文章编号　1000-5013(2002)01-012-04

高阶Schrödinger方程的显式差分格式

单　双　荣

(华侨大学数学系, 泉州 362011)

摘要　对高阶Schrödinger方程常规差分格式的稳定性进行论证,用加入耗散项的方程构造两种不同的显式差分格式. 同时, 对其稳定性作理论分析, 并用数值例子说明所作分析的正确性.

关键词　高阶Schrödinger方程, 差分格式, 稳定性
中图分类号　O 241.82　　文献标识码　A

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. 最简单的模型方程为 $i\frac{\partial u}{\partial t}+(-1)^m\frac{\partial^{2m}u}{\partial x^{2m}}=0$ [1], 即

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

为了寻求高稳定性的差分格式, 文[2~5]利用在方程中加入耗散项的方法. 即在方程(1)的右端加入耗散项 R, 使之成为

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

通过适当地选取参数, 构造高稳定性或无条件稳定的差分格式. 本文对高阶Schrödinger方程蛙跳格式的稳定性进行了论证, 进而通过对加入耗散项的方程(2)构造了不同的显式差分格式, 放宽了对 r 的要求. 最后, 用数值试验证明所作的理论分析是正确的. 为了证明本文所给出差分格式的稳定性, 需引用相关结论——文[6]的引理, 即复系数二次方程 $A\rho^2+B\rho+C=0$. 当 $|A|=|C|$ 时, 其两根按模≤1, 且无重根的充要条件为 $\bar{A}B=\bar{B}C$, $|B|<2|A|$.

1　常规差分格式

以下分别用 τ, h 表示时间 t 及空间方向 x 的步长, 用 u_j^n 表示 $u(jh, n\tau)$ 的差分逼近. 对于方程(1)的左端, 用关于 t 的中心差商代替 $\frac{\partial u}{\partial t}$, 右端用关于 x 的 $2m$ 阶中心差商 $\frac{\delta_x^{2m}u}{h^{2m}}$ 代替 $\frac{\partial^{2m}u}{\partial x^{2m}}$. 于是, 得到的蛙跳(Richardson)格式为

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\tau}=i(-1)^m\frac{\delta_x^{2m}u_j^n}{h^{2m}}, \tag{3a}$$

收稿日期　2001-09-21　　作者简介　单双荣(1956-), 男, 讲师
基金项目　福建省自然科学基金资助项目

或

$$u_j^{n+1}=\mathrm{i}(-1)^m 2r\delta_x^{2m}u_j^n+u_j^{n-1},\tag{3b}$$

其中 $r=\tau/h^{2m}$ 为网格比. 差分格式(3) 的截断误差为 $O(\tau^2+h^2)$. 众所周知, 关于差分格式(3) 的稳定性有如定理 1 的结论.

定理 1　当 $r=1/2^{2m}$ 时, 蛙跳格式(3) 是稳定的.

证明　差分格式(3) 的特征方程为

$$f(\xi)=\xi^2-\mathrm{i}2rs^*\xi-1=0,\tag{4}$$

其中 $s^*=(4s^2)^m$, $s=\sin\frac{\theta h}{2}$(下同). 因 $A=1$, $B=-\mathrm{i}2rs^*$, $C=-1$, 易验证 $|A|=|C|=1$, $\bar{A}B=\bar{B}C=-\mathrm{i}2rs^*$. 由 $|B|<2|A|$, 得 $rs^*<1$, $r\cdot 4^m s^{2m}<1$, 当 $r<1/4^m=1/2^{2m}$ 时恒成立. 即当 $r<1/2^{2m}$ 时, 文[5]的引理条件满足. 定理得证.

2　R 为 $-\mathrm{i}\beta h^{2m}\frac{\partial^{4m}u}{\partial x^{4m}}$ 及其三层显格式

对于方程(2), 其左端用关于 t 的中心差商代替 $\frac{\partial u}{\partial t}$, 右端用关于 x 的 $2m$ 阶及 $4m$ 阶中心差分别代替 $\frac{\partial^{2m}u}{\partial x^{2m}}$ 以及 $\frac{\partial^{4m}u}{\partial x^{4m}}$, 得到差分格式为

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\tau}=\mathrm{i}(-1)^m\frac{\delta_x^{2m}u_j^n}{h^{2m}}-\mathrm{i}\beta h^{2m}\frac{\delta_x^{4m}u_j^n}{h^{4m}},\tag{5a}$$

或

$$u_j^{n+1}=\mathrm{i}(-1)^m 2r\delta_x^{2m}u_j^n-\mathrm{i}2\beta r\delta_x^{4m}u_j^n+u_j^{n-1}.\tag{5b}$$

其局部截断误差为 $O(\tau^2+h^2)$.

