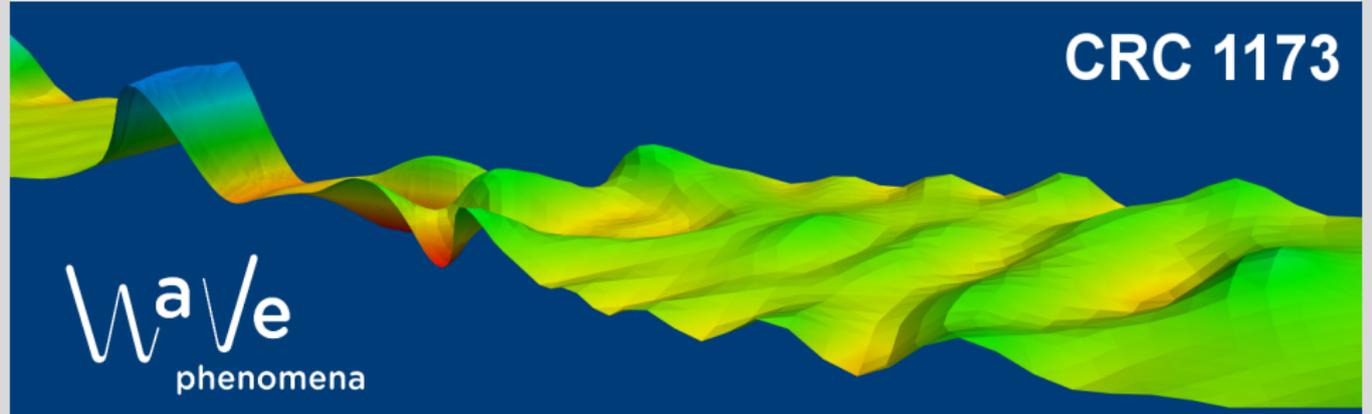


Numerische Methoden für die nichtlineare Schrödingergleichung mit starkem *dispersion management*

Julian Baumstark gemeinsame Arbeit mit Tobias Jahnke

Kompaktseminar Annweiler | 10. Oktober 2018



CRC 1173

Wave
phenomena

- 1 Motivation
- 2 Analytischer Kontext
- 3 Ortsdiskretisierung
- 4 Aktueller Stand

Anwendung: Datenübertragung durch optische Glasfaserkabel

¹siehe Agrawal (2007)

Anwendung: Datenübertragung durch optische Glasfaserkabel

Problem: Verschiedene Effekte, z.B. Dispersion, beeinträchtigen den Datentransfer

¹siehe Agrawal (2007)

Anwendung: Datenübertragung durch optische Glasfaserkabel

Problem: Verschiedene Effekte, z.B. Dispersion, beeinträchtigen den Datentransfer

Idee: Verwendung von Fasern mit alternierender Dispersion (sog. *dispersion management*)

¹siehe Agrawal (2007)

Anwendung: Datenübertragung durch optische Glasfaserkabel

Problem: Verschiedene Effekte, z.B. Dispersion, beeinträchtigen den Datentransfer

Idee: Verwendung von Fasern mit alternierender Dispersion (sog. *dispersion management*)

Modell: Ausbreitung eines optischen Signals in Glasfasern wird durch die nichtlineare Schrödingergleichung (NLS) beschrieben¹

Hier: Betrachte starkes *dispersion management*

¹siehe Agrawal (2007)

Dispersion-managed NLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x), \quad t \in [0, T], x \in \mathbb{R}$$

mit $u(0, \cdot) = u_0$

Dispersion-managed NLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \partial_x^2 u(t, x) + i|u(t, x)|^2 u(t, x), \quad t \in [0, T], x \in \mathbb{R}$$

mit $u(0, \cdot) = u_0$

1-periodische, unstetige dispersion map:

$$d(t) = \chi(t) + \varepsilon \kappa, \quad \chi(t) = \begin{cases} \delta, & t \in [n, n + \frac{1}{2}) \\ -\delta, & t \in [n + \frac{1}{2}, n + 1) \end{cases}, n \in \mathbb{N}_0$$

mit Parametern $0 < \varepsilon \ll 1$, $\delta > 0$ und $\kappa \geq 0$

Dispersion-managed NLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \partial_x^2 u(t, x) + i|u(t, x)|^2 u(t, x), \quad t \in [0, T], x \in \mathbb{R}$$

mit $u(0, \cdot) = u_0$

1-periodische, unstetige dispersion map:

$$d(t) = \chi(t) + \varepsilon \kappa, \quad \chi(t) = \begin{cases} \delta, & t \in [n, n + \frac{1}{2}) \\ -\delta, & t \in [n + \frac{1}{2}, n + 1) \end{cases}, n \in \mathbb{N}_0$$

mit Parametern $0 < \varepsilon \ll 1$, $\delta > 0$ und $\kappa \geq 0$

Starkes dispersion management: $\delta > \varepsilon \kappa$, z.B. $\delta = 1$

Dispersion-managed NLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \partial_x^2 u(t, x) + i|u(t, x)|^2 u(t, x), \quad t \in [0, T], \quad x \in \mathbb{R}$$

mit $u(0, \cdot) = u_0$

Unterschied zu M. Mikl!

1-periodische, unstetige dispersion map:

$$d(t) = \chi(t) + \varepsilon \kappa, \quad \chi(t) = \begin{cases} \delta, & t \in [n, n + \frac{1}{2}) \\ -\delta, & t \in [n + \frac{1}{2}, n + 1) \end{cases}, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

mit Parametern $0 < \varepsilon \ll 1$, $\delta > 0$ und $\kappa \geq 0$

Starkes dispersion management: $\delta > \varepsilon \kappa$, z.B. $\delta = 1$

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Ziel: Berechne numerische Approximation $u^n \approx u(t_n, \cdot)$ zu Zeitpunkten $t_n = n\tau$ mit Zeitschrittweite τ

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Ziel: Berechne numerische Approximation $u^n \approx u(t_n, \cdot)$ zu Zeitpunkten $t_n = n\tau$ mit Zeitschrittweite τ

Herausforderung:

- Hochoszillatorisches Problem

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Ziel: Berechne numerische Approximation $u^n \approx u(t_n, \cdot)$ zu Zeitpunkten $t_n = n\tau$ mit Zeitschrittweite τ

Herausforderung:

- Hochoszillatorisches Problem
- Unstetige *dispersion map*

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Ziel: Berechne numerische Approximation $u^n \approx u(t_n, \cdot)$ zu Zeitpunkten $t_n = n\tau$ mit Zeitschrittweite τ

Herausforderung:

- Hochoszillatorisches Problem
- Unstetige *dispersion map*
- Nichtlinearität

Beispiel: Strang-Splitting

Betrachte als Zeitintegrator ein "Standardverfahren" für die klassische NLS

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Betrachte als Zeitintegrator ein "Standardverfahren" für die klassische NLS

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Idee:

- Splitte die rechte Seite in Teilprobleme

$$\partial_t v(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 v(t, x), \quad (\text{S1})$$

$$\partial_t w(t, x) = i |w(t, x)|^2 w(t, x) \quad (\text{S2})$$

Betrachte die Teilprobleme:

- (S1) kann exakt gelöst werden:

$$v(t, \cdot) = \exp \left(\frac{i}{\varepsilon} \int_0^t d \left(\frac{\sigma}{\varepsilon} \right) d\sigma \partial_x^2 \right) v(0, \cdot)$$

- (S2) kann auch exakt gelöst werden, da $|w(t, \cdot)|^2$ zeitlich konstant:

$$w(t, \cdot) = \exp(it|w(0, \cdot)|^2) w(0, \cdot)$$

Strang-Splitting

Betrachte die Teilprobleme:

- (S1) kann exakt gelöst werden:

$$v(t, \cdot) = \exp \left(\frac{i}{\varepsilon} \int_0^t d \left(\frac{\sigma}{\varepsilon} \right) d\sigma \partial_x^2 \right) v(0, \cdot)$$

- (S2) kann auch exakt gelöst werden, da $|w(t, \cdot)|^2$ zeitlich konstant:

$$w(t, \cdot) = \exp(it|w(0, \cdot)|^2) w(0, \cdot)$$

Strang-Splitting:

$$u^{n+1,-} = \exp \left(i \frac{\tau}{2} |u^n|^2 \right) u^n,$$

mit Startwert $u^0 = u(0, \cdot)$

Betrachte die Teilprobleme:

- (S1) kann exakt gelöst werden:

$$v(t, \cdot) = \exp \left(\frac{i}{\varepsilon} \int_0^t d \left(\frac{\sigma}{\varepsilon} \right) d\sigma \partial_x^2 \right) v(0, \cdot)$$

- (S2) kann auch exakt gelöst werden, da $|w(t, \cdot)|^2$ zeitlich konstant:

$$w(t, \cdot) = \exp(it|w(0, \cdot)|^2) w(0, \cdot)$$

Strang-Splitting:

$$u^{n+1,-} = \exp \left(i \frac{\tau}{2} |u^n|^2 \right) u^n,$$

$$u^{n+1,+} = \exp \left(\frac{i}{\varepsilon} \int_{t_n}^{t_n+\tau} d \left(\frac{\sigma}{\varepsilon} \right) d\sigma \partial_x^2 \right) u^{n+1,-},$$

mit Startwert $u^0 = u(0, \cdot)$

Strang-Splitting

Betrachte die Teilprobleme:

