第17卷 第1期 华侨大学学报(自然科学版) Vol. 17 No. 1
1996年1月 Journal of Huaqiao University (Natural Science) Jan. 1996

高阶 schrödinger 方程的恒稳显式与半显式差分格式*

曾 文 平

(华侨大学管理信息科学系,泉州 362011)

摘要 利用加耗散项的方法,构造了高阶 schrödinger 方程的无条件稳定的显式与半显式差分格式.

关键词 耗散项,显式与半显式差分格式,无条件稳定,高阶 schrödinger 方程

分类号 O 241.82

高阶 schrödinger 方程在量子力学、非线性光学及流体力学中有着广泛的应用,其最简单的模型方程为 $\mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial t}+(-1)^m\frac{\partial^{2m}u}{\partial x^{2m}}=0$[1],即

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

为更好地研究更一般的高阶 schrödinger 方程的差分解法,有必要深入研究模型方程(1)的差分解法.然而,Euler 显式格式是无条件不稳定的;蛙跳格式(Richardson 格式)虽是条件稳定的显式格式,但稳定性条件 $r=k/h^{2m}\leqslant 1/2^{2m}$($k,h$ 分别为时间及空间方向步长),随着方程阶数 $2m$ 的增加而变得越来越苛刻;而 Euler 隐式格式虽是无条件稳定,但需解耦合方程组,计算量较大.因此,寻找方程(1)的无条件稳定的显式或半显式格式便具有十分重要的理论意义和明显的实用价值.

为此,我们利用加耗散项的方法[2-3],即在方程(1)中的右端加入耗散项 R 使之成为

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

通过适当选取参数构造了无条件稳定的显式及半显式差分格式,包含了 $m=1$ 时 schrödinger 方程的已有差分格式[2~3].数值例子表明本文所构造的格式是有效的,进一步研究表明它们还可推广去解更一般的非线性的高阶 schrödinger 方程,对此将另文讨论.今后将用 Fourier 分析法研究差分格式的稳定性,为此需要如下的准则.

Miller 准则[4] 复系数 n 次多项式 $f(z)=a_0+a_1z+\cdots+a_nz^n(a_n\neq 0)$的所有根按模小于

* 本文 1995-05-27 收到;国务院侨办自然科学基金资助项目

等于1的充要条件是 $f^*(0)f(z)\equiv f(0)f^*(z)$，且 $f'(z)$ 只有按模小于等于1的根，其中

$$f^*(z)=\bar{a}_n+\bar{a}_{n-1}z+\cdots+\bar{a}_0z^n.$$

我们将分别用 k,h 表示时间 t 及空间 x 方向的步长，u_j^n 为 $u(jh,nk)$ 的差分逼近，δ_x^{2m} 表示 x 方向的 $2m$ 阶中心差分算子，$r=k/h^{2m}$ 表示网格比．

1 恒稳的两层半显式格式

(1) 耗散项 $R=(\alpha+\mathrm{i}\beta)hr\dfrac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}$ 及其相应的两层的半显式格式有下面2类，即

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{k}=\mathrm{i}(-1)^m\frac{\delta_x^{2m}u_j^n}{h^{2m}}+(\alpha+\mathrm{i}\beta)hr\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}-u_j^n+u_{j-1}^n}{kh}\tag{3}$$

及

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{k}=\mathrm{i}(-1)^m\frac{\delta_x^{2m}u_j^n}{h^{2m}}+(\alpha+\mathrm{i}\beta)hr\frac{u_{j+1}^{n+1}-u_j^{n+1}-u_{j+1}^n+u_j^n}{kh}.\tag{4}$$

不难计算，上述两格式的截断误差均为 $O(k+h^2+k/h)$；当 $k=o(h)$ 时，它相容于方程(1)．
格式(3)的特征方程的根为

$$\xi=\frac{\{1-\alpha r(1-\cos\theta h)+\beta r\sin\theta h\}+\mathrm{i}r\{2^m(1-\cos\theta h)^m-\beta(1-\cos\theta h)-\alpha\sin\theta h\}}{\{1-\alpha r(1-\cos\theta h)+\beta r\sin\theta h\}-\mathrm{i}r\{\beta(1-\cos\theta h)+\alpha\sin\theta h\}}$$

$$\overset{\text{记}}{\equiv}\frac{N}{D},\tag{5}$$

由于 ξ 的分子和分母的实部相同，若要 $|\xi|\leqslant1$，只要 $I_mN^2\leqslant I_mD^2$，即只要 $2^m(1-\cos\theta h)^m-2[\beta(1-\cos\theta h)+\alpha\sin\theta h]\leqslant0$．取 $\alpha=0$，上式成为 $2^{m-1}(1-\cos\theta h)^{m-1}\leqslant\beta$．因此只要取 $\beta\geqslant2^{2(m-1)}$，上式便恒成立．于是有如下定理．

