第 16 卷　第 4 期　华侨大学学报（自然科学版）　Vol. 16　No. 4
1995 年 10 月　Journal of Huaqiao University (Natural Science)　Oct. 1995

高阶 Schrödinger 方程的一类半隐式差分格式*

曾　文　平

（华侨大学管理信息科学系，泉州 362011）

摘要　构造高阶 Schrödinger 方程 $\mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial t}+(-1)^m\frac{\partial^{2m}u}{\partial x^{2m}}=0$ 的一类半隐式差分格式，给出了它们的稳定性条件.

关键词　傅氏分析，稳定性，差分格式，高阶薛丁谔方程
分类号　O 241.84

在许多文献中，从等离子体物理、非线性光学、流体力学等各种领域提出了一类非线性高阶 Schrödinger 方程的一些定解问题，得到解的存在唯一性定理. 为了更深入地研究非线性高阶 Schrödinger 方程的差分解法，有必要对高阶 Schrödinger 方程的最简单的模型 $\mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial t}+(-1)^m\frac{\partial^{2m}u}{\partial x^{2m}}=0$，即

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\mathrm{i}(-1)^m\frac{\partial^{2m}u}{\partial x^{2m}}\quad(其中\ \mathrm{i}=\sqrt{-1}),\tag{1}$$

作更进一步的深入研究. 古典的 Euler 显格式是无条件不稳定的，三层的蛙跳显格式虽是条件稳定的，但稳定性条件为 $r=k/h^{2m}\leqslant 1/2^{2m}$（其中 k 为时间步长，h 为空间步长）是较为苛刻的，而 Euler 隐格式虽是无条件稳定的，但需解一耦合方程组，计算量较大. 因此，寻找方程(1)的高稳定性的显式格式或半隐式格式便具有十分重要的理论意义及明显的实用价值.

本文首先提出一种半隐式格式，它实际上是可以显式求解的，也可按显式求解过程讨论其稳定性，然后进一步引入参数 α，构造了一类 α-型可显式求解的半隐式格式（实际上是显式方法），并得到了其稳定性条件. 其稳定区域较之蛙跳格式有较大的改善，而计算量增加并不多.

引理　实系数二次方程 $x^2+bx+c=0$ 的两根按模小于等于 1 的充要条件是 $|b|\leqslant 1+c$ 且 $|c|\leqslant 1$.

1　半隐式格式

首先假设 $u=v+\mathrm{i}w$，其中 $v=\mathrm{Re}(u)$，$w=\mathrm{Im}(u)$. 于是化方程(1)为

* 本文 1995-05-24 收到

$$\frac{\partial v}{\partial t} = (-1)^{m+1} \frac{\partial^{2m} w}{\partial x^{2m}}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = (-1)^{m} \frac{\partial^{2m} v}{\partial x^{2m}}, \tag{3}$$

令 $r=k/h^{2m}$ 为网格比，且用 w_j^n，v_j^n 分别表示 $w(jh,nk)$，$v(jh,nk)$ 的差分逼近，δ_x^{2m} 表示关于 x 方向的 $2m$ 阶中心差分算子.

对于式(2)用古典 Euler 显格式、式(3)用古典 Euler 隐格式，则可得如下的半隐式格式

$$v_j^{n+1} = v_j^n + (-1)^{m+1} r\delta_x^{2m} w_j^n, \tag{4}$$

$$w_j^{n+1} = w_j^n + (-1)^{m} r\delta_x^{2m} v_j^{n+1}, \tag{5}$$

将式(4)代入式(5)得

$$v_j^{n+1} = v_j^n + (-1)^{m+1} r\delta_x^{2m} w_j^n, \tag{6}$$

$$w_j^{n+1} = w_j^n + (-1)^{m} r\delta_x^{2m} v_j^n - r^2\delta_x^{4m} w_j^n, \tag{7}$$

易得其截断误差为 $O(k+h^2)$.