- (S1) kann exakt gelöst werden:

$$v(t, \cdot) = \exp \left(\frac{i}{\varepsilon} \int_0^t d \left(\frac{\sigma}{\varepsilon} \right) d\sigma \partial_x^2 \right) v(0, \cdot)$$

- (S2) kann auch exakt gelöst werden, da $|w(t, \cdot)|^2$ zeitlich konstant:

$$w(t, \cdot) = \exp(it|w(0, \cdot)|^2) w(0, \cdot)$$

Strang-Splitting:

$$u^{n+1,-} = \exp \left(i \frac{\tau}{2} |u^n|^2 \right) u^n,$$

$$u^{n+1,+} = \exp \left(\frac{i}{\varepsilon} \int_{t_n}^{t_n+\tau} d \left(\frac{\sigma}{\varepsilon} \right) d\sigma \partial_x^2 \right) u^{n+1,-},$$

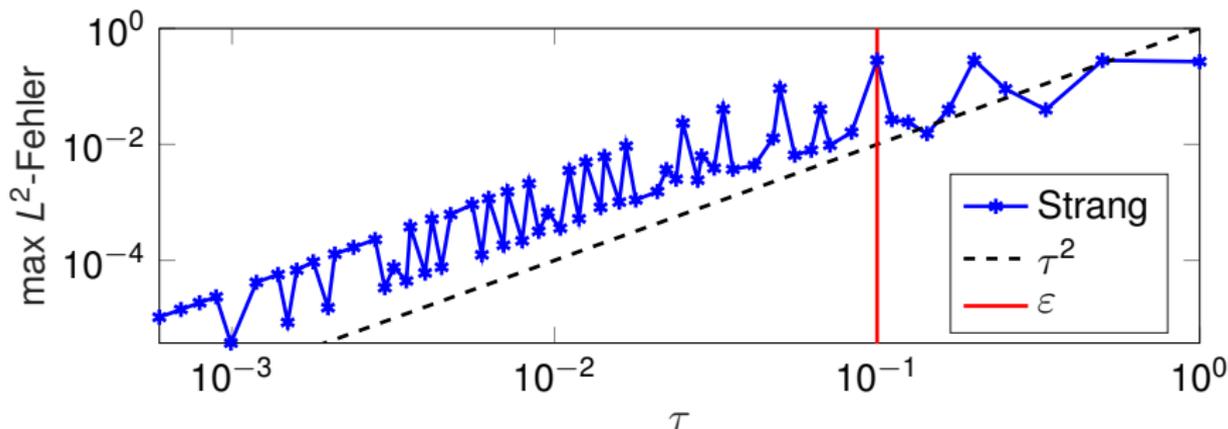
$$u^{n+1} = \exp \left(i \frac{\tau}{2} |u^{n+1,+}|^2 \right) u^{n+1,+},$$

mit Startwert $u^0 = u(0, \cdot)$

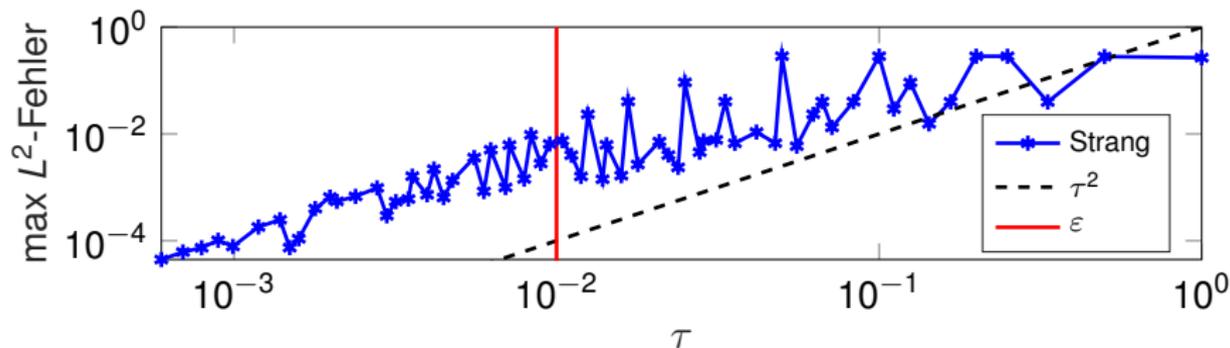
- **Ortsdiskretisierung:** Finite-Differenzen-Methode mit Gitterweite h und homogenen Dirichlet-RB
- **Startwert:** komplexer Gauß-Peak

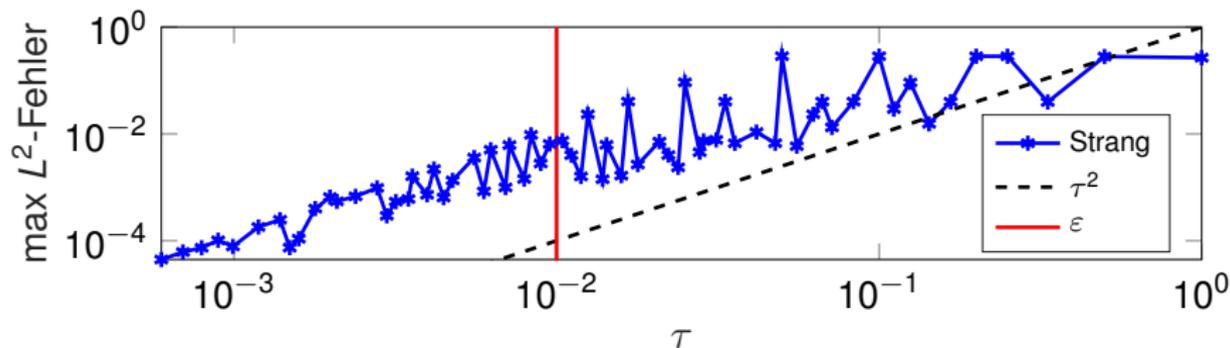
- **Ortsdiskretisierung:** Finite-Differenzen-Methode mit Gitterweite h und homogenen Dirichlet-RB
- **Startwert:** komplexer Gauß-Peak

Strang-Splitting für $T = 1$, $\kappa = 0.1$, $\delta = 1$, $h = 10^{-2}$, $\varepsilon = 0.1$



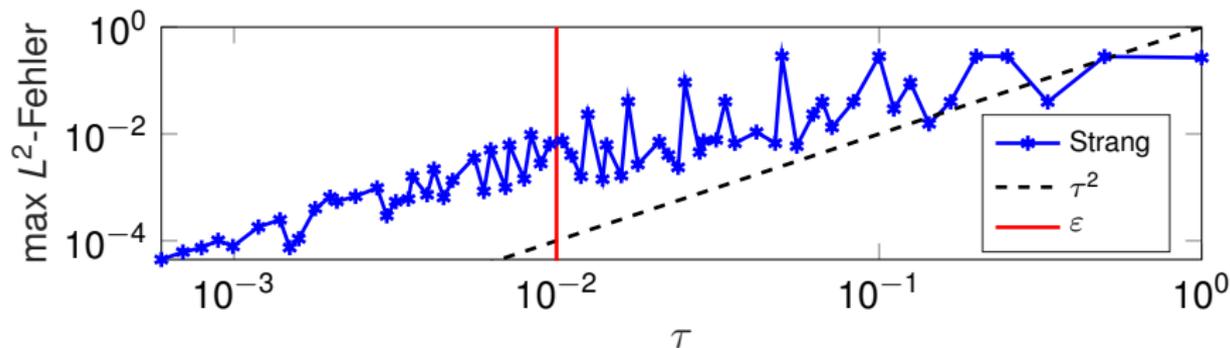
Numerisches Beispiel





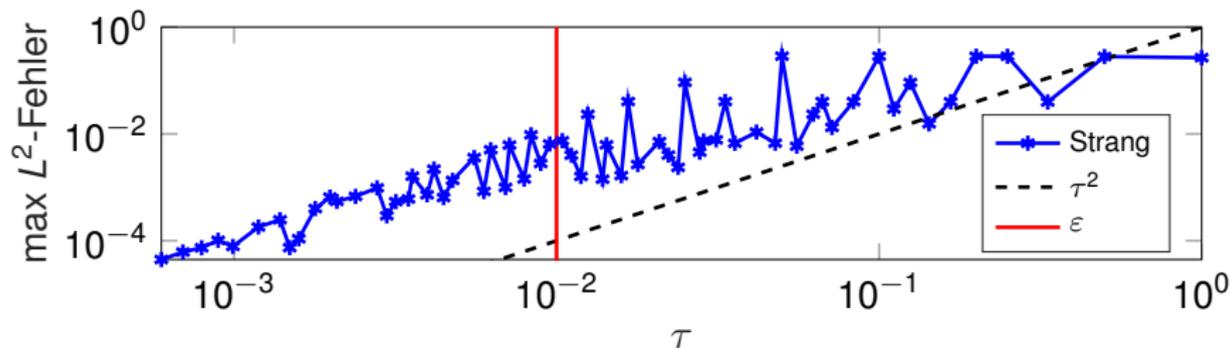
Probleme:

