

文章编号: 1000-5862(2016)06-0599-04

2 维 Gross-Pitaevskii 方程的辛格式

符芳芳¹, 周媛兰²

(1. 南昌工学院, 江西 南昌 330108; 2. 江西师范大学数学与信息科学学院, 江西 南昌 330022)

摘要: 提出了 2 维 Gross-Pitaevskii 方程的辛格式, 该格式能够精确地保持电荷守恒和隐式能量守恒, 还分析了该格式的数值误差, 最后通过数值例子验证了理论结果.

关键词: 辛格式; Gross-Pitaevskii 方程; 守恒律

中图分类号: O 241.8 文献标志码: A DOI: 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2016.06.11

0 引言

众所周知, 当温度极低时, 在高能物理状态下, 同种物质原子的量子电子的电核凝聚可以用 Gross-Pitaevskii (GP) 方程来描述, 它是 1 类带有坍塌项的非线性薛定谔方程^[1-2]

$$\begin{aligned} i \partial \psi(X, t) / \partial t &= -\nabla^2 \psi / 2 + V_d(X) \psi + \\ \beta_d |\psi|^2 \psi, \quad \psi \in \mathbf{R}^d, \quad t \geq 0, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 β_d 为实数, V_d 为坍塌项.

近 20 年来这一物理模型引起了科研工作者的极大关注, 从理论和实际应用等方面对它进行了大量研究^[3-6]. 本文考虑 GP 方程的初边值问题

$$\psi(X, 0) = \psi^0(X), \quad X \in \mathbf{R}^d, \quad (2)$$

$$\lim_{|X| \rightarrow \infty} \psi(X, t) = 0, \quad (3)$$

初边值问题 (1) ~ (3) 满足电荷守恒律和能量守恒律:

$$Q(t) = \int_{\mathbf{R}^d} |\psi(X, t)|^2 dt = \int_{\mathbf{R}^d} |\psi(X, 0)|^2 dt = Q(0), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon(t) &= \int_{\mathbf{R}^d} [|\nabla \psi(X, t)|^2 / 2 + V_d(X) |\psi|^2 + \\ \beta_d |\psi|^4 / 2] dt &= \varepsilon(0). \end{aligned} \quad (5)$$

本文主要研究 2 维 GP 方程 (1) 的辛格式. 为此, 考虑下列周期初边值问题

$$\begin{cases} i \partial \psi(x, y, t) / \partial t = -(\psi_{xx} + \psi_{yy}) / 2 + V(x, y) \psi + \\ \beta |\psi|^2 \psi, \quad (x, y) \in [a, b] \times [c, d], \quad t \in [0, T], \\ \psi(x, y, 0) = \psi^0(x, y), \\ \psi(x + b - a, y, t) = \psi(x, y, t) = \psi(x, y + d - c, t), \end{cases} \quad (6)$$

令 $\psi = p + iq$, 则 (6) 式可写成

$$\begin{cases} q_t + (q_{xx} + q_{yy}) / 2 - V(x, y) q - \beta(p^2 + q^2) q = 0, \\ q_t - (p_{xx} + p_{yy}) / 2 + V(x, y) p + \beta(p^2 + q^2) p = 0. \end{cases} \quad (7)$$

令 $z = (p, q)^T$, 则 (7) 式可以写成 Hamilton 形式

$$dz/dt = J^{-1} \delta H(z) / \delta z, \quad (8)$$

其中 $J^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ 其 Hamilton 泛函为

$$\begin{aligned} H(p, q) &= -\frac{1}{2} \int_a^b \int_c^d \left[\frac{1}{2} (\nabla^2 p + \nabla^2 q) + \right. \\ &\quad \left. V(p^2 + q^2) + \frac{1}{2} \beta (p^2 + q^2)^2 \right] dx dy, \end{aligned}$$

其中 $\nabla^2 p = p_x^2 + p_y^2$, $\nabla^2 q = q_x^2 + q_y^2$.

