第16卷 第1期 华侨大学学报(自然科学版) Vol. 16 No. 1
1995年1月 Journal of Huaqiao University (Natural Science) Jan. 1995

解高维Schrödinger方程的一类稳定的显格式*

王 子 丁

(华侨大学管理信息科学系,泉州 362011)

摘要 对高维的Schrödinger方程,利用加耗散项的方法,建立一类绝对稳定的三层格式,包含了Du Fort-Frankel型差分格式的结果.

关键词 差分格式,差分格式稳定性,高维

分类号 O 241.84

文〔1〕给出解Schrödinger型方程$u_t=\mathrm{i}u_{xx}$的两个三层显格式,其稳定条件分别为$r\leqslant 1$和$r\leqslant 2.2071$.文〔2〕中对更一般的高维方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\mathrm{i}\sum_{p=1}^{N}\frac{\partial^2 u}{\partial x_p^2}\quad(N\geqslant 1\text{ 是自然数},\mathrm{i}=\sqrt{-1}),\tag{1}$$

建立了一个绝对稳定的三层显格式.本文利用文〔3〕,〔4〕中加耗散项的思想,对方程(1)建立起一类绝对稳定的三层显格式,它包含了文〔2〕中的结果.

1 差分格式的构造

把耗散项$\varepsilon\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$加进高维方程(1)中,得

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\mathrm{i}\sum_{p=1}^{N}\frac{\partial^2 u}{\partial x_p^2}+\varepsilon\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}.\tag{2}$$

令$\varepsilon=-\tau Nr(\alpha+\mathrm{i}\beta)$,其中$r=\tau/h^2$,$\tau=\Delta t$为时间步长,$h=\Delta x_1=\Delta x_2=\cdots=\Delta x_N$为空间步长.

为了建立差分格式,记$u^k_{j_1,j_2,\cdots,j_N}=u(j_1\Delta x_1,j_2\Delta x_2,\cdots,j_N\Delta x_N)$,并且利用数值微分公式

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^k_{j_1,j_2,\cdots,j_N}=\frac{1}{2\tau}\left(u^{k+1}_{j_1,j_2,\cdots,j_N}-u^{k-1}_{j_1,j_2,\cdots,j_N}\right)+o(\tau^2),\tag{3}$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)^k_{j_1,j_2,\cdots,j_N}=\frac{1}{\tau^2}\left(u^{k+1}_{j_1,j_2,\cdots,j_N}-2u^k_{j_1,j_2,\cdots,j_N}+u^k_{j_1,j_2,\cdots,j_N}\right)+o(\tau^2),\tag{4}$$

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_p^2}\right)^k_{j_1,j_2,\cdots,j_N}=\frac{1}{h^2}\bigl(&u^k_{j_1,\cdots,j_{p-1},j_p+1,j_{p+1},\cdots,j_N}-2u^k_{j_1,\cdots,j_p,\cdots,j_N}\\&+u^k_{j_1,\cdots,j_{p-1},j_p-1,j_{p+1}\cdots,j_N}\bigr)+o(h^2).\end{aligned}\tag{5}$$

* 本文1994-04-22收到

将式(3)～(5)代入方程(2),并舍去截断误差项 $o(\tau^2+h^2+\tau^2/h^2)$,得三层显格式如下

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2\tau}(u^{k+1}_{j_1,\cdots,j_N}-u^{k-1}_{j_1,\cdots,j_N})\\&=\mathrm{i}/h^2\sum_{p=1}^{N}(u^k_{j_1,\cdots,j_p+1,\cdots,j_N}-2u^k_{j_1,\cdots,j_N}+u^k_{j_1,\cdots,j_p-1,\cdots,j_N})\\&\quad-r(\alpha+\mathrm{i}\beta)\tau\cdot\frac{N}{\tau^2}(u^{k+1}_{j_1,\cdots,j_N}-2u^k_{j_1,\cdots,j_N}+u^{k-1}_{j_1,\cdots,j_N}),\end{aligned}\tag{6}$$

或者

$$\begin{aligned}&\{1+2rN(\alpha+\mathrm{i}\beta)\}u^{k+1}_{j_1,\cdots,j_N}\\&=\{1-2rN(\alpha+\mathrm{i}\beta)\}u^{k-1}_{j_1,\cdots,j_N}+4rN(\alpha+\mathrm{i}\beta)u^k_{j_1,\cdots,j_N}\\&\quad+2\mathrm{i}r\sum_{p=1}^{N}(u^k_{j_1,\cdots,j_p+1,\cdots,j_N}-2u^k_{j_1,\cdots,j_N}+u^k_{j_1,\cdots,j_p-1,\cdots,j_N}),\end{aligned}\tag{7}$$

其中 $r=\tau/h^2$ 为网格比. 当 $\tau=o(h^2)$时,式(6)或式(7)相容于方程(1).

2 差分格式的稳定性

为讨论其稳定性,先叙述如下的 Miller 准则[5].

