式(19)计算 20 000 步后数值解与精确解的比较图.图 2 给出了在不同时刻的离散电荷误差情况.在网格点 (x_j, t_n) 处,记 u_j^n 为精确解 $u(x_j, t_n) = u(jh, n\tau)$ 的近似值,定义离散电荷误差为

$$Er^n = |E^n - E^0|. \quad (20)$$

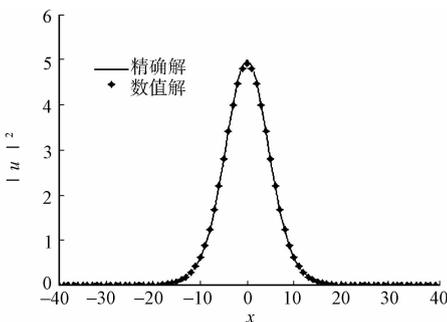


图 1 数值解与精确解的比较图

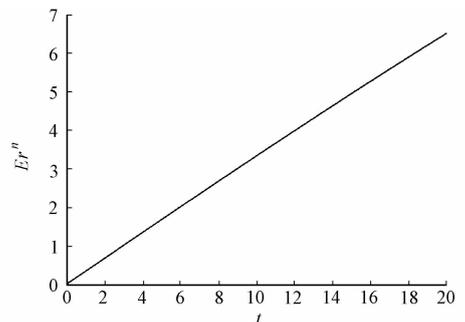


图 2 离散电荷误差

式(20)中: $E^n = h \sum_{j=0}^{N-1} |u_j^n|^2$.

从图 1,2 可以看出:所构造的半显式多辛拟谱格式进行长时间的数值模拟后,不出现振荡现象,且离散电荷误差很小,说明该格式能很好地保持原方程的电荷守恒性质,因此,该数值离散方法是有效可行的.

参考文献:

- [1] 冯康,秦孟兆. 哈密尔顿系统的辛几何算法[M]. 杭州:浙江科学技术出版社,2002:1-501.
- [2] BRIDGES T J, REICH S. Multi-symplectic integrators: Numerical schemes for Hamiltonian PDEs that conserve symplecticity[J]. Physics Letter A, 2001, 284(4/5):184-193.
- [3] REICH S. Multi-symplectic Runge-kutta methods for Hamiltonian wave equations[J]. J Comput Phys, 2000, 157(5):473-499.
- [4] CHEN Jing-bo, QIN Meng-zhao. Multi-symplectic Fourier pseudospectral method for the nonlinear Schrödinger equation[J]. Electron Trans Numer Anal, 2001, 12:193-204.
- [5] ZENG Wen-ping. Constructing symplectic schemes for Schrödinger equation by using hyperbolic function[J]. Acta Mathematica Applicatae Sinica, 1996, 19(3):424-430.
- [6] 黄浪扬. 广义非线性 Schrödinger 方程的多辛算法与模方守恒律[J]. 计算物理, 2009, 26(5):693-698.
- [7] HONG Jia-lin, KONG Ling-hua. Novel multisymplectic integrators for nonlinear fourth-order Schrödinger equation with trapped term[J]. Commun Comput Phys, 2010, 7(3):613-630.
- [8] KONG Ling-hua, CAO Ying, WANG Lan, et al. Split-step multisymplectic integrator for fourth-order Schrödinger equation with cubic nonlinear term[J]. Chinese J Comput Phys, 2011, 28(5):730-736.
- [9] WANG Yu-shun, LI Qing-hong, SONG Yong-zhong. Two new simple multi-symplectic schemes for the nonlinear Schrödinger equation[J]. Chin Phys Lett, 2008, 25(5):1538-1540.
- [10] CAI Jia-xiang, MIAO Jun. New explicit multisymplectic scheme for the complex modified Korteweg-de Vries equation[J]. Chin Phys Lett, 2012, 29(3):030201.
- [11] QIAN Xu, SONG Song-he, GAO Er, et al. Explicit multi-symplectic method for the Zakharov-Kuznetsov equation [J]. Chin Phys B, 2012, 21(7):070206.
- [12] 王志焕, 黄浪扬. 组合 KdV-mKdV 方程的多辛 Fourier 拟谱格式[J]. 华侨大学学报:自然科学版, 2011, 32(4):471-474.

Semi-Explicit Multi-Symplectic Pseudo-Spectral Scheme for the Nonlinear Four-Order Schrödinger Equation

HUANG Lang-yang

(School of Mathematical Sciences, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China)

Abstract: Combining the Fourier pseudo-spectral method in spatial direction with symplectic Euler method in time direction together, we construct a semi-explicit multi-symplectic pseudo-spectral scheme for the nonlinear four-order Schrödinger equation. Numerical results show that the scheme constructed in this paper can well preserve the charge conservation nature of the original equation after a long time computation and it is an effective and practicable numerical method.

Keywords: four-order Schrödinger equation; semi-explicit; symplectic Euler method; multi-symplectic pseudo-spectral scheme; conservation law; numerical experiments

(责任编辑: 陈志贤 英文审校: 黄心中)