

Hartree 方程的低正则算法

李雪,李新彤

(天津大学 应用数学中心,天津 300072)

摘要:构建了一种 Fourier 积分器来求解非线性 Hartree 方程,这种指数型积分器是显式的,且可通过快速 Fourier 变换实现一阶收敛.通过严格的分析,证明对任意的 $\gamma > \frac{d}{2}$,该格式对于 $H^{\gamma+1}$ 空间中的任何初始数据都提供了一阶精度.即,固定时间 T ,存在常数 $C = C(T, \|u\|_{L^\infty([0, T]; H^{\gamma+1})}) > 0$,使得 $\|u^n - u(t_n)\|_{H^\gamma(\mathbf{T}^d)} \leq C\tau$,其中 u^n 为在 $t_n = n\tau$ 处的数值解.

关键词:Hartree 方程;一阶收敛;指数型积分器;低正则性

中图分类号:O241.4

文献标志码:A

在这篇文章中,考虑 Hartree 方程:

$$\begin{cases} i\partial_t u(t, x) + \Delta(t, x) = (|x|^{-1} * |u|^2)u(t, x), t > 0, x \in \mathbf{T}^d, \\ u(0, x) = u_0(x), x \in \mathbf{T}^d, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $\mathbf{T}^d = (0, 2\pi)^d$, $u = u(t, x): \mathbf{R}^+ \times \mathbf{T}^d \rightarrow \mathbf{C}$, $u_0 \in H^\gamma(\mathbf{T}^d)$ ($\gamma \geq 0$) 为给定的初值.非线性 Hartree 方程在量子理论中有非常广泛的应用,它描述了量子力学中多玻色子系统场方程的经典极限^[1].因此自提出以来就备受研究者关注,并已经有了大量理论研究成果^[2-3]和数值求解方法,包括有限元方法^[4-5]、有限差分方法^[6-7]和分割法^[8-9]等.

上述数值方法都是基于精确解足够光滑的假设构造的,特别地,经典的 Strang Splitting 方法要求 $u_0 \in \mathcal{H}^{\gamma+2}$ 才能获得相应的数值解和真解之间的一阶收敛^[10],即一阶精度需有两个导数损失.本文的目标是通过构造一类新的算法,使其一阶精度所要求的初值正则性更低.本文的算法构造基于指数型积分算法^[8].相应的非线性 Schrödinger 方程的相关研究可见文献^[11-13]及其参考文献.

定义函数 φ 如

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{e^x - 1}{x}, x \neq 0, \\ 1, x = 0, \end{cases}$$

并定义泛函

$$\psi(f) = e^{i\tau\Delta} f + i\tau e^{i\tau\Delta} [|x|^{-1} * (\varphi(-2i\tau\Delta)\bar{f} \cdot f) \cdot f].$$

给出如下算法,

$$\begin{cases} u^{n+1} = \psi(u^n), n = 0, 1, \dots, \frac{T}{\tau} - 1, \\ u^0 = u_0, \end{cases} \quad (2)$$

其中 u^n 为 u 在 $t = n\tau$ 时的数值解.主要的定理为:

定理 1 设 v^n 为方程(1)满足格式(2)的解.对任意的 $\gamma \geq \frac{d}{2}$,若 $u_0 \in \mathcal{H}^{\gamma+1}$,则数值解(2)满足:给定 $\tau \geq$

$0, \| u(t_n) - u^n \|_{\mathcal{Y}^r} \leq C\tau, n = 1, \dots, \frac{T}{\tau}$, 其中 $C = C(\| u_0 \|_{\mathcal{Y}^{r+1}}, T)$.

在定理 1 中, 可得到一阶收敛性仅需损失一个导数, 因此改进了 Strang Splitting 等方法获得的结果.

1 预备知识

下面提供一些有用的定义和性质.

使用 $A \lesssim B$ 或者 $B \gtrsim A$ 来表示 $A \leq CB$, 对于某些绝对常数 $C > 0$. 使用 $A \sim B$ 来表示 $A \lesssim B \lesssim A$.

