

DOI:10.11830/ISSN.1000-5013.202011019



非线性薛定谔方程的几种差分格式

孙传志, 汪佳玲

(南京信息工程大学 数学与统计学院, 江苏 南京 210044)

**摘要:** 在满足一定的初值、边值条件下,结合不同的差分格式对非线性薛定谔(NLS)方程进行数值求解. 分别利用经典的向前差分算子、二阶中心差分算子、Crank-Nicolson 方法和紧致差分算子构造向前 Euler 格式、Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式,并证明 Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式精确保持离散质量守恒和能量守恒. 利用数学软件 MATLAB 进行实验计算,结果表明:所构造的 3 种格式具有合理性及有效性.

**关键词:** 非线性薛定谔方程; 向前 Euler 格式; Crank-Nicolson 格式; 紧致差分格式; 质量守恒; 能量守恒

**中图分类号:** O 241.81      **文献标志码:** A      **文章编号:** 1000-5013(2021)04-0551-10

Several Difference Schemes for Nonlinear Schrödinger Equation

SUN Chuanzhi, WANG Jialing

(School of Mathematics and Statistics, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China)

**Abstract:** Under the condition of initial value and boundary value, the nonlinear Schrödinger (NLS) equation numerical solution is solved by different difference schemes. The forward Euler scheme, the Crank-Nicolson scheme and the compact difference scheme are constructed by using the classical forward difference operator, the second-order central difference operator, the Crank-Nicolson method and the compact difference operator. It is proved that the Crank-Nicolson scheme and the compact difference scheme keep the conservation of discrete mass and energy accurately. Carrying out experimental calculation by using mathematical software MATLAB, we find that the three schemes constructed are reasonable and effective.

**Keywords:** nonlinear Schrödinger equation; forward Euler scheme; Crank-Nicolson scheme; compact difference scheme; mass conservation; energy conservation

1926 年,物理学家薛定谔提出薛定谔方程,作为量子力学领域的基本方程,它对物理领域的研究具有深远意义.随着社会的发展进步,单纯线性模型已经不足以描述这个世界的所有现象,学者们将视线逐渐转移到非线性模型的研究.20 世纪 70 年代,在含非线性项的色散方程的研究中,Hasegawa 推导出非线性薛定谔(nonlinear Schrödinger equation,NLS)方程,广泛应用于应用数学和量子力学等物理领域,如光脉冲在色散与非线性介质中的传输,原子激光产生的 Bose-Einstein 凝聚效应,电磁场中超导电子的运动等.

NLS 方程的一般形式为  $iu_t + u_{xx} + \beta |u|^2 u = 0$ . 其中,  $\beta$  为实常数;  $i$  为虚数单位. NLS 方程对分析求解具有一定难度,没有统一和高效的方法,在对非线性方程的各类研究中发现,非线性方程在很多情况下都不具备解析解,只有给出具体的限定条件才能得到确切的结果.关于同一个 NLS 方程,若给定的初始波函数不同,波函数的随时演化模式也会产生变化,为此,利用数值模拟研究 NLS 方程.

随着科学技术的创新,非线性薛定谔方程的研究越来越受到国内外学者的重视. 张云峰<sup>[1]</sup>运用算子半群方法证明了 NLS 方程的解存在唯一性及解的一些性质;孟佳<sup>[2]</sup>利用有限差分法对具体的 NLS 方程问题展开数值求解;Borhanifar 等<sup>[3]</sup>研究薛定谔方程近似解的构造,并在实验中加入验证;Ashyralyev 等<sup>[4]</sup>研究含相关系数的高维分数阶薛定谔微分方程混合问题的一阶及二阶精度差分格式,并得到这些差分格式解的稳定性分析;Zisowsky 等<sup>[5]</sup>建立并分析求解 NLS 方程的不同有限差分格式的离散人工边界条件,借助数值算例证明其稳定性和正确性.

偏微分方程领域中的数值计算方法都很经典,主要包括算子分裂法,有限元法,有限差分法等<sup>[6]</sup>. 有限差分法是求常(偏)微分方程及方程组的定解的方法,它较为灵活简单,普遍性强,因而方便利用计算机进行编程求解. 在相关格式数值研究中,王海等<sup>[7]</sup>简要分析二阶中心差分的理论基础,在此基础上构造声波方程的该格式,建立相关模型并进行数值模拟;吴宏伟<sup>[8]</sup>证明紧致差分格式的解的相关性质,并利用该格式数值求解一类半线性抛物型方程;李华等<sup>[9]</sup>对 Crank-Nicolson 差分格式的误差、稳定性等展开分析证明,并联立具体的数值算例加以论证;文献[10-11]提出非线性差分格式,证明解存在唯一性和二阶收敛  $L^\infty$  范数,并提出一种迭代算法求解非线性差分格式;Wang<sup>[12]</sup>构造最优收敛速度的紧致有限差分格式,即  $L^\infty$  范数下空间上 4 阶及时间上 2 阶精度;Patel 等<sup>[13]</sup>针对具体偏微分方程提出一种无条件稳定的紧致有限差分格式,并证明所提差分格式的稳定性、一致性和收敛性.

NLS 方程格式守恒性一直备受学者们的重视<sup>[14-17]</sup>,张鲁明等<sup>[18-19]</sup>针对 NLS 方程构造新的守恒差分格式,并对该守恒格式的收敛稳定性展开证明;Lü 等<sup>[20]</sup>推导出 NLS 方程的一种新求解方法,并利用实验证明该方法能准确保持电荷守恒、能量守恒;Ismail 等<sup>[21]</sup>提出求解 NLS 方程的一种线性隐式守恒方法,并在数值实验中表明该方法在时间和空间上均具备二阶精度且能精确地保持能量守恒;Wang<sup>[22]</sup>提出一种求解非线性耦合薛定谔方程的能量守恒算法,并分析所提算法的可解性、稳定性和误差估计;Wang<sup>[23]</sup>提出并分析一个关于非线性耦合薛定谔方程的线性守恒差分格式;文献[24-26]针对带周期边界条件的非线性薛定谔方程,分别提出紧差分的能量守恒格式,并给出无网格比的误差估计;Gong 等<sup>[27]</sup>利用 Fourier 拟谱方法构造求解 2 维非线性薛定谔方程的一个能量和质量守恒格式并加以分析;He<sup>[28]</sup>构造并分析了非线性薛定谔方程的一个质量且能量守恒的局部非连续 Galerkin 方法;Cui 等<sup>[29]</sup>结合 SAV 方法构造非线性薛定谔方程的任意高阶的保结构指数 Runge-Kutta 方法;Wang 等<sup>[30]</sup>研究两个高维薛定谔方程的傅里叶拟谱格式及方程的爆破行为. 本文在一定初值、边值条件下,结合不同的差分格式对 NLS 方程进行数值求解.

