

基于守恒量诊断的非线性薛定谔方程孤子传播与谱方法研究

安 吉

贵州大学大数据与信息工程学院, 贵州 贵阳

收稿日期: 2026年8月2日; 录用日期: 2026年8月26日; 发布日期: 2026年9月2日

摘 要

非线性薛定谔方程是数学物理中描述色散、非线性自聚焦和孤子传播的重要模型, 如何在有限计算区域内稳定再现孤子形态并保持基本守恒量, 是开展非线性波数值研究的关键问题。本文以一维聚焦型三次非线性薛定谔方程为对象, 构造解析亮孤子解作为可验证基准, 采用傅里叶谱离散处理空间二阶导数, 并用Strang分步格式分离线性色散算子与非线性相位算子; 同时引入质量、哈密顿量、相对 L_2 误差和末时刻振幅相关系数作为守恒量诊断与精度评价指标。数值结果表明, 在周期边界与足够宽计算区间下, 孤子在传播过程中保持明显的局域结构, 时空密度图未出现可见弥散破坏; 质量最大相对误差约为 $9.137\text{e}-14$, 哈密顿量最大相对误差约为 $1.637\text{e}-11$, 末时刻相对 L_2 误差约为 $6.814\text{e}-06$, 振幅散点基本贴近理想对角线。进一步的时间步长和空间网格收敛性实验表明, 该方法在时间方向呈现接近二阶的收敛特征, 空间方向表现出谱方法对光滑孤子解的快速收敛优势; 双孤子碰撞算例也表明, 所提出的守恒量诊断框架能够用于更复杂的非线性相互作用过程。基于守恒量诊断的傅里叶谱分步方法能够有效刻画非线性薛定谔孤子的长期传播特征, 可为非线性波、量子流体和光学孤子等数学物理问题提供可复现的计算框架。

关键词

数学物理, 非线性薛定谔方程, 傅里叶谱方法, 孤子传播, 守恒量诊断

Spectral Analysis of Soliton Propagation in the Nonlinear Schrödinger Equation Based on Conservation Diagnostics

Ji An

School of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang Guizhou

Received: August 2, 2026; accepted: August 26, 2026; published: September 2, 2026

文章引用: 安吉. 基于守恒量诊断的非线性薛定谔方程孤子传播与谱方法研究[J]. 现代物理, 2026, 16(5): 134-145.

DOI: 10.12677/mp.2026.165015

Abstract

The nonlinear Schrödinger equation is a fundamental mathematical-physics model for dispersion, nonlinear self-focusing and soliton propagation. A stable numerical description of soliton motion requires not only small pointwise errors but also reliable conservation diagnostics. Taking the one-dimensional focusing cubic nonlinear Schrödinger equation as the model problem, this study constructs a bright-soliton benchmark solution, discretizes the spatial derivative by a Fourier spectral method, and advances the solution by a Strang split-step scheme that separates the linear dispersive operator from the nonlinear phase operator. The mass, Hamiltonian, relative L_2 error and final-time amplitude correlation coefficient are used as diagnostic indicators. The numerical density map shows that the localized soliton structure is preserved during propagation. The maximum relative mass error is about $9.137\text{e-}14$, the maximum relative Hamiltonian error is about $1.637\text{e-}11$, and the final-time relative L_2 error is about $6.814\text{e-}06$. The final-time amplitude scatter is almost aligned with the ideal diagonal. Further convergence tests with respect to the time step and spatial grid resolution show that the method exhibits nearly second-order accuracy in time and rapid spectral convergence for the smooth soliton solution. In addition, a two-soliton collision test demonstrates that the proposed conservation-diagnostic framework can also be extended to more complex nonlinear interaction scenarios. The conservation-diagnostic Fourier split-step framework provides a reproducible and physically interpretable tool for nonlinear wave problems in mathematical physics.

Keywords

Mathematical Physics, Nonlinear Schrödinger Equation, Fourier Spectral Method, Soliton Propagation, Conservation Diagnostics

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

数学物理的一个核心任务，是在严格方程、解析结构和可计算算法之间建立稳定联系。许多现代物理系统并不表现为简单线性叠加，而是同时受到色散、非线性相互作用和边界条件的制约。典型例子包括非线性光纤中的脉冲传播、浅水波中的包络演化、等离子体波包调制以及低维量子流体中的集体激发。对于这类问题，研究者既关心方程是否具有孤子、守恒律和哈密顿结构，也关心离散算法能否在有限网格上长期保持这些结构。因此，将非线性偏微分方程、谱离散方法和守恒量诊断结合起来，是数学物理计算研究中具有实际意义的方向。

非线性薛定谔方程(nonlinear Schrödinger equation, NLS)是描述弱非线性、弱色散波包演化的代表性模型。Zakharov 和 Shabat 关于自聚焦与自调制波的研究奠定了 NLS 孤子理论的重要基础，说明特定非线性系统中可以出现形态稳定、碰撞后仍保持结构的孤立波解[1]。从数学上看，NLS 不仅是一个具体物理模型，而且是连接哈密顿系统、可积理论、谱问题和调制稳定性分析的重要桥梁。

孤子问题的特殊价值在于，它为数值算法提供了较严格的检验标准。一般的非线性演化方程很难获得解析解，误差只能通过网格收敛或与高精度参考解比较间接判断；而聚焦型 NLS 具有明确的亮孤子解析解，可以同时检验波形、相位、传播速度和守恒量。逆散射变换理论表明，一类非线性波方程可通过