定义 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 为 L^2 内积,

$$\langle f, g \rangle = \text{Re} \int_{\mathbf{T}^d} f(x) \overline{g(x)} dx. \tag{3}$$

函数 f 在 \mathbf{T}^d 上的 Fourier 变换定义为

$$\hat{f}_k = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{T}^d} e^{-ik \cdot x} f(x) dx, \tag{4}$$

Fourier 逆变换为

$$f(x) = \sum_{k \in \mathbf{Z}^d} e^{ik \cdot x} \hat{f}_k. \tag{5}$$

Fourier 变换常用性质

$$\| f \|_{L^2}^2 = 2\pi \sum_{k \in \mathbf{Z}^d} | \hat{f}_k |^2. \tag{6}$$

$$(fg)^\wedge(k) = \sum_{k_1 \in \mathbf{Z}^d} \hat{f}_{k-k_1} \hat{g}_{k_1}. \tag{7}$$

Sobolev 空间 $H^\gamma(\mathbf{T}^d), \gamma \geq 0$ 的范数

$$\| f \|_{H^\gamma(\mathbf{T}^d)}^2 = 2\pi \sum_{k \in \mathbf{Z}^d} (1+k^2)^\gamma | \hat{f}_k |^2. \tag{8}$$

定义算子 J^s 为

$$J^s = (1 - \Delta)^{\frac{s}{2}}. \tag{9}$$

此外, 定义算子 ∇^{-1}

$$\nabla^{-1} f(k) = \begin{cases} (ik)^{-1} \hat{f}(k), & \text{当 } k \neq 0, \\ 0, & \text{当 } k = 0. \end{cases} \tag{10}$$

文中, 将经常应用下面的 Kato-Ponce 不等式(简单版本), 这最初是由文献[14]证明的, 最近在端点处[15]取得了重要进展.

引理 1(Kato-Ponce 不等式) 对任意的 $\gamma > \frac{d}{2}, f, g \in H^\gamma$, 有下面不等式成立

$$\| J^\gamma(fg) \|_{L^2} \lesssim \| f \|_{H^\gamma} \| g \|_{H^\gamma}. \tag{11}$$

2 收敛性分析

根据 Duhamel 公式, 满足方程的解(1)有如下等式

$$u(t, x) = u(t_0) e^{i(t-t_0)\Delta} + i \int_{t_0}^t e^{i(t-s)\Delta} (|x|^{-1} * |u|^2) u(s) ds.$$

整理上式可得 $e^{-ir\Delta} u(t) = e^{-it_0\Delta} u(t_0) + i \int_{t_0}^t e^{-is\Delta} (|x|^{-1} * |u|^2) u(s) ds$. 令 $v(t) = e^{-ir\Delta} u(t)$ 则有

$$v(t) = v(t_0) + i \int_{t_0}^t e^{-is\Delta} (|x|^{-1} * |e^{is\Delta} v(s)|^2) e^{is\Delta} v(s) ds.$$

对上式做 Fourier 变换可得,

$$\hat{v}_k(t) = \hat{v}_k(t_0) + iC \int_{t_0}^t \sum_{k=k_1+k_2+k_3} e^{is(|k|^2+|k_1|^2-|k_2|^2-|k_3|^2)} \frac{\overline{\hat{v}_{k_1}(s)} \hat{v}_{k_2}(s) \hat{v}_{k_3}(s)}{(k_1+k_2)^{d-1}} ds. \tag{12}$$

进一步可得

$$\hat{v}_k(t_{n+1}) = \hat{v}_k(t_n) + iC \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sum_{k_1+k_2+k_3} e^{is(|k|^2+|k_1|^2-|k_2|^2-|k_3|^2)} \frac{\mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(t_n)\hat{v}_{k_2}(t_n)\hat{v}_{k_3}(t_n)}{(k_1+k_2)^{d-1}} ds + (\hat{\mathcal{R}}_1^n)_k. \quad (13)$$

其中 \hat{v}_k 为 $v(t)$ 的 Fourier 系数, 余项 $\hat{\mathcal{R}}_1^n$ 将在算法的设计中被舍弃.