方程 (8) 保持辛守恒^[7-10]

$$d\omega/dt = 0, \quad \omega = dz \wedge J dz.$$

1 辛格式的构造

为简化记号, 用 $[L, R] \times [L, R] \times [0, T]$ 表示空间-时间区域, 并用 3 组平行线对其进行划分

$$\begin{aligned} x_j &= L + j\Delta x \quad (j = 1, 2, \dots, N), \quad y_k = L + k\Delta y \quad (k = 1, \\ &\quad 2, \dots, K), \quad t^n = n\tau \quad (n = 1, 2, \dots, M), \end{aligned}$$

ψ_{jk}^n 表示 $\psi(x, y, t)$ 在点 (x_j, y_k, t^n) 的近似值, 并引入下列记号

$$\psi_{jk}^{n+1/2} = (\psi_{jk}^{n+1} + \psi_{jk}^n) / 2, \quad (U^n, V^n) = \Delta x \Delta y \sum_{j,k} u_{jk}^n \overline{v_{jk}^n},$$

$$\|U^n\| = \sqrt{(U^n, U^n)}.$$

为将无限维 Hamilton 系统转化为有限维, 首先对空间方向进行离散, 这关键在于对空间导数 $\partial^2 / \partial x^2$, $\partial^2 / \partial y^2$ 的离散^[10-13]. 采用 2 阶中心差分算子对其离散

$$\begin{aligned} \Delta_{2x} v_{jk} &= k(v_{j-1,k} - 2v_{j,k} + v_{j+1,k}) / \Delta x^2, \\ \Delta_{2y} v_{jk} &= k(v_{j,k-1} - 2v_{j,k} + v_{j,k+1}) / \Delta y^2. \end{aligned} \quad (9)$$

先考虑 2 维线性周期边值问题

$$\begin{cases} p_t + (q_{xx} + q_{yy}) / 2 = 0, \\ q_t - (p_{xx} + p_{yy}) / 2 = 0. \end{cases}$$

收稿日期: 2016-05-20

基金项目: 国家自然科学基金 (11301234, 11211171) 和江西省自然科学基金 (20161ACB20006, 20151BAB201012, 20142BCB23009) 资助项目.

作者简介: 符芳芳 (1984-), 女, 江西南昌人, 讲师, 主要从事偏微分方程研究.

用 2 阶差分算子 (9) 对其进行空间离散得到

$$\begin{cases} dp_{jk}/dt = - [(q_{j-1k} - 2q_{jk} + q_{j+1k})/\Delta x^2 + \\ (q_{jk-1} - 2q_{jk} + q_{jk+1})/\Delta y^2]/2, \\ dq_{jk}/dt = [(p_{j-1k} - 2p_{jk} + p_{j+1k})/\Delta x^2 + \\ (p_{jk-1} - 2p_{jk} + p_{jk+1})/\Delta y^2]/2, \end{cases}$$

取 $\Delta x = \Delta y = h$, $N = (R - L)/h$, 可得

$$\begin{cases} dp_{jk}/dt = - (q_{j-1k} + q_{j+1k} - 4q_{jk} + q_{j+1k} + \\ q_{jk+1})/(2h^2), \\ dq_{jk}/dt = (p_{j-1k} + p_{j+1k} - 4p_{jk} + p_{j+1k} + \\ p_{jk+1})/(2h^2). \end{cases}$$

假设

$$p = (p_{11} \ p_{21} \ \cdots \ p_{N1} \ p_{12} \ p_{22} \ \cdots \ p_{N2} \ \cdots \ p_{NN})^T,$$

$$q = (q_{11} \ q_{21} \ \cdots \ q_{N1} \ q_{12} \ q_{22} \ \cdots \ q_{N2} \ \cdots \ q_{NN})^T,$$

可得半离散系统

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -I \\ I & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M/2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix},$$

其中 I 是 $N^2 \times N^2$ 单位矩阵, 并且

$$M = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} B & I_N & & I_N \\ & B & I_N & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & B & I_N \\ I_N & & & & I \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -4 & 1 & & 1 \\ 1 & -4 & 1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & 1 & -4 & 1 \\ 1 & & & 1 & -4 \end{bmatrix},$$