谱数据演化获得孤子解, 这使“谱”不仅是数值离散工具, 也具有明确的数学物理内涵[2]。

在实际计算中, 有限差分、有限元和谱方法都可用于 NLS 离散。有限差分形式直观、实现简单, 但在高光滑周期问题上可能需要较密网格才能获得高精度; 有限元适合复杂区域与边界, 但对周期光滑孤子并非最经济选择; 傅里叶谱方法则能够在周期区间内用全局基函数逼近空间导数, 若解足够光滑, 通常表现出较快收敛。另一方面, 非线性薛定谔方程具有质量、动量、哈密顿量等守恒量, 如果算法只追求短时点值误差而忽略守恒结构, 则可能在长时间演化中出现相位漂移、伪耗散或伪增益。

基于上述考虑, 本文提出一个适合正式复现实验的研究题目: 基于守恒量诊断的非线性薛定谔方程孤子传播与谱方法研究。本文主要贡献包括: 第一, 建立亮孤子解析解与数值解之间的直接比较; 第二, 用质量和哈密顿量相对误差判断算法是否保持物理结构; 第三, 用时空密度图、守恒量曲线和末时刻振幅散点图展示孤子传播与重构精度。

2. 数学物理模型与守恒结构

2.1. 一维聚焦型非线性薛定谔方程

本文研究的一维聚焦型三次非线性薛定谔方程写为:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + |\psi|^2 \psi = 0, \quad x \in \Omega, \quad t \geq 0 \quad (1)$$

其中 $\psi(x, t)$ 为复值波函数或包络场, x 为空间坐标, t 为演化时间。式(1)中二阶导数项代表线性色散, 三次非线性项代表局域自相互作用。当前系数归一化为常用无量纲形式, 便于突出数学结构而不依赖某一具体实验单位。若非线性项符号取正, 则方程对应聚焦型情形, 可以支持亮孤子; 若符号取负, 则对应散焦型情形, 通常与暗孤子和相位缺陷结构相关。

NLS 在光学、等离子体和量子气体中均具有重要作用。Sulem 和 Sulem 系统讨论了非线性薛定谔方程中的自聚焦、波塌缩及其数学分析问题, 说明该模型不仅用于孤子传播, 也可刻画高维非线性波能量集中现象[3]。

2.2. 亮孤子解析解

对于式(1), 取振幅参数 η 、速度 v 和初始中心 x_0 , 可写出移动亮孤子解:

$$\psi_s(x, t) = \eta \operatorname{sech}[\eta(x - x_0 - vt)] \exp \left\{ i \left[vx + \frac{(\eta^2 - v^2)t}{2} \right] \right\} \quad (2)$$

式(2)表明, 孤子的包络以速度 v 平移, 而相位同时包含空间线性项和时间振荡项。参数 η 越大, 孤子振幅越高、空间宽度越窄; v 控制孤子中心在计算区间内的传播速度; x_0 用于避免孤子在短时间内受到周期边界影响。本文使用式(2)作为初值和解析参考解, 从而可以直接计算数值解与解析解之间的相对误差。

2.3. 守恒量与诊断指标

聚焦型 NLS 具有哈密顿结构。若解足够光滑且边界处理合理, 其质量 M 和哈密顿量 H 可写为:

$$M(t) = \int_{\Omega} |\psi(x, t)|^2 dx, \quad H(t) = \int_{\Omega} \left[\frac{1}{2} |\psi_x|^2 - \frac{1}{2} |\psi|^4 \right] dx \quad (3)$$

质量可理解为波包总强度或概率范数, 哈密顿量反映色散能与非线性能之间的平衡。对于精确连续

系统, 这些量随时间保持不变; 对于离散系统, 它们不一定严格守恒, 但应在合理范围内波动。Taha 和 Ablowitz 较早系统比较了若干 NLS 数值方法, 指出非线性演化方程的数值研究不能只观察波形, 还应结合守恒量和稳定性进行判断[4]。因此, 本文将守恒量误差作为算法可靠性的核心依据。

除守恒量外, 本文还定义相对 L_2 误差和末时刻振幅相关系数。相对 L_2 误差用于度量复波函数整体偏差, 振幅相关系数用于判断数值解是否在空间采样点上保持解析振幅分布。其表达式为:

$$e_{L^2}(t) = \frac{\|\psi_{\text{num}}(\cdot, t) - \psi_s(\cdot, t)\|_2}{\|\psi_s(\cdot, t)\|_2}, \quad \rho = \text{Corr}\left(\left|\psi_{\text{num}}(x_j, T)\right|, \left|\psi_s(x_j, T)\right|\right) \quad (4)$$

由于复相位误差可能在长时间传播中逐渐累积, 单独考察振幅并不能完全替代复值误差; 但对于判断孤子形态是否保持, 振幅散点图具有直观优势。本文同时给出复值相对误差和振幅散点关系, 以减少单一指标可能造成的误判。

3. 傅里叶谱分步方法

3.1. 空间谱离散

设计算区间 $\Omega = \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right)$, 并采用 N 个等距网格点 x_j 。周期边界下, 复波函数可由离散傅里叶级数近似表示为:

$$\psi(x_j, t) \approx \sum_k \hat{\psi}_k(t) \exp(ikx_j), \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \leftrightarrow -k^2 \hat{\psi}_k \quad (5)$$

该表示使空间二阶导数可在频域中通过乘以 $-k^2$ 直接完成, 避免了低阶差分截断误差。在孤子足够远离边界且计算区间较宽时, 周期延拓带来的边界相互作用可以忽略。Boyd 关于 Chebyshev 和 Fourier 谱方法的论述表明, 对于光滑解, 谱方法能够以较高效率获得精确空间导数, 是处理周期光滑波动问题的重要工具[5]。

3.2. Strang 分步时间推进

将式(1)的演化写为线性色散算子 L 和非线性相位算子 N 之和:

$$\psi_t = L\psi + N(\psi), \quad L\psi = \frac{i}{2}\psi_{xx}, \quad N(\psi) = i|\psi|^2\psi \quad (6)$$