设 $f(\rho)=a_0+a_1\rho+\cdots+a_n\rho^n(a_0a_n\neq0)$,为平面上的 n 次多项式,定义多项式 $f^*(\rho)=\bar{a}_n+\bar{a}_{n-1}\rho+\cdots+\bar{a}_0\rho^n$,其中 $\bar{a}_j$ 表示 $a_j(j=0,1\cdots,n)$的共轭复数. 如果 $f^*(0)f(\rho)=f(0)f^*(\rho)$成立,则 $f(\rho)=0$ 的全部根按模小于 1 的充要条件为 $f'(\rho)=0$ 只有按模小于等于 1 的根.

下面用分离变量法分析差分格式(7)的稳定性. 令

$$u^k_{j_1,\cdots,j_N}=\rho^k e^{\mathrm{i}(\sum_{p=1}^{N}j_p\theta_p)},\ |\theta_p|<\pi,\tag{8}$$

代入格式(7),并整理得特征方程为

$$\begin{aligned}f(\rho)=&\{1+2rN(\alpha+\mathrm{i}\beta)\}\rho^2+\{4\mathrm{i}r\sum_{p=1}^{N}(1-\cos\theta_p)\\&-4rN(\alpha+\mathrm{i}\beta)\}\rho-\{1-2rN(\alpha+\mathrm{i}\beta)\}=0.\end{aligned}\tag{9}$$

差分格式(7)稳定的条件是其特征方程 $f(\rho)=0$ 的所有根按模小于等于 1,且模为 1 的根是单根. 经计算易知,当 $\alpha=0$ 时,有 $f(0)f^*(\rho)=f^*(0)f(\rho)$. 此时 $f'(\rho)=0$ 的根为

$$\rho=\frac{-2\mathrm{i}r\sum_{p=1}^{N}(1-\cos\theta_p)+2rN\beta\mathrm{i}}{1+2rN\beta\mathrm{i}}.\tag{10}$$

要使$|\rho|\leqslant1$,只要 $4r^2\{N\beta-\sum_{p=1}^{N}(1-\cos\theta_p)\}^2\leqslant1+(2rN\beta)^2$,即

$$4r^2\{-2N\beta\sum_{p=1}^{N}(1-\cos\theta_p)+(\sum_{p=1}^{N}(1-\cos\theta_p))^2\}\leqslant1.\tag{11}$$

若

$$(\sum_{p=1}^{N}(1-\cos\theta_p))^2-2N\beta\sum_{p=1}^{N}(1-\cos\theta_p)\leqslant0,\tag{12}$$

则式(11)恒成立,这就要求

$$2N\beta\geqslant\sum_{p=1}^{N}(1-\cos\theta_p).\tag{13}$$

从而,当 $\beta\geqslant1$ 时,无论 r 取何值,式(11)恒成立. 根据 Miller 准则,$f(\rho)$的根按模小于等于 1. 而当 $\alpha=0,\beta\geqslant1$ 时,特征方程 $f(\rho)=0$ 有一对模为 1 的不等复根. 因此,根据文[6]可以证明

如下的定理．

定理　若 $\alpha=0,\beta\geqslant 1$ 时，则差分格式(6)或(7)是绝对稳定．

特别当 $\alpha=0,\beta=1$ 时，差分格式(7)恰为 Du Fort-Frankel 型差分格式，也即文〔2〕中的三层显格式．因此，定理包含了文〔2〕中的三层显格式，即包含了 Du Fort-Frankel 型差分格式．

参　考　文　献

1 林鹏程．Schrödinger 型方程的三层显格式. 计算数学，1988，10(3)：328～331

2 金承日．解 $\frac{\partial u}{\partial t}=i\sum_{p=1}^{N}\frac{\partial^2 u}{\partial x_p^2}$ 的绝对稳定的三层显格式. 计算数学，1990，12(2)：214～215

3 Chen D l, Longun S T F. Stable explicit schemes for equation of the Schrödinger type. SIAM. J. Numer. Anal.，1986，23(2)：274～281

4 戴伟忠. 解 Schrödinger 方程的绝对稳定的半显式与显式差分格式. 计算数学，1989，11(2)：128～131

5 Miller J J H. On the location of zeros of certain classes of polynomials with application to numerical analysis. J. Inst. Math. Appls.，1971，(8)：397～406

6 Richtmger R D, Morton K W. Difference method for initial-value problems. New York：2nd, Edit, Wiley, 1967. 168～398

A Class of Stable Explicit Schemes for Solving Higher Dimensional Schrödinger Equations

Wang Ziding

(Dept. of Manag. Info. Sci.，Huaqiao Univ, 362011，Quanzhou)

Abstract　For solving higher dimensional Schrödinger equations, a class of absolutely stable and three level schemes including the results of Du Fort-Frankel type difference scheme are derived by adding dissipative term.

Keywords　difference schemes, stability of difference schemes，higher-dimension