1 数值格式的构造

考虑如下 NLS 方程的初值、边值问题,即

$$iu_t + u_{xx} + \beta |u|^2 u = 0, \quad x \in \mathbf{R}, \quad t > 0, \tag{1}$$

初值条件为

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \mathbf{R}, \tag{2}$$

边值条件为

$$u(x, t) \rightarrow 0, \quad |x| \rightarrow \infty, \quad t > 0. \tag{3}$$

式(1)~(3)中: $u_0(x)$ 为已知光滑函数,函数随着 $|x| \rightarrow \infty$ 迅速向 0 衰减.

当 $|x| \geq 1$ 时,方程的解飞快地向 0 衰减,所以可在一个有限的区域 $\Omega = (x_L, x_R)$ 上对式(1)~(2)展开数值求解,其中, $x_L, x_R \geq 1$ ,得到如下初值、边值问题,即

$$iu_t + u_{xx} + \beta |u|^2 u = 0, \quad x \in \Omega, \quad t \in [0, T], \tag{4}$$

初值条件为

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \overline{\Omega} = [x_L, x_R], \tag{5}$$

边值条件为

$$u(x, t) = 0, \quad x = x_L \text{ 或 } x = x_R, \quad x \in \partial\Omega. \tag{6}$$

式(4)~(6)的质量守恒律为

$$M(t)=\int_{x_L}^{x_R}|u(x,t)|^2\mathrm{d}x=M(0). \tag{7}$$

能量守恒律为

$$E(t)=-\frac{1}{2}\int_{x_L}^{x_R}|u_x(x,t)|^2\mathrm{d}x+\frac{1}{4}\beta\int_{x_L}^{x_R}|u(x,t)|^4\mathrm{d}x=E(0). \tag{8}$$

对区域  $\Omega=[0,T]\times[x_L,x_R]$  划分网格, 取时间步长  $\tau=\frac{T}{N}$ , 空间步长  $h=\frac{x_R-x_L}{J}$ ,  $N,J\in N^*$ , 则有  $t_n=n\tau(0\leqslant n\leqslant N)$ ,  $x_j=x_0+jh(0\leqslant j\leqslant J, x_0=x_L)$ . 记  $\Omega_\tau=\{t_n|1\leqslant n\leqslant N-1\}$ ,  $\bar{\Omega}_\tau=\{t_n|0\leqslant n\leqslant N\}$ ,  $\Omega_h=\{x_j|1\leqslant j\leqslant J-1\}$ ,  $\bar{\Omega}_h=\{x_j|0\leqslant j\leqslant J\}$ ,  $\Omega_{h,\tau}=\Omega_\tau\times\Omega_h$ ,  $\bar{\Omega}_{h,\tau}=\bar{\Omega}_\tau\times\bar{\Omega}_h$ , 设  $\{v_j^n|0\leqslant n\leqslant N, 0\leqslant j\leqslant J\}$  为  $\bar{\Omega}_{h,\tau}$  上的一个网格分量, 引入差分记号, 有

$$\begin{aligned} v_j^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}(v_j^n+v_j^{n+1}), & \delta_tv_j^n &= \frac{1}{\tau}(v_j^{n+1}-v_j^n), & n\neq N, \\ \hat{v}_j^n &= \frac{1}{2}(v_j^{n-1}+v_j^{n+1}), & \hat{D}_tv_j^n &= \frac{1}{2\tau}(v_j^{n+1}-v_j^{n-1}), & n\neq 0, N, \\ \delta_xv_j^n &= \frac{1}{h}(v_{j+1}^n-v_j^n) & j\neq J, \\ \delta_x^2v_j^n &= \frac{1}{h^2}(v_{j+1}^n-2v_j^n+v_{j-1}^n), & j\neq 0, J. \end{aligned}$$

令  $\mathbf{v}^n=\{v_0^n,v_1^n,\cdots,v_J^n\}$ , 则  $\mathbf{v}^n$  为  $\Omega_h$  上的一个网格函数.  $V_h=\{\tilde{\mathbf{v}}|\tilde{\mathbf{v}}=v_1,v_2,\cdots,v_{J-1}\}$ , 记  $\mathring{V}_h=\{\mathbf{v}|\mathbf{v}=\{v_j|0\leqslant j\leqslant J\}\in V_h, \text{且 } v_0=v_J=0\}$ , 设  $\mathbf{u}, \mathbf{v}\in\mathring{V}_h$ , 离散内积定义为  $\langle\mathbf{u}, \mathbf{v}\rangle_J=h\sum_{j=0}^{J-1}u_j\bar{v}_j$ , 离散范数定义为  $\|\mathbf{v}\|_J=\langle\mathbf{v}, \mathbf{v}\rangle_J^{\frac{1}{2}}$ ,  $\|\mathbf{v}\|_{J,4}=(h\sum_{j=0}^{J-1}|v_j|^4)^{\frac{1}{4}}$ ,  $\|\mathbf{v}\|_\infty=\max_{0\leqslant j\leqslant J}|v_j|$ ,  $\|\delta_x\mathbf{v}\|_J=(h\sum_{j=0}^{J-1}|\delta_xv_j|^2)^{\frac{1}{2}}$ . 其中,  $\delta_xv_j=\frac{1}{h}(v_{j+1}-v_j)$ ,  $\bar{v}$  表示  $v$  的共轭复数.

通过简单计算, 能够得到  $\|\delta_x\mathbf{v}\|_J=\langle-\mathbf{A}\mathbf{v}, \mathbf{v}\rangle_J^{\frac{1}{2}}$ . 矩阵  $\mathbf{A}$  是根据二阶中心差分算子得到的, 即  $\mathbf{A}=\frac{1}{h^2}$

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}. \text{ 记矩阵 } \mathbf{S}=\frac{1}{12}\begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 10 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 10 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 10 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 10 \end{pmatrix}, \mathbf{S} \text{ 对角占优, 可逆, } \mathbf{H}=\mathbf{S}^{-1},$$

再定义范数  $\|\delta_x\mathbf{v}\|=\langle-\mathbf{H}\mathbf{A}\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{\mathbf{v}}\rangle^{\frac{1}{2}}$ , 其中  $\tilde{\mathbf{v}}\in V_h$ .  $\|\mathbf{v}\|_\infty, \|\mathbf{v}\|_J$  和  $\|\mathbf{v}\|_{J,4}$  都是  $V_h$  上的范数, 依次为  $L^\infty$  范数(无穷范数), 平均范数(2 范数)和 4 范数.  $\|\delta_x\mathbf{v}\|_J$  和  $\|\delta_x\mathbf{v}\|$  均是  $V_h$  上的半范数.