这里 I_N 是 $N \times N$ 单位矩阵. 将此空间离散方法拓展到非线性问题, 可得方程 (6) 的半离散系统

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -I \\ I & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}, \quad (10)$$

其中

$$M_1 = M/2 + \begin{bmatrix} D_1 & & \\ & D_2 & \\ & & \ddots \\ & & & D_N \end{bmatrix},$$

且 $D_i (i = 1, 2, \cdots, N)$ 是 $N \times N$ 对角矩阵, 其对角元为 $D_{ij} = -(V_{ji} + \beta(p_{ji}^2 + q_{ji}^2))$, $j = 1, 2, \cdots, N$. 根据矩阵 M , $D_i (i = 1, 2, \cdots, N)$ 的对称性可知, 系统 (10) 为 Hamilton 系统, 且 Hamilton 泛函为

$$H(p, q) = \frac{1}{4} [p^T \ q^T] \begin{bmatrix} M & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} -$$

$$\frac{1}{2} \sum_{j,k} \left\{ V_{jk} (p_{jk}^2 + q_{jk}^2) + \frac{1}{2} (p_{jk}^2 + q_{jk}^2)^2 \right\}.$$

将辛中点格式^[14]应用于半离散系统 (10), 可得

$$(p^{n+1} - p^n)/\tau + Mq^{n+1/2}/2 - Vq^{n+1/2} - \beta((p^{n+1/2})^2 + (q^{n+1/2})^2)q^{n+1/2} = 0, \quad (11)$$

$$(q^{n+1} - q^n)/\tau - Mp^{n+1/2}/2 + Vp^{n+1/2} + \beta((p^{n+1/2})^2 + (q^{n+1/2})^2)p^{n+1/2} = 0, \quad (12)$$

其中 $V = [V_{11} \ V_{21} \ \cdots \ V_{N1} \ V_{12} \ V_{22} \ \cdots \ V_{N2} \ \cdots \ V_{NN}]^T$, $p^n = [p_{11} \ p_{21} \ \cdots \ p_{N1} \ p_{12} \ p_{22} \ \cdots \ p_{N2} \ \cdots \ p_{NN}]^T$, $q^n =$

$[q_{11} \ q_{21} \ \cdots \ q_{N1} \ q_{12} \ q_{22} \ \cdots \ q_{N2} \ \cdots \ q_{NN}]^T$. 将方程 (11) $\times i -$ (12) 得 2 阶非线性周期初边值问题 (6) 的辛格式为

$$i(\psi^{n+1} - \psi^n)/\tau + M\psi^{n+1/2}/2 - V\psi^{n+1/2} - \beta|\psi^{n+1/2}|^2\psi^{n+1/2} = 0. \quad (13)$$

易知矩阵 M 为对称矩阵, 且由矩阵分解理论知, 存在矩阵 A , 使得 $-M = A^T A$.

2 理论结果

2.1 守恒律

如前所述, 初边值问题 (1) ~ (3) 满足 2 个守恒律, 因此也希望所构造的辛格式 (13) 也能满足离散的电荷守恒及能量守恒.

定理 1 辛格式 (13) 保持电荷守恒, 即

$$Q^{n+1} = h^2 \sum_{j,k} |\psi_{jk}^{n+1}|^2 = h^2 \sum_{j,k} |\psi^0(x_j, y_k)|^2 = Q^0.$$

定理 2 辛格式 (13) 满足隐式能量守恒律, 即

$$(\|A\psi^{n+1}\|^2 - \|A\psi^n\|^2)/2 + h^2 \sum_{j,k} (V_{jk} + \beta|\psi_{jk}^{n+1/2}|^2)(|\psi_{jk}^{n+1}|^2 - |\psi_{jk}^n|^2) = 0.$$

注 1 定理 1 和定理 2 的证明过程类似于文献 [15], 限于篇幅, 此处从略.