- Abschneiden des Gebiets



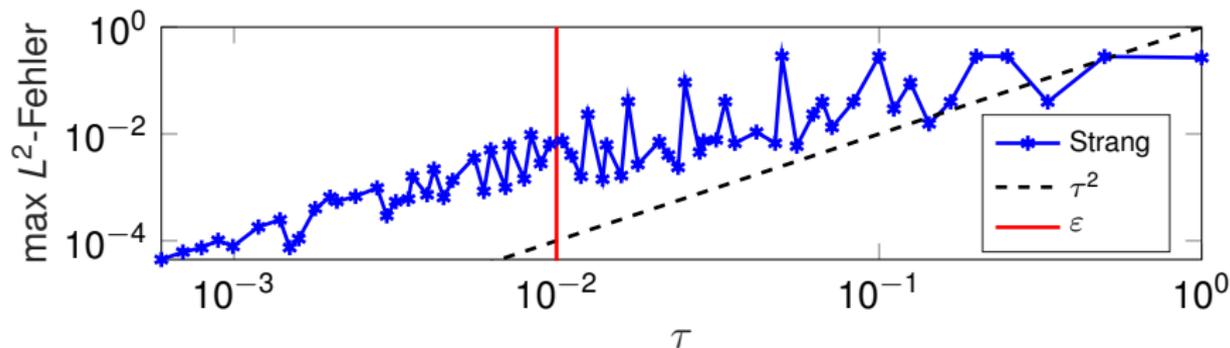
Probleme:

- Abschneiden des Gebiets
- Konvergenz erst für $\tau \leq \epsilon \ll 1$



Probleme:

- Abschneiden des Gebiets
- Konvergenz erst für $\tau \leq \epsilon \ll 1$
- Hoher Rechenaufwand



Probleme:

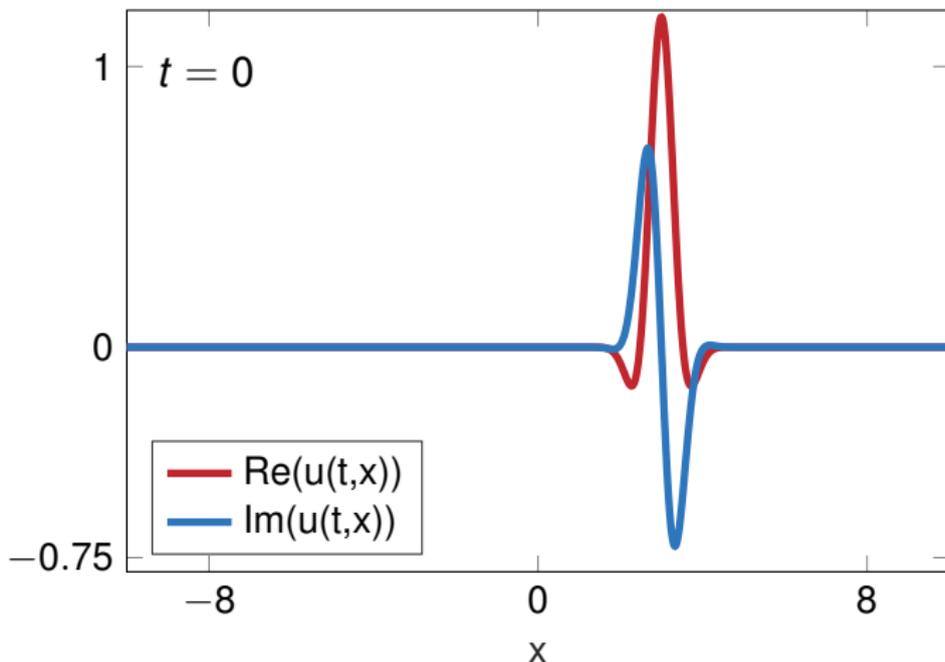
- Abschneiden des Gebiets
- Konvergenz erst für $\tau \leq \epsilon \ll 1$
- Hoher Rechenaufwand

Ziel: Konstruktion eines effizienteren Verfahrens

- 1 Motivation
- 2 Analytischer Kontext**
- 3 Ortsdiskretisierung
- 4 Aktueller Stand

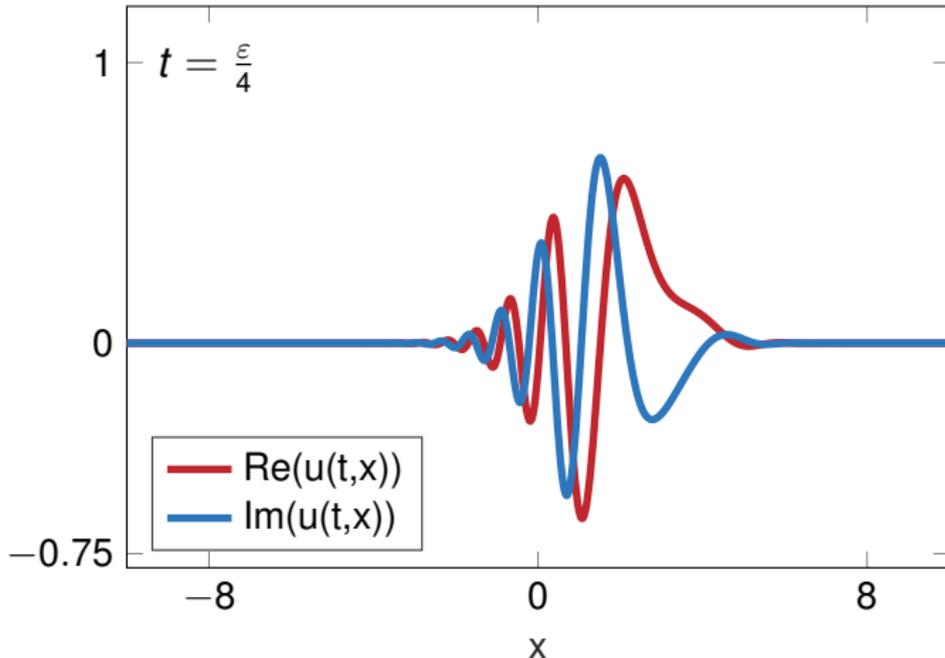
Referenzlösung • Strang-Splitting

- $u_0(x) = u(0, x)$ komplexer Gauß-Peak
- $\varepsilon = 0.01, \kappa = 0.1, \delta = 1, \tau \approx 10^{-5}$



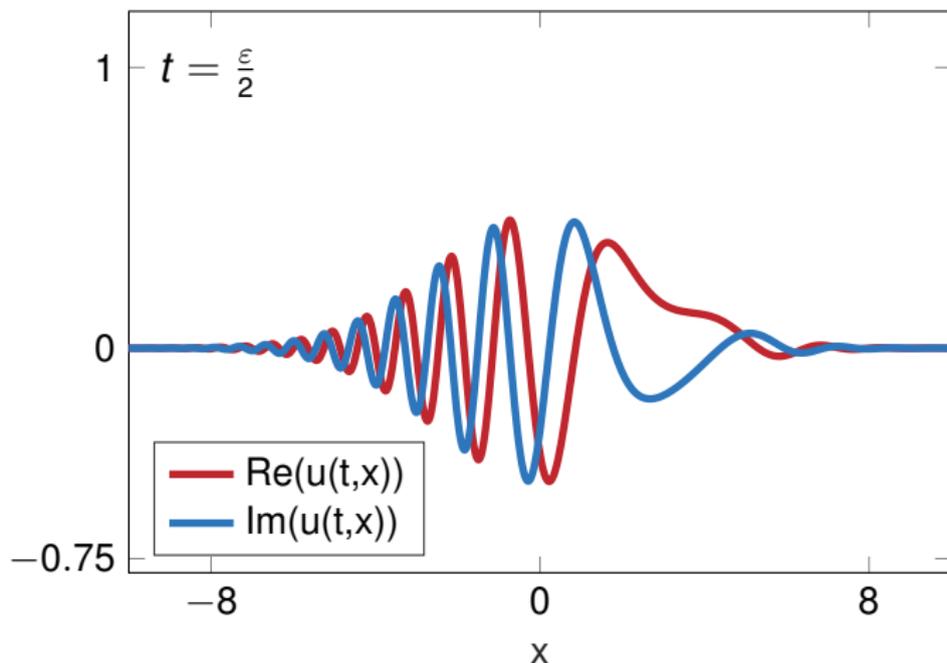
Referenzlösung • Strang-Splitting

- $u_0(x) = u(0, x)$ komplexer Gauß-Peak
- $\varepsilon = 0.01, \kappa = 0.1, \delta = 1, \tau \approx 10^{-5}$



