第 25 卷　第 3 期　　华侨大学学报(自然科学版)　　Vol. 25　No. 3
2004 年 7 月　　Journal of Huaqiao University (Natural Science)　　Jul. 2004

文章编号　1000-5013(2004)03-0237-04

Schrödinger 方程一族高精度恒稳差分格式

曾　文　平

(华侨大学数学系, 福建 泉州 362021)

摘要　Schrödinger 方程 $\frac{\partial u}{\partial t}= i\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, 可构造一族含双参数的三层高精度隐式差分格式. 当参数 $\alpha=1/2$, $\beta=0$ 时得到一个双层格式. 证明该格式对任意非负参数 $\alpha\geqslant 0$, $\beta\geqslant 0$ 都是绝对稳定的, 并且其截断误差阶为 $O(\Delta t^2+\Delta x^4)$. 数值例子表明, 文中所建立的差分格式是有效的, 理论分析与实际计算相吻合.

关键词　Schrödinger 方程, 差分格式, 高精度, 绝对隐定

中图分类号　O 241.82　　　　文献标识码　A

众所周知, Schrödinger 方程在等离子体、量子力学及流体力学中都有广泛的应用, 其最简单的模型方程为

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

对它的差分解法的研究已有很多成果[1~2], 但无论是显式格式或隐式格式其精度都不高, 截断误差阶仅为 $O(\Delta t+\Delta x^2)$ 或 $O(\Delta t^2+(\Delta t/\Delta x)^2+\Delta x^2)$ 或 $O(\Delta t^2+\Delta x^2)$. 例如, 著名的 Crank-Nicolson 格式

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}=\frac{i}{2\Delta x^2}\delta_x^2(u_j^{n+1}-u_j^n) \tag{2}$$

也仅为 $O(\Delta t^2+\Delta x^2)$. 其中 Δt, Δx 分别为时间方向 t 及空间方向 x 的步长, δ_x^2 为关于 x 的二阶中心差分. 为此, 本文对方程(1)构造一族含双参数的三层高精度隐式差分格式. 当参数 $\alpha=1/2$, $\beta=0$ 时得到一个双层格式. 可以证明该格式对任意非负实参数 $\alpha\geqslant 0$, $\beta\geqslant 0$ 都是绝对稳定的, 并且其截断误差阶为 $O(\Delta t^2+\Delta x^4)$. 数值例子表明, 本文所建立的差分格式是有效的, 且理论分析与实际计算相吻合.

1　差分格式的提出

对 Schrödinger 方程(1)提出如下的三层多参数隐式差分格式

$$\begin{aligned}&\frac{\zeta_1}{2\Delta t}\{(\alpha+\frac{1}{2})u_{j+1}^{n+1}-2\alpha u_{j+1}^n+(\alpha-\frac{1}{2})u_{j+1}^{n-1}\}+\frac{\zeta_0}{\Delta t}\{(\alpha+\frac{1}{2})u_j^{n+1}-2\alpha u_j^n+\\&(\alpha-\frac{1}{2})u_j^{n-1}\}+\frac{\zeta_1}{2\Delta t}\{(\alpha+\frac{1}{2})u_{j-1}^{n+1}-2\alpha u_{j-1}^n+(\alpha-\frac{1}{2})u_{j-1}^{n-1}\}=\\&i\{(\frac{1}{4}+\frac{1}{2}\alpha+\beta)\frac{\delta_x^2u_j^{n+1}}{\Delta x^2}+(\frac{1}{2}-2\beta)\frac{\delta_x^2u_j^n}{\Delta x^2}+(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\alpha+\beta)\frac{\delta_x^2u_j^{n-1}}{\Delta x^2}\}.\end{aligned} \tag{3}$$

格式(3)的实参数偶(α,β)为非负实数偶. 而 ζ_0, ζ_1 是待定实常数. 适当选择这些参数和待定参数, 可以使差分方程(3)逼近微分方程(1)具有尽可能高阶的离散误差, 而且有较好的稳定性. 对于参数偶(α,β)的不同选取, 便可得到不同的差分格式.