2.2 误差估计

为估计格式 (13) 的误差, 用 φ_{jk}^n 表示点 (x_j, y_k, t^n) 的精确值, e_{jk}^n 表示在点 (x_j, y_k, t^n) 所产生的误差, 即 $e_{jk}^n = \varphi_{jk}^n - \psi_{jk}^n$. 由守恒律 (4), (5) 和定理 1 可假设 $\|\varphi^n\|^2 \leq Q$, $\|\psi^n\|^2 \leq Q$, $\|e^n\|^2 \leq 4Q$.

由泰勒展开可推出格式 (13) 的截断误差为

$$\Gamma_{jk}^n = i(\varphi_{jk}^{n+1} - \varphi_{jk}^n)/\tau + (M\varphi^{n+1/2})_{jk}/2 - (V_{jk} + \beta|\varphi_{jk}^{n+1/2}|^2)\varphi_{jk}^{n+1/2} = O(\tau^2 + h^2).$$

定理 3 存在仅依赖于初值 $u^0(x)$ 的正常数 C 使得误差 e_j^n 满足

$$\|e^{n+1}\|^2 \leq (\|e^0\|^2 + \tau O(\tau^2 + h^2)^2) e^{4CT}.$$

其中 τ 充分小使得 $2CT \leq (M-1)/(2M)$, 其中 $M = T/\tau$.

注 2 定理 3 可以用 Gronwall 不等式^[9]、定理 1 和定理 2 证明, 在此不写出详细的证明过程.

3 数值实验

下面通过数值算例来验证格式 (13) 的守恒性以及误差^[14-16]. 取空间区域为 $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$, $e_2^n = h \cdot$

$$\sqrt{\sum_{j,k} |\varphi_{jk}^n - \psi_{jk}^n|^2} e_\infty^n = \max_{j,k} |\varphi_{jk}^n - \psi_{jk}^n|$$

例 1 考虑线性周期初边值问题

$$\begin{cases} i\psi_t = (\psi_{xx} + \psi_{yy})/2, \\ \psi(x, y, t) = \psi(x, y + 2\pi, t), \\ \psi(x, y, t) = \psi(x + 2\pi, y, t), \\ \psi(x, y, 0) = e^{-i(x+y)}/2. \end{cases}$$

易知该问题的理论解为 $\psi(x, y, t) = e^{-i(x+y+t)}$.

为证实理论分析,采用不同的空间-时间步长来模拟该问题.表1列出当 $t = 10$ 时的数值结果.且图1表明格式(13)满足精确的电荷守恒及能量守恒.

表1 不同网格步长下的误差

τ	h	e_∞^n	e_2^n	CPU/s
0.010	$\pi/10$	3.6062×10^{-2}	7.1184×10^{-2}	4
	$\pi/15$	1.3309×10^{-2}	1.7515×10^{-2}	22
0.001	$\pi/10$	4.0481×10^{-2}	7.9908×10^{-2}	30
	$\pi/15$	1.7752×10^{-2}	2.3360×10^{-2}	143

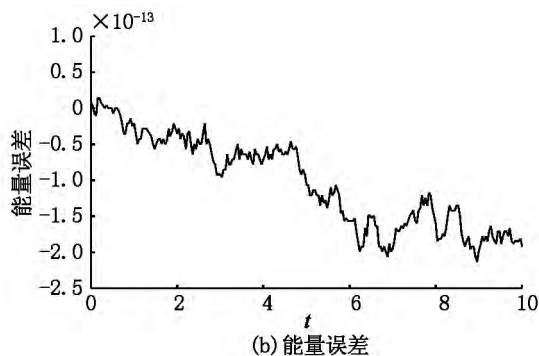
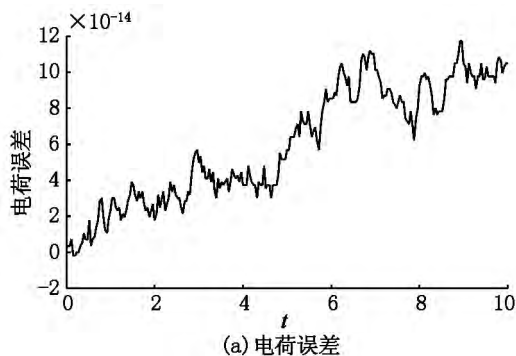