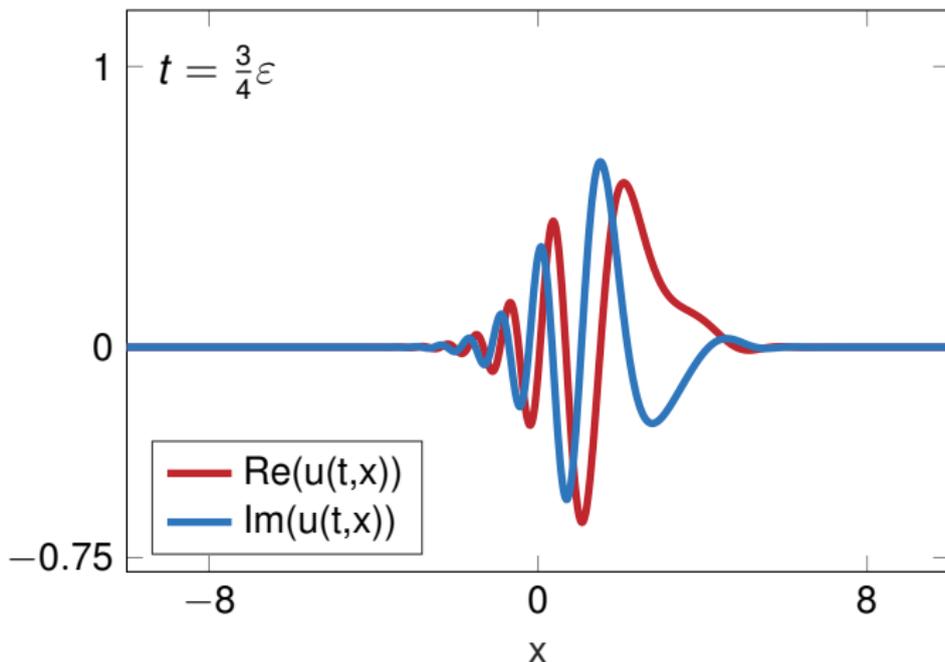
Referenzlösung • Strang-Splitting

- $u_0(x) = u(0, x)$ komplexer Gauß-Peak
- $\varepsilon = 0.01, \kappa = 0.1, \delta = 1, \tau \approx 10^{-5}$



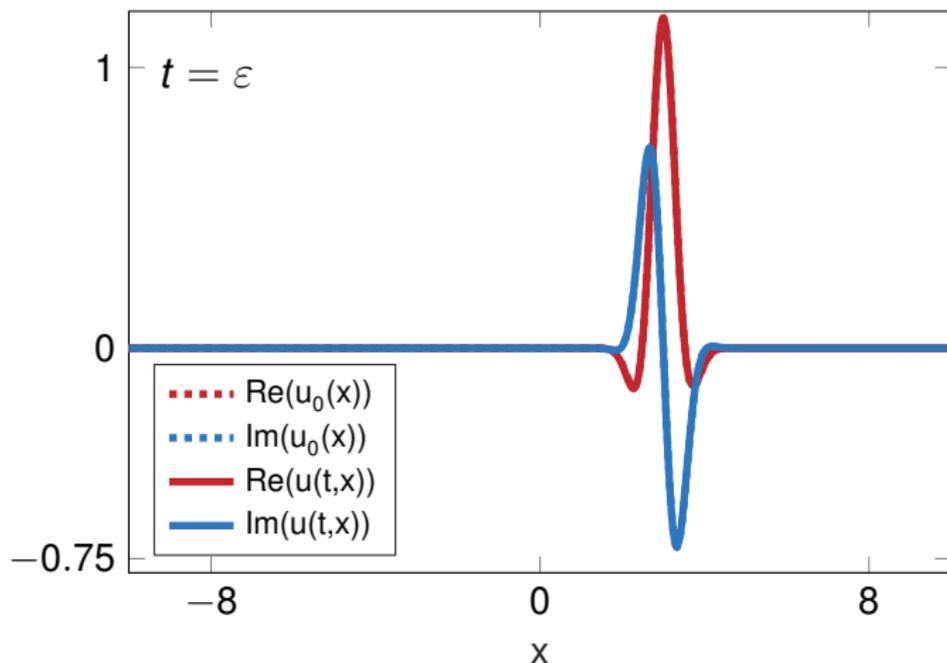
Referenzlösung • Strang-Splitting

- $u_0(x) = u(0, x)$ komplexer Gauß-Peak
- $\varepsilon = 0.01, \kappa = 0.1, \delta = 1, \tau \approx 10^{-5}$



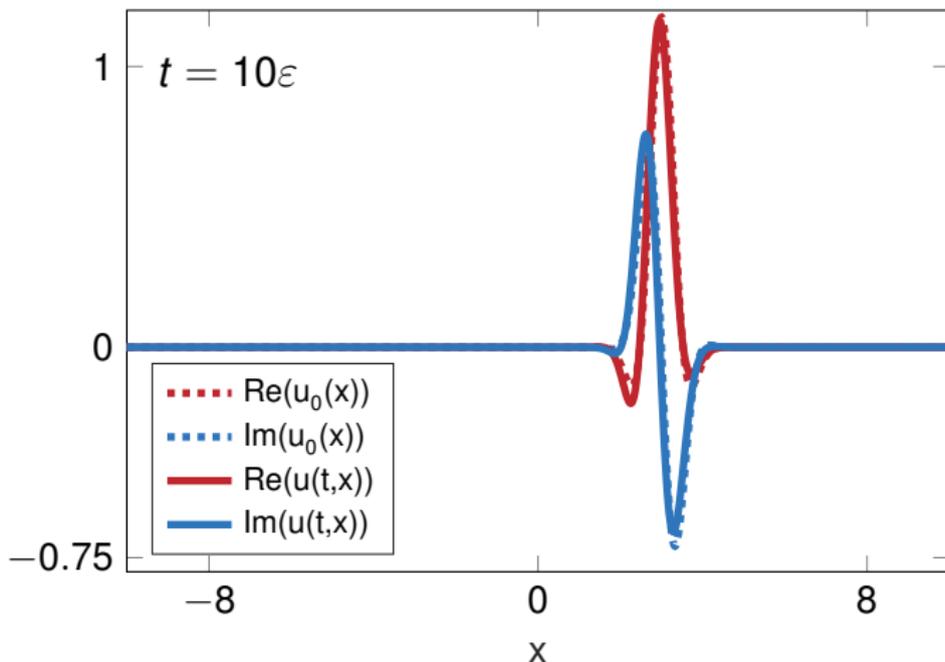
Referenzlösung • Strang-Splitting

- $u_0(x) = u(0, x)$ komplexer Gauß-Peak
- $\varepsilon = 0.01, \kappa = 0.1, \delta = 1, \tau \approx 10^{-5}$



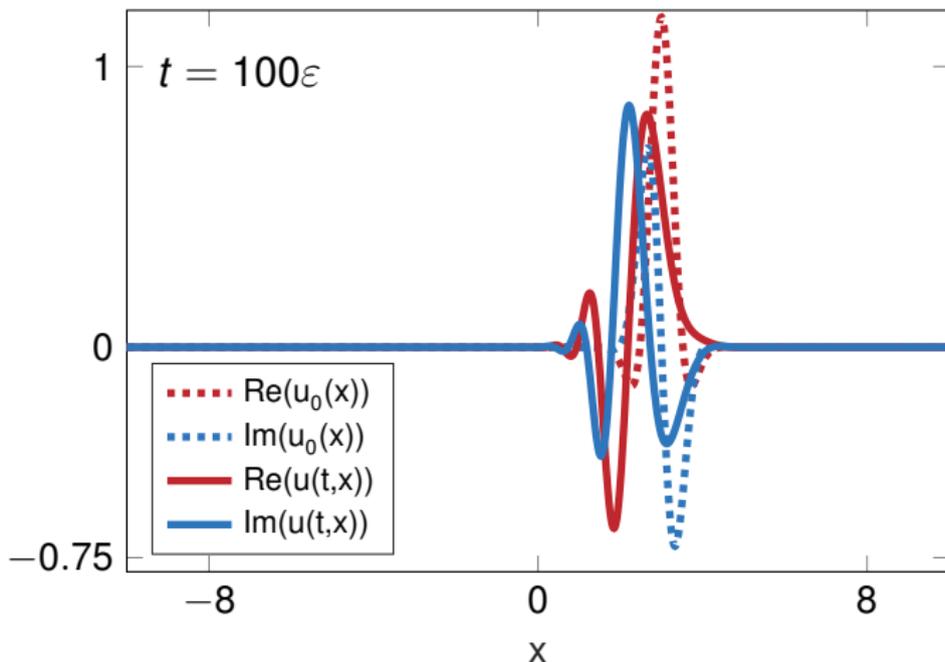
Referenzlösung • Strang-Splitting

- $u_0(x) = u(0, x)$ komplexer Gauß-Peak
- $\varepsilon = 0.01, \kappa = 0.1, \delta = 1, \tau \approx 10^{-5}$



Referenzlösung • Strang-Splitting

- $u_0(x) = u(0, x)$ komplexer Gauß-Peak
- $\varepsilon = 0.01$, $\kappa = 0.1$, $\delta = 1$, $\tau \approx 10^{-5}$



komplexer Gauß-Peak²:

$$g(\gamma(t), x) = \left(\frac{2b_2(t)}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(i \left(b(t)(x - q(t))^2 + p(t)(x - q(t)) + z(t) \right) \right),$$