2　截断的误差的讨论

对于 Schrödinger 方程(1), 差分格式(3)的截断误差阶可达 $O(\Delta t^2+\Delta x^4)$. 下面给予推导, 并由此

收稿日期　2003-11-05

作者简介　曾文平(1940-), 男, 教授, 主要从事偏微分方程数值解和数值代数的研究. E-mail: zengwp@hqu.edu.cn

确定常数 $\zeta_0,\ \zeta_1$. 记

$$D_t(\alpha,j)=\frac{1}{\Delta t}\{(\alpha+\frac{1}{2})u_j^{n+1}-2\alpha u_j^n+(\alpha-\frac{1}{2})u_j^{n-1}\},\tag{4}$$

$$\eta_x(n)=\frac{\delta_x^2u_j^n}{\Delta x^2}=\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{\Delta x^2}.\tag{5}$$

设方程(1)的解 $u(x,t)$ 充分光滑, 使得下列关系式成立, 即

$$\frac{\partial^{p+q}u}{\partial t^q\partial x^p}=\mathrm{i}^q\frac{\partial^{p+2q}u}{\partial x^{p+2q}},\qquad p,q\ \text{为非负整数}.\tag{6}$$

令 $r=\Delta t/\Delta x^2$ 为格式的网格比于网格点 $(j\Delta x,\ n\Delta t)$ 处进行Taylor展开得

$$D_t(\alpha,j)=\frac{\partial u}{\partial t}+\alpha\Delta t\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{1}{6}\Delta t^2\frac{\partial^3u}{\partial x^3}+O(\Delta t^3).\tag{7}$$

进而, 可得式(3)左端为

$$\frac{\zeta_1}{2}(D_t(\alpha,j+1)+(D_t(\alpha,j-1))+\zeta_0D_t(\alpha,j)=(\zeta_1+\zeta_0)\frac{\partial u}{\partial t}+$$
$$\frac{1}{2}\zeta_1\Delta x^2\frac{\partial^3u}{\partial t\partial x^2}+\alpha(\zeta_1+\zeta_0)\Delta t\frac{\partial^2u}{\partial t^2}+\frac{1}{24}\zeta_1\Delta x^4\frac{\partial^5u}{\partial t\partial x^4}+\frac{\alpha}{2}\zeta_1\Delta t\Delta x^2\frac{\partial^4u}{\partial t^2\partial x^2}+$$
$$\frac{\zeta_1+\zeta_0}{6}\Delta t^2\frac{\partial^3u}{\partial t^3}+O(\Delta x^6+\Delta t\Delta x^4+\Delta t^2\Delta x^2+\Delta t^3).\tag{8}$$

又

$$\eta_x(n)=\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{1}{12}\Delta x^2\frac{\partial^4u}{\partial x^4}+\frac{\Delta x^4}{360}\frac{\partial^6u}{\partial x^6}+O(\Delta x^8),\tag{9}$$

并利用关系式(6)可得(3)式右端为

$$\mathrm{i}\{(\frac{1}{4}+\frac{1}{2}\alpha+\beta)\eta_x(n+1)+(\frac{1}{2}-2\beta)\eta_x(n)+(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\alpha+\beta)\eta_x(n-1)\}=$$
$$\mathrm{i}\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+\frac{1}{12}\Delta x^2\frac{\partial^3u}{\partial t\partial x^2}+\alpha\Delta t\frac{\partial^2u}{\partial t^2}+\frac{1}{360}\Delta x^4\frac{\partial^5u}{\partial t\partial x^4}+\frac{\alpha}{12}\Delta t\Delta x^2\frac{\partial^4u}{\partial x^2\partial t^2}+$$
$$(\frac{1}{4}+\beta)\Delta t^2\frac{\partial^3u}{\partial t^3}+O(\Delta x^6+\Delta t\Delta x^4+\Delta t^2\Delta x^2+\Delta t^3).\tag{10}$$