定理1 若 $\alpha=0,\beta\geqslant2^{2(m-1)}$，则半显式格式(3)绝对稳定；若 $\alpha=0,\beta\leqslant-2^{2(m-1)}$，则半显式格式(4)绝对稳定．

容易看出，当 $m=1$ 时，若在(3)式中取 $\alpha=0,\beta=1$，在(4)式中取 $\alpha=0,\beta=-1$，则此时均为 Larkin 修改[5]．由 Larkin 修改得到了抛物型方程的绝对稳定的半显式格式，同时也适用于高阶 schrödinger 方程(1)．

(2) 耗散项 $R=(\alpha+\mathrm{i}\beta)h^2r\dfrac{\partial^3 u}{\partial t\partial x^2}(m\geqslant2)$ 及其相应的两层半显式格式为

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{k}=\mathrm{i}(-1)^m\frac{\delta_x^{2m}u_j^n}{h^{2m}}+(\alpha+\mathrm{i}\beta)h^2r\frac{\delta_x^2(u_j^{n+1}-u_j^n)}{kh^2},\tag{6}$$

其截断误差为 $O(k+h^2)$，当 $k=o(h)$ 时，它也相容于方程(1)．它的放大矩阵为

$$G=\frac{(1+4\alpha rs^2)+\mathrm{i}4rs^2(\beta+(4s^2)^{m-1})}{(1+4\alpha rs^2)+\mathrm{i}4rs^2\beta}$$

$$\overset{\text{记}}{\equiv}\frac{N}{D},\tag{7}$$

其中 $s=\sin(\theta h/2)$，由于分子和分母的实部相同，若要 $|\xi|\leqslant1$，只要 $I_mN^2\leqslant I_mD^2$．因此只要 $2\beta+(2s)^{2m-2}\leqslant0$，上式对任意实数 α 及 $\beta\leqslant-2^{2m-3}$ 都成立．因此有

定理2 对任意实数 α、半显式格式(6)($m\geqslant2$)当 $\beta\leqslant-2^{2m-3}$ 时绝对稳定．

注意，当 $m=1$ 时，取 $\alpha=0$，$\beta=-1/2$ 时格式(6)恒稳，但它为隐式格式；特别地当 $\alpha=0$，β

$=-1/2$ 时即为 Crank-Nicolson 格式．

2 恒稳的三层显式格式

若取耗项 $R=-\mathrm{i}\beta kr\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$，则可构造如下的三层显式格式，即

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2k}=\mathrm{i}(-1)^m\frac{\delta_x^{2m}u_j^n}{h^{2m}}-\mathrm{i}\beta kr\frac{u_j^{n+1}-2u_j^n+u_j^{n-1}}{k^2},\tag{8}$$

其截断误差为 $O(k^2+h^2+(k/h)^2)$，当 $k=o(h)$ 时，它也相容于方程(1)．其相应的特征方程为

$$f(\xi)=(1+\mathrm{i}2\beta r)\xi^2-\mathrm{i}2r[2\beta+(4s^2)^m]\xi-(1-\mathrm{i}2\beta r)=0.\tag{9}$$

易证 $f(0)f^*(\xi)\equiv f^*(0)f(\xi)$，而 $f'(\xi)=0$ 的根为 $\xi=\mathrm{i}r(2\beta+(4s^2)^m)/(1+\mathrm{i}2\beta r)$，其中 $s=\sin(\theta h/2)$．若要 $|\xi|\leqslant 1$，只要 $(2\beta+(4s^2)^m)^2r^2\leqslant 1+4\beta^2r^2$，即 $r^2(4\beta+(4s^2)^m)(4s^2)^m\leqslant 1$，上式当 $\beta\leqslant -4^{m-1}$ 时恒成立．此时方程(9)有一对模为 1 的共轭复根 ξ_1,ξ_2，因而 $c_1|\xi_1|^n+c_2|\xi_1|^n\leqslant c_1+c_2=\text{const}$，于是有下面的定理 3.

