

文章编号:1000-5862(2013)05-0462-04

Dirac 方程分裂步多辛格式

王 兰¹ 符芳芳² 童 慧¹

(1. 江西师范大学数学与信息科学学院 江西 南昌 330022;

2. 南昌工学院基础部 江西 南昌 330108)

摘要:把非线性的 Dirac 方程分裂成线性和非线性 2 个子问题,这 2 个子问题具有辛或者多辛结构,可以用辛格式对它们进行离散计算,得到的格式具有整体辛性.此格式较传统的多辛格式具有效率高、计算快等优点.

关键词:Dirac 方程;分裂步方法;多辛格式;计算效率

中图分类号: O 241.8

文献标志码: A

0 引言

Dirac 方程是量子物理和相对论物理中重要的数学模型,考虑它的初边值问题^[1]:

$$\begin{cases} u_t + v_x + iu + i(|v|^2 - |u|^2)u = 0, & x \in \mathbf{R}, t > 0, \\ v_t + u_x - iv + i(|u|^2 - |v|^2)v = 0, & x \in \mathbf{R}, t > 0, \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x), \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x, t) = \lim_{|x| \rightarrow \infty} v(x, t) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $i = \sqrt{-1}$. 易知 Dirac 方程的初边值问题(1)满足粒子出现的概率守恒,即

$$\begin{aligned} P(t) &= \int_{\mathbf{R}} (|u(x, t)|^2 + |v(x, t)|^2) dx = \\ &= \int_{\mathbf{R}} (|u_0(x)|^2 + |v_0(x)|^2) dx = P(0). \end{aligned} \quad (2)$$

(2) 式是量子物理中的重要守恒律,数值方法对此守恒律的保持具有重要的意义和作用.对这一问题的数值方法研究是近年来的热点问题^[2-5].

辛和多辛算法是近 20 年来计算数学领域发展的一类重要算法.与传统算法相比,它具有保持系统几何结构特征的优点,同时具有长时间稳定的数值模拟能力.然而,由于算法的辛或者多辛条件,这类算法基本上是完全隐式的,对于非线性问题需要求解非线性的代数方程组^[6],从而计算效率通常不

高.为对多辛算法进行改进同时扩大它的应用范围,文献[7]发展了 1 种分裂步的多辛算法,它既有多辛算法的特点,又有计算效率高的优势^[8-10].

多辛哈密顿系统的一般形式是

$$Mz_t + Kz_x = \nabla_z S(z), \quad (3)$$

其中 $z \in \mathbf{R}^m$, $M, K \in \mathbf{R}^{m \times m}$ 是反对称矩阵, $S(z)$ 是光滑实函数,也称作哈密顿能量泛函.它满足多辛守恒律

$$\omega_t + \kappa_x = 0, \quad (4)$$

其中微分 2-形式 $\omega = dz \wedge Mdz$, $\kappa = dz \wedge Kdz$.称多辛哈密顿系统(3)的保持多辛守恒律(4)的相应离散形式的数值方法为多辛格式.构造多辛格式的主要方法有 Runge-Kutta 方法,及其与其它空间离散方法的组合方法,如谱方法、有限元方法.然而,通过这种方法构造出来的多辛格式往往是完全隐式的^[11],需要求解非线性的代数方程组,从而大大增加了计算的复杂度.为克服此弊端,引进分裂步的思想,把多辛哈密顿系统(3)分裂成若干个子哈密顿系统,然后对这些子系统构造辛或者多辛格式,最后把它们组合起来.

1 Dirac 方程的多辛结构及其分裂子系统

为得到 Dirac 方程(1)的多辛结构,令 $u = p +$

收稿日期:2013-06-25

基金项目:国家自然科学基金(11211171,11301234),江西省自然科学基金(20114BAB201011)和江西省教育厅基金(GJJ12174)资助项目.

作者简介:王 兰(1979-),女,安徽池州人,讲师,主要从事微分方程数值解法的研究.

