UNIVERSITÄT LEIPZIG

Jun.-Prof. Dr. Mira Schedensack
Mathematisches Institut
Universität Leipzig

Numerisches Praktikum

WS 2022/2023 & SS 2023

Projekt: Finite Differenzen Methode für die Schrödinger Gleichung (empfohlene Gruppengröße: 3)

Dieses Projekt setzt die Finite-Differenzen-Methode aus [DFP81] für die nicht-lineare Schrödinger Gleichung um.
Es sei $\lambda \in \mathbb{R}$. Man betrachte die folgende nicht-lineare Schrödinger Gleichung: Finde $u = u(x,t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ mit

$$\begin{aligned} iu_t - u'' + \lambda |u|^2 u &= 0, \\ u(x,0) &= \phi(x), \end{aligned}$$

wobei u_t die Ableitung nach t und u'' die zweite Ableitung nach x bezeichne und $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ eine gegebene Funktion ist. Die Lösung erhält die Größen

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} |u|^2 \, dx &= \text{const}, \\ \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{2}|u'|^2 + \frac{\lambda}{4}|u|^4 \right) dx &= \text{const}. \end{aligned}$$

Eine exakte Lösung ist gegeben durch

$$u(x,t) = \frac{3}{2} \exp\left(i \left(2x - \frac{7}{4}t \right) \right) \operatorname{sech}\left(\frac{3}{2}(x+5) - 6t \right) \tag{1}$$

wobei

$$\operatorname{sech}(x) = \frac{2}{\exp(x) + \exp(-x)} = \frac{1}{\cosh(x)}$$

den Sekans hyperbolicus bezeichnet. Diese Funktion (und typische Lösungen im Allgemeinen) ist fast null außerhalb eines kompakten Intervalls (im Ort).
Wähle das kompakte Intervall $[-30, 30] \subseteq \mathbb{R}$. Es seien $\Delta x > 0$ und $\Delta t > 0$ gegebene Orts- und Zeitschrittweiten und es sei $J := 30/\Delta x \in \mathbb{N}$ und $K := 6/\Delta t \in \mathbb{N}$. Eine diskrete Approximation U_j^k an $u(j\Delta x, k\Delta t)$ für $k = 0, \dots, K$ und $j = -J, -J+1, \dots, J$ ist gegeben durch $U_j^0 = \phi(j\Delta x)$ für alle $j = -J, \dots, J$ und $U_{-J}^k = U_J^k = 0$ für alle $k = 0, \dots, K$ und

$$\begin{aligned} i\frac{U_j^{k+1} - U_j^k}{\Delta t} - \frac{1}{2} \left(\frac{U_{j+1}^{k+1} - 2U_j^{k+1} + U_{j-1}^{k+1}}{|\Delta x|^2} + \frac{U_{j+1}^k - 2U_j^k + U_{j-1}^k}{|\Delta x|^2} \right) \\ + \frac{\lambda}{4} \left(|U_j^{k+1}|^2 + |U_j^k|^2 \right) \left(U_j^{k+1} + U_j^k \right) = 0 \end{aligned}$$

für alle $k = 0, \dots, K$ und $j = -J+1, \dots, J-1$. Definiere die Matrix $A \in \mathbb{R}^{2J-1}$ durch

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & & & \vdots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & -1 & 2 & -1 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Diese Matrix beschreibt die Diskretisierung von u''. Es bezeichne $U^k := (U^k_{-J+1}, \dots, U^k_{J-1}) \in \mathbb{R}^{2J-1}$ den Vektor, der $u(\bullet, k\Delta t)$ approximiert. Dann kann das obige Verfahren in Matrixform geschrieben werden als

$$i\frac{1}{\Delta t}(U^{k+1} - U^k) + \frac{1}{2|\Delta x|^2}(AU^{k+1} + AU^k) + F_k(U^{k+1}) = 0,$$

wobei

$$(F_k(U))_j := \frac{\lambda}{4}(|U_j|^2 + |U_j^k|^2)(U_j + U_j^k) \qquad \text{für alle } U \in \mathbb{R}^{2J-1}.$$

Eine Umformung ergibt also mit der Einheitsmatrix I

$$\left(\frac{i}{\Delta t}I + \frac{A}{2\,|\Delta x|^2}\right)U^{k+1} + F_k(U^{k+1}) = \left(\frac{i}{\Delta t}I - \frac{A}{2\,|\Delta x|^2}\right)U^k.$$

Dies ist ein nicht-lineares System und eine Lösung (in jedem Zeitschritt) kann durch ein Fixpunktverfahren approximiert werden, d.h. durch die Iterationsvorschrift

$$U_{p+1} = \left(\frac{i}{\Delta t}I + \frac{A}{2\,|\Delta x|^2}\right)^{-1}\left(\left(\frac{i}{\Delta t}I - \frac{A}{2\,|\Delta x|^2}\right)U^k - F_k(U_p)\right).$$

1. Implementieren Sie eine Methode, die das obige Verfahren umsetzt. Beachten Sie dabei, dass Sie die Matrix A als *sparse*-Matrix erstellen. Für die Lösung der linearen Gleichungssysteme können Sie auf existierende Routinen (für *sparse*-Matrizen) zurückgreifen, z.B. auf die python-Routine `scipy.sparse.linalg.spsolve`. Benutzen Sie als Abbruchkriterium für die Fixpunktiteration

$$|U_{p+1} - U_p| < \varepsilon.$$

2. Approximieren Sie damit die Lösung zu den Anfangsdaten $u(x, 0)$ mit u aus (1) für verschiedene selbstgewählte Werte von ε.

3. Überprüfen Sie die diskreten Erhaltungen

$$\Delta x \sum_{j=-J}^{J} |U_j^k|^2 = \Delta x \sum_{j=-J}^{J} |U_j^0|^2,$$

$$\frac{\Delta x}{2}\sum_{j=-J}^{J-1}\left|\frac{U_{j+1}^k - U_j^k}{\Delta x}\right|^2 + \frac{\lambda}{4}\Delta x \sum_{j=-J}^{J} |U_j^k|^4 = \text{const.}$$

Wie verhalten sich diese Erhaltungen für verschiedene Werte von ε?

4. Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit dem expliziten Verfahren, das durch

$$i\frac{1}{\Delta t}(U^{k+1} - U^k) - \frac{1}{|\Delta x|^2}AU^k + F_k(U^k) = 0$$

gegeben ist.

Literatur

[DFP81] M. Delfour, M. Fortin, and G. Payre. Finite-difference solutions of a non-linear Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, 44:277–288, 1981.