²Heller (1975)

komplexer Gauß-Peak²:

$$g(\gamma(t), x) = \left(\frac{2b_2(t)}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp(i(b(t)(x - q(t))^2 + p(t)(x - q(t)) + z(t))),$$

wobei

- $q(t) \in \mathbb{R}$ Ortsparameter,
- $p(t) \in \mathbb{R}$ Impulsparameter,
- $z(t) \in \mathbb{R}$ Phasenparameter,
- $b(t) \in \mathbb{C}$ Breitenparameter mit $b(t) = b_1(t) + ib_2(t)$, $b_2(t) > 0$,
- $\gamma(t) := (q(t), p(t), b(t), z(t))$

²Heller (1975)

Entwicklung³:

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \psi_j(t, x),$$

wobei

$$\psi_j(t, x) = g(\gamma(t), x) \rho_j(\gamma(t), x)$$

³Billing (1999)

Entwicklung³:

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \psi_j(t, x),$$

wobei

$$\psi_j(t, x) = g(\gamma(t), x) \rho_j(\gamma(t), x)$$

Erinnerung: $\gamma(t) = (q(t), p(t), b(t), z(t))$

Forderung: ρ_j reelles Orthogonalpolynom vom Grad j

³Billing (1999)

Entwicklung³:

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \psi_j(t, x),$$

wobei

$$\psi_j(t, x) = g(\gamma(t), x) \rho_j(\gamma(t), x)$$

Gauß-Teil:

$$g(\gamma(t), x) = \left(\frac{2b_2(t)}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp(i(b(t)(x - q(t))^2 + p(t)(x - q(t)) + z(t)))$$

³Billing (1999)

Entwicklung³:

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \psi_j(t, x),$$

wobei

$$\psi_j(t, x) = g(\gamma(t), x) \rho_j(\gamma(t), x)$$

Hermite-Teil:

$$\rho_j(\gamma(t), x) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!}} H_j \left(\sqrt{2b_2(t)}(x - q(t)) \right),$$

wobei H_j das Hermite-Polynom von Ordnung j beschreibt

³Billing (1999)

$$g(\gamma(t), x) = \left(\frac{2b_2(t)}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp(i(b(t)(x - q(t))^2 + p(t)(x - q(t)) + z(t)),$$
$$\rho_j(\gamma(t), x) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!}} H_j(\sqrt{2b_2(t)}(x - q(t)))$$

$$g(\gamma(t), x) = \left(\frac{2b_2(t)}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(i \left(b(t)(x - q(t))^2 + p(t)(x - q(t)) + z(t) \right) \right),$$
$$\rho_j(\gamma(t), x) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!}} H_j \left(\sqrt{2b_2(t)}(x - q(t)) \right)$$

GH Basisfunktionen: Mit $y(t) := \sqrt{2b_2(t)}(x - q(t))$ gilt

$$\psi_j(t, x) = (2b_2(t))^{\frac{1}{4}} \exp \left(i \left(b_1(t)(x - q(t))^2 + p(t)(x - q(t)) + z(t) \right) \right) \varphi_j(y(t)),$$

$$g(\gamma(t), x) = \left(\frac{2b_2(t)}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp(i(b(t)(x - q(t))^2 + p(t)(x - q(t)) + z(t))),$$
$$\rho_j(\gamma(t), x) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!}} H_j \left(\sqrt{2b_2(t)}(x - q(t)) \right)$$

GH Basisfunktionen: Mit $y(t) := \sqrt{2b_2(t)}(x - q(t))$ gilt

$$\psi_j(t, x) = (2b_2(t))^{\frac{1}{4}} \exp(i(b_1(t)(x - q(t))^2 + p(t)(x - q(t)) + z(t))) \varphi_j(y(t)),$$

wobei die j te Hermite-Funktion φ_j gegeben ist durch

$$\varphi_j(y(t)) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{y(t)^2}{2}\right) H_j(y(t))$$

Eigenschaften der ψ_j :

- Bilden eine vollständige Orthonormalbasis (ONB) des $L^2(\mathbb{R})$

Eigenschaften der ψ_j :

- Bilden eine vollständige Orthonormalbasis (ONB) des $L^2(\mathbb{R})$
- Erfüllen mit $\psi_{-1}(t, x) = 0$ für $j \in \mathbb{N}_0$ die Drei-Term-Rekursion

$$\psi_{j+1}(t, x) = \sqrt{\frac{2}{j+1}} \sqrt{2b_2(t)}(x - q(t))\psi_j(t, x) - \sqrt{\frac{j}{j+1}}\psi_{j-1}(t, x)$$

Eigenschaften der ψ_j :

- Bilden eine vollständige Orthonormalbasis (ONB) des $L^2(\mathbb{R})$
- Erfüllen mit $\psi_{-1}(t, x) = 0$ für $j \in \mathbb{N}_0$ die Drei-Term-Rekursion

$$\psi_{j+1}(t, x) = \sqrt{\frac{2}{j+1}} \sqrt{2b_2(t)}(x - q(t))\psi_j(t, x) - \sqrt{\frac{j}{j+1}}\psi_{j-1}(t, x)$$

- Zeitabhängigkeit: Sind abhängig von den Gaußparametern $q(t)$, $\rho(t)$, $b(t)$ und $z(t)$

Eigenschaften der ψ_j :

- Bilden eine vollständige Orthonormalbasis (ONB) des $L^2(\mathbb{R})$
- Erfüllen mit $\psi_{-1}(t, x) = 0$ für $j \in \mathbb{N}_0$ die Drei-Term-Rekursion

$$\psi_{j+1}(t, x) = \sqrt{\frac{2}{j+1}} \sqrt{2b_2(t)}(x - q(t))\psi_j(t, x) - \sqrt{\frac{j}{j+1}}\psi_{j-1}(t, x)$$

- Zeitabhängigkeit: Sind abhängig von den Gaußparametern $q(t)$, $\rho(t)$, $b(t)$ und $z(t)$
- Sind zentriert um den Ortsparameter $q(t)$

Eigenschaften der ψ_j :

- Bilden eine vollständige Orthonormalbasis (ONB) des $L^2(\mathbb{R})$
- Erfüllen mit $\psi_{-1}(t, x) = 0$ für $j \in \mathbb{N}_0$ die Drei-Term-Rekursion

$$\psi_{j+1}(t, x) = \sqrt{\frac{2}{j+1}} \sqrt{2b_2(t)(x - q(t))} \psi_j(t, x) - \sqrt{\frac{j}{j+1}} \psi_{j-1}(t, x)$$

- Zeitabhängigkeit: Sind abhängig von den Gaußparametern $q(t)$, $\rho(t)$, $b(t)$ und $z(t)$
- Sind zentriert um den Ortsparameter $q(t)$
- 0te Basisfunktion entspricht dem komplexen Gauß-Peak $g(\gamma(t), x)$

Linearer Teil der DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \partial_x^2 u(t, x), \quad t \in [0, T], \quad x \in \mathbb{R}, \quad u(0, \cdot) = u_0$$

Linearer Teil der DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x), \quad t \in [0, T], \quad x \in \mathbb{R}, \quad u(0, \cdot) = u_0$$

- Einsetzen der Entwicklung

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \psi_j(t, x)$$

liefert

$$\sum_{j=0}^{\infty} \dot{a}_j(t) \psi_j(t, x) + \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \nabla_{\gamma} \psi_j(t, x) \dot{\gamma} = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \partial_x^2 \psi_j(t, x)$$

$$\begin{aligned}
 & \sum_{j=0}^{\infty} \dot{a}_j(t) \psi_j(t, x) + \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \left[\left(i(x-q)^2 \dot{b}_1 - (x-q)^2 \dot{b}_2 \right. \right. \\
 & \quad + i(x-q) [\dot{p} - 2b_1 \dot{q}] + (x-q) 2b_2 \dot{q} \\
 & \quad \left. \left. + i[\dot{z} - p\dot{q}] + \frac{1}{4} \frac{\dot{b}_2}{b_2} \right) \psi_j(t, x) + 2\sqrt{j}\sqrt{b_2} \left((x-q) \frac{\dot{b}_2}{2b_2} - \dot{q} \right) \psi_{j-1}(t, x) \right] \\
 &= \frac{1}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \left[\left(i(x-q)^2 4(b_2^2 - b_1^2) + (x-q)^2 (8b_1 b_2) \right. \right. \\
 & \quad + i(x-q)(-4b_1 p) + (x-q)(4b_2 p) - i[p^2 + 2b_2(2j+1)] \\
 & \quad \left. \left. - 2b_1 \right) \psi_j(t, x) + 2\sqrt{j}\sqrt{b_2} \left((x-q)(-4b_1) - 2p \right) \psi_{j-1}(t, x) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \sum_{j=0}^{\infty} \dot{a}_j(t) \psi_j(t, x) + \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \left[\left(i(x-q)^2 \dot{b}_1 - (x-q)^2 \dot{b}_2 \right. \right. \\
 & \quad + i(x-q) [\dot{p} - 2b_1 \dot{q}] + (x-q) 2b_2 \dot{q} \\
 & \quad \left. \left. + i[\dot{z} - p\dot{q}] + \frac{1}{4} \frac{\dot{b}_2}{b_2} \right) \psi_j(t, x) + 2\sqrt{j}\sqrt{b_2} \left((x-q) \frac{\dot{b}_2}{2b_2} - \dot{q} \right) \psi_{j-1}(t, x) \right] \\
 &= \frac{1}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \left[\left(i(x-q)^2 4(b_2^2 - b_1^2) + (x-q)^2 (8b_1 b_2) \right. \right. \\
 & \quad + i(x-q)(-4b_1 p) + (x-q)(4b_2 p) - i[p^2 + 2b_2(2j+1)] \\
 & \quad \left. \left. - 2b_1 \right) \psi_j(t, x) + 2\sqrt{j}\sqrt{b_2} \left((x-q)(-4b_1) - 2p \right) \psi_{j-1}(t, x) \right]
 \end{aligned}$$