$iq \cdot p = f + ig \cdot z = (p \ q \ f \ g)^T$ 则可以得到 Dirac 方程(1)的多辛方程组:

$$\begin{cases} -q_t - g_x = p + (f^2 + g^2 - p^2 - q^2)p, \\ p_t + f_x = q + (f^2 + g^2 - p^2 - q^2)q, \\ -g_t - q_x = -f - (f^2 + g^2 - p^2 - q^2)f, \\ f_t + p_x = -g - (f^2 + g^2 - p^2 - q^2)g, \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{从而得辛结构矩阵 } M = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} K =$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{哈密顿函数为 } S(z) = \left[1 + \right.$$

$(p^2 + q^2 - f^2 - g^2)/2 \left. \right] (p^2 + q^2 - f^2 - g^2)/2$ 其多辛守恒律为

$$\frac{\partial}{\partial t} (dq \wedge dp + dg \wedge df) + \frac{\partial}{\partial x} (dg \wedge dp + dq \wedge df) = 0.$$

由 $S(z)$ 的表达式可知, 这是一个不可分的哈密顿系统, 只能构造完全隐式的多辛格式. 基于此, 把(5)式分裂成多辛线性子系统:

$$\begin{cases} u_t + v_x = 0, \\ v_t + u_x = 0, \end{cases} \quad (6)$$

与非线性辛子系统:

$$\begin{cases} u_t = -i[1 + (|v|^2 - |u|^2)]u, \\ v_t = i[1 - (|u|^2 - |v|^2)]v. \end{cases} \quad (7)$$

多辛线性子系统(6)具有与原系统(5)一样的多辛结构, 非线性子系统(7)的辛结构为

$$\frac{d}{dt} (dq \wedge dp + dg \wedge df) = 0, \forall x, t.$$

非线性子系统具有点点的概率守恒, 即 $\forall x, t$,

$$\begin{cases} P_u(t) = |u(x, t)|^2 = \\ p(x, t)^2 + q(x, t)^2 = P_u(0), \\ P_v(t) = |v(x, t)|^2 = \\ f(x, t)^2 + g(x, t)^2 = P_v(0). \end{cases} \quad (8)$$

这一点点守恒律将使得非线性子问题可以精确求解. 用分离变量法计算可得其精确解为

$$\begin{cases} u(x, t) = e^{-i[1 + (|v(x, \rho)|^2 - |u(x, \rho)|^2)]t} u(x, \rho), \\ v(x, t) = e^{i[1 - (|u(x, \rho)|^2 - |v(x, \rho)|^2)]t} v(x, \rho). \end{cases}$$

由此精确解的表达式可知, 它保持了点点守恒律(8).

2 多辛格式及其分裂格式

下面对 Dirac 方程(1)构造多辛格式. 为此, 用2族平行线 $x_j = -L + jk, t_n = n\tau, j = 0, 1, \dots, J, n = 0, 1, \dots, N$ 对时空区域 $[-L, L] \times [0, T]$ 进行一致网格剖分, 其中 $k = 2L/J, \tau = T/N$ 分别为空间和时间步长. 对多辛哈密顿方程组(5)在时空方向都用中点格式也就是1级辛 Runge-Kutta 方法离散, 得

$$\begin{cases} -\delta_t q_{j+1/2}^{n+1/2} - \delta_x g_{j+1/2}^{n+1/2} = p_{j+1/2}^{n+1/2} + \left[(f_{j+1/2}^{n+1/2})^2 + \right. \\ \left. (g_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (p_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (q_{j+1/2}^{n+1/2})^2 \right] p_{j+1/2}^{n+1/2}, \\ \delta_t p_{j+1/2}^{n+1/2} + \delta_x f_{j+1/2}^{n+1/2} = q_{j+1/2}^{n+1/2} + \left[(f_{j+1/2}^{n+1/2})^2 + \right. \\ \left. (g_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (p_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (q_{j+1/2}^{n+1/2})^2 \right] q_{j+1/2}^{n+1/2}, \\ -\delta_t g_{j+1/2}^{n+1/2} - \delta_x q_{j+1/2}^{n+1/2} = -f_{j+1/2}^{n+1/2} - \left[(f_{j+1/2}^{n+1/2})^2 + \right. \\ \left. (g_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (p_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (q_{j+1/2}^{n+1/2})^2 \right] f_{j+1/2}^{n+1/2}, \\ \delta_t f_{j+1/2}^{n+1/2} + \delta_x p_{j+1/2}^{n+1/2} = -g_{j+1/2}^{n+1/2} - \left[(f_{j+1/2}^{n+1/2})^2 + \right. \\ \left. (g_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (p_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (q_{j+1/2}^{n+1/2})^2 \right] g_{j+1/2}^{n+1/2}, \end{cases}$$

其中 $\delta_t u_j^{n+1/2} = (u_j^{n+1} - u_j^n)/\tau, \delta_x u_{j+1/2}^n = (u_{j+1}^n - u_j^n)/k, \mu_{j+1/2}^{n+1/2} = (u_{j+1/2}^n + u_{j+1/2}^{n+1})/2 = (u_j^n + u_{j+1}^{n+1} + u_{j+1}^n + u_j^{n+1})/4$ 等. 此格式是多辛的.