比较式(8)和式(10)可知, 为使差分格式(3)的截断误差阶为 $O(\Delta t^2+\Delta x^4)$, 必需使参数 $\zeta_1,\ \zeta_0$ 同时满足 $\zeta_1+\zeta_0=1,\ \frac{1}{2}\zeta_1=\frac{1}{12}$. 由此解得

$$\zeta_1=\frac{1}{6},\quad\zeta_0=\frac{5}{6}.\tag{11}$$

将其代入式(3), 便得截断误差阶达 $O(\Delta t^2+\Delta x^4)$ 的三层双参数隐式差分格式

$$\frac{1}{12\Delta t}\{(\alpha+\frac{1}{2})u_{j+1}^{n+1}-2\alpha u_{j+1}^n+(\alpha-\frac{1}{2})u_{j+1}^{n-1}\}+\frac{5}{6\Delta t}\{(\alpha+\frac{1}{2})u_j^{n+1}-2\alpha u_j^n+$$
$$(\alpha-\frac{1}{2})u_j^{n-1}\}+\frac{1}{12\Delta t}\{(\alpha+\frac{1}{2})u_{j-1}^{n+1}-2\alpha u_{j-1}^n+(\alpha-\frac{1}{2})u_{j-1}^{n-1}\}=$$
$$\mathrm{i}\{(\frac{1}{4}+\frac{1}{2}\alpha+\beta)\frac{\delta_x^2u_j^{n+1}}{\Delta x^2}+(\frac{1}{2}-2\beta)\frac{\delta_x^2u_j^n}{\Delta x^2}+(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\alpha+\beta)\frac{\delta_x^2u_j^{n-1}}{\Delta x^2}\}.\tag{12}$$

其截断误差表达式为

$$R_j^n=-\Delta t^2\{\frac{1}{240}\frac{\Delta x^4}{\Delta t^2}+(\frac{1}{12}+\beta)\}\frac{\partial^3u}{\partial t^3}+O(\Delta x^6+\Delta t\Delta x^4+\Delta t^2\Delta x^2+\Delta t^3)=$$
$$O(\Delta t^2+\Delta x^4).\tag{13}$$

由于当 $\beta=-\frac{1}{12}$ 或 $\beta=-\frac{1}{12}-\frac{1}{240r^2}$ 时均不满足稳定性条件, 故格式(12)的截断误差阶不可能更高了. 在特殊情况下, 由格式(12)可以获得如下几种特殊的高精度格式.

(Ⅰ) $\alpha=\frac{1}{2},\ \beta=0$ 为一个两层格式, 记为格式(Ⅰ). 有

$$(1-6\mathrm{i}r)(u_{j+1}^{n+1}+u_{j-1}^{n+1})+(10+12\mathrm{i}r)u_j^{n+1}=$$
$$(1+6\mathrm{i}r)(u_{j+1}^{n}+u_{j-1}^{n})+(10-12\mathrm{i}r)u_j^{n}. \tag{14}$$

(Ⅱ) $\alpha=1$, $\beta=\frac{1}{4}$, 为一个三层格式, 记为格式(Ⅱ). 有

$$(3-24\mathrm{i}r)(u_{j+1}^{n+1}+u_{j-1}^{n+1})+(30+48\mathrm{i}r)u_j^{n+1}=$$
$$4((u_{j+1}^{n}+u_{j-1}^{n})+40u_j^{n}-(u_{j+1}^{n-1}+u_{j-1}^{n-1})-10u_j^{n-1}. \tag{15}$$

(Ⅲ) $\alpha=0$, $\beta=0$, 也是一个三层格式, 记为格式(Ⅲ). 有

$$(1-6\mathrm{i}r)(u_{j+1}^{n+1}+u_{j-1}^{n+1})+(10+12\mathrm{i}r)u_j^{n+1}=$$
$$12\mathrm{i}r(u_{j+1}^{n}+u_{j-1}^{n})-24\mathrm{i}ru_j^{n}+(1+6\mathrm{i}r)(u_{j+1}^{n-1}+u_{j-1}^{n-1})+(10-12\mathrm{i}r)u_j^{n-1}. \tag{16}$$

3 稳定性分析

为研究差分格式稳定性, 需如下Miller准则[3]. 设复系数二次方程

$$Az^2+Bz+C=0,\qquad A\neq 0 \tag{17}$$

的根 $z_1=\rho e^{\mathrm{i}\varphi}$, $z_2=\xi e^{\mathrm{i}\varphi}$, 且 $\rho\geqslant\xi$. (1) 若 $|A|>|B|$, 则 $\rho\leqslant 1\Leftrightarrow|\bar{A}B-\bar{B}C|\leqslant|A|^2-|C|^2$. (2) 若 $|A|=|C|$, 则 $\rho=\xi=1$ 且 $z_1\neq z_2\Leftrightarrow\bar{A}B=\bar{B}C$, $|B|\leqslant 2|A|$. 现用Fourier方法分析差分格式(12)的稳定性, 分两种情况讨论.