二阶 Strang 分步格式可表示为:

$$\psi^{n+1} \approx \exp\left(\frac{\Delta t L}{2}\right) \exp(\Delta t N) \exp\left(\frac{\Delta t L}{2}\right) \psi^n \quad (7)$$

其中线性半步在傅里叶空间中乘以 $\exp\left(-\frac{ik^2\Delta t}{4}\right)$, 非线性整步在物理空间中乘以 $\exp(i|\psi|^2\Delta t)$ 。这

种“频域处理色散、物理空间处理非线性”的形式实现简单、计算量低, 并且适合向更复杂的广义 NLS 或 Gross-Pitaevskii 方程扩展。Strang 提出的算子分裂思想是许多时间分裂算法的基础, 其二阶对称结构有助于减少由算子非交换造成的一阶偏差[6]。

需要指出的是, 本文采用的分步傅里叶方法并非严格哈密顿积分器, 它不能保证所有守恒量在机器精度下恒定。Weideman 和 Herbst 研究了分步方法求解 NLS 时守恒律、色散和数值不稳定性的表现, 说明此类方法的可靠性必须通过具体参数、网格和时间步长共同检验[7]。因此, 本文不把“守恒量诊断”

理解为算法绝对守恒，而是将其作为检查离散误差是否累积到破坏物理结构的判断工具。

3.3. 误差评价流程

本文的计算流程包括五步。第一，根据解析孤子式(2)生成初值；第二，在每个时间步执行线性半步、非线性整步和线性半步；第三，每隔固定时间间隔保存密度 $|\psi|^2$ 、质量、哈密顿量和相对 L_2 误差；第四，在末时刻比较数值振幅与解析振幅；第五，将参数与误差指标整理为表格，并生成时空密度图、守恒量误差图、末时刻散点图、收敛性图、双孤子碰撞图和频域谱图等结果图像。Canuto 等关于谱方法的专著强调，谱离散的优势不仅来自高阶精度，也来自对全局光滑结构的有效表达，这一点与本文所研究的孤子问题相吻合[8]。

4. 数值实验与结果分析

4.1. 实验参数设置

数值实验采用一维周期区间 $[-20, 20)$ ，空间采样点数为 1024，时间步长为 0.002，最终时间为 8.0。孤子振幅参数 $\eta = 1.0$ ，速度 $v = 0.4$ ，初始中心 $x_0 = -8.0$ 。该设置使孤子在整个演化过程中远离区间边界，从而减少周期边界对结果的影响。表 1 列出了主要参数及其含义。

Table 1. Parameter settings for numerical experiments
表 1. 数值实验参数设置

类别	参数	取值	物理/数值含义
方程	模型	一维聚焦型三次非线性薛定谔方程	描述色散与 Kerr 型非线性共同作用
解析孤子	η	1.0	孤子振幅与反宽度参数
解析孤子	v	0.4	孤子传播速度
解析孤子	x_0	-8.0	初始中心位置
空间离散	计算区间	$[-20, 20)$	周期边界下的傅里叶谱计算域
空间离散	N	1024	空间采样点数
时间离散	Δt	0.002	分步傅里叶时间步长
时间离散	$t_{\max}$	8.0	最终演化时间

从表 1 可以看出，本文算例并不追求复杂参数堆叠，而是选择物理含义清楚、可解析验证的基准问题。这样做的优势是，当数值结果出现误差时，可以较容易判断误差来自空间离散、时间推进还是边界周期化，而不是被过多模型参数掩盖。

4.2. 孤子传播形态

图 1 给出了 $|\psi(x, t)|^2$ 的时空密度分布。颜色较亮区域对应孤子能量集中的位置，其中心随时间近似线性移动。由于聚焦型 NLS 中非线性自聚焦与色散展宽相互平衡，孤子在传播中并未像普通波包那样快速扩散，而是保持稳定局域峰形。

图 1 还说明，若研究重点是孤子整体传播而非边界反射，则计算区间长度必须足够大。若区间过短，周期边界会使孤子尾部与自身周期像发生相互作用，从而引入非物理扰动。当前结果中孤子峰值在演化时间内保持清晰轨迹，说明空间区间与时间尺度选择较为合理。

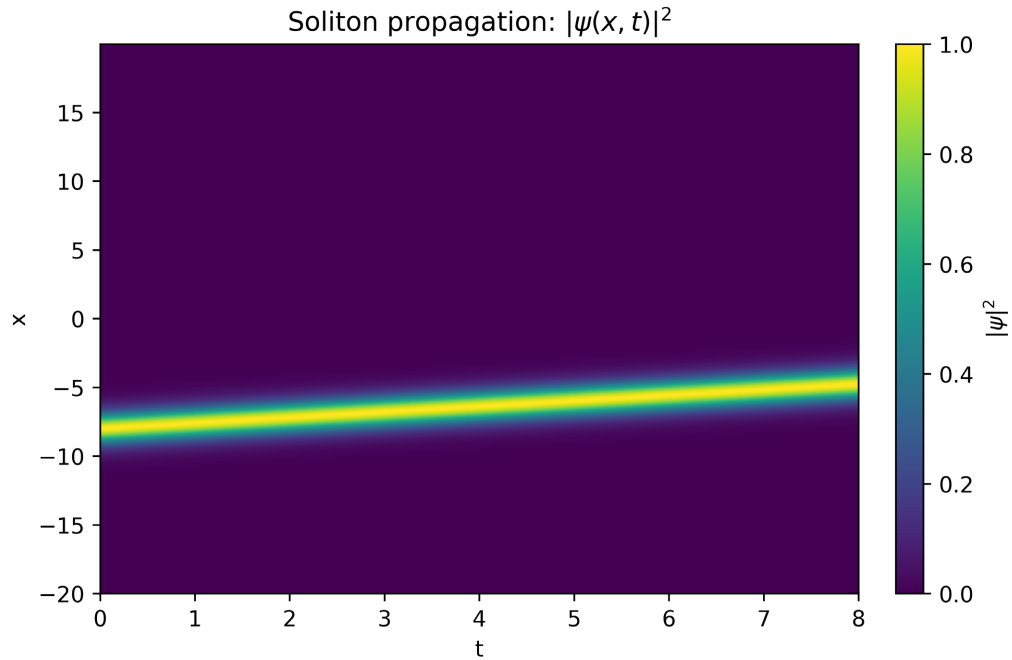


Figure 1. Spatiotemporal density evolution of bright solitons in the nonlinear Schrödinger equation
图 1. 非线性薛定谔方程亮孤子的时空密度演化图