## 2 几种差分格式

### 2.1 向前 Euler 格式

设函数  $U=\{U_j^n|0\leqslant n\leqslant N, 0\leqslant j\leqslant J\}$  为空间  $\Omega_{h,\tau}$  上的网格函数, 其中,  $U_j^n=u(x_j,t_n)$ ,  $0\leqslant n\leqslant N, 0\leqslant j\leqslant J$ . 在结点  $(x_j,t_n)$  处, 考虑方程(4), 有

$$\mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_n)+\frac{\partial^2u}{\partial x^2}(x_j,t_n)+\beta|u(x_j,t_n)|^2u(x_j,t_n)=0, \quad 0\leqslant n\leqslant N-1, \quad 1\leqslant j\leqslant J-1. \tag{9}$$

由二阶中心差分算子和向前差分算子, 有

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2u}{\partial x^2}(x_j,t_n) &= \frac{1}{h^2}[u(x_{j-1},t_n)-2u(x_j,t_n)+u(x_{j+1},t_n)]-\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4u}{\partial x^4}(\zeta_{j,n},t_n)= \\ &\delta_x^2U_j^n-\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4u}{\partial x^4}(\zeta_{j,n},t_n), \quad x_{j-1}<\zeta_{j,n}<x_{j+1}, \end{aligned} \tag{10}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) = \frac{1}{\tau} [u(x_j, t_{n+1}) - u(x_j, t_n)] - \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, \eta_{j,n}) =$$
$$\delta_t U_j^n - \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, \eta_{j,n}), \quad t_n < \eta_{j,n} < t_{n+1}.$$

(11)

将式(10),(11)代入式(9),有

$$i\delta_t U_j^n + \delta_x^2 U_j^n + \beta |u_j^n|^2 u_j^n = \frac{\tau i}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, \eta_{j,n}) + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\zeta_{j,n}, t_n), \quad 0 \leq n \leq N-1, \quad 1 \leq j \leq J-1.$$

(12)

结合式(5)~(6),有

$$U_j^0 = \varphi(x_j), \quad 0 \leq j \leq J,$$

(13)

$$U_0^n = U_J^n = 0, \quad 1 \leq n \leq N.$$

(14)

忽略式(12)的小量项,用  $u_j^n$  代替  $U_j^n$ ,得到差分格式,即

$$i\delta_t u_j^n + \delta_x^2 u_j^n + \beta |u_j^n|^2 u_j^n = 0, \quad 0 \leq n \leq N-1, \quad 1 \leq j \leq J-1,$$

(15)

$$u_j^0 = \varphi(x_j), \quad 0 \leq j \leq J,$$

(16)

$$u_0^n = u_J^n = 0, \quad 1 \leq n \leq N.$$

(17)

以上格式即为 NLS 方程的向前 Euler 格式,是一个非线性显式格式,记

$$c_1 = \max \left\{ \frac{1}{2} \max \left| \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) \right|, \frac{1}{12} \max \left| \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x, t) \right| \right\}, \quad X_L \leq x \leq X_R, \quad 0 \leq t \leq T.$$

根据上面格式的构造过程,截断误差  $|R_{j,n}^{(1)}|$  满足

$$|R_{j,n}^{(1)}| \leq c_1 (\tau + h^2), \quad 0 \leq n \leq N-1, \quad 1 \leq j \leq J-1.$$

(18)

向前 Euler 格式(15)~(17)的数值解在时间和空间方向分别具有 1 阶、2 阶精度.

2.2 Crank-Nicolson 格式

令  $t_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(t_n + t_{n+1})$ ,在点  $(x_j, t_{n+\frac{1}{2}})$  处考虑方程(4),有

$$i \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \beta |u(x_j, t_{n+\frac{1}{2}})|^2 u(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) = 0.$$

(19)

式(19)中: $0 \leq n \leq N-1; 1 \leq j \leq J-1$ .

结合式(10)及如下式(20)~(22),即

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_{n+1}) \right] - \frac{\tau}{8} \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2}(x_j, \xi_{j,n}), \quad t_n < \xi_{j,n} < t_{n+1},$$

(20)

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) = \delta_t U_j^n - \frac{\tau^2}{24} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j, \eta_{j,n}), \quad t_n < \eta_{j,n} < t_{n+1},$$

(21)

$$|u(x_j, t_{n+\frac{1}{2}})|^2 = \frac{1}{2} (|u(x_j, t_n)|^2 + |u(x_j, t_{n+1})|^2) + o(\tau^2) = \frac{1}{2} (|U_j^n|^2 + |U_j^{n+1}|^2) + o(\tau^2),$$

(22)

并利用向前 Euler 格式类似的推导过程,有

$$i\delta_t U_j^n + \delta_x^2 U_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\beta}{2} (|U_j^n|^2 + |U_j^{n+1}|^2) U_j^{n+\frac{1}{2}} = R_{j,n}^{(2)}, \quad 0 \leq n \leq N-1, \quad 1 \leq j \leq J-1.$$

(23)

式(23)中: $R_{j,n}^{(2)} = c_2 (\tau^2 + h^2), 0 \leq n \leq N-1, 1 \leq j \leq J-1$  称为局部截断误差,  $c_2$  是与  $h$  和  $\tau$  无关的常数.

忽略式(23)小量项,结合初边值条件(5),(6),用  $u_j^n$  代替  $U_j^n$  得到 Crank-Nicolson 格式,即

$$i\delta_t u_j^n + \delta_x^2 u_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\beta}{2} (|u_j^n|^2 + |u_j^{n+1}|^2) u_j^{n+\frac{1}{2}} = 0, \quad 0 \leq n \leq N-1, \quad 1 \leq j \leq J-1,$$

(24)

$$u_j^0 = \varphi(x_j), \quad 0 \leq j \leq J,$$

(25)

$$u_0^n = u_J^n = 0, \quad 1 \leq n \leq N.$$

(26)

与向前 Euler 格式不同,Crank-Nicolson 格式是一个非线性隐式格式,Crank-Nicolson 格式(24)~(26)的数值解在时间和空间方向上都具有 2 阶精度.

2.3 紧致差分格式

定义紧致差分算子  $A_h u_j^k = \begin{cases} \frac{1}{12} (u_{j-1}^k + 10u_j^k + u_{j+1}^k), & 1 \leq j \leq J-1, \\ u_j^k, & j=0, J. \end{cases}$  然后,在点  $(x_j, t_{n+\frac{1}{2}})$  处考虑 NLS

方程,有

$$i \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \beta |u(x_j, t_{n+\frac{1}{2}})|^2 u(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) = 0, \tag{27}$$

式(27)中:  $0 \leq j \leq J; 0 \leq n \leq N-1$ .