令 $\tau = t_{n+1} - t_n$, 并且记 $\phi = |k| + |k_1| - |k_2| - |k_3| = 2|k_1|^2 + 2k_1k_2 + 2k_2k_3 + 2k_3k_1 = \alpha + \beta$, 其中 $\alpha = 2|k_1|^2, \beta = 2k_1k_2 + 2k_2k_3 + 2k_3k_1$. 于是有

$$\int_0^\tau e^{is\phi} ds = \int_0^\tau e^{is\alpha+is\beta} ds = \frac{1}{i\alpha} (e^{i\tau\alpha} - 1) + \tau^2 O(|\beta|) \triangleq \tau\varphi(i\tau\alpha) + \tau^2 O(|\beta|), \quad (14)$$

将(14)式代入(13)式, 整理可得:

$$\hat{v}_k(t_{n+1}) = \hat{v}_k(t_n) + iC \sum_{k=k_1+k_2+k_3} \frac{e^{i\tau\phi}}{|k_1+k_2|^{d-1}} \mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(t_n)\hat{v}_{k_2}(t_n)\hat{v}_{k_3}(t_n)\tau\varphi(2i\tau|k_1|^2) + (\hat{\mathcal{R}}_1^n)_k + (\hat{\mathcal{R}}_2^n)_k. \quad (15)$$

其中,

$$(\hat{\mathcal{R}}_2^n)_k = iC \sum_{k=k_1+k_2+k_3} \frac{1}{|k_1+k_2|^{d-1}} \mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(t_n)\hat{v}_{k_2}(t_n)\hat{v}_{k_3}(t_n)\tau^2 O(|k_1||k_2|+|k_2||k_3|+|k_3||k_1|).$$

对(15)式逆 Fourier 变换得

$$v(t_{n+1}) = v(t_n) + i\tau e^{-i\tau\Delta} [|x|^{-1} * (\varphi(-2i\tau\Delta)e^{-i\tau\Delta}\bar{v}(t_n) \cdot e^{i\tau\Delta}v(t_n) \cdot e^{i\tau\Delta}v(t_n))] + \mathcal{R}_1^n + \mathcal{R}_2^n \triangleq \Phi(v(t_n)) + \mathcal{R}_1^n + \mathcal{R}_2^n.$$

根据 ψ 和 Φ 的定义, 有 $\psi(f) = e^{i\tau\Delta}\Phi(e^{-i\tau\Delta}f)$. 忽略 $\mathcal{R}_1^n, \mathcal{R}_2^n$, 得到数值算法(2).

3 定理 1 的证明

3.1 关于 \mathcal{R}_1^n 和 \mathcal{R}_2^n 的估计

引理 2 对于 \mathcal{R}_1^n , 在 $\gamma > \frac{d}{2}$ 时, 有以下估计

$$\|\mathcal{R}_1^n\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq C\tau^2 \|v\|_{\mathcal{H}^\gamma}^5. \quad (16)$$

证明

$$(\hat{\mathcal{R}}_1^n)_k = iC \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sum_{k=k_1+k_2+k_3} e^{is(|k|^2+|k_1|^2-|k_2|^2-|k_3|^2)} \cdot \frac{\mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(s)\hat{v}_{k_2}(s)\hat{v}_{k_3}(s) - \mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(t_n)\hat{v}_{k_2}(t_n)\hat{v}_{k_3}(t_n)}{(k_1+k_2)^{d-1}} ds, \quad (17)$$

其中

$$\mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(s)\hat{v}_{k_2}(s)\hat{v}_{k_3}(s) - \mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(t_n)\hat{v}_{k_2}(t_n)\hat{v}_{k_3}(t_n) = (\mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(s) - \mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(t_n))\hat{v}_{k_2}(s)\hat{v}_{k_3}(s) + (\hat{v}_{k_2}(s) - \hat{v}_{k_2}(t_n))\hat{v}_{k_3}(t_n) + (\hat{v}_{k_3}(s) - \hat{v}_{k_3}(t_n))\hat{v}_{k_1}(t_n)\hat{v}_{k_2}(t_n).$$

