暗孤立子情形下非线性薛定谔方程的辛算法

张宜浩

摘 要

非线性薛定谔方程是一类重要的非线性演化方程，与数学物理中许多非线性问题有重要的联系，对该方程的研究有着重要的理论意义和实际价值. 对它进行数值离散之后可以得到著名的 Ablowitz-Ladik 模型，它可以表示成一个高维的非正则哈密尔顿系统.

哈密尔顿系统的辛几何算法在科学计算领域被广泛研究和应用，并发挥着日益重要的作用. 辛算法不仅能保持哈密尔顿系统的内在结构，还能近似保持系统的哈密尔顿量. 对于求解非正则的 Ablowitz-Ladik 模型的优越性显而易见. 我们考虑对 Ablowitz-Ladik 模型构造辛算法. 由于它的非线性程度比较高，生成函数理论很难适用，于是我们考虑运用分裂技巧对其构造 K 辛算法. 同时也可以通过坐标变换将其转换成正则辛系统并应用传统辛算法. 这两种方法在保持运动轨道和近似保持系统的哈密尔顿量以及守恒量方面相较于其它算法有着显著的优势.

本文主要研究暗孤立子情形下非线性薛定谔方程的辛算法，并通过数值实验验证它们在模拟非线性薛定谔方程的孤立子运动以及保持守恒量方面的优势.

首先我们通过分裂方法将 Ablowitz-Ladik 模型分成两个可以精确求解的子系统，并将子系统的解复合构造高阶的 K 辛方法；另一方面，我们可以通过三种坐标变换将非正则的哈密尔顿系统正则化，对正则化后的系统我们应用高阶的辛 Runge-Kutta 方法. 通过数值实验我们验证了 2 阶的中点格式和 2 阶的分裂 K 辛方法比 3 阶的非辛方法在模拟哈密尔顿量和守恒量方面有着显著的优势. 另外我们还对比了 2 阶和 4 阶的分裂 K 辛方法与 2 阶和 4 阶的辛方法，数值实验证明了分裂 K 辛方法比辛方法更高效. 在达到相同精度的误差下 2 阶分裂 K 辛方法所消耗的时间比 2 阶中点格式少得多，而 4 阶的分裂 K 辛方法不论是数值精度和 CPU 时间上都比 4 阶高斯方法要少.

关键词： 非线性薛定谔方程；Ablowitz-Ladik 模型；辛算法；分裂算法；守恒量