

Nonlinear equation

HYX

USTC

May 5, 2019

Outline

光腔中的 BEC 动力学问题

非线性方程组的求根

极小值问题

总结

The nonlinear equations

$$\begin{aligned} \ddot{c}_n &= \frac{n^2 k_c^2}{2m} c_n + \frac{U_0 |\alpha|^2}{4} (2c_n + c_{n-2} + c_{n+2}) + \frac{\eta(\alpha + \alpha^*)}{2} (c_{n-1} + c_{n+1}) \\ i\dot{\alpha}(t) &= -(\delta_c + i\kappa)\alpha(t) + \frac{U_0}{4} \sum_n (2c_n^* c_n + c_{n-2}^* c_n) \alpha(t) + \frac{\eta}{2} \sum_n c_{n-1}^* c_n \end{aligned}$$

- ▶ n 取截断 $[-n_c, n_c]$, 共有 $2n_c + 1$ 个模式 + 一个腔场
- ▶ 考虑实部和虚部, 共有 $2(2n_c + 2)$ 个方程
- ▶ 但是, 实部和虚部是没有具体物理意义的

$$c_j = \sqrt{n_j} e^{i\theta_j}$$

- ▶ 方程有一个守恒量 $\sum_j n_j = 1$
- ▶ 整体相位也可以去掉一个自由度
- ▶ 独立的方程个数: $4n_c + 2$

The problem

$$\begin{aligned}\frac{\dot{n}_j}{2\sqrt{n_j}} &= \frac{U_0}{4} n_a [\sqrt{n_{j-2}} \sin(\theta_{j-2} - \theta_j) + \sqrt{n_{j+2}} \sin(\theta_{j+2} - \theta_j)] \\ &\quad + \eta \cos \theta_a \sqrt{n_a} [\sqrt{n_{j-1}} \sin(\theta_{j-1} - \theta_j) + \sqrt{n_{j+1}} \sin(\theta_{j+1} - \theta_j)] \\ -\sqrt{n_j} \dot{\theta}_j &= \frac{U_0}{4} n_a [2\sqrt{n_j} + \sqrt{n_{j-2}} \cos(\theta_{j-2} - \theta_j) + \sqrt{n_{j+2}} \cos(\theta_{j+2} - \theta_j)] \\ &\quad + \eta \cos \theta_a \sqrt{n_a} [\sqrt{n_{j-1}} \cos(\theta_{j-1} - \theta_j) + \sqrt{n_{j+1}} \cos(\theta_{j+1} - \theta_j)]\end{aligned}$$

我们的问题是：求这个系统的不动点

- ▶ 可以验证 $\partial_t(\sum_j n_j) = 0$

$$\sum_j n_j - 1 = 0$$

- ▶ θ_j 和 n_j 都是实数
- ▶ 如果求上面系统的不动点，用一般的方法（比如 Broyden），给定一个初值，它极有可能在某一步演化到 $n_j < 0$

Nonlinear equations

$$c_j = x_j + iy_j$$

Nonlinear equations

$$c_j = x_j + iy_j$$

$$n_j = x_j^2 + y_j^2, \quad \theta_j = \arctan \frac{y_j}{x_j}$$

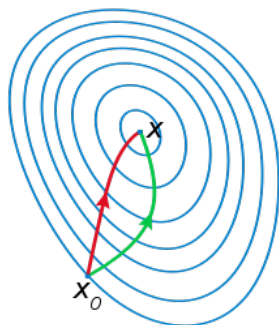
$$\dot{n}_j = 2x_j\dot{x}_j + 2y_j\dot{y}_j, \quad \dot{\theta}_j = \frac{x_j\dot{y}_j - \dot{x}_j y_j}{x_j^2 + y_j^2}$$

高斯牛顿法

求 $f(x)$ 的最小值问题，牛顿法化为

$$f'(x) = 0 \rightarrow x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}$$

一般认为牛顿法可以利用到曲线本身的信息，比梯度下降法更容易收敛（迭代更少次数）



红色是牛顿法，绿色是梯度下降法

对于高维问题

$$X_{n+1} = X_n - H_f(X_n)^{-1} \nabla f(X_n)$$

海赛矩阵 $H_f = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$

高斯牛顿法

$$\text{目标函数 } s(x) = \sum_{i=1}^n f_i^2(x)$$

► 梯度

$$g_j = \sum_{i=1}^n f_i \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = 2 \sum_{i=1}^n f_i J_{ij} \rightarrow \mathbf{g} = 2 \mathbf{J}_f^T \mathbf{f}$$

► 海赛矩阵

$$H_{jk} = 2 \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \frac{\partial f_i}{\partial x_k} + f_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k} \right) \approx 2 \sum_i J_{ij} J_{ik} \rightarrow H \approx 2 \mathbf{J}_f^T \mathbf{J}_f$$

得到高斯牛顿法的迭代公式

$$x_{s+1} = x_s + \Delta, \quad \Delta = - \left(\mathbf{J}_f^T \mathbf{J}_f \right)^{-1} \mathbf{J}_f^T \mathbf{f}$$

莱文贝格 - 马夸特方法 (Levenberg-Marquardt algorithm)

$$x_{s+1} = x_s + \Delta, \quad \Delta = - \left(J_f^T J_f + \lambda I \right)^{-1} J_f^T f$$

相对于高斯牛顿法

- ▶ 通过 λ 控制步长
- ▶ 海赛矩阵没有逆时，高斯牛顿法无法进行
- ▶ 初值离极小值较远时

总结

- ▶ 高维非线性方程的求解
- ▶ 要满足一定的限制条件
- ▶ 求根和极小值
- ▶ 高斯牛顿法，莱文贝格-马夸特方法