Bewegungsgleichungen:

$$\dot{q}(t) = 2\frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)p(t),$$

$$\dot{p}(t) = 0,$$

$$\dot{b}(t) = -4\frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)b(t)^2,$$

$$\dot{z}(t) = \frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)[p(t)^2 - 2b_2(t)],$$

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t)\frac{i}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)a_k(t).$$

Bewegungsgleichungen:

$$\dot{q}(t) = 2\frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)p(t),$$

$$\dot{p}(t) = 0,$$

$$\dot{b}(t) = -4\frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)b(t)^2,$$

$$\dot{z}(t) = \frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)[p(t)^2 - 2b_2(t)],$$

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t)\frac{i}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)a_k(t).$$

Die Lösungen dieser DGLen können explizit dargestellt werden.

Ansatz für das volle Problem

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Entwicklung:

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \psi_j(t, x)$$

Ansatz für das volle Problem

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Entwicklung:

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \psi_j(t, x)$$

Forderung: Die Parameter $\gamma(t)$ erfüllen Bewegungsgleichungen des linearen Teils

Ansatz für das volle Problem

DMNLS:

$$\partial_t u(t, x) = \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) \partial_x^2 u(t, x) + i |u(t, x)|^2 u(t, x)$$

Entwicklung:

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(t) \psi_j(t, x)$$

Forderung: Die Parameter $\gamma(t)$ erfüllen Bewegungsgleichungen des linearen Teils

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) a_k(t) + i \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle a_j(t),$$

wobei

$$\langle v, w \rangle := \int_{\mathbb{R}} \overline{v(x)} w(x) dx$$

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) a_k(t) + i \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle a_j(t)$$

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) a_k(t) + i \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle a_j(t)$$

- Führe unter obiger Forderung folgende Transformation ein:

$$\tilde{a}_k(t) = \exp(ik\alpha(t)) a_k(t), \quad \alpha(t) = \arctan\left(\frac{b_1(t)}{b_2(t)}\right)$$

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) a_k(t) + i \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle a_j(t)$$

- Führe unter obiger Forderung folgende Transformation ein:

$$\tilde{a}_k(t) = \exp(ik\alpha(t)) a_k(t), \quad \alpha(t) = \arctan\left(\frac{b_1(t)}{b_2(t)}\right)$$

- Dann gilt:

$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = k4b_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \tilde{a}_k(t) + \exp(ik\alpha(t)) \dot{a}_k(t)$$

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) a_k(t) + i \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle a_j(t)$$

- Führe unter obiger Forderung folgende Transformation ein:

$$\tilde{a}_k(t) = \exp(ik\alpha(t)) a_k(t), \quad \alpha(t) = \arctan\left(\frac{b_1(t)}{b_2(t)}\right)$$

- Dann gilt:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{a}}_k(t) &= k4b_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \tilde{a}_k(t) + \exp(ik\alpha(t)) \dot{a}_k(t) \\ &= i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t) \end{aligned}$$

Transformation:

$$\tilde{a}_k(t) = \exp(ik\alpha(t)) a_k(t), \quad \alpha(t) = \arctan\left(\frac{b_1(t)}{b_2(t)}\right)$$

Transformation:

$$\tilde{a}_k(t) = \exp(ik\alpha(t)) a_k(t), \quad \alpha(t) = \arctan\left(\frac{b_1(t)}{b_2(t)}\right)$$

Vergleich:

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) a_k(t) + i \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle a_j(t), \quad (\star)$$

$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t) \quad (\star\star)$$

Transformation:

$$\tilde{a}_k(t) = \exp(ik\alpha(t)) a_k(t), \quad \alpha(t) = \arctan\left(\frac{b_1(t)}{b_2(t)}\right)$$

Vergleich:

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) a_k(t) + i \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle a_j(t), \quad (*)$$

$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t) \quad (**)$$

Vorteile:

- RHS von (**) ist stetig, von (*) nicht

Transformation:

$$\tilde{a}_k(t) = \exp(ik\alpha(t)) a_k(t), \quad \alpha(t) = \arctan\left(\frac{b_1(t)}{b_2(t)}\right)$$

Vergleich:

$$\dot{a}_k(t) = -4kb_2(t) \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) a_k(t) + i \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle a_j(t), \quad (*)$$

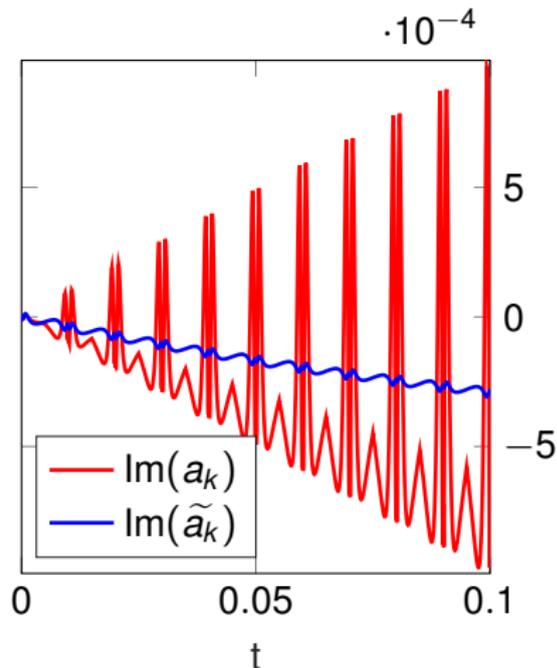
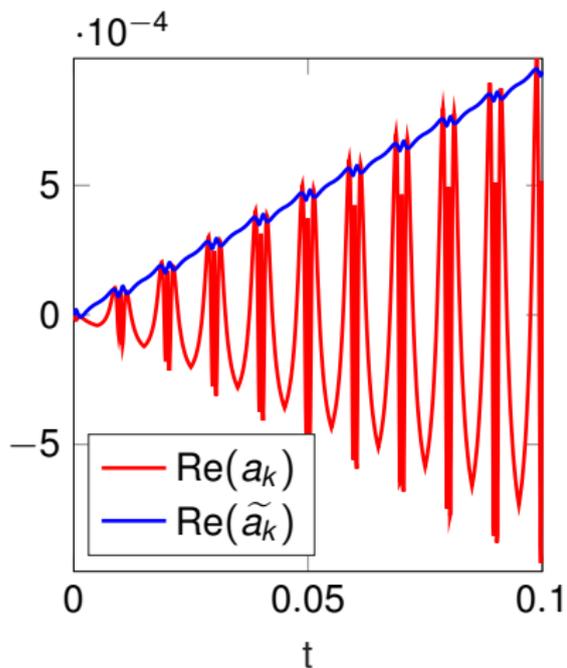
$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_k(t, \cdot), |u(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t) \quad (**)$$

Vorteile:

- RHS von (**) ist stetig, von (*) nicht
- (**) ist beschränkt für $\varepsilon \rightarrow 0$, (*) nicht

Illustration

Hier: $\varepsilon = 0.01$



- 1 Motivation
- 2 Analytischer Kontext
- 3 Ortsdiskretisierung**
- 4 Aktueller Stand

- Betrachte dynamischen Approximationsraum

$\mathcal{V}_K = \text{span}\{\psi_0, \dots, \psi_{K-1}\} \subset L^2(\mathbb{R})$, wobei $\psi_j = \psi_j(t, \cdot)$ und

$$u_K(t, \cdot) = \sum_{j=0}^{K-1} a_j(t) \psi_j(t, \cdot) \in \mathcal{V}_K$$

- Betrachte dynamischen Approximationsraum

$\mathcal{V}_K = \text{span}\{\psi_0, \dots, \psi_{K-1}\} \subset L^2(\mathbb{R})$, wobei $\psi_j = \psi_j(t, \cdot)$ und

$$u_K(t, \cdot) = \sum_{j=0}^{K-1} a_j(t) \psi_j(t, \cdot) \in \mathcal{V}_K$$

- Galerkin-Bedingung: $\forall \psi \in \mathcal{V}_K$

$$\left\langle \psi(t, \cdot), \partial_t u_K(t, \cdot) - \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \partial_x^2 u_K(t, \cdot) - i |u_K(t, \cdot)|^2 u_K(t, \cdot) \right\rangle \stackrel{!}{=} 0$$