结合式(20)~(22),有

$$i \delta_t U_j^n + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_{n+1}) \right] + \frac{\beta}{2} (|U_j^n|^2 + |U_j^{n+1}|^2) U_j^{n+\frac{1}{2}} + c_3 \tau^2 = 0. \tag{28}$$

式(28)中:  $0 \leq n \leq N-1; 0 \leq j \leq J-1$ ;  $c_3$  是与  $h$  和  $\tau$  无关的常数.

对式(28)两边同时乘以  $A_h$ , 经过变换有

$$i A_h \delta_t U_j^n + \frac{1}{2} \left[ A_h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + A_h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_{n+1}) \right] + A_h \frac{\beta}{2} (|U_j^n|^2 + |U_j^{n+1}|^2) U_j^{n+\frac{1}{2}} + c_3 \tau^2 = 0, \quad 0 \leq n \leq N-1, 1 \leq j \leq J-1. \tag{29}$$

由于

$$A_h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) = \delta_x^2 U_j^n - \frac{h^4}{240} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\xi_{j,n}, t_n), \quad x_{j-1} < \xi_{j,n} < x_{j+1}, \tag{30}$$

可得 
$$\frac{1}{2} \left[ A_h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + A_h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_{n+1}) \right] = \frac{1}{2} (\delta_x^2 U_j^n + \delta_x^2 U_j^{n+1}) + \frac{h^4}{240} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\theta_{j,n}, \bar{\theta}_{j,n}). \tag{31}$$

式(31)中:  $x_{j-1} < \theta_{j,n} < x_{j+1}; t_n < \bar{\theta}_{j,n} < t_{n+1}$ .

将式(31)代入式(29),有

$$i A_h \delta_t U_j^n + \delta_x^2 U_j^{n+\frac{1}{2}} + A_h \frac{\beta}{2} (|U_j^n|^2 + |U_j^{n+1}|^2) U_j^{n+\frac{1}{2}} = R_{j,n}^{(3)}, \tag{32}$$

式(32)中:  $R_{j,n}^{(3)} = c_3 (\tau^2 + h^4)$ ,  $c_3$  是与  $h$  和  $\tau$  无关的常数.

结合初边值条件(5), (6), 并忽略小量项, 用  $u_j^n$  代替  $U_j^n$ , 得到紧致差分格式, 即

$$i A_h \delta_t u_j^n + \delta_x^2 u_j^{n+\frac{1}{2}} + A_h \frac{\beta}{2} (|u_j^n|^2 + |u_j^{n+1}|^2) u_j^{n+\frac{1}{2}} = 0, \quad 0 \leq n \leq N-1, \quad 1 \leq j \leq J-1, \tag{33}$$

$$u_j^0 = \varphi(x_j), \quad 0 \leq j \leq J, \tag{34}$$

$$u_0^n = u_J^n = 0, \quad 1 \leq n \leq N. \tag{35}$$

紧致差分格式也是一个非线性隐式格式, 利用前面定义的矩阵  $\mathbf{A}$  和  $\mathbf{H}$ , 可以将式(33)表示为

$$i \delta_t \mathbf{u}^n + \mathbf{H} \mathbf{A} \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\beta}{2} (|\mathbf{u}^n|^2 + |\mathbf{u}^{n+1}|^2) \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} = 0, \quad 0 \leq n \leq N-1. \tag{36}$$

紧致差分格式(33)~(35)的数值解在时间和空间方向上分别具有 2 阶, 4 阶精度.

### 3 守恒性

**引理 1**<sup>[26]</sup> 对于任意的  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \dot{V}_h$ , 有  $\langle \delta_x^2 \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = -\langle \delta_x \mathbf{u}, \delta_x \mathbf{v} \rangle$ .

**引理 2**<sup>[26]</sup> 对于任意的  $\tilde{\mathbf{u}}^n \in V_h, n=0, 1, 2, \dots, N-1$ , 则有  $\text{Re} \langle \mathbf{H} \mathbf{A} (\bar{\mathbf{u}}^{n+1} + \bar{\mathbf{u}}^n), \bar{\mathbf{u}}^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^n \rangle = \|\delta_x \bar{\mathbf{u}}^{n+1}\|^2 - \|\delta_x \bar{\mathbf{u}}^n\|^2, \text{Im} \langle \mathbf{H} \mathbf{A} (\bar{\mathbf{u}}^{n+1} + \bar{\mathbf{u}}^n) \bar{\mathbf{u}}^{n+1} + \bar{\mathbf{u}}^n \rangle = 0$ . 其中,  $\text{Re}, \text{Im}$  分别表示函数的实部和虚部.

**定理 1** Crank-Nicolson 格式(24)~(26)精确保离散质量守恒和能量守恒, 质量守恒和能量守恒分别为

$$M^n = \|\mathbf{u}^n\|_J^2 \equiv M^0, \tag{37}$$

$$E^n = \frac{\beta}{4} \|\mathbf{u}^n\|_{J,4}^4 - \frac{1}{2} \|\delta_x \mathbf{u}^n\|_J^2 = E^0. \tag{38}$$

式(37)~(38)中:  $n=0, 1, 2, \dots, N$ .

证明: 式(24)的紧形式为

$$i \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\tau} + \delta_x^2 \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\beta}{2} (|\mathbf{u}^n|^2 + |\mathbf{u}^{n+1}|^2) \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} = 0. \tag{39}$$

式(39)两边与  $\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}}$  作离散内积, 得

$$\langle i \frac{u^{n+1}-u^n}{\tau}, \frac{u^{n+1}+u^n}{2} \rangle_J + \langle \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J + \frac{\beta}{2} \langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J = 0.$$

对上式取虚部,有

$$\frac{1}{2\tau} (\|u^{n+1}\|_J^2 - \|u^n\|_J^2) + \text{Im} \langle \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J + \frac{\beta}{2} \text{Im} \langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J = 0.$$

由引理 1,有 $\langle \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J = -\langle \delta_x u^{n+\frac{1}{2}}, \delta_x u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J \in \mathbf{R}$ . 又因为 $\langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J = h \sum_{j=0}^{J-1} (|u_j^n|^2 + |u_j^{n+1}|^2) |u_j^{n+\frac{1}{2}}|^2 \in \mathbf{R}$ . 所以 $\frac{1}{2\tau} (\|u^{n+1}\|_J^2 - \|u^n\|_J^2) = 0$ ,即 $\|u^{n+1}\|_J^2 = \|u^n\|_J^2$ ,由此,式(37)质量守恒.