若记 $S^* = 4S^2$，$S=\sin\dfrac{\theta h}{2}$，根据 Fourier 分析有

$$\begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}_j^{n+1} = \begin{bmatrix} 1 & -rS^{*m} \\ rS^{*m} & 1-r^2S^{*2m} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}_j^{n}, \tag{8}$$

于是得放大矩阵

$$G = \begin{bmatrix} 1 & -rS^{*m} \\ rS^{*m} & 1-r^2S^{*2m} \end{bmatrix} \tag{9}$$

的特征方程为

$$\lambda^2 - (2 - r^2S^{*2m})\lambda + 1 = 0, \tag{10}$$

由引理知其根在单位园内的充要条件为 $|2-r^2S^{*2m}| \leqslant 2$，即 $r^2S^{*2m} \leqslant 4$. 于是得格式(4)～(5)的稳定条件为 $r=k/h^{2m} \leqslant 1/2^{2m-1}$. 从而我们有

定理 1　半隐式格式(式(4)，(5))当 $r \leqslant 1/2^{2m-1}$ 时稳定.

由此可见，半隐式格式(式(4)，(5))的稳定区域比蛙跳格式放宽一倍.

2　含权 α 的半隐式格式

为进一步放宽差分格式的稳定性条件，且仍保持精度 $O(k+h^2)$ 不变. 我们引入参数 α 构造如下的含权 α 的半隐式格式

$$v_j^{n+1} = v_j^n + (-1)^{m+1} r\delta_x^{2m}(1+\alpha\delta_x^2) w_j^n, \tag{11}$$

$$w_j^{n+1} = w_j^n + (-1)^{m} r\delta_x^{2m}(1+\alpha\delta_x^2) v_j^{n+1}, \tag{12}$$

将式(11)代入式(12)得

$$v_j^{n+1} = v_j^n + (-1)^{m+1} r\delta_x^{2m}(1+\alpha\delta_x^2) w_j^n, \tag{13}$$

$$w_j^{n+1} = w_j^n + (-1)^{m} r\delta_x^{2m}(1+\alpha\delta_x^2) v_j^n - r^2\delta_x^{4m}(1+\alpha\delta_x^2)^2 w_j^n, \tag{14}$$

其中 α 为任意参数.

由 Fourier 分析法得

$$\begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}_j^{n+1} = \begin{bmatrix} 1 & -rS^{*m}(1-\alpha S^*) \\ rS^{*m}(1-\alpha S^*) & 1-r^2S^{*2m}(1-\alpha S^*)^2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}_j^{n}. \tag{15}$$

其放大矩阵的特征方程为

$$\lambda^2 - [2 - r^2 S^{*2m}(1 - \alpha S^*)^2]\lambda + 1 = 0. \tag{16}$$

由引理知其根在单位园内的充要条件为

$$|2 - r^2 S^{*2m}(1 - \alpha S^*)^2| \leqslant 2,$$

即

$$r^2 S^{*2m}(1 - \alpha S^*)^2 \leqslant 4, \tag{17}$$

若令 $2S^2 = x$，则 $x \in [0,2]$. 式(17)化为

$$r \leqslant \frac{2}{2^m x^m |1 - 2\alpha x|} \qquad (0 \leqslant x \leqslant 2), \tag{18}$$

设 $f(x) = x^m|1-2\alpha x|$，下面求

$$M = \min_{\alpha} \max_{0\leqslant x\leqslant 2} f(x) = \min_{\alpha} \max_{0\leqslant x\leqslant 2} x^m |1 - 2\alpha x|, \tag{19}$$

分两种情况讨论：

(i) $0<\alpha\leqslant 1/4$，此时令 $f(x)=x^m(1-2\alpha x)\geqslant 0, (0\leqslant x\leqslant 2)$，则 $f'(x)=x^{m-1}[m-2\alpha(m+1)x]=0$，得 $x^*=\frac{m}{2(m+1)\alpha}>0$，且 $f''(x^*)=-m(x^*)^{m-2}<0$，故 $f(x)$ 在 x^* 取得极大值. $\max\limits_{0\leqslant x\leqslant 2} f(x)=f(x^*)=\frac{1}{m+1}[\frac{m}{2(m+1)\alpha}]^m$，它是 α 的单调下降函数，所以

$$M = \min_{0\leqslant\alpha\leqslant 1/4} \max_{0\leqslant x\leqslant 2} f(x) = \frac{1}{m+1}[\frac{2m}{m+1}]^m, \tag{20}$$