图1 格式(13)的电荷守恒及能量守恒

例2 求解带坍塌项的非线性周期初边值问题

$$\begin{cases} i\partial_t \psi(x, y, t) = -(\psi_{xx} + \psi_{yy})/2 + \\ V(x, y)\psi + |\psi|^2\psi, \\ \psi(x, y, 0) = \sin x \sin y, \end{cases} \quad (14)$$

其中 $(x, y) \in [0, 2\pi]$, $V(x, y) = 1 - \sin^2 x \sin^2 y$ 且

其精确解为 $\psi(x, y, t) = \sin x \sin y e^{-2it}$.

选取 $\tau = 0.001$, $h = \pi/20$ 来研究格式(13)的性态.图2给出了当 $t = 10$ 时的模拟结果.图3表明辛格式(13)能保持电荷守恒和隐式能量守恒.

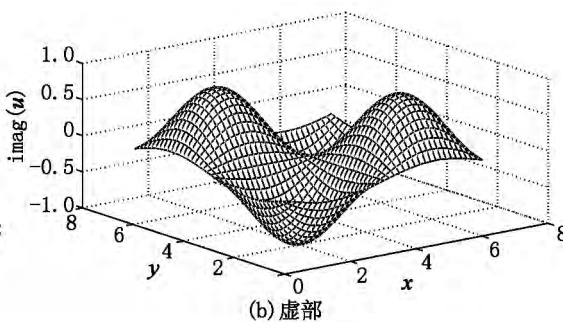
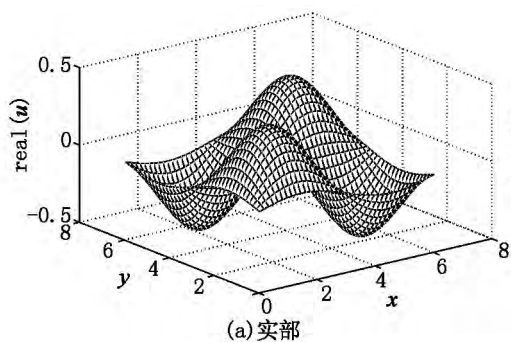


图2 当 $t = 10$ 时(14)式的数值解

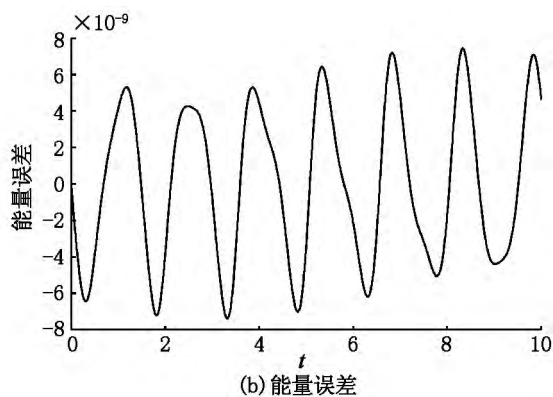
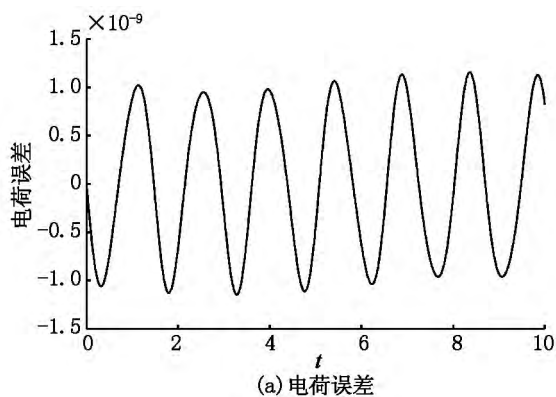


图3 辛格式(13)的电荷守恒和隐式能量守恒

4 结论

本文研究了 2 维 Gross-Pitaevskii 方程的辛格式,分析了格式的守恒性和误差.通过数值实验可以看出,该格式能够长时间地进行数值模拟,但该格式应用于 2 维情况相对于 1 维情况耗时更长,因为需要消耗更多的计算机内存,为了克服此缺点,将在今后的研究中结合分裂和辛算法的思想,构造更灵活快捷的数值格式.