在实际计算中, 为简化计算和减少内存开支, 采用如下便于计算的形式:

$$\begin{cases} \delta_t u_{j+1/2}^{n+1/2} + \delta_x v_{j+1/2}^{n+1/2} + i u_{j+1/2}^{n+1/2} + i (|v_{j+1/2}^{n+1/2}|^2 - \\ |u_{j+1/2}^{n+1/2}|^2) u_{j+1/2}^{n+1/2} = 0, \\ \delta_t v_{j+1/2}^{n+1/2} + \delta_x u_{j+1/2}^{n+1/2} - i v_{j+1/2}^{n+1/2} + i (|u_{j+1/2}^{n+1/2}|^2 - \\ |v_{j+1/2}^{n+1/2}|^2) v_{j+1/2}^{n+1/2} = 0, \end{cases} \quad (9)$$

有关格式的分析推导可以参见文献[4].

对多辛哈密顿线性子系统(6)利用中心 Box 格式离散得

$$\begin{cases} \delta_t u_{j+1/2}^{n+1/2} + \delta_x v_{j+1/2}^{n+1/2} = 0, \\ \delta_t v_{j+1/2}^{n+1/2} + \delta_x u_{j+1/2}^{n+1/2} = 0. \end{cases} \quad (10)$$

此格式也保持(6)的多辛几何结构. 它是多辛格式, 且能够保持概率守恒律(2)的离散形式, 即具有离散概率守恒律:

$$P^{n+1} = h \sum_{j=1}^{J-1} (|u_{j+1/2}^{n+1}|^2 + |v_{j+1/2}^{n+1}|^2) = P^n = \dots = P^0.$$

因此, 可以得到(1)式的具有多辛结构特征的数值格式如下.

(i) Lie-Trotter 分裂:

$$\begin{cases} u_j^* = e^{-i[1+(|v_j^n|^2-|u_j^n|^2)\tau]} u_j^n, & v_j^* = e^{i[1-(|u_j^n|^2-|v_j^n|^2)\tau]} v_j^n, \\ \frac{u_{j+1/2}^{n+1} - u_{j+1/2}^*}{\tau} + \frac{v_{j+1}^{n+1} - v_j^{n+1} + v_{j+1}^* - v_j^*}{2k} = 0, \\ \frac{v_{j+1/2}^{n+1} - v_{j+1/2}^*}{\tau} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1} + u_{j+1}^* - u_j^*}{2k} = 0. \end{cases} \quad (11)$$

(ii) Strang 分裂:

$$\begin{cases} u_j^* = e^{-i[1+(|v_j^n|^2-|u_j^n|^2)\tau/2]} u_j^n, \\ v_j^* = e^{i[1-(|u_j^n|^2-|v_j^n|^2)\tau/2]} v_j^n, \\ \frac{u_{j+1/2}^{**} - u_{j+1/2}^*}{\tau} + \frac{v_{j+1}^{**} - v_j^{**} + v_{j+1}^* - v_j^*}{2k} = 0, \\ \frac{v_{j+1/2}^{**} - v_{j+1/2}^*}{\tau} + \frac{u_{j+1}^{**} - u_j^{**} + u_{j+1}^* - u_j^*}{2k} = 0, \\ u_j^{n+1} = e^{-i[1+(|v_j^{**}|^2-|u_j^{**}|^2)\tau/2]} u_j^{**}, \\ v_j^{n+1} = e^{i[1-(|u_j^{**}|^2-|v_j^{**}|^2)\tau/2]} v_j^{**}. \end{cases} \quad (12)$$

分裂步多辛格式(11)与(12)分别具有1阶和2阶时间分裂精度,而多辛格式(10)在时空方向均具有2阶离散误差.因而,格式(11)的误差为 $O(\tau + k^2)$,格式(12)的误差为 $O(\tau^2 + k^2)$.

与相应的传统多辛格式(9)相比,格式(11)与(12)具有以下优点:格式(9)在每一个时间层需要求解1个非线性的代数方程组,而格式(11)和(12)只要求解1个线性的代数方程组,而非线性问题是精确求解,因而避免了做非线性迭代.从如下数值实验可以看到它们的计算时间比传统多辛格式(9)少.