将 $(u^{n+1}-u^n)$ 与式(39)两边同时作内积,并取实部,有

$$\text{Re} \langle \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}}, (u^{n+1}-u^n) \rangle_J + \frac{\beta}{2} \text{Re} \langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) u^{n+\frac{1}{2}}, (u^{n+1}-u^n) \rangle_J = 0. \tag{40}$$

因为 $\langle \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}}, (u^{n+1}-u^n) \rangle_J = \frac{1}{2} \langle \delta_x^2 (u^{n+1}+u^n), (u^{n+1}-u^n) \rangle_J = -\frac{1}{2} \langle \delta_x u^{n+1}, \delta_x u^{n+1} \rangle_J + \frac{1}{2} \times \langle \delta_x u^n, \delta_x u^n \rangle_J + \frac{1}{2} \langle \delta_x u^{n+1}, \delta_x u^n \rangle_J - \frac{1}{2} \langle \delta_x u^n, \delta_x u^{n+1} \rangle_J$ ,故 $\text{Re} \langle \delta_x^2 u^{n+\frac{1}{2}}, (u^{n+1}-u^n) \rangle_J = -\frac{1}{2} \|\delta_x u^{n+1}\|_J^2 + \frac{1}{2} \|\delta_x u^n\|_J^2 + \frac{1}{2} \text{Re} \langle \delta_x u^{n+1}, \delta_x u^n \rangle_J - \frac{1}{2} \text{Re} \langle \delta_x u^n, \delta_x u^{n+1} \rangle_J = -\frac{1}{2} \|\delta_x u^{n+1}\|_J^2 + \frac{1}{2} \|\delta_x u^n\|_J^2$ ,而 $\frac{\beta}{2} \text{Re} \langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) u^{n+\frac{1}{2}}, (u^{n+1}-u^n) \rangle_J = \frac{\beta}{4} \text{Re} (h \sum_{j=0}^{J-1} (|u_j^n|^2 + |u_j^{n+1}|^2) (u_j^{n+1} + u_j^n) (\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n)) = \frac{\beta}{4} h \sum_{j=0}^{J-1} (|u_j^n|^2 + |u_j^{n+1}|^2) (|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2) = \frac{\beta}{4} (\|u^{n+1}\|_{J,4}^4 - \|u^n\|_{J,4}^4)$ . 即 $\frac{\beta}{4} \|u^{n+1}\|_{J,4}^4 - \frac{1}{2} \times \|\delta_x^2 u^{n+1}\|_J^2 = \frac{\beta}{4} \|u^n\|_{J,4}^4 - \frac{1}{2} \|\delta_x^2 u^n\|_J^2$ . 所以 $E^{n+1} = E^n$ ,即可证式(38)成立.

**定理 2** 紧致差分格式(34)~(36)精确保离散质量守恒和能量守恒,质量守恒和能量守恒分别为

$$M^n = \|u^n\|_J^2 \equiv M^0, \quad n=0,1,2,\cdots,N. \tag{41}$$

$$E^n = \frac{\beta}{4} \|u^{n+1}\|_{J,4}^4 - \frac{1}{2} \|\delta_x u^n\|_J^2 = E^0, \quad n=0,1,2,\cdots,N. \tag{42}$$

证明:对式(36)两边与 $u^{n+\frac{1}{2}}$ 作内积,得

$$\langle i \frac{u^{n+1}-u^n}{\tau}, \frac{u^{n+1}+u^n}{2} \rangle_J + \langle H A u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J + \frac{\beta}{2} \langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J = 0.$$

对上式取虚部,由引理 2 可得 $\text{Im} \langle H A u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J = 0$ . 又因为 $\langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) u^{n+\frac{1}{2}}, u^{n+\frac{1}{2}} \rangle_J \in \mathbf{R}$ . 所以 $\frac{1}{2\tau} (\|u^{n+1}\|_J^2 - \|u^n\|_J^2) = 0$ ,即 $\|u^{n+1}\|_J^2 = \|u^n\|_J^2$ . 因此,式(41)质量守恒.

将式(36)的两边与 $(u^{n+1}-u^n)$ 作内积并取实部,得

$$\frac{1}{2} \text{Re} \langle H A (u^{n+1}+u^n), (u^{n+1}-u^n) \rangle_J + \frac{\beta}{4} \text{Re} \langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) (u^{n+1}+u^n), (u^{n+1}-u^n) \rangle_J = 0.$$

由引理 2 可得 $\frac{1}{2} \text{Re} \langle H A (u^{n+1}+u^n), (u^{n+1}-u^n) \rangle_J = \frac{1}{2} \|\delta_x u^{n+1}\|_J^2 - \frac{1}{2} \|\delta_x u^n\|_J^2$ ,而有 $\frac{\beta}{4} \times \text{Re} \langle (|u^n|^2 + |u^{n+1}|^2) (u^{n+1}+u^n), (u^{n+1}-u^n) \rangle_J = \frac{\beta}{4} (\|u^{n+1}\|_{J,4}^4 - \|u^n\|_{J,4}^4)$ . 故 $-\frac{1}{2} \|\delta_x u^{n+1}\|_J^2 + \frac{\beta}{4} \|u^{n+1}\|_{J,4}^4 = -\frac{1}{2} \|\delta_x u^n\|_J^2 + \frac{\beta}{4} \|u^n\|_{J,4}^4$ , $E^{n+1} = E^n$ . 因此,式(42)能量守恒.

4 数值实验

4.1 孤立波的演化实验

初始状况 $t=0$  s 时的孤立波波形,如图 1 所示. 选取空间步长 $h=\frac{30}{200}$ ,时间步长 $\tau=0.0001$ ,对应

的计算区间为 $[-15, 15] \times [0, t]$ . 向前 Euler 格式的孤立波的波形, 如图 2 所示.

Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式的孤立波波形分别如图 3, 4 所示.

由图 2~4 可知: 当  $t=10$  s 时, 向前 Euler 格式所得的孤立波波形有一些振荡, 可能是因为向前 Euler 格式作为显格式, 对差分步长较敏感. 因此, 相对其他两种格式而言, 向前 Euler 格式稍显不足.

当  $t=10$  s 时, 选取时间步长 ( $\tau=0.000\ 01$ ) 继续采用向前 Euler 格式进行数值模拟, 孤立波波形, 如图 5 所示. 当  $t=10$  s 时, 孤立波波形随着时间步长  $\tau$  的减小, 振荡越弱即波形更加稳定.