5 参考文献

- [1] Gross E P. Hydrodynamics of a superfluid condensate [J]. J Math Phys, 1963, 4(2): 195-207.
- [2] Dalfovo F, Giorgini S. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases [J]. Physics, 1999, 71(3): 463-512.
- [3] Wang Hanquan. Numerical studies on split-step finite difference method for nonlinear Schrödinger equations [J]. Appl Math Comput, 2005, 170(1): 17-35.
- [4] Bao Weizhu. Numerical methods for the nonlinear Schrödinger equation with nonzero far-field conditions [J]. Methods and Applications of Analysis, 2004, 11(3): 1-22.
- [5] Kong Linghua, Hong Jialin, Zhang Jingjing. LOD-MS for Gross-Pitaevskii equation in Bose-Einstein condensates [J]. Commun Comput Phys, 2013, 14(1): 219-241.
- [6] Muruganandam P, Adhikari S K. Fortran programs for the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap [J]. Comput Phys Commun, 2009, 180(10): 1888-1912.
- [7] Feng Kang. On difference schemes and symplectic geometry [C]//Feng Kang. Proceeding of the 1984 Beijing Symposium on Differential Geometry and Differential Equations, Computation of PDEs, Beijing: Science Press, 1985: 42-58.
- [8] Fu Fangfang, Kong Linghua, Wang Lan. Symplectic Euler method for nonlinear high order Schrödinger equation with a trapped term [J]. Adv Appl Math Mech, 2009, 1(5): 699-710.
- [9] 符芳芳, 孔令华. 一类新的含双幂非线性项的 Schrödinger 方程的差分格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2010, 34(1): 22-26.
- [10] Chen Jingbo, Qin Mengzhao, Tang Yifa. Symplectic and multi-symplectic methods for the nonlinear Schrödinger equations [J]. Comput Math with Appl, 2002, 43(8/9): 1095-1106.
- [11] 秦孟兆, 王雨顺. 偏微分方程中的保结构算法 [M]. 杭州: 浙江科学技术出版社, 2011.
- [12] Wang Yushun, Hong Jialin. Multi-symplectic algorithms for Hamiltonian partial differential equations [J]. Commun Appl Math Comput, 2013, 27(2): 163-230.
- [13] 黄红, 王兰. 薛定谔方程的局部 1 维多辛算法 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2011, 35(5): 455-458.
- [14] 徐远, 孔令华, 王兰, 等. 带有阻尼项的 4 阶非线性薛定谔方程的显式辛格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2013, 37(3): 244-248.
- [15] Wang Zhongcheng, Shao Hezhu. A new kind of discretization scheme for solving a two-dimensional time-independent Schrödinger equation [J]. Comput Phys Commun, 2009, 180(6): 842-849.
- [16] Kalogiratos Z, Monovasilis T, Simos T E. Symplectic integrators for the numerical solution of the Schrödinger equation [J]. J Comput Appl Math, 2003, 158(1): 83-92.

The Symplectic Integrator for Two-Dimensional Gross-Pitaevskii Equations

FU Fangfang¹, ZHOU Yuanlan²

(1. Nanchang Institute of Science and Technology, Nanchang Jiangxi 330108, China;

2. College of Mathematics and Informatics, Jiangxi Normal University, Nanchang Jiangxi 330022, China)

Abstract: A symplectic integrator is proposed for the two dimensional Gross-Pitaevskii equations in the letter. It is observed that the proposed scheme keeps the charge exactly unchanged and an implicit energy conservation law. Furthermore, the error of the numerical method is estimated theoretically. The theoretical analysis is illustrated by some numerical examples.

Key words: symplectic integrator; Gross-Pitaevskii equation; conservation laws

(责任编辑: 曾剑锋)