则(17)式可以写成 $(\hat{\mathcal{R}}_1^n)_k = (\hat{\mathcal{R}}_{11}^n)_k + (\hat{\mathcal{R}}_{12}^n)_k + (\hat{\mathcal{R}}_{13}^n)_k$, 且有

$$\mathcal{R}_{11}^n = iC \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{-is\Delta} |\nabla|^{-d+1} [e^{-is\Delta}(\bar{v}(s) - \bar{v}(t_n)) \cdot e^{is\Delta}v(s)] \cdot e^{is\Delta}v(t_n) ds,$$

$$\mathcal{R}_{12}^n = iC \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{-is\Delta} |\nabla|^{-d+1} [e^{-is\Delta}(v(s) - v(t_n)) \cdot e^{is\Delta}\bar{v}(t_n)] \cdot e^{is\Delta}v(s) ds,$$

$$\mathcal{R}_{13}^n = iC \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{-is\Delta} |\nabla|^{-d+1} [|e^{-is\Delta}v(t_n)|^2] \cdot e^{is\Delta}(v(s) - v(t_n)) ds.$$

只需计算其中一个估计, 其他类似可得.

$$\begin{aligned} \|\mathcal{R}_{13}^n\|_{\mathcal{H}^\gamma} &\leq C \int_{t_n}^{t_{n+1}} \| |\nabla|^{-d+1} [|e^{-is\Delta}v(t_n)|^2] \cdot e^{is\Delta}(v(s) - v(t_n)) \|_{\mathcal{H}^\gamma} ds \leq \\ &C\tau [\| |\nabla|^{-d+1} |e^{-is\Delta}v(t_n)|^2 \|_{L^2} \cdot \| e^{is\Delta}(v(s) - v(t_n)) \|_{L^\infty} + \\ &\| |\nabla|^{-d+1} |e^{-is\Delta}v(t_n)|^2 \|_{L^\infty} \cdot \| |\nabla|^\gamma e^{is\Delta}(v(s) - v(t_n)) \|_{L^2}] \leq \\ &\tau [\|v(t_n)\|_{\mathcal{H}^{\gamma-d+1}}^2 \cdot \|v(s) - v(t_n)\|_{\mathcal{H}^\gamma} + \|v(t_n)\|_{\mathcal{H}^{\gamma-d+1}}^2 \cdot \|v(s) - \end{aligned}$$

$$\|v(t_n)\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq C\tau \|v(t_n)\|_{\mathcal{H}^\gamma}^2 \cdot \|v(s) - v(t_n)\|_{\mathcal{H}^\gamma}, \gamma \geq \frac{d}{2}, \tag{18}$$

其中,有

$$v(s) - v(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \partial_t v(\xi) d\xi, i\partial_t v(t) = e^{-it\Delta} (|e^{it\Delta} v(t)|^2 * |x|^{-1}) e^{it\Delta} v(t).$$

于是

$$\|v(s) - v(t_n)\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|v(\xi)\|_{\mathcal{H}^\gamma}^3 d\xi \leq \tau \|v(\xi)\|_{\mathcal{H}^\gamma}^3, \gamma > \frac{d}{2}, \xi \in (t_n, t_{n+1}).$$

因此,(18)式可以写为

$$\|\mathcal{R}_1^n\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq C\tau^2 \|v\|_{\mathcal{H}^\gamma}^5.$$

引理 3 对于 \mathcal{R}_1^n ,在 $\gamma > \frac{d}{2}$ 时,有以下估计

$$\|\mathcal{R}_2^n\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq C\tau^2 \|v\|_{\mathcal{H}^{\gamma+1}}^3. \tag{19}$$