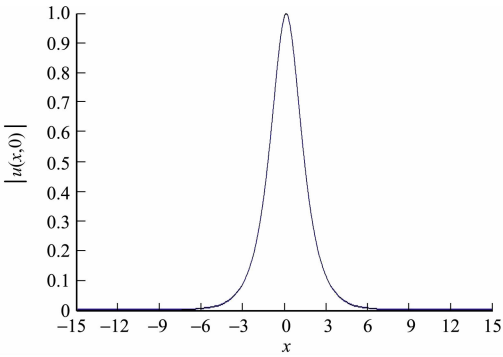


图 1 初始条件下  $t=0$  s 时的孤立波波形  
Fig. 1 Solitary waveform under initial condition at  $t=0$  s

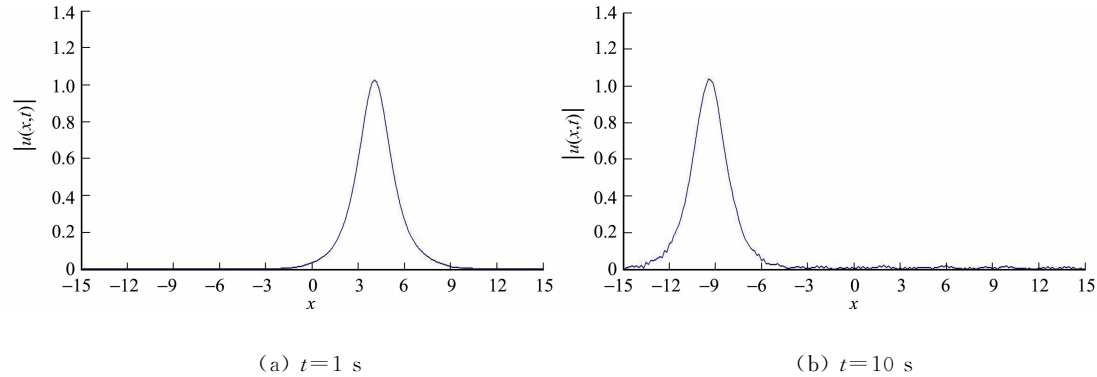


图 2 向前 Euler 格式的孤立波波形  
Fig. 2 Solitary waveforms of forward Euler scheme

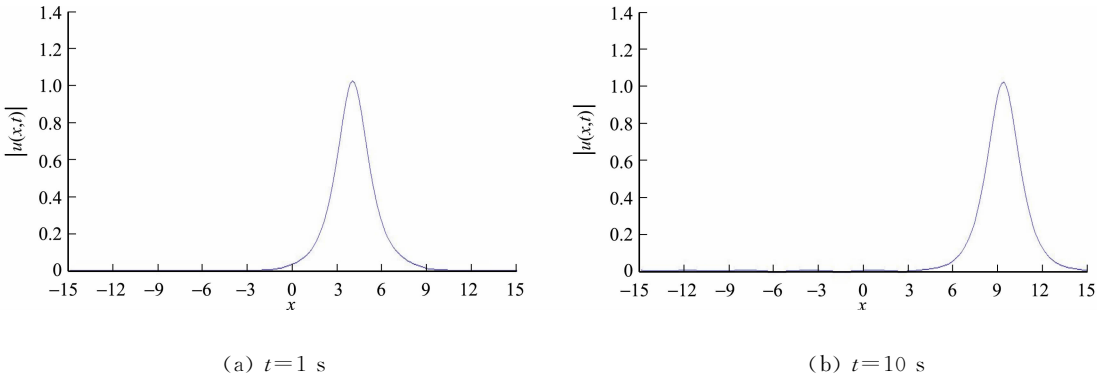


图 3 Crank-Nicolson 格式的孤立波波形  
Fig. 3 Solitary waveforms of Crank-Nicolson scheme

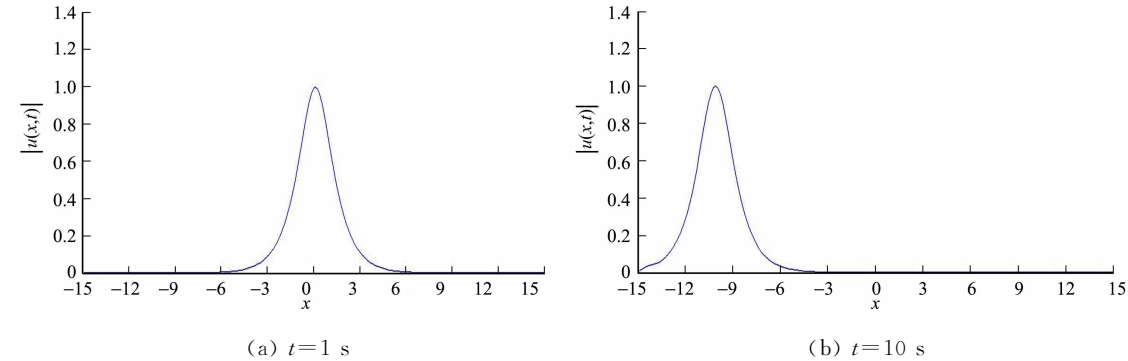


图 4 紧致差分格式的孤立波波形  
Fig. 4 Solitary waveforms of compact difference scheme

4.2 守恒量的保持实验

选取空间步长为  $h=\frac{30}{200}$ , 空间步长为  $\tau=0.001$ , 对应的计算区间为  $[-15,15]\times[0,t]$ , 实验结果以图形的方式给出. 其中, Crank-Nicolson 格式对守恒量的保持情况, 如图 6 所示. 紧致差分格式守恒量的保持结果, 如图 7 所示.

由图 6, 7 可知: Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式均能很好地保持离散质量守恒和能量守恒.

4.3 数值格式的计算效率实验

选取空间步长  $h=\frac{30}{200}$ , 空间步长  $\tau=0.0001$ , 对

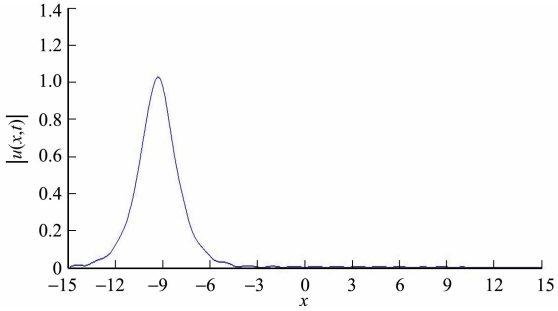
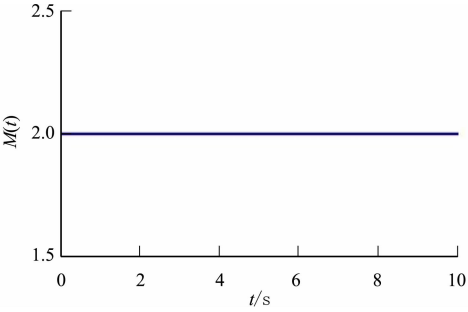
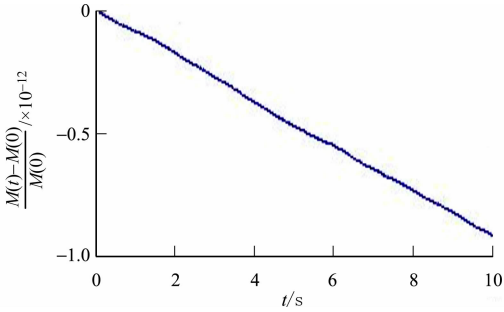