3 数值实验

这里考察分裂步多辛格式(11)和(12)的数值效果.取适当的初始条件,使得初边值问题(1)有如下孤立波解:

$$\begin{cases} u(x, t) = \sqrt{2(1-\lambda^2)(1+\lambda)} \cdot \\ \frac{\cosh \sqrt{1-\lambda^2}x}{1+\lambda \cosh 2\sqrt{1-\lambda^2}x} e^{-i\lambda t}, \\ v(x, t) = \sqrt{2(1-\lambda^2)(1-\lambda)} \cdot \\ \frac{\sinh \sqrt{1-\lambda^2}x}{1+\lambda \cosh 2\sqrt{1-\lambda^2}x} e^{-i\lambda t}, \end{cases}$$

其中 $\lambda = 0.75$.取 $x \in [-60, 60]$,空间步长 $k = 0.12$,时间步长 $\tau = 0.1$,分别用格式(11)与(12)进行计算到时间 $t = 100$.把计算结果与文献[4]中的研究结果进行对比,分析计算效率.表1列出了数值解当 $t = 100$ 时最大模意义下的误差,而图1给出了数值解随时间的演化关系,图2给出了粒子出现的概率波动幅度随时间的发展关系.由图1,图2和表1可以看出,在多辛算法中引入分裂步方法思想后得到的分裂步多辛算法较传统多辛算法快得多,计算时间不到后者的1/7.而得到解的误差相当,而且本文新构造的格式也能够长时间内模拟原问题,粒子出现的概率波动非常稳定,虽然不守恒,但是误差一直很小.