证明 不妨假设 $\mathcal{F}\bar{v}_k(t_n), \hat{v}_k(t_n) \geq 0, \|v\|_{\mathcal{H}^\gamma} = \sum_k |k|^\gamma |\hat{v}_k|^2.$

$$\hat{\mathcal{R}}_2^n \leq iC \sum_{k=k_1+k_2+k_3} \frac{1}{|k_1+k_2|^{d-1}} \mathcal{F}\bar{v}_{k_1}(t_n)\hat{v}_{k_2}(t_n)\hat{v}_{k_3}(t_n)\tau^2 (|k_1||k_2|+|k_2||k_3|+|k_3||k_1|).$$

上式逆傅立叶变换得

$$\mathcal{R}_2^n \leq iC\tau^2 (|\nabla|^{-d+1} (|\nabla|v)^2)v + |\nabla|^{-d+1} (|\nabla|\bar{v}v)|\nabla|v + |\nabla|^{-d+1} (\bar{v}|\nabla|v)|\nabla|v).$$

于是有

$$\begin{aligned} \|\mathcal{R}_2^n\|_{\mathcal{H}^\gamma} &\leq \| |\nabla|^\gamma \mathcal{R}_2^n \|_{L^2} \leq C\tau^2 (\| |\nabla|^{\gamma-d+1} \|\nabla|v\|^2 \|_{L^2} \|v\|_{L^\infty} + \\ &\| |\nabla|^{-d+1} \|\nabla|v\|^2 \|_{L^\infty} \| |\nabla|^\gamma v \|_{L^2} + \| |\nabla|^{\gamma-d+1} (\bar{v}|\nabla|v) \|_{L^2} \| |\nabla|v \|_{L^\infty} + \\ &\| |\nabla|^{-d+1} (\bar{v}|\nabla|v) \|_{L^\infty} \| |\nabla|^{\gamma+1} v \|_{L^2} + \| |\nabla|^{\gamma-d+1} (|\nabla|\bar{v}v) \|_{L^2} \| |\nabla|v \|_{L^\infty} + \\ &\| |\nabla|^{-d+1} (|\nabla|\bar{v}v) \|_{L^\infty} \| |\nabla|^{\gamma+1} v \|_{L^2}) \leq C\tau^2 \|v\|_{\mathcal{H}^{\gamma+1}}^3, \gamma > \frac{d}{2}. \end{aligned} \tag{20}$$

3.2 定理 1 的证明

接下来证明定理 1.

证明

$$\begin{aligned} v^{n+1} - v(t_{n+1}) &= \Phi(v^n) - v(t_{n+1}) = \Phi(v^n) - \Phi(v(t_n)) + \Phi(v(t_n)) - v(t_{n+1}) = \\ &\Phi(v^n) - \Phi(v(t_n)) - (\mathcal{R}_1^n + \mathcal{R}_2^n). \end{aligned} \tag{21}$$

根据引理 2 和引理 3 得如下误差估计

$$\|\Phi(v(t_n)) - v(t_{n+1})\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq \|\mathcal{R}_1^n\|_{\mathcal{H}^\gamma} + \|\mathcal{R}_2^n\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq C\tau^2. \tag{22}$$

记 $e_n = v(t_n) - v^n$, 利用 Kato-Ponce 不等式可得稳定性估计

$$\begin{aligned} \|\Phi(v^n) - \Phi(v(t_n))\|_{\mathcal{H}^\gamma} &= \|v^n - v(t_n)\|_{\mathcal{H}^\gamma} + \tau \| |x|^{-1} ((\varphi(-2i\tau\Delta)\bar{v}^n \cdot v^n)v^n - \\ &(\varphi(-2i\tau\Delta)\bar{v}(t_n) \cdot v(t_n))v(t_n)) \|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq \|e_n\|_{\mathcal{H}^\gamma} + C\tau (\|e_n\|_{\mathcal{H}^\gamma} + \|e_n\|_{\mathcal{H}^{\frac{3}{2}}}). \end{aligned}$$

又因为 $\|e_{n+1}\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq C\tau^2 + (1+C\tau)\|e_n\|_{\mathcal{H}^\gamma} + C\tau\|e_n\|_{\mathcal{H}^{\frac{3}{2}}}^3$. 由递归法和 Grownwall 不等式得 $\|e_n\|_{\mathcal{H}^\gamma} \leq$

$$C\tau^2 \sum_{j=0}^{\frac{T}{\tau}} (1+C\tau)^j \leq C\tau.$$

由此,定理 1 得证.