(Ⅰ) 两层隐格式(Ⅰ)(即格式(14), 或 $\alpha=\frac{1}{2}$, $\beta=0$ 的格式(12)). 此时传播因子为

$$G(\theta)=\frac{12-4s^2-24\mathrm{i}rs^2}{12-4s^2+24\mathrm{i}rs^2}=\frac{3-s^2-6\mathrm{i}rs^2}{3-s^2+6\mathrm{i}rs^2}, \tag{18}$$

其中 $s=\sin\frac{\theta}{2}$. 显见, 对任意 $r>0$ 均有 $|G(\theta)|=1$. 因此有

定理1 两层隐格式(Ⅰ)(即格式(14), 或 $\alpha=\frac{1}{2}$, $\beta=0$ 的格式(12))绝对稳定.

(Ⅱ) 两层隐格式(12). 由Fourier方法知, 格式(12)的传播矩阵的特征方程为形如式(17)的复系数二次方程, 其中系数 $A=(\alpha+\frac{1}{2})(1-\frac{1}{3}s^2)+\mathrm{i}(1+2\alpha+4\beta)rs^2$, $B=-2\alpha(1-\frac{1}{3}s^2)+2\mathrm{i}(1-4\beta)rs^2$, $C=(\alpha-\frac{1}{2})(1-\frac{1}{3}s^2)+\mathrm{i}(1-2\alpha+4\beta)rs^2$. 分两种情况讨论. (1) 当 $\alpha=0$ 时, 此时 $A=-\bar{C}=\frac{1}{2}(1-\frac{1}{3}s^2)+\mathrm{i}(1+4\beta)rs^2$, $B=2\mathrm{i}(1-4\beta)rs^2$. 故 $|A|=|C|$ 且 $\bar{A}B\equiv-BC\equiv\bar{B}C$, 又对任意 $\beta\geqslant 0$ 均有 $4|A|^2-|B|^2=(1-\frac{1}{3}s^2)+32\beta r^2s^4=(\frac{2}{3}+\frac{1}{3}(1-s^2))^2+32\beta r^2s^4\geqslant\frac{4}{9}>0$, 即 $|B|<2|A|$. 所以此时Miller准则成立, 且无模为1的重根. (2) 当 $\alpha\neq 0$ 时, 显见, 对任意 $\alpha>0$, $\beta\geqslant-\frac{1}{4}$ 时, 有 $|A|^2-|C|^2=2\alpha(1-\frac{1}{3}s^2)^2+8\alpha(1+4\beta r)r^2s^4\geqslant\frac{8}{9}\alpha>0$. 所以 $|A|>|C|$. 又经计算知, 对任意 $\alpha>0$, $\beta\geqslant 0$ 均有 $(|A|^2-|C|^2)^2-|\bar{A}B-\bar{B}C|^2=1\,024\alpha^2\beta r^4s^4\geqslant 0$. 故由Mill准则知, 对任意 $\alpha>0$, $\beta\geqslant 0$ 特征方程两根按模小于等于1, 且 $|\lambda|=1$ 只有单根, 故格式(12)绝对稳定. 注意, 这种情况事实上蕴含了定理1. 综上所述, 便得

定理2 对任意非负实数 $\alpha\geqslant 0$, $\beta\geqslant 0$, 三层隐格式(12)绝对稳定. 特别地, 两层格式(Ⅰ)(即(式14))及三层格式(Ⅱ)(即(式15))与格式(Ⅲ)(即(式16))都是绝对稳定的.

4 数值例子

考虑Schrödinger方程周期初值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\mathrm{i}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\qquad u(x,0)=\exp(\mathrm{i}\frac{\pi}{4})\sin x,\qquad u(x+2\pi,t)=u(x,t), \tag{19}$$

其精确解为

$$u(x,t)=\exp(\mathrm{i}(\frac{\pi}{4}-t))\sin x. \tag{20}$$

取 $\Delta t=\frac{2\pi}{64}=\frac{\pi}{32}$, $\Delta t=r\Delta x^2$, $r=\frac{1}{2}$, 1. 按格式格(Ⅰ)~(Ⅲ)(即式(14)~(16))及C-N格式(2)进行计算到 $n=500$. 列出其数值误差比较表如表1所示. 表中的三层格式(Ⅱ)及(Ⅲ), 第1层的网格函数值均按精确值计算. 结果表明本文格式比C-N格式精度高 $10^{-1}\sim10^{-3}$, 我们所的理论分析是正确的.