注意此时 $x^*=\frac{2m}{m+1}\in[0,2]$，从而可得此时的稳定性条件(当 $\alpha=\frac{1}{4}$ 时等号成立)为

$$r^* \leqslant \frac{2}{2^m}\cdot\frac{1}{M} = \frac{m+1}{2^{2m-1}}(\frac{m+1}{m})^m; \tag{21}$$

(ii) $\alpha>\frac{1}{4}$，此时

$$f(x) = x^m|1 - 2\alpha x| = \begin{cases} x^m(1 - 2\alpha x) & x < 1/2\alpha, \\ x^m(2\alpha x - 1) & x \geqslant 1/2\alpha, \end{cases} \tag{22}$$

在 $(0,\frac{1}{2\alpha})$ 内，$f(x)$ 极值点为 $x^*=\frac{m}{2(m+1)\alpha}<\frac{1}{2\alpha}$，最大值为 $\max\limits_{0<x<1/2\alpha} f(x)=f(x^*)=\frac{1}{m+1}\cdot[\frac{m}{2(m+1)\alpha}]^m$；在 $(\frac{1}{2\alpha},2)$ 内，$f'(x)=x^{m-1}[2\alpha(m-1)x-m]>x^{m-1}>0$，故 $f(x)$ 为单调上升函数，其最大值在右端点 $x=2$ 达到，即 $\max\limits_{1/2\alpha\leqslant x\leqslant 2} f(x)=2^m(4\alpha-1)=f(2)$. 于是 $\max\limits_{0\leqslant x\leqslant 2} f(x)=\max\{f(x^*),f(2)\}=\max\{\frac{1}{m+1}(\frac{m}{2(m+1)\alpha})^m, 2^m(4\alpha-1)\}$，显然要使 α 将 $\max\limits_{0\leqslant x\leqslant 2} f(x)$ 变为最小，就必须

$$M = f(x^*) = f(2), \tag{23}$$

或

$$\frac{1}{m+1}\cdot[\frac{m}{2(m+1)\alpha}]^m = 2^m(4\alpha - 1),$$

即 α 为满足方程

$$\alpha^{m+1} - \frac{1}{4}\alpha^m - \frac{1}{4(m+1)}(\frac{m}{4(m+1)})^m = 0, \tag{24}$$

的正实根.

利用 Newton 迭代法,易得高次方程(24)的唯一正实根 α^*,如表 1 所示.

而当 $\alpha=\alpha^*$ 时的 M 值为

$$M=\frac{1}{m+1}\cdot\left[\frac{m}{2(m+1)\alpha^*}\right]^m=2^m(4\alpha^*-1),\tag{25}$$

相应地 r 值为

$$r^{**}\leqslant\frac{2}{2^2m(4\alpha^*-1)}=2(m+1)\cdot\left[\frac{(m+1)\alpha^*}{m}\right]^m,\tag{26}$$

实际计算表明:当 $m=1\sim6$,且 $\alpha=\alpha^*$ 时 r^{**} 比 r^* 大.

于是我们有

定理 2 含权 α 的半隐式格式(式(11),(12))当 $\alpha=\alpha^*\triangleq\alpha_{opt}$ 时稳定性最好,其最佳稳定条件为 $r\leqslant2(m+1)\left[\frac{(m+1)\alpha^*}{m}\right]^m$.

为使用方便计,得最佳稳定性条件 r_{opt} 及相应正实根 $\alpha^*=\alpha_{opt}$ 列表如表 1.

表 1　最佳稳定条件 r_{opt} 及相应正实根 $\alpha^*=\alpha_{opt}$

m	正实根 $\alpha^*=\alpha_{opt}$	r_{opt}	比蛙跳格式稳定性条件放宽倍数
1	0.301 776 7	2.414 213 3	9.656 853 3
2	0.279 608 5	1.055 440 1	16.887 042
3	0.270 757 3	0.376 373 6	24.087 911
4	0.266 000 1	0.122 069 5	31.249 804
5	0.262 996 8	0.037 569 3	38.471 008
6	0.261 248 7	0.010 851 9	44.449 58

由表 1 可见,α 型格式(11)～(12)(当 $\alpha=\alpha_{opt}$ 时)比蛙跳格式的稳定性条件有较大改进,特别当 $m=1$ 时,与文[1]中结论相符.