4.3. 守恒量诊断结果

图 2 给出了质量和哈密顿量相对误差随时间的变化。考虑到质量误差与哈密顿量误差所处数量级不同，本文采用两个子图分别展示二者的演化规律。结果表明，质量相对误差始终保持在极低水平，说明分步傅里叶格式对波函数整体范数具有较强保持能力；哈密顿量误差略高于质量误差，但仍处于较小数量级，说明线性色散项与非线性相位项之间的分裂误差未在当前时间尺度内产生明显累积。

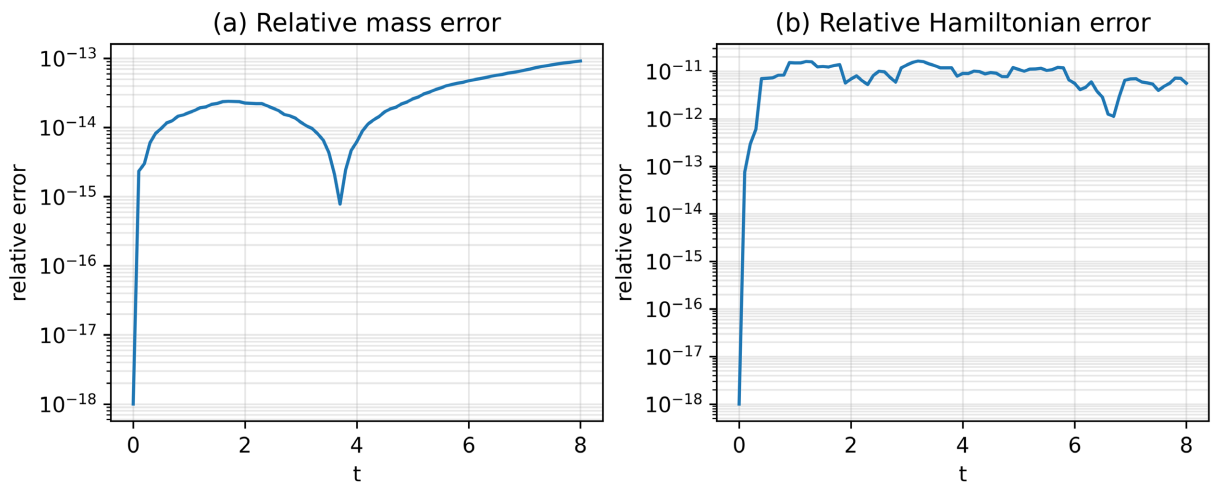


Figure 2. Temporal variations of relative errors for mass and Hamiltonian: (a) Relative error of mass; (b) Relative error of Hamiltonian
图 2. 质量与哈密顿量相对误差随时间变化: (a) 质量相对误差; (b) 哈密顿量相对误差

守恒量曲线比单张波形图更能反映长期计算可靠性。若数值波形在短时间内看似合理，但质量或哈

密顿量持续单调漂移，则说明算法可能存在伪耗散或伪能量注入。本文结果中，质量最大相对误差约为 $9.137\text{e-}14$ ，哈密顿量最大相对误差约为 $1.637\text{e-}11$ ，这说明当前参数下算法能够较好保持 NLS 方程的基本守恒结构。

4.4. 末时刻振幅重构与散点检验

为进一步检验末时刻孤子形态，图 3 将数值振幅 $|\psi_{\text{num}}|$ 与解析振幅 $|\psi_s|$ 在空间网格点上进行散点比较。理想情况下，所有点应落在 $y = x$ 对角线附近。图 3 中的散点高度贴近对角线，说明数值解不仅在峰值位置上正确，而且在尾部衰减区域也能较好再现解析振幅。