表1 Schrödinger 方程 $\frac{\partial u}{\partial t}=\mathrm{i}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 误差 $(u_j^n-u(x_j,t_n))$ 表

x	r	格式(Ⅰ)		格式(Ⅱ)	
		实部	虚部	实部	虚部
$\frac{5\pi}{32}$	1/2	-1.40740×10^{-7}	-2.63435×10^{-6}	-4.59461×10^{-7}	-9.19360×10^{-6}
	1	-1.15919×10^{-5}	1.43739×10^{-5}	-4.49685×10^{-5}	5.49492×10^{-5}
$\frac{22\pi}{32}$	1/2	-2.48242×10^{-7}	-4.64657×10^{-6}	-8.10416×10^{-7}	-1.62160×10^{-5}
	1	-2.04463×10^{-5}	2.53533×10^{-5}	-7.93174×10^{-5}	9.69218×10^{-5}
$\frac{39\pi}{32}$	1/2	-1.89404×10^{-7}	-3.54524×10^{-6}	6.18330×10^{-7}	1.23725×10^{-5}
	1	1.56001×10^{-5}	-1.93440×10^{-5}	6.05174×10^{-5}	-7.39492×10^{-5}
$\frac{56\pi}{32}$	1/2	2.11113×10^{-7}	3.95159×10^{-6}	6.89203×10^{-7}	1.37906×10^{-5}
	1	-1.15673×10^{-5}	1.43725×10^{-5}	-1.15883×10^{-3}	1.43128×10^{-3}

x	r	格式(Ⅲ)		C-N格式	
		实部	虚部	实部	虚部
$\frac{5\pi}{32}$	1/2	-1.38723×10^{-7}	-2.62989×10^{-6}	-4.788105×10^{-5}	-9.12960×10^{-3}
	1	-1.15673×10^{-5}	1.43725×10^{-5}	-1.15883×10^{-3}	1.43128×10^{-3}
$\frac{22\pi}{32}$	1/2	-2.44685×10^{-7}	-4.63864×10^{-6}	-8.44696×10^{-5}	-1.61037×10^{-3}
	1	-2.04028×10^{-5}	2.53508×10^{-5}	-0.04400×10^{-3}	2.52454×10^{-3}
$\frac{39\pi}{32}$	1/2	1.86689×10^{-7}	3.53919×10^{-6}	6.44485×10^{-5}	1.22864×10^{-3}
	1	1.55669×10^{-5}	-1.93421×10^{-5}	1.55953×10^{-3}	-1.92617×10^{-3}
$\frac{56\pi}{32}$	1/2	2.08087×10^{-7}	3.94484×10^{-6}	7.18354×10^{-5}	1.36946×10^{-3}
	1	1.73512×10^{-5}	-2.15591×10^{-5}	1.73828×10^{-3}	-2.14695×10^{-3}

参考文献

1 Chan T F, Lee D, Shen L J. Stable explicit scheme for equation of the Schrödinger type[J]. SIAM J. Numer. Anal., 1986, 23(2): 274~281

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

3 Miller J J H. On the location of zeros of certain classes of polynonials with applications to numerical analysis[J]. J. Inst. Math. Appls., 1971, 4(8): 397~406

A Family of Absolutely Stable Difference Schemes of High Accuracy for Solving Schrödinger Equation

Zeng Wenping

(Dept. of Math., Huaqiao Univ., 362021, Quanzhou, China)

Abstract For solving Schrödinger equation $\frac{\partial u}{\partial t}=\mathrm{i}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, it is feasible to construct a family of three-layer, high accurate and implicit difference schemes containing two parameters. A three-layer difference scheme is obtained in case $\alpha=\frac{1}{2}$ and $\beta=0$; and this difference scheme is proved to be absolutely stable for arbitrarily chosen non-negative parameter, with its truncation error in the order of $O(\Delta t^2+\Delta x^4)$. The difference scheme constructing here is proved by numerical example to be effective, and its theoretical analysis tallies with practical computation.

Keywords Schrödinger equation, difference scheme, high accuracy, absolutely stable