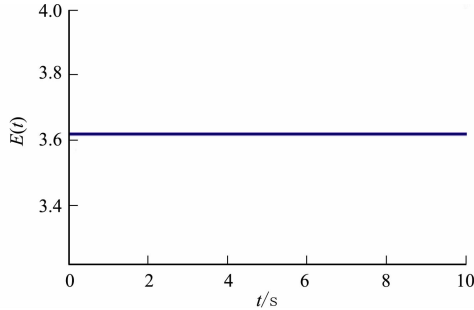
图 5 向前 Euler 格式在  $\tau=0.0001$  的孤立波波形  
Fig. 5 Solitary waveforms of forward Euler scheme at  $\tau=0.0001$



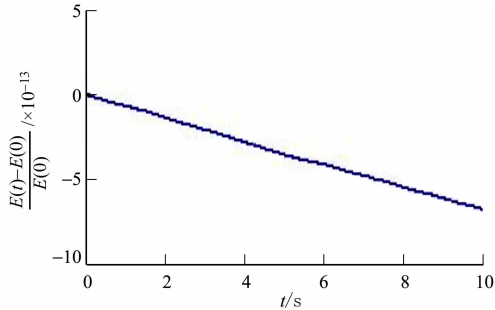
(a) 总质量



(b) 质量误差



(c) 总能量

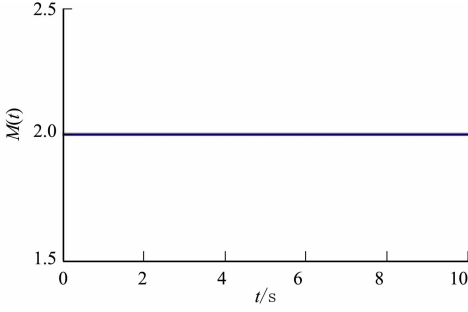


(d) 能量误差

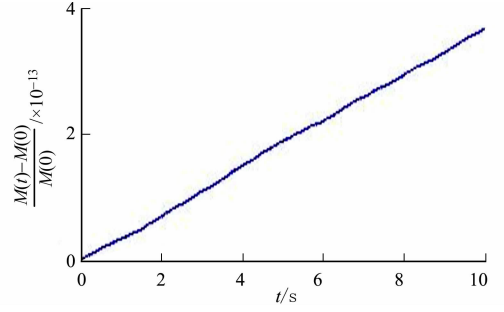
图 6 Crank-Nicolson 格式对守恒量的保持情况

Fig. 6 Conservation situation of conserved quantities in Crank-Nicolson scheme

应的计算区间为  $[-15,15]\times[0,10]$ . 3 种数值格式在 MATLAB 中的运行时间如下: 向前 Euler 格式的运行时间为 15.072 s; Crank-Nicolson 格式的运行时间为 1 286.743 s; 紧致差分格式为 1 574.862 s. 因此, 向前 Euler 格式的计算时间远远少于其他两个数值格式, 具有很高的计算效率. 这主要是由于 Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式是隐式差分格式, 进行数值求解需要使用迭代算法, 而迭代需要消耗更多的计算时间, 因而计算效率相对较低.



(a) 总质量



(b) 质量误差



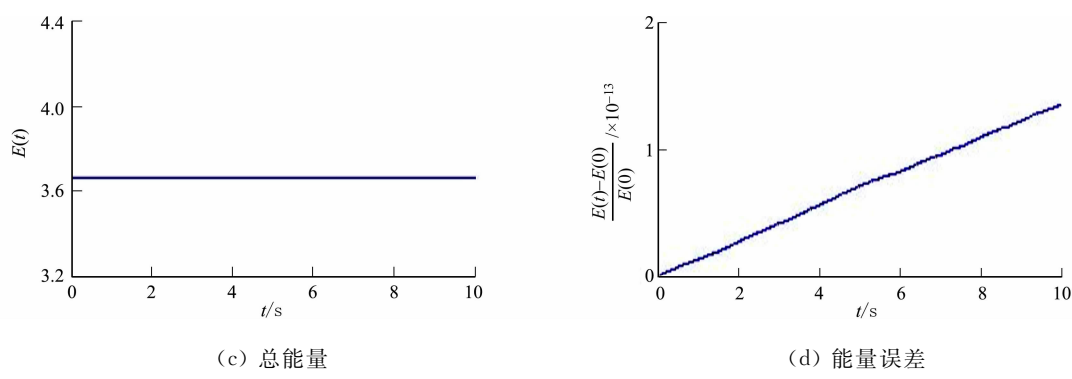


图 7 紧致差分格式对守恒量的保持情况

Fig. 7 Conservation situation of conserved quantities in compact difference scheme

## 5 结论

分别利用经典的向前差分算子、二阶中心差分算子、Crank-Nicolson 方法和紧致差分算子构造了向前 Euler 格式、Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式. 引用守恒性相关理论知识证明了 Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式精确保持离散质量守恒和能量守恒.

通过数学软件 MATLAB, 分别对 3 种格式进行了孤立波的数值实验和计算, 并研究了 Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式对守恒量的保持. 虽然 3 种格式均能对 NLS 方程进行数值求解, 但是具有不同的特性. 向前 Euler 差分格式作为非线性显式格式, 易于理解和编程, 并且计算时间较少. 而 Crank-Nicolson 格式和紧致差分格式都是非线性隐式格式, 通过数值实验可以验证它们都能够精确保持离散质量守恒和能量守恒, 与理论证明相符合.

这些格式不仅能应用于 NLS 方程, 还能应用于偏微分方程领域的诸多方程中, 如 KdV 方程、Klein-Gordon 方程等. 每种差分格式都具有不同的优劣性, 在具体的实际情况下, 可采用较为理想的差分格式进行数值计算.

## 参考文献:

[1] 张云峰. 一类低维广义非线性 Schrödinger 方程解的研究[J]. 兰州工业高等专科学校学报, 2003, 10(2): 1-4.

[2] 孟佳. 一类非线性薛定谔方程的数值解法[D]. 开封: 河南大学, 2015.

[3] BORHANIFAR A, ABAZARI R. Numerical study of nonlinear Schrödinger and coupled Schrödinger equations by differential transformation method[J]. Optics Communications, 2010, 283(10): 2026-2032. DOI: 10. 1016/j. optcom. 2010. 01. 046.

[4] ASHYRALYEV A, HICDURMAZ B. On the numerical solution of fractional Schrödinger differential equations with the Dirichlet condition[J]. International Journal of Computer Mathematics, 2012, 89(13/14): 1927-1936. DOI: 10. 1080/00207160. 2012. 698841.