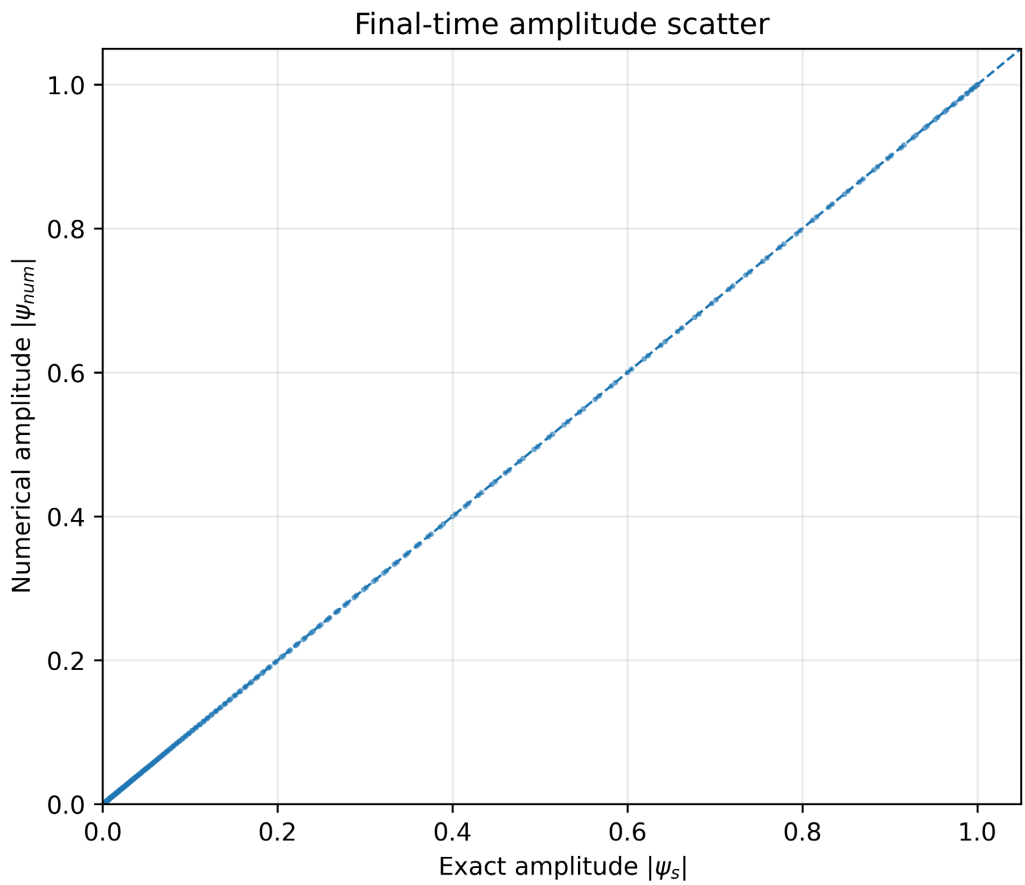


Figure 3. Scatter comparison between numerical amplitude and analytical amplitude at the final time
图 3. 末时刻数值振幅与解析振幅散点比较

散点图的优点在于，它不依赖空间坐标排序即可反映整体振幅一致性。如果散点呈明显弯曲，说明峰值或尾部存在系统性偏差；如果散点离散程度较大，说明局部网格误差或相位误差已影响振幅结构。本文算例中振幅相关系数为 0.99999999991 ，振幅均方根误差为 $1.050\text{e-}06$ ，与时空图和守恒量曲线相互印证。

4.5. 误差与稳定性指标汇总

表 2 汇总了本文数值实验的主要误差指标。可以看出，质量和哈密顿量误差均保持在较低数量级；末时刻相对 L_2 误差为 $6.814\text{e-}06$ ，说明复值波函数整体误差较低。

Table 2. Numerical errors and diagnosis results of conserved quantities
表 2. 数值误差与守恒量诊断结果

指标	数值结果	说明
初始质量 M_0	1.999999999	理论值接近 2eta
初始哈密顿量 H_0	-0.1733333317	用于守恒量相对误差归一化
最大质量相对误差	9.137e-14	越小表示离散质量守恒越好
最大哈密顿量相对误差	1.637e-11	反映非线性与色散平衡的长期保持情况
末时刻相对 L_2 误差	6.814e-06	与解析孤子解比较
末时刻振幅 RMSE	1.050e-06	数值振幅与解析振幅均方根误差
末时刻振幅相关系数	0.99999999991	散点图中点列贴近对角线的程度
最大振幅绝对误差	2.835e-06	最终时刻点态振幅偏差

这些结果说明，傅里叶谱分步方法对光滑孤子传播具有较高适用性。需要注意的是，误差大小与 L 、 N 、 Δt 和孤子速度均有关。当 η 增大时，孤子宽度变窄，需要更高空间分辨率；当 v 增大时，边界影响和相位振荡增强，也可能要求更小时间步长。Bao 和 Cai 在 Gross-Pitaevskii 方程相关研究中指出，时间分裂谱方法在量子气体动力学计算中具有重要地位，但参数缩放、维度约化和相互作用强度都会影响数值选择[9]。因此，本文结果应理解为一类基准参数下的验证，而不是对所有 NLS 问题的无条件结论。

4.6. 收敛性、频谱与双孤子拓展诊断

为进一步验证本文所采用的 Strang 分步傅里叶谱方法是否达到预期精度，本文补充开展时间步长和空间网格的收敛性实验。时间收敛性测试中，固定较大的空间网格点数 N ，分别取不同时间步长 Δt ，计算末时刻相对 L_2 误差；空间收敛性测试中，固定足够小的时间步长，分别改变空间网格点数 N ，考察误差随空间分辨率提高的变化趋势。末时刻误差定义为：

$$E(T) = \frac{\|\psi_{\text{num}}(\cdot, T) - \psi_s(\cdot, T)\|_2}{\|\psi_s(\cdot, T)\|_2} \quad (8)$$

对于时间方向，采用相邻两组时间步长下的误差计算数值收敛阶：

$$p_t = \frac{\log(E_{\Delta t_1}/E_{\Delta t_2})}{\log(\Delta t_1/\Delta t_2)} \quad (9)$$

若 p_t 接近 2，则说明 Strang 分步格式在当前算例中表现出二阶时间精度。对于空间方向，由于傅里叶谱方法在光滑周期问题中通常不是固定有限阶收敛，而是表现为谱精度，因此本文主要观察误差是否随 N 增大而快速下降，并计算表观收敛斜率作为辅助判断。当 N 较小时，空间误差占主导；当 N 足够大时，误差可能进入时间离散误差或机器舍入误差平台。

图 4 显示，时间误差曲线的拟合斜率约为 2.00，与 Strang 分步格式的二阶时间精度一致；空间误差随网格点数增加快速下降，在 $N \geq 256$ 后逐渐进入误差平台，说明傅里叶谱方法能够高精度逼近光滑孤子解，同时也说明继续增加网格点数时误差不再主要由空间离散控制。