定理 3　三层显式格式(8)当 $\beta\leqslant -4^{m-1}$ 时绝对稳定．

当 $m=1,\beta=-1$ 时，式(8)恰为 Dufort-Frankel 格式．因此，定理 3 包含了 D-F 型格式．但当 $m\geqslant 2$ 时的 D-F 型格式则不满足稳定性条件．事实上，这时 u_j^n 的系数和为 $(-1)^m(-1)^m c_{2m}^m+2\beta=0$，从而得 $\beta=-\dfrac{1}{2}c_{2m}^m=-\dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{(2m)!}{(m!)^2}\geqslant -4^{m-1}$，不满足稳定性条件．

3 数值例子

考虑如下的周期初值问题，即

$$\left.\begin{array}{ll}\mathrm{i}u_t+u_{xxxx}=0 & (x\in R,t>0),\\ u(x,o)=\dfrac{5}{2}\sqrt{2}(1+\mathrm{i})\sin x & (x\in R),\\ u(x+2\pi,t)=u(x,t) & (x\in R,t\geqslant o),\end{array}\right\}\tag{10}$$

其精确解为

$$u(x,t)=5\exp(\mathrm{i}(t+\frac{\pi}{4}))\sin x.\tag{11}$$

为节省篇幅，我们仅计算三层显式格式(8)与蛙跳格式(即 Richardson 格式)，即

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2k}=\mathrm{i}(-1)^m\frac{\delta_x^{2m}u_j^n}{h^{2m}}\tag{12}$$

其截断误差为 $O(k^2+h^2)$，稳定性条件为 $r\leqslant 1/2^{2m}$. 计算结果列于附表，以便比较，同时列出半个周期[0,π]的数值误差值．附表中的三层格式，第一层的网格函数值均按精确值进行计算，数值计算结果表明理论分析是正确的．

附表　差分格式误差 $|u|^2-|u_h^N|^2(N=2\,000)$ 比较①

	蛙跳格式(14)	恒稳的三层显式格式(8)($\beta=-4$)		
	6×10^{-4}	10^{-3}	8×10^{-3}	10^{-2}
	0.061 6<1/16	0.102 7	0.822 8	1.027
π/10	0.000 016 46	−0.000 030 39	0.000 030 23	−0.003 604 70

续附表

	蛙跳格式(14)	恒稳的三层显式格式(8)($\beta=-4$)		
	6×10^{-4}	10^{-3}	8×10^{-3}	10^{-2}
	0.061 6<1/16	0.102 7	0.822 8	1.027
$2\pi/10$	0.000 059 56	−0.000 110 01	0.000 109 43	−0.013 041 82
$3\pi/10$	0.000 112 90	−0.000 208 47	0.000 207 35	−0.024 706 76
$4\pi/10$	0.000 156 11	−0.000 288 13	0.000 286 60	−0.341 144 07
$5\pi/10$	0.000 172 37	−0.000 318 56	0.000 316 85	−0.037 748 72
$6\pi/10$	0.000 155 96	−0.000 288 18	0.000 286 59	−0.341 144 04
$7\pi/10$	0.000 112 91	−0.000 208 52	0.000 207 43	−0.024 706 80
$8\pi/10$	0.000 059 64	−0.000 109 97	0.000 109 55	−0.013 041 86
$9\pi/10$	0.000 016 52	−0.000 030 34	0.000 303 5	−0.003 604 65
π	0	0	0	0

①本表取 $h=\pi/10$，$r=k/h^4$；若取 $k=10^{-3}$，则 $1/16<r<1/8$；当 $N=25$ 时，蛙跳格式(14)溢出

参　考　文　献

1 周毓麟，符鸿源．非线性高阶广义 schrödinger 型方程组的周期边界问题．数学物理学报，1981，(2)：156～164

2 Chan T F. Stability analysis of finite difference schemes for the advection-diffusion equation. SIAM. J. Numer. Anal.，1986，23：272～284

3 戴伟忠．解 schrödinger 方程的绝对稳定半显式与显式差分格式．计算数学，1989，(2)：128～131

4 秦孟兆．色散方程 $u_t=au_{xxx}$ 的差分格式．计算数学，1984，(1)：1～13

5 Jain M K. Numerical solution of differential equation. Wiley Eastern Limited，New Delhi，1979，26～81

6 Richtmyer R D，Morton K W. Difference methods for initial-value problems. 2nd ed. New York：Wiley，1967. 38～107

Steady Explicit and Semi-Explicit Difference Scheme of High-Order Schrödinger Equation

Zeng Wenping

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

Abstract By introduing a dissipative term，the author constructs the unconditionally stable expilcit and semi-explicit difference scheme of high-order Schrödinger equation.

Keywords dissipative term，explicit and semi-explicit difference scheme，unconditionally stable，high-order Schrödinger equation