参 考 文 献

[1] GROSS E P. Dynamics of interacting bosons[M]. New York: Gordon and Breach, 1966.
 [2] CAZENAVE T, LIONS P L. Orbital stability of standing waves for some nonlinear Schrödinger equations[J]. Journal of Communications in Mathematical Physics, 1982, 85(4): 549-561.
 [3] CHEN J, GUO B. Strong instability of standing waves for a nonlocal Schrödinger equation[J]. Journal of Physica D: Nonlinear Phenome-

na,2007,227(2):142-148.

- [4] AKSAN E,ÖZDEŞA.Numerical solution of Korteweg-de Vries equation by Galerkin B-spline finite element method[J].Applied Mathematics and Computation,2006,175(2):1256-1265.
- [5] DUTTA R,KOLEY U,RISEBRO N H.Convergence of a higher order scheme for the Korteweg-de Vries equation[J].SIAM Journal on Numerical Analysis,2015,53:1963-1983.
- [6] COURTÈS C,LAGOUTIÈRE F,ROUSSET F. Error estimates of finite difference schemes for the Korteweg-de Vries equation[J].IMA Journal of Numerical Analysis,2020,40:628-685.
- [7] HOLDEN H,KOLEY U,RISEBRO N.Convergence of a fully discrete finite difference scheme for the Korteweg-de Vries equation[J].IMA Journal of Numerical Analysis,2015,35(3):1047-1077.
- [8] HOLDENH,LUBICH C,RISEBRO N H.Operator splitting for partial differential equations with Burgers nonlinearity[J].Mathematics of Computation,2012,82:173-185.
- [9] HOLDEN H,KARLSEN K H,RISEBRO N H,et al.Operator splitting for the KdV equation[J].Mathematics of Computation,2011,80:821-846.
- [10] HOCHBRUCK M,OSTERMANN A.Explicit exponential Runge-Kutta methods for semilinear parabolic problems[J].SIAM Journal on Numerical Analysis,2005,43:1069-1090.
- [11] HOCHBRUCK M,OSTERMANN A.Exponential integrators[J].Acta Numerica,2010,19:209-286.
- [12] KNÖLLER M,OSTERMANN A,SCHRATZ K.A Fourier integrator for the cubic nonlinear Schrödinger equation with rough initial data [J].SIAM Journal on Numerical Analysis,2019,57:1967-1986.
- [13] LI Y,WU Y,YAO F.Convergence of an embedded exponential-type low-Regularity integrators for the kdV equation without loss of regularity[J].Annals of Applied Mathematics,2021(1):1-21.
- [14] KATO T,PONCE G.Commutator estimates and the Euler and Navier-Stokes equations[J].Communications on Pure and Applied Mathematics,1988,41:891-907.
- [15] OURGAIN B,LI J D.On an endpoint Kato-Ponce inequality[J].Differential Integral Equations,2014,27:1037-1072.

Low regular algorithm for Hartree equations

Li Xue, Li Xintong

(Center for Applied Mathematics, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract: In this paper, a Fourier integrator is constructed to solve the nonlinear Hartree equation. This exponential integrator is explicit and can achieve first-order convergence by fast Fourier transform. Through rigorous analysis, we prove that for any $\gamma > \frac{d}{2}$, the format provides first-order accuracy for any initial data in $H^{\gamma+1}$ space. That is, for a fixed time of t , there is a constant of $C = C(T, \|u\|_{L^\infty([0, T]; H^{\gamma+1})}) > 0$, so that $\|u^n - u(t_n)\|_{H^\gamma(\mathbb{R}^d)} \leq C\tau$, where u^n is the numerical solution at $t_n = n\tau$.

Keywords: Hartree equation; first-order convergence; exponential integrator; low regularity

[责任编辑 陈留院 赵晓华]