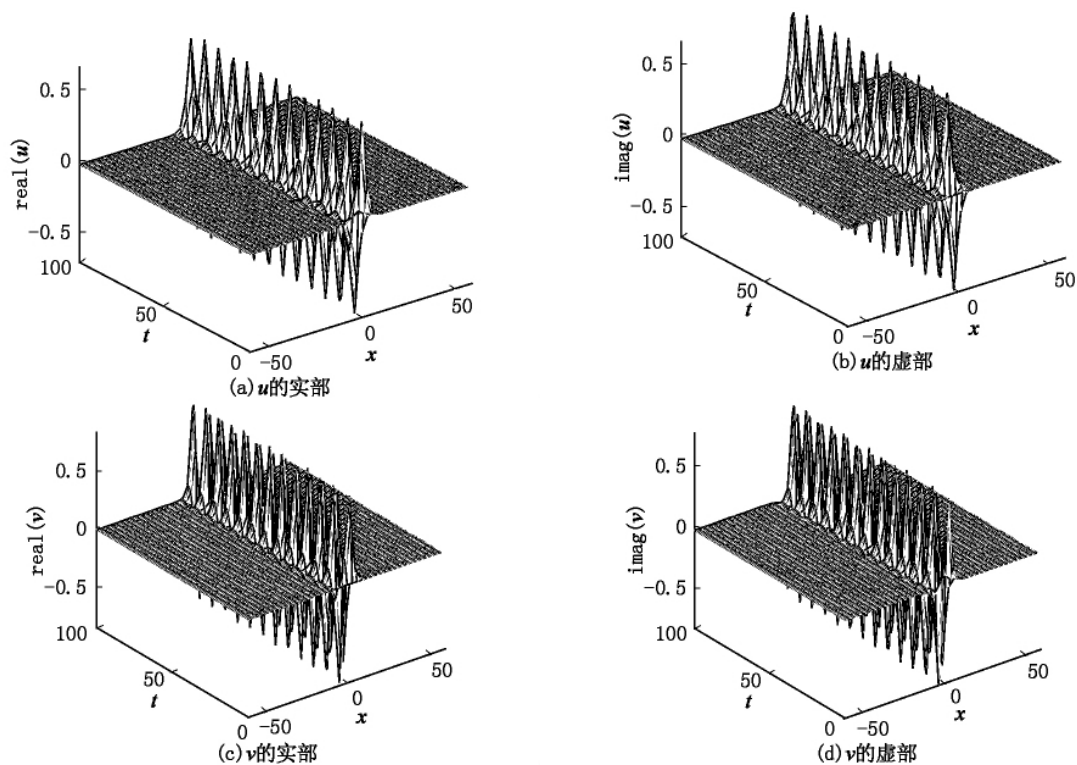


图1 数值解的实部与虚部随时间的演化关系

表 1 数值解当 $t = 100$ 时最大模意义下的误差

	u 的实部	u 的虚部	v 的实部	v 的虚部	计算时间
格式 (9)	$3.162\ 1e-3$	$9.334\ 2e-4$	$1.304\ 3e-4$	$3.748\ 2e-4$	105.80
格式 (11)	$3.484\ 2e-3$	$7.385\ 8e-3$	$6.543\ 0e-3$	$2.346\ 9e-3$	13.28
格式 (12)	$7.050\ 8e-4$	$2.424\ 8e-4$	$2.084\ 0e-4$	$3.039\ 4e-4$	14.26

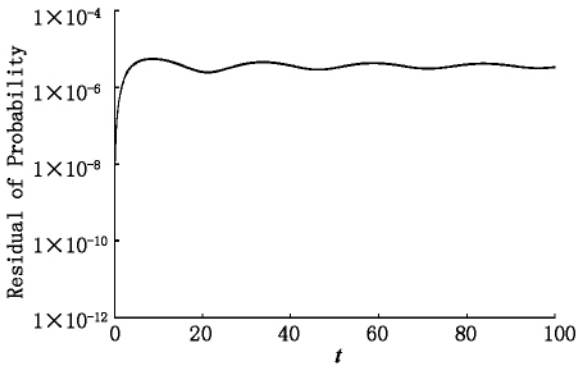


图 2 粒子出现的概率波动情况随时间的演化关系

4 参考文献

[1] Alvarez A ,Carreras B. Interaction dynamics for the solitary waves of a nonlinear Dirac model [J]. Phys Lett A ,1981 , 86(6/7) :327-332.

[2] Alvarez A. Linear Crank-Nicholson scheme for nonlinear Dirac equations [J]. J Comput Phys ,1992 ,99 (2) :348-350.

[3] Alvarez A ,Kuo Penyu ,Vazquez L. The numerical study of a nonlinear one-dimensional Dirac equation [J]. Appl Math Comput ,1983 ,13(1/2) :1-15.

[4] Hong Jialin ,Li Chun. Multi-symplectic Runge-Kutta methods for nonlinear Dirac equations [J]. J Comput Phys , 2006 211(2) :448-472.

[5] Wang Han ,Tang Huazhong. An efficient adaptive mesh redistribution method for a nonlinear Dirac equation [J]. J Comput Phys 2007 222 :176-193.

[6] Wang Yushun ,Hong Jialin. Multi-symplectic algorithms for Hamiltonian partial differential equations [J]. Commun Appl Math Comput 2013 27:163-230.

[7] Hong Jialin ,Kong Linghua. Novel multisymplectic integrators for nonlinear fourth-order Schrödinger equation with trapped term [J]. Commun Comput Phys ,2010 ,7 (3) : 613-630.

[8] Kong Linghua ,Cao Ying ,Wang Lan et al. Split-step multi-symplectic integrator for the fourth-order Schrödinger equation with cubic nonlinear term [J]. Chin J Comput Phys , 2011 28(5) :730-736.

[9] 王兰. 多辛 Preissman 格式及其应用 [J]. 江西师范大学学报:自然科学版 2009 33(1) :42-46.

[10] 黄红 ,王兰. 薛定谔方程的局部 1 维多辛格式 [J]. 江西师范大学学报:自然科学版 2011 35(5) :455-458.

[11] 郑斌. 2 + 1 维非线性 Schrödinger 方程的显式解 [J]. 重庆师范大学学报:自然科学版 2006 23(2) :23-25.

The Split-Step Multisymplectic Scheme for Dirac Equation

WANG Lan¹ ,FU Fang-fang² ,TONG Hui¹

(1. College of Mathematics and Informatics ,Jiangxi Normal University ,Nanchang Jiangxi 330022 ,China;
2. Basic Teaching Department ,Nanchang Institute of Science & Technology ,Nanchang Jiangxi 330108 ,China)

Abstract:One splits the Dirac equation into a linear subproblem and a nonlinear subproblem. The subproblems are equipped with symplectic or multisymplectic structures. Then they are approximated by symplectic integrators. As a whole ,the scheme is symplectic. It is superior to the traditional multisymplectic integrator in efficiency and computational cost.

Key words:Dirac equation ;split-step method ;symplectic scheme ;computational efficiency

(责任编辑:曾剑锋)