定理 2　当 $r\le 2/2^{2m}$, $1/2^{2m+1}<\beta\le 1/2^{2m}$ 时, 格式(5a) 稳定.

证明　格式(5) 的特征方程为

$$\rho^2+\mathrm{i}[-2rs^*+2r\beta(s^*)^2]\rho-1=0.\tag{6}$$

因 $A-1=-C$, $B=\mathrm{i}[-2rs^*+2r\beta(s^*)^2]$, 则 $|A|=|C|=1$, $\bar{A}B=\bar{B}C=B$. 引理的条件 $|B|<2|A|$ 等价于

$$2r|s^*-\beta(s^*)^2|<2.\tag{7}$$

当 $0<\beta\le 1/2^{2m}$ 时, $s^*-\beta(s^*)^2\ge 0$. 令 $f(s^*)=s^*-\beta(s^*)^2$, 则有

$$\max f(s^*)=f\left(\frac{1}{2\beta}\right)=\frac{1}{4\beta}.$$

又因 $0\le s^*=(4s^2)^m=\frac{1}{2\beta}\le 4^m$, 即当 $\beta>1/2^{2m+1}$, 或 $0\le\frac{1}{4\beta}<\frac{1}{2}\cdot 2^{2m-1}=2^{2m-1}$. 从而, 式(7) 可化简为 $r\cdot 2^{2m-1}\le 1$, 即 $r\le 2/2^{2m}$. 由引理可知, 定理的结论成立. 定理 2 得证.

格式(5) 比蛙跳格式(3) 的稳定性限制放宽了一倍.

3　R 为 $\mathrm{i}\beta h^{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 及其三层显格式

对于方程(2), 其左端同样用关于 t 的中心差商代替 $\frac{\partial u}{\partial t}$, 右端用关于 x 的中心差商和关于 t

的中心差商分别代替$\frac{\partial^{2m}u}{\partial x^{2m}}$以及$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. 可得到差分格式为

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

或

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{r-\mathrm{i}2\beta}[\mathrm{i}(-1)^m 2r^2\delta_x^{2m}u_j^n-\mathrm{i}4\beta u_j^n+(r+\mathrm{i}2\beta)u_j^{n-1}].\tag{8b}$$

其局部截断误差为$O(\tau^2+h^2)$.

定理 **3** 当$\beta\geq 4^{m-1}\cdot r^2$时, 格式(8)稳定.

证明 格式(8)的特征方程为

$$(r-\mathrm{i}2\beta)\rho^2-\mathrm{i}(2r^2s^*-4\beta)\rho-(r+\mathrm{i}2\beta)=0.\tag{9}$$

因为$A=r-\mathrm{i}2\beta, B=\mathrm{i}(4\beta-2r^2s^*), C=-(r+\mathrm{i}2\beta)$, 所以$|A|=|C|$. 又$\bar{A}B-\bar{B}C=(r-\mathrm{i}2\beta)\cdot\mathrm{i}(4\beta-2r^2s^*)-\mathrm{i}(4\beta-2r^2s^*)\cdot(r-\mathrm{i}2\beta)=0$, 即$\bar{A}B=\bar{B}C$. 而$|B|<2|A|$等价于$(2\beta-r^2s^*)^2<r^2+4\beta^2$, 即$s^*(r^2s^*-4\beta)<1$. 令$r^2s^*-4\beta\leq 0$, 因$s^*=(4s^2)^m\leq 4^m$, 由此得$\beta\geq 4^{m-1}r^2$. 由引理可知, 定理3的结论成立. 定理3得证.

4 数值例子

考虑下列周期初值问题

$$\mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}=0,\qquad x\in R, t>0,$$

$$u(x,0)=\frac{5}{2}\sqrt{2}(1+\mathrm{i})\sin x,\qquad x\in R,$$

$$u(x+2\pi,t)=u(x,t),\qquad x\in R, t\geq 0,\tag{10}$$

其精确解$u(x,t)=5\exp\{\mathrm{i}(t+\frac{\pi}{4})\}\cdot\sin x$. 取$\Delta x=\pi/10$. 因格式(2)为三层格式, 除初始层网格函数值为已知外, 还需要用其它方法预先计算出第1层网格上的函数值. 为简化计算, 第1层网格函数值按精确值进行计算. 下面给出精度比较表, 其值等于精确解的模减去差分格式解的模的数值, 计算结果如表1所示.