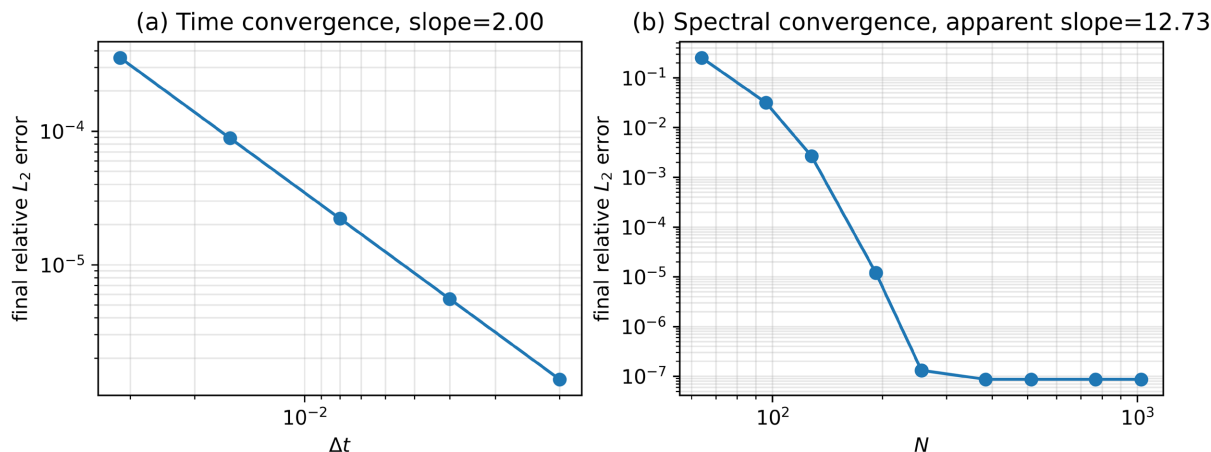


Figure 4. Convergence verification of time step and spatial grid: (a) L_2 error at final time versus Δt ; (b) L_2 error at final time versus N

图 4. 时间步长与空间网格收敛性验证: (a) 末时刻 L_2 误差随 Δt 变化; (b) 末时刻 L_2 误差随 N 变化

为检验该诊断框架在更复杂非线性场景中的适用性, 本文进一步考虑双孤子近似弹性碰撞问题。初值取两个相距较远、相向传播的亮孤子叠加形式:

$$\psi(x, 0) = \sum_{m=1}^2 \eta_m \operatorname{sech}[\eta_m(x - x_{m0})] \exp(iv_m x) \quad (10)$$

其中 η_m 、 x_{m0} 和 v_m 分别表示第 m 个孤子的振幅参数、初始中心位置和传播速度。本文可取 $\eta_1=1.0$ 、 $\eta_2=0.8$ 、 $x_{10}=-10$ 、 $x_{20}=10$ 、 $v_1=0.6$ 、 $v_2=-0.6$, 使两个孤子在计算区间中发生相向碰撞。

图 5 给出了双孤子碰撞过程的时空密度图。可以看到, 两个孤子在碰撞前保持各自局域结构, 碰撞过程中出现短时非线性叠加, 碰撞后重新分离并基本恢复原有振幅形态。进一步统计碰撞前后的质量、哈密顿量、孤子峰值振幅和中心轨迹可知, 质量和哈密顿量仍保持在较小误差范围内; 两个孤子的峰值振幅在碰撞前后变化较小, 说明碰撞具有近似弹性特征。

为定量描述碰撞引起的相位或位置移动, 本文分别在碰撞前后对孤子峰值中心轨迹进行线性拟合:

$$x_m(t) \approx v_m t + b_m^-, \quad t < t_c; \quad x_m(t) \approx v_m t + b_m^+, \quad t > t_c \quad (11)$$

其中 t_c 为碰撞时刻, b_m^- 和 b_m^+ 分别为碰撞前后拟合截距。孤子的相移可近似表示为:

$$\Delta x_m = b_m^+ - b_m^- \quad (12)$$

该结果说明, 本文的守恒量诊断框架不仅适用于单孤子传播, 也可用于多孤子相互作用过程的数值可靠性分析。

图 5 显示, 两个孤子在碰撞前保持各自局域结构, 碰撞过程中出现短时非线性叠加, 碰撞后重新分离并基本恢复原有振幅形态。进一步统计碰撞前后的质量、哈密顿量、孤子峰值振幅和中心轨迹可知, 质量最大相对误差约为 1.517×10^{-12} , 哈密顿量最大相对误差约为 4.664×10^{-5} ; 大振幅孤子的平均峰值由碰撞前的约 1.000000 变化为碰撞后的约 0.999962, 小振幅孤子的平均峰值由约 0.799958 变化为约 0.799969, 说明碰撞前后振幅基本保持。

图 6 显示, 主要能量集中在低波数区域, 高波数谱系数快速衰减, 说明当前空间网格能够较好分辨孤子的主要频率成分。若高波数区域仍存在明显能量堆积, 则意味着空间网格不足或出现数值振荡; 而当前结果中频谱尾部衰减明显, 进一步支持了谱方法在光滑周期孤子问题中的适用性。