[5] ZISOWSKY A, EHRHARDT M. Discrete artificial boundary conditions for nonlinear Schrödinger equations[J]. Computational Mathematics and Modeling, 2008, 47(11): 1264-1283. DOI: 10. 1016/j. mcm. 2007. 07. 007.

[6] 孙志忠. 偏微分方程数值解法[M]. 北京: 科学出版社, 2005.

[7] 王海, 黄金辉, 屈凤林, 等. 理论地质模型的声波波场数值模拟[J]. 煤, 2011, 20(3): 3-5. DOI: 10. 3969/j. issn. 1005-2798. 2011. 03. 002.

[8] 吴宏伟. 一类半线性抛物型方程的紧致差分格式[J]. 应用数学, 2007, 20(2): 421-426. DOI: 10. 3969/j. issn. 1001-9847. 2007. 02. 031.

[9] 李华, 周维奎, 邓培智. Crank-Nicolson 差分格式及其稳定性研究[J]. 矿物岩石, 1998(增刊 1): 239-242.

[10] SONNIER W J, CHRISTOV C I. Strong coupling of Schrödinger equations: Conservative scheme approach[J]. Mathematics and Computers in Simulation, 2005, 69(5/6): 514-525. DOI: 10. 1016/j. matcom. 2005. 03. 016.

[11] SUN Zhizhong, ZHAO Dandan. On the  $L^\infty$  convergence of a difference scheme for coupled nonlinear Schrödinger equations[J]. Computers and Mathematics with Applications, 2010, 59(10): 3286-3300. DOI: 10. 1016/j. camwa. 2010. 03. 012.

- [12] WANG Tingchun. Optimal point-wise error estimate of a compact finite difference scheme for the coupled nonlinear Schrödinger equations[J]. Journal of Computational Mathematics, 2014, 32(10): 58-74. DOI: 10. 1016/j. jmaa. 2013. 10. 038.
- [13] PATEL K S, MANI M. A numerical study of Asian option with high-order compact finite difference scheme[J]. Journal of Applied Mathematics and Computing, 2018, 57(1/2): 467-491. DOI: 10. 1007/s12190-017-1115-2.
- [14] WANG Yushun, HONG Jialin. Multi-symplectic algorithms for Hamiltonian partial differential equations[J]. Communication on Applied Mathematics and Computation, 2013, 27(2): 163-230. DOI: 10. 3969/j. issn. 1006-6330. 2013. 02. 001.
- [15] STRAUSS W, VÁZQUEZ L. Numerical solution of a nonlinear Klein-Gordon equation[J]. Journal of Computational Physics, 1978, 28(2): 271-278. DOI: 10. 1016/0021-9991(78)90038-4.
- [16] 郭本瑜, VÁZQUEZ L. 非线性 Klein-Gordon 方程的数值解[J]. 应用科学学报, 1983(1): 25-32.
- [17] GUO Benyu, PASCUAL P J. Numerical solution of the Sine-Gordon equation[J]. Applied Mathematics and Computation, 1986, 18(1): 1-14. DOI: 10. 1016/0096-3003(86)90025-1.
- [18] 张鲁明, 常谦顺. 非线性 Schrödinger 方程初边值问题的守恒数值格式[J]. 数学物理学报, 2000, 20(2): 240-245. DOI: 10. 3321/j. issn: 1003-3998. 2000. 02. 015.
- [19] 张鲁明, 常谦顺. 非线性 Schrödinger 方程的一个新的守恒差分格式[J]. 高校应用数学学报: A 辑, 2000, 15(1): 72-78. DOI: 10. 3969/j. issn. 1000-4424. 2000. 01. 012.
- [20] LÜ Zhongquan, ZHANG Luming, WANG Yushun. A conservative Fourier pseudospectral algorithm for the nonlinear Schrödinger equation[J]. Chinese Physics B, 2014, 23(12): 120203. DOI: 10. 1088/1674-1056/23/12120203.
- [21] ISMAIL M S, TAHA T R. A linearly implicit conservative scheme for the coupled nonlinear Schrödinger equation[J]. Mathematics and Computers in Simulation, 2007, 74(4/5): 302-311. DOI: 10. 1016/j. matcom. 2006. 10. 020.
- [22] WANG Jialing, WANG Yushun. Numerical analysis of a new conservative scheme for the coupled nonlinear Schrödinger equations[J]. International Journal of Computer Mathematics, 2018, 95(8): 1583-1608. DOI: 10. 1080/00207160. 2017. 1322692.
- [23] WANG Tingchun. Maximum norm error bound of a linearized difference scheme for a coupled nonlinear Schrödinger equations[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2011, 235(14/15): 4237-4250. DOI: 10. 1016/j. cam. 2011. 03. 019.
- [24] WANG Tingchun, GUO Bolin, XU Qiubin. Fourth-order compact and energy conservative difference schemes for the nonlinear Schrödinger equations in two dimensions[J]. Journal of Computational Physics, 2013, 243(15): 382-399. DOI: 10. 1016/j. jcp. 2013. 03. 007.
- [25] HONG Jialin, JI Lihai, KONG Linghua, *et al.* Optimal error estimate of a compact scheme for nonlinear Schrödinger equation[J]. Applied Numerical Mathematics, 2017, 120: 68-81. DOI: 10. 1016/j. apnum. 2017. 05. 004.
- [26] WANG Tingchun, ZHAO Xiaofei. Unconditional  $L^\infty$  convergence of two compact conservative finite difference schemes for the nonlinear Schrödinger equation in multi-dimensions[J]. Calcolo, 2018, 55(3): 34-59. DOI: 10. 1007/s10092-018-0277-0.
- [27] GONG Yuezheng, WANG Qi, WANG Yushun, *et al.* A conservative Fourier pseudo-spectral method for the nonlinear Schrödinger equation[J]. Journal of Computational Physics, 2017, 328: 354-370. DOI: 10. 1016/j. jcp. 2016. 10. 022.
- [28] HE Yang. Conservative local discontinuous Galerkin methods for the cubic-quintic nonlinear Schrödinger equation[J]. Optik, 2020, 226(1): 165821. DOI: 10. 1016/j. ijleo. 2020. 165821.
- [29] CUI Jin, XU Zhuangzhi, WANG Yushun, *et al.* Mass-and energy-preserving exponential Runge-Kutta methods for the nonlinear Schrödinger equation[J]. Applied Mathematics Letters, 2020, 112: 106770. DOI: 10. 1016/j. aml. 2020. 106770.
- [30] WANG Tingchun, WANG Jialing, GUO Bolin. Two completely explicit and unconditionally convergent Fourier pseudo-spectral methods for solving the nonlinear Schrödinger equation[J]. Journal of Computational Physics, 2019, 404: 109116. DOI: 10. 1016/J/JCP. 2019. 109116.

(责任编辑: 陈志贤      英文审校: 黄心中)