- Betrachte dynamischen Approximationsraum

$\mathcal{V}_K = \text{span}\{\psi_0, \dots, \psi_{K-1}\} \subset L^2(\mathbb{R})$, wobei $\psi_j = \psi_j(t, \cdot)$ und

$$u_K(t, \cdot) = \sum_{j=0}^{K-1} a_j(t) \psi_j(t, \cdot) \in \mathcal{V}_K$$

- Galerkin-Bedingung: $\forall \psi \in \mathcal{V}_K$

$$\left\langle \psi(t, \cdot), \partial_t u_K(t, \cdot) - \frac{i}{\varepsilon} d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) \partial_x^2 u_K(t, \cdot) - i |u_K(t, \cdot)|^2 u_K(t, \cdot) \right\rangle \stackrel{!}{=} 0$$

- Erhalte folgende gekoppelte Gleichungen für die Koeffizienten

$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{K-1} \langle \psi_k(t, \cdot), |u_K(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t)$$

$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{K-1} \langle \psi_k(t, \cdot), |u_K(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t)$$

$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{K-1} \langle \psi_k(t, \cdot), |u_K(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t)$$

Idee: Berechne die Integrale mit einer Gauß-Hermite-Quadratur

$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{K-1} \langle \psi_k(t, \cdot), |u_K(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t)$$

Idee: Berechne die Integrale mit einer Gauß-Hermite-Quadratur

- Mit $y = \sqrt{2b_2(t)}(x - q(t))$ gilt

$$\langle \psi_k(t, \cdot), |u_K(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi}_k(x) |u_K(t, x)|^2 \psi_j(x) dx$$

$$\dot{\tilde{a}}_k(t) = i \exp(ik\alpha(t)) \sum_{j=0}^{K-1} \langle \psi_k(t, \cdot), |u_K(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle \exp(-ij\alpha(t)) \tilde{a}_j(t)$$

Idee: Berechne die Integrale mit einer Gauß-Hermite-Quadratur

- Mit $y = \sqrt{2b_2(t)}(x - q(t))$ gilt

$$\begin{aligned} \langle \psi_k(t, \cdot), |u_K(t, \cdot)|^2 \psi_j(t, \cdot) \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi}_k(x) |u_K(t, x)|^2 \psi_j(x) dx \\ &= \sqrt{2b_2(t)} \sum_{l,n=0}^{K-1} I_{k,l,n,j} a_l(t) \overline{a}_n(t), \end{aligned}$$

wobei

$$I_{k,l,n,j} := \int_{\mathbb{R}} \varphi_k(y) \varphi_l(y) \varphi_n(y) \varphi_j(y) dy$$

$$I_{k,l,n,j} = \int_{\mathbb{R}} \varphi_k(y) \varphi_l(y) \varphi_n(y) \varphi_j(y) dy,$$

$$\varphi_j(y) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) H_j(y)$$

$$I_{k,l,n,j} = \int_{\mathbb{R}} \varphi_k(y) \varphi_l(y) \varphi_n(y) \varphi_j(y) dy,$$

$$\varphi_j(y) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) H_j(y)$$

- Integrand hat die Form $f(y)e^{-2y^2}$, wobei $f \in \mathcal{P}_{4(K-1)}$

$$I_{k,l,n,j} = \int_{\mathbb{R}} \varphi_k(y) \varphi_l(y) \varphi_n(y) \varphi_j(y) dy,$$

$$\varphi_j(y) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) H_j(y)$$

- Integrand hat die Form $f(y)e^{-2y^2}$, wobei $f \in \mathcal{P}_{4(K-1)}$
- Quadraturformel ist exakt

$$\int_{\mathbb{R}} f(y) e^{-y^2} dy = \sum_{m=0}^{2K-2} f(y_m) \omega_m e^{-y_m^2},$$

$$I_{k,l,n,j} = \int_{\mathbb{R}} \varphi_k(y) \varphi_l(y) \varphi_n(y) \varphi_j(y) dy,$$

$$\varphi_j(y) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) H_j(y)$$

- Integrand hat die Form $f(y)e^{-2y^2}$, wobei $f \in \mathcal{P}_{4(K-1)}$
- Quadraturformel ist exakt

$$\int_{\mathbb{R}} f(y) e^{-y^2} dy = \sum_{m=0}^{2K-2} f(y_m) \omega_m e^{-y_m^2},$$

wobei y_0, \dots, y_{2K-2} die NS des Hermite-Polynoms H_{2K-1} sind

$$I_{k,l,n,j} = \int_{\mathbb{R}} \varphi_k(y) \varphi_l(y) \varphi_n(y) \varphi_j(y) dy,$$

$$\varphi_j(y) = \frac{1}{\sqrt{2^j j!} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) H_j(y)$$

- Integrand hat die Form $f(y)e^{-2y^2}$, wobei $f \in \mathcal{P}_{4(K-1)}$
- Quadraturformel ist exakt

$$\int_{\mathbb{R}} f(y)e^{-y^2} dy = \sum_{m=0}^{2K-2} f(y_m) \omega_m e^{-y_m^2},$$

wobei y_0, \dots, y_{2K-2} die NS des Hermite-Polynoms H_{2K-1} sind und

$$\omega_m = \frac{1}{(2K-1)\varphi_{2K-2}^2(y_m)}, \quad m = 0, \dots, 2K-2$$

$$\dot{\tilde{a}}(t) = i(b_2(t))^{\frac{1}{2}} \exp(i\alpha(t)\mathcal{K}) \mathcal{F}D(\tilde{a}(t)) \mathcal{F}^T \exp(-i\alpha(t)\mathcal{K}) \tilde{a}(t),$$

wobei

$$\tilde{a}(t) = (\tilde{a}_k(t))_{k=0,\dots,K-1} \in \mathbb{C}^K,$$

$$\dot{\tilde{a}}(t) = i(b_2(t))^{\frac{1}{2}} \exp(i\alpha(t)\mathcal{K}) \mathcal{F} D(\tilde{a}(t)) \mathcal{F}^T \exp(-i\alpha(t)\mathcal{K}) \tilde{a}(t),$$

wobei

$$\tilde{a}(t) = (\tilde{a}_k(t))_{k=0,\dots,K-1} \in \mathbb{C}^K,$$

$$D(\tilde{a}(t)) = \text{diag} \left(\omega_m |v_K \left(t, \frac{y_m}{\sqrt{2}} \right)|^2 \right),$$

$$v_K(t, y) = \sum_{j=0}^{K-1} a_j(t) \varphi_j(y),$$

$$\hat{\tilde{a}}(t) = i(b_2(t))^{\frac{1}{2}} \exp(i\alpha(t)\mathcal{K}) \mathcal{F} D(\tilde{a}(t)) \mathcal{F}^T \exp(-i\alpha(t)\mathcal{K}) \tilde{a}(t),$$

wobei

$$\tilde{a}(t) = (\tilde{a}_k(t))_{k=0,\dots,K-1} \in \mathbb{C}^K,$$

$$D(\tilde{a}(t)) = \text{diag} \left(\omega_m |v_K \left(t, \frac{y_m}{\sqrt{2}} \right)|^2 \right),$$

$$v_K(t, y) = \sum_{j=0}^{K-1} a_j(t) \varphi_j(y),$$

$$\mathcal{F} = \left(\varphi_j \left(\frac{y_m}{\sqrt{2}} \right) \right)_{\substack{j=0,\dots,K-1; \\ m=0,\dots,2k-2}} \in \mathbb{R}^{K \times 2K-1},$$

$$\hat{\tilde{a}}(t) = i(b_2(t))^{1/2} \exp(i\alpha(t)\mathcal{K}) \mathcal{F} D(\tilde{a}(t)) \mathcal{F}^T \exp(-i\alpha(t)\mathcal{K}) \tilde{a}(t),$$

wobei

$$\tilde{a}(t) = (\tilde{a}_k(t))_{k=0, \dots, K-1} \in \mathbb{C}^K,$$

$$D(\tilde{a}(t)) = \text{diag} \left(\omega_m |v_K \left(t, \frac{y_m}{\sqrt{2}} \right)|^2 \right),$$

$$v_K(t, y) = \sum_{j=0}^{K-1} a_j(t) \varphi_j(y),$$

$$\mathcal{F} = \left(\varphi_j \left(\frac{y_m}{\sqrt{2}} \right) \right)_{\substack{j=0, \dots, K-1; \\ m=0, \dots, 2K-2}} \in \mathbb{R}^{K \times 2K-1},$$

$$\mathcal{K} = \text{diag}(0, 1, \dots, K-1)$$

$$\tilde{\hat{a}}(t) = i(b_2(t))^{1/2} \exp(i\alpha(t)\mathcal{K}) \mathcal{F} D(\tilde{a}(t)) \mathcal{F}^T \exp(-i\alpha(t)\mathcal{K}) \tilde{a}(t),$$

wobei

$$\tilde{a}(t) = (\tilde{a}_k(t))_{k=0,\dots,K-1} \in \mathbb{C}^K,$$

$$D(\tilde{a}(t)) = \text{diag} \left(\omega_m |v_K \left(t, \frac{y_m}{\sqrt{2}} \right)|^2 \right),$$

$$v_K(t, y) = \sum_{j=0}^{K-1} a_j(t) \varphi_j(y),$$

$$\mathcal{F} = \left(\varphi_j \left(\frac{y_m}{\sqrt{2}} \right) \right)_{\substack{j=0,\dots,K-1; \\ m=0,\dots,2k-2}} \in \mathbb{R}^{K \times 2K-1},$$