3　数值例子

考虑如下的初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}=\mathrm{i}\,\dfrac{\partial^4 u}{\partial x^4},\\ u(x,0)=\sin x-\mathrm{i}\cos x,\end{cases}$$

易证其精确解为 $u(x,t)=\sin(x+t)-\mathrm{i}\cos(x+t)$.

计算结果表明:

(Ⅰ)当 $r=\frac{1}{2^4}=0.062\,5$ 时,蛙跳格式半隐式格式(4)～(5)及含权 α 的半隐式格式(11)～(12)(取 $\alpha=0.279\,6$)计算得到 $999\triangle t$ 均稳定;

(Ⅱ)当 $r=\frac{1}{2^3}=0.125$ 时,蛙跳格式计算得 $n=18$ 时已溢出,而其他两格式仍稳定;

(Ⅲ)当 $r=\frac{1}{4}=0.25$ 及 $r=1.055$ 时,只有含权的半隐式格式(11)～(12)(取 $\alpha=0.279\,6$)仍然稳定.但若取 $r=1.1$,则当 $n=73$ 时格式(11)～(12)也上溢.

上述结果与理论分析相吻合,详见表 2.

表2 取$\triangle x=0.1$,$\triangle t=r\times 10^{-4}$,计算得到999$\triangle t$时各格式稳定性能比较表

t	格式	x	R_e误差	I_m误差
$\frac{1}{16}=0.0625$	蛙跳格式	0	0.000 012 51	−0.000 001 28
		5.0	0.000 005 53	0.000 007 61
		10.0	−0.000 000 08	−0.000 001 37
	半隐式格式(4)~(5)	0	0.000 012 51	−0.000 001 31
		5.0	0.000 005 54	0.000 007 58
		10.0	−0.000 000 08	−0.000 001 37
	含权α的半隐格式(11)~(12)$\alpha=0.2796$	0	0.000 037 56	−0.000 006 75
		5.0	0.000 020 33	0.000 012 25
		10.0	−0.000 009 12	−0.000 005 00
$\frac{1}{8}=0.125$	蛙跳格式		$n=18$上溢	
	半隐式格式	0	0.000 024 62	−0.000 002 86
		5.0	0.000 007 55	0.000 009 14
		10.0	−0.000 000 09	−0.000 021 69
	含权α的半隐格式(11)~(12)$\alpha=0.2796$	0	0.000 065 49	−0.000 006 96
		5.0	0.000 026 96	0.000 006 93
		10.0	−0.000 010 17	−0.000 021 69
$\frac{1}{4}=0.25$	半隐式格式(4)~(5)		$n=10$上溢	
	含权α的半隐格式(11)~(12)$\alpha=0.2796$	0	0.000 976 2	−0.000 013 28
		5.0	0.000 007 72	0.000 040 75
		10.0	−0.000 016 13	−0.000 083 28
$r=1.05$	含权α的半隐格式 $\alpha=0.2796$	0	0.000 043 50	−0.000 126 86
		5.0	0.000 008 17	0.000 037 80
		10.0	−0.000 047 62	−0.000 194 23
$r=1.1$	含权α的半隐格式 $\alpha=0.2796$		$n=73$上溢	

参 考 文 献

1 赵 宁,戴嘉尊.Schrödinger型方程的一种半隐式差分格式.南京航空学院学报,1989,21(4):52~56

A Class of Semi-Implicit Difference Schemes for Schrödinger Type Equation of Higher Order

Zeng Wenping

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

Abstract A class of semi-implicit difference schemes are established for Schrödinger type equation of higher order. In reality, such schemes can be solved explicitly and their stability condition can be given.

Keywords Fourier analysis, stability, difference scheme, Schrödinger equation of higher order