表1 精度比较表($n=1\,000$)

格式	r	β	x: $\pi/10$	$3\pi/10$	$5\pi/10$	备 注
格式(3)	1/16	–	$7.154\,26\times10^{-6}$	$1.873\,01\times10^{-5}$	$2.315\,17\times10^{-5}$	$r=1/2^{2m}$
	1/32	–	$2.164\,72\times10^{-6}$	$5.667\,30\times10^{-6}$	$7.005\,17\times10^{-6}$	$r<1/2^{2m}$
	1/15	–	$-3.364\,53\times10^{141}$	$-3.364\,53\times10^{141}$	$-3.364\,53\times10^{141}$	$r>1/2^{2m}$
格式(5)	1/8	1/16	$1.085\,16\times10^{-5}$	$2.840\,99\times10^{-5}$	$3.511\,66\times10^{-5}$	$r=2/2^{2m}, \beta=1/2^{2m}$
	1/8	1/32	$1.065\,45\times10^{-5}$	$2.789\,38\times10^{-5}$	$3.447\,86\times10^{-5}$	$\beta=1/2^{2m+1}$
	1/8	1/24	$1.072\,02\times10^{-5}$	$2.806\,58\times10^{-5}$	$3.469\,11\times10^{-5}$	$1/2^{2m+1}<\beta<1/2^{2m}$
	1/16	1/24	$7.324\,96\times10^{-6}$	$1.917\,70\times10^{-5}$	$2.370\,41\times10^{-5}$	$r<2/2^{2m}$
	1/32	1/24	$2.216\,01\times10^{-6}$	$5.801\,58\times10^{-6}$	$7.171\,14\times10^{-6}$	$r<2/2^{2m}$
	1/15	1/16	$8.126\,82\times10^{-6}$	$2.127\,63\times10^{-5}$	$2.629\,90\times10^{-5}$	$r<2/2^{2m}$

附表

格式	r	β	x			备注
			$\pi/10$	$3\pi/10$	$5\pi/10$	
格式(5)	1/15	1/50	7.93564×10^{-6}	2.07758×10^{-5}	2.56803×10^{-5}	$\beta< 1/2^{2m+1}$
	1/8	1/8	-3.85588×10^{118}	-4.60115×10^{118}	-5.82107×10^{118}	$\beta> 1/2^{2m}$
	1/4	1/24	溢出	溢出	溢出	$r> 2/2^{2m}$
格式(8)	1/15	1/4	-1.19525×10^{-4}	-3.12921×10^{-4}	-3.86792×10^{-4}	$\beta> 4^{m-1}\cdot r^2$
	1/15	1/500	-1.89198×10^{27}	-1.89198×10^{27}	-1.89198×10^{27}	$\beta< 4^{m-1}\cdot r^2$
	2	16	-2.23188×10^{-2}	-5.84313×10^{-2}	-7.22250×10^{-2}	$\beta= 4^{m-1}\cdot r^2$
	2	20	-1.12277×10^{-2}	-2.93946×10^{-2}	-3.63337×10^{-2}	$\beta< 4^{m-1}\cdot r^2$
	2	15	-2.05959×10^{203}	-2.05959×10^{203}	-2.05959×10^{203}	$\beta> 4^{m-1}\cdot r^2$

计算结果表明, 定理 1 在 $r= 1/2^{2m}$ 时是稳定的. 此外, 定理 2 和定理 3 关于 β 的条件, 也可适当放宽.

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[J]. 数学物理学报, 1981, 1(2): 156～164

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

3 林鹏程. Schrödinger 型方程的三层显式格式[J]. 计算数学, 1988, 10(3): 328～331

4 曾文平. 高阶 Schrödinger 方程的差分格式[J]. 应用数学, 1996, 9(4): 523～525

4 曾文平. 高阶 Schrödinger 方程的恒稳的显式与半显式格式[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 1996, 17(1): 1～4

6 邬华谟. 二次多项式的 Schur-Cohn 定理和 Miller 定理的初等证明[J]. 数值计算与计算机应用, 1982, 3(1): 63～64

Explicit Difference Schemes for Solving Higher-Order Schrödinger Equation

Shan Shuangrong

(Dept. of Math., Huaqiao Univ., 362011, Quanzhou)

Abstract　A demonstration is made on the stability of the conventional difference schemes for solving higher-order Schrödinger equation, and two different explicit difference schemes are constructed for solving equations with the addition of dissipation term. Moreover, theoretical analysis is made on their stability; and the correctness of the analysis is explained by numerical examples.

Keywords　higher-order Schrödinger equation, difference schemes, stability