Erinnerung:

$$\dot{b}(t) = -4 \frac{1}{\varepsilon} d \left(\frac{t}{\varepsilon} \right) b(t)^2$$

- 1 Motivation
- 2 Analytischer Kontext
- 3 Ortsdiskretisierung
- 4 **Aktueller Stand**

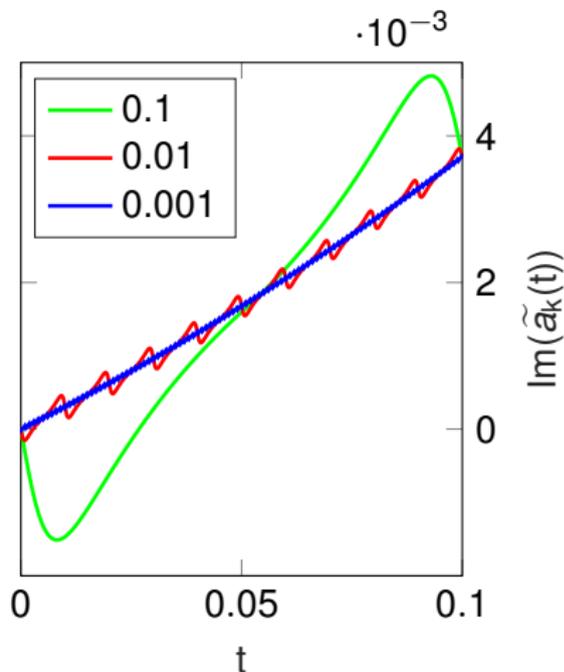
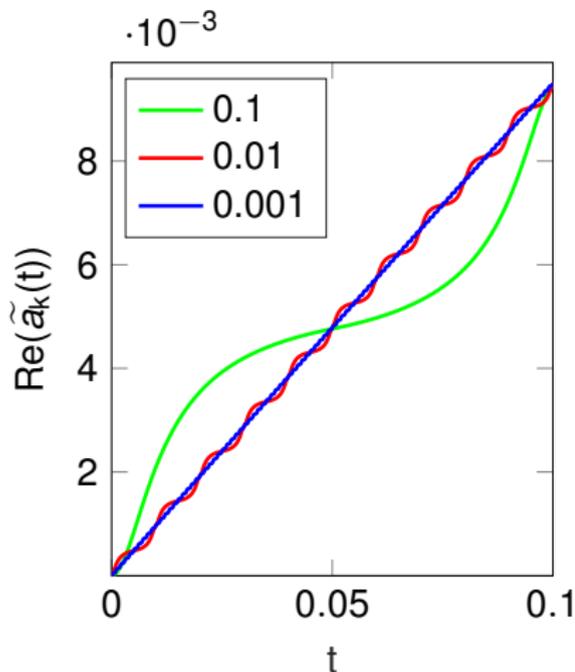
Offene Fragen I

Dynamik der Koeffizienten $\tilde{a}_k(t)$ für $\varepsilon \rightarrow 0$?

Offene Fragen I

Dynamik der Koeffizienten $\tilde{a}_k(t)$ für $\varepsilon \rightarrow 0$?

Hier: $\varepsilon_j = 10^{-j}$, $j = 1, 2, 3$



Andere Wahl für die Bewegungsgleichungen der Parameter?

Andere Wahl für die Bewegungsgleichungen der Parameter?

Bisher: "Linearer Teil", d.h.

$$\dot{q}(t) = 2\frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)p(t),$$

$$\dot{p}(t) = 0,$$

$$\dot{b}(t) = -4\frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)b(t)^2,$$

$$\dot{z}(t) = \frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)[p(t)^2 - 2b_2(t)]$$

Andere Wahl für die Bewegungsgleichungen der Parameter?

Idee: "Linearer Teil" + "quadratischer Anteil der Nichtlinearität", d.h.

$$\dot{q}(t) = 2\frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)p(t),$$

$$\dot{p}(t) = 0,$$

$$\dot{b}(t) = -4\frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)b(t)^2 + \alpha_1(t),$$

$$\dot{z}(t) = \frac{1}{\varepsilon}d\left(\frac{t}{\varepsilon}\right)[p(t)^2 - 2b_2(t)] + \alpha_0(t),$$

wobei $\alpha_1(t) \in \mathbb{C}$, $\alpha_0(t) \in \mathbb{R}$

Herausforderungen und Ziele:

- Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ verstehen

Herausforderungen und Ziele:

- Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ verstehen
- Konstruktion eines geeigneten Zeitintegrators

Herausforderungen und Ziele:

- Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ verstehen
- Konstruktion eines geeigneten Zeitintegrators
- Fehleranalyse voll-diskretes Verfahren

- 1 G. P. Agrawal: *Nonlinear fiber optics*, 4th edition, Amsterdam, Heidelberg: Elsevier Academic Press, 2007.
- 2 G. D. Billing: *Time-dependent quantum dynamics in a Gauss-Hermite basis*, J. Chem. Phys., 110(12): 5526-5537, 1999.
- 3 S. Blanes, F. Casas, J.A. Oteo, J. Ros: *The Magnus expansion and some of its applications*, Physics Reports, 470(5): 151-238, 2009.
- 4 E. J. Heller: *Time-dependent approach to semiclassical dynamics*, J. Chem. Phys., 62(4): 1544-1555, 1975
- 5 C. Lubich: *From quantum to classical molecular dynamics: reduced models and numerical analysis*, Zurich Lectures in Advanced Mathematics, Zürich : European Mathematical Society Publ. House, 2008.

Ansatz: Magnus-Integratoren⁴

Betrachte DGL der Form

$$\dot{Y}(t) = A(t)Y(t), \quad Y(0) = Y_0, \quad (1)$$

wobei $A(t)$ schief-hermitesch.

Idee von Magnus (1954): Bestimme $\Omega(t)$ so, dass

$$Y(t) = \exp(\Omega(t)) Y_0$$

die Gleichung (1) löst, wobei

$$\Omega(t) = \sum_{j=1}^{\infty} \Omega_j(t)$$

die **Magnus-Reihe** beschreibt. Der erste Term dieser Reihe ist gegeben durch

$$\Omega_1(t) = \int_0^t A(\sigma) d\sigma.$$

⁴siehe Blanes et al. (2009)

Numerische Methoden sind gegeben durch

$$Y_{n+1} = \exp(\tilde{\Omega}_n) Y_n, \quad Y_0 = Y(0), \quad \text{mit} \quad \tilde{\Omega}_n \approx \Omega(\tau).$$

Die Approximation beinhaltet:

- Abschneiden der Magnus-Reihe nach k Termen, z.B.

$$k = 1 : \quad \tilde{\Omega}(\tau) = \int_0^\tau A(t_n + \sigma) d\sigma$$

- Approximation der Integrale durch Quadraturformeln

- Halte $\tilde{a}(t)$ zu einem Zeitpunkt fest und wende die Idee von Magnus auf die DGL

$$\dot{\tilde{a}}(t) = \mathcal{A}(t, \tilde{a})\tilde{a}(t), \quad \tilde{a}(t_0) = \tilde{a}_0 \quad (2)$$

an, wobei

$$\mathcal{A}(t, \tilde{a}) := i(b_2(t))^{1/2} \exp(i\alpha(t)\mathcal{K}) \mathcal{F}D(\tilde{a})\mathcal{F}^T \exp(-i\alpha(t)\mathcal{K})$$

- Schneide die Magnus-Reihe nach dem ersten Term ab und definiere für feste n und τ

$$\mathcal{E}_n(\tau, w) := \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{A}(\sigma, w) d\sigma,$$
$$\mathcal{M}_n(\tau, w) := \frac{1}{2\tau} \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} \mathcal{A}(\sigma, w) d\sigma$$

- Approximation der Integrale z.B. durch Quadraturformel, liefert

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{E}}_n(\tau, \mathbf{w}) &\approx \mathcal{E}_n(\tau, \mathbf{w}), \\ \tilde{\mathcal{M}}_n(\tau, \mathbf{w}) &\approx \mathcal{M}_n(\tau, \mathbf{w})\end{aligned}$$

- Erhalte Approximationen an (2) durch

$$\tilde{\mathbf{a}}^{n+1} = \exp\left(\tau \tilde{\mathcal{E}}_n(\tau, \tilde{\mathbf{a}}^n)\right) \tilde{\mathbf{a}}^n$$

oder durch

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{a}}^{n+1} &= \exp\left(2\tau \tilde{\mathcal{M}}_n(\tau, \tilde{\mathbf{a}}^n)\right) \tilde{\mathbf{a}}^{n-1}, \\ \tilde{\mathbf{a}}^1 &= \exp\left(\tau \tilde{\mathcal{E}}_0(\tau, \tilde{\mathbf{a}}^0)\right) \tilde{\mathbf{a}}^0\end{aligned}$$