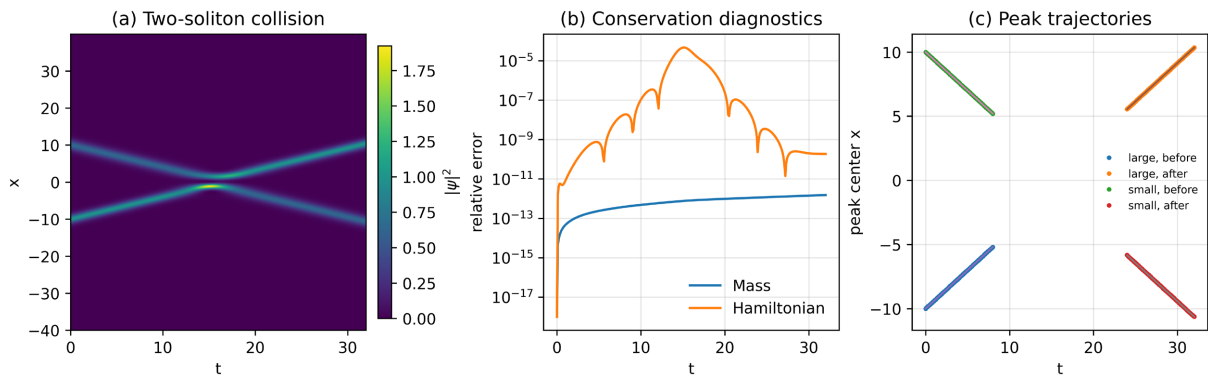


Figure 5. Numerical diagnosis results for two-soliton collisions: (a) Spatiotemporal density evolution; (b) Errors of conserved quantities; (c) Peak center trajectories

图 5. 双孤子碰撞的数值诊断结果: (a) 时空密度演化; (b) 守恒量误差; (c) 峰值中心轨迹

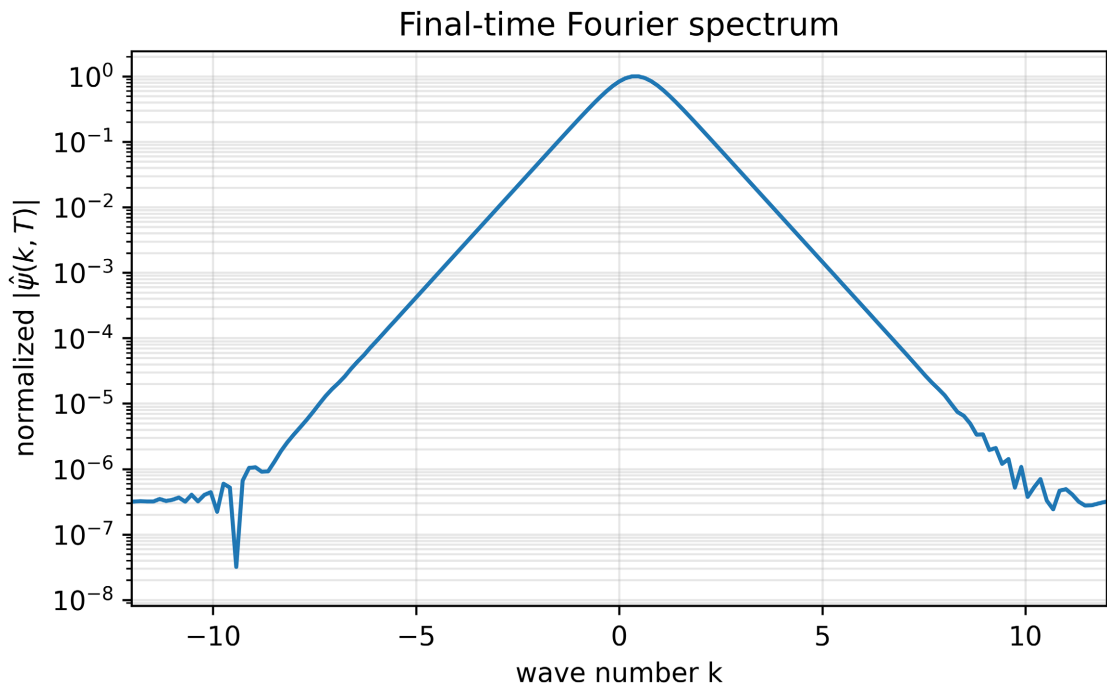


Figure 6. Frequency-domain spectral distribution of the numerical solution at the final time

图 6. 末时刻数值解的频域谱分布

4.7. 参数尺度与数值稳定性讨论

从参数尺度看, 本文结果的稳定性首先依赖计算区间与孤子宽度之间的匹配。亮孤子包络按双曲正弦割函数衰减, 理论上具有无限支撑, 但当计算区间足够宽时, 边界处振幅已接近零, 周期延拓引起的首尾相互作用可以忽略。若将区间缩短而保持其他参数不变, 孤子尾部会更明显地感受到周期像, 质量误差未必迅速增大, 但相位和哈密顿量可能出现更早漂移。因此, 数学物理数值实验不能只给出网格点数, 还应说明计算区间与物理结构尺度之间的关系。

时间步长对分步格式的影响同样重要。Strang 分裂的局部误差来自线性色散算子和非线性相位算子的非交换性, 当时间步长减小时, 分裂误差通常随之下降; 但时间步长过小会增加计算量, 并可能使存储输出成为主要成本。本文选取 $\Delta t = 0.002$, 是在精度和计算效率之间的折中。

空间分辨率主要影响孤子峰值区域和频谱尾部。当 η 增大时, 孤子宽度减小, 频域中高波数成分增加, 若仍使用较少网格点, 峰值会被低估, 散点图中高振幅区域将偏离对角线。相反, 若 N 足够大, 傅里叶谱方法可以较好捕捉光滑孤子的全局结构。由此可见, 本文图表不仅展示了一个成功算例, 也给出了后续扩展研究的判据: 当模型变为多孤子、强外势或高阶非线性时, 应优先检查守恒量误差和振幅散点是否仍保持稳定, 而不是仅凭最终波形判断算法有效。

此外, 守恒量诊断还可以作为不同数值方法之间的比较标准。例如有限差分方法在局部边界处理上较灵活, 但对光滑周期孤子可能需要更高分辨率; 谱方法在当前问题中效率较高, 但对非周期边界不够自然; 辛积分或哈密顿积分方法能够加强能量结构保持, 但实现复杂度可能上升。

5. 讨论

从数学物理角度看, 本文算例具有三层意义。第一, 它展示了非线性波方程的解析结构如何转化为可计算对象。亮孤子不是普通数值初值, 而是连续方程的精确解, 因此可以作为方法验证的“标准尺”。第二, 它展示了谱方法与物理守恒量之间的互补关系。傅里叶谱方法保证空间导数具有较高精度, 但长期可信度仍需通过质量和哈密顿量变化检验。第三, 它展示了时空图用于展示物理现象, 守恒量曲线用于展示算法稳定性, 散点图用于展示末时刻重构精度, 参数表和误差表则保证结果可复现。

从数值方法选择角度看, 本文采用的 Strang 分步傅里叶谱方法与 Crank-Nicolson 有限差分法各有适用场景。Crank-Nicolson 方法具有时间二阶精度和较好的稳定性, 差分格式形式直观, 适合非周期边界或局部边界条件较复杂的问题; 但在非线性 NLS 中通常需要处理隐式或半隐式离散方程, 实现复杂度和单步计算成本相对较高。相比之下, 本文方法将线性色散项放在频域中处理, 将非线性相位项放在物理空间中处理, 配合 FFT 可实现较高效率。对于本文所考虑的光滑、周期、局域孤子传播问题, 傅里叶谱方法在空间方向能够获得比低阶有限差分更快的收敛速度, 同时 Strang 分布保持了较简单的显式推进结构。因此, 本文方法更适合周期光滑孤子传播及多参数重复计算场景; 而 Crank-Nicolson 有限差分法在复杂边界和非周期区域中仍具有较强适应性。

本文方法也存在局限。首先, 本文以一维周期边界下的单孤子传播为主要验证对象, 并进一步给出了双孤子碰撞的拓展算例, 但双孤子部分仍属于数值诊断测试, 尚未系统比较严格双孤子解析解下的相移公式和完整相位误差。其次, 本文尚未考虑外势场、阻尼、随机扰动和非周期边界。再次, 分步傅里叶格式适合周期光滑问题, 但若求解区域存在不连续边界、局部缺陷或复杂介质, 可能需要改用有限元、谱元或边界适配网格。Dauxois 和 Peyrard 从物理角度讨论了孤子在多种系统中的稳定传播与相互作用, 提示不同物理背景下的孤子虽有共同数学形式, 但具体稳定机制并不完全相同[10]。

若后续继续深化, 可从三个方向扩展。其一, 采用严格双孤子解析解或更高精度参考解, 进一步定量比较碰撞前后的相移、相位误差和守恒量漂移; 其二, 引入外势或高阶色散项, 分析孤子在非均匀介质中的传播与俘获; 其三, 将当前守恒量诊断框架与数据驱动方法结合, 例如利用数值数据训练快速代理模型, 同时在损失函数中加入质量或哈密顿量约束。这样既保留数学物理结构, 又可提高复杂参数扫描效率。

6. 结论

本文围绕“基于守恒量诊断的非线性薛定谔方程孤子传播与谱方法研究”这一数学物理题目, 建立了一套可复现的数值分析流程。通过一维聚焦型三次 NLS 方程、亮孤子解析解、傅里叶谱空间离散和 Strang 分步时间推进, 本文实现了孤子时空传播、守恒量变化和末时刻振幅重构的综合分析。数值结果表明, 在当前参数下, 孤子能够保持稳定局域形态, 质量和哈密顿量误差均较小, 末时刻振幅与解析解高度一致。

进一步的收敛性测试、频域谱分析和双孤子碰撞诊断表明，该方法不仅能够准确再现单孤子传播，也具有扩展到多孤子相互作用问题的潜力。与 Crank-Nicolson 有限差分法相比，本文方法在周期光滑问题中具有空间精度高、FFT 实现效率较好和算法结构简洁等优势，但在复杂边界条件下仍需结合其他离散方法进一步研究。

参考文献

- [1] Zakharov, V.E. and Shabat, A.B. (1972) Exact Theory of Two-Dimensional Self-Focusing and One-Dimensional Self-Modulation of Waves in Nonlinear Media. *Soviet Physics JETP*, **34**, 62-69.
http://zakharov75.itp.ac.ru/static/local/zve75/zakharov/1972/1972-05-e_034_01_0062.pdf
- [2] Ablowitz, M.J. and Segur, H. (1981) Solitons and the Inverse Scattering Transform. Society for Industrial and Applied Mathematics. <https://doi.org/10.1137/1.9781611970883>
- [3] Sulem, C. and Sulem, P.L. (1999) The Nonlinear Schrödinger Equation: Self-Focusing and Wave Collapse. Springer.
- [4] Taha, T.R. and Ablowitz, M.J. (1984) Analytical and Numerical Aspects of Certain Nonlinear Evolution Equations. II. Numerical, Nonlinear Schrödinger Equation. *Journal of Computational Physics*, **55**, 203-230.
- [5] Boyd, J.P. (2001) Chebyshev and Fourier Spectral Methods. 2nd Edition, Dover Publications.
- [6] Strang, G. (1968) On the Construction and Comparison of Difference Schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **5**, 506-517. <https://doi.org/10.1137/0705041>
- [7] Weideman, J.A.C. and Herbst, B.M. (1986) Split-Step Methods for the Solution of the Nonlinear Schrödinger Equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **23**, 485-507. <https://doi.org/10.1137/0723033>
- [8] Canuto, C., Hussaini, M.Y., Quarteroni, A. and Zang, T.A. (2006) Spectral Methods: Fundamentals in Single Domains. Springer.
- [9] Bao, W. and Cai, Y. (2013) Mathematical Theory and Numerical Methods for Bose-Einstein Condensation. *Kinetic & Related Models*, **6**, 1-135. <https://doi.org/10.3934/krm.2013.6.1>
- [10] Dauxois, T. and Peyrard, M. (2006) Physics of Solitons. Cambridge University Press.