

文章编号: 1000-5862(2013)03-0244-05

带有阻尼项的 4 阶非线性薛定谔方程的显式辛格式

徐 远, 孔令华*, 王 兰, 黄晓梅

(江西师范大学数学与信息科学学院, 江西 南昌 330022)

摘要: 把带有阻尼项的 4 阶薛定谔方程写成标准的哈密顿系统, 将该哈密顿系统分裂成 2 个哈密顿子系统. 一个子系统是可分的, 可以构造显式的辛格式; 而另一个子系统由点点的质量守恒可以精确求解. 这样得到的数值格式整体上是辛格式, 而且避免了通常辛格式需要迭代的弊端, 提高了计算效率.

关键词: 4 阶非线性薛定谔方程; 显式辛格式; 哈密顿系统

中图分类号: O 241.8

文献标志码: A

0 引言

自 1984 年在北京举行的国际“双微”会议上冯康院士首先系统地提出哈密顿系统的辛几何算法以来^[1], 辛几何算法得到了长足发展, 构造出了多种数值方法, 如生成函数法、(块) Runge-Kutta (RK) 方法等^[2-3]. 现在不仅有哈密顿常微分方程的辛算法, 而且已发展到哈密顿偏微分方程多辛算法^[4-8]. 由 RK 方法需满足 $b_i b_j - b_i a_{ij} - b_j b_{ji} = 0$ 这一条件才称为辛格式, 易知显式的 RK 方法不可能为辛的. 对于可分的哈密顿系统, 可以构造出显式的块 RK 辛算法. 这样对于不可分的哈密顿系统只能建立完全隐式的辛格式, 这将大大增加计算量和存储量, 使得格式的计算效率不高. 基于辛映射的复合还是辛映射的理论, 可以把不可分的哈密顿系统分裂成一些可分的哈密顿子系统, 然后为各个子系统构造辛格式, 最后进行复合运算. 基于上述原理, 本文考虑在量子力学、非线性光学中有重要应用的带有阻尼项的 4 阶非线性薛定谔(FNSLET)方程的周期初边值问题.

$$\begin{cases} i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + G(|u|^2)u + V(x)u = 0, \\ x \in [0, L], t > 0, \\ u(x, 0) = u_0(x), x \in [0, L], \\ u(x, t) = u(x + L, t), t \in [0, T] \end{cases} \quad (1)$$

的显式辛格式. 在此 $i = \sqrt{-1}$, $G(|u|^2)$ 是一个关

于 $|u(x, t)|^2 \in \mathbf{R}$ 的有界实函数, $V(x)$ 是有界实函数, 称之为势函数. $u(x, t)$ 是一个复数值函数, $u_0(x)$ 是一个给定的复数值函数. 经过简单的微积分计算可知, 该定解问题具有质量守恒律

$$Q(t) = \int_0^L |u(x, t)|^2 dx = \int_0^L |u(x, 0)|^2 dx = Q(0), \quad (4)$$

和能量守恒律

$$E(t) = \int_0^L (|u_{xx}|^2 + G(|u(x, t)|^2) + V(x)|u(x, t)|^2) dx = E(0). \quad (5)$$

对于周期初边值问题(1)~(3)的数值解, 已经有一些研究, 主要包含完全显式的蛙跳格式, 但是此格式不是自启动的, 不保持辛守恒, 同时也不保持守恒律(4)式或(5)式. 完全隐式的辛格式能够保持辛守恒, 但是计算效率不高. 为此, 在辛算法中引入分裂步方法的基本思想: 把原问题分裂成一些更简单的子问题, 通过对子问题依次数值求解或者解析求解来达到求解原问题的目的.

1 FNSET 方程哈密顿形式

令 $u(x, t) = p(x, t) + iq(x, t)$, 其中 $p(x, t)$, $q(x, t)$ 是实函数, $z = (p, q)^T$, 则 FNSET 方程(1)可以写成哈密顿系统的形式

$$\frac{dz}{dt} = J^{-1} \nabla_z H(z), \quad J^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

收稿日期: 2012-11-15

基金项目: 国家自然科学基金(10901074, 11271171), 江西省自然科学基金(20114BAB201011)和江西省教育厅科研计划(GJJ12174)资助项目.

通信作者: 孔令华(1977-), 男, 江西石城人, 副教授, 博士, 主要从事偏微分方程数值解法的研究.

$$\text{其中 } \nabla_z \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \delta H / \delta p \\ \delta H / \delta q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{xxxx} + G(|u|^2)p + V(x)p \\ q_{xxxx} + G(|u|^2)q + V(x)q \end{pmatrix},$$

$$H(p, q) = \int_0^L [0.5((p_{xx})^2 + (q_{xx})^2) + G(|u|^2) + V(x)|u|^2] dx.$$

此系统是**不可分系统**，只能构造全隐的(块)RK辛格式，但是计算效率不高，而且非线性迭代将在一定程度上破坏数值格式的辛性。因此，为克服此弊端，引进分裂步方法的思想。

把问题(1)分裂为线性问题

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad (7)$$

和非线性问题

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = -[G(|u|^2) + V(x)]u. \quad (8)$$

这2个子问题均具有与问题(1)一样的辛结构。线性子问题(7)的辛形式为

$$\begin{pmatrix} p_t \\ q_t \end{pmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \nabla_z \mathbf{H}_L(z) = \begin{pmatrix} -q_{xxxx} \\ p_{xxxx} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

其哈密顿函数为 $H_L(p, q) = \frac{1}{2} \int_0^L ((p_{xx})^2 + (q_{xx})^2) dx$ ，非线性子问题(8)的哈密顿函数为

$$H_N(p, q) = \int_0^L [G(|u|^2) + V(x)|u|^2] dx.$$

易知，对于非线性子问题(8)有点点质量守恒律，即

$$|u(x, t)|^2 = |u(x, 0)|^2, \quad \forall x, t.$$

从而非线性子问题(8)中的 $[G(|u|^2) + V(x)]$ 是一个与时间 t 无关的量，则有

$$\frac{\partial u}{\partial t} = i[G(|u(x, 0)|^2) + V(x)]u =$$

$$iF(|u|^2, x)u,$$

其中 $F(|u|^2, x)$ 是与 t 无关的函数。从而可以利用分离变量法求解(8)，可得

$$u(x, t) = e^{iF(|u|^2, x)t} u(x, 0).$$

下面讨论线性哈密顿系统(7)的显式辛格式。

设求解区域为 $D = \{(x, t) \mid 0 \leq x \leq 2\pi, 0 \leq t \leq T\}$ ，空间步长为 h ，时间步长为 τ ， $J = [2\pi/h]$ ， $N = [T/\tau]$ ，用2组平行线 $x_j = jh$ ， $j = 0, 1, \dots, J$ ， $t_n = n\tau$ ， $n = 0, 1, \dots, N$ 划分区域 D ，记 $u(x_j, t_n) \equiv u_j^n$ ， $u(x_j, t) \equiv u_j$ ， $\mu(x, t_n) \equiv \mu^n$ ， $p(x_j, t_n) \equiv p_j^n$ ， $q(x_j, t) \equiv q_j$ ， $p(x_j, t) \equiv p_j$ ， $p(x, t_n) \equiv p^n$ ， $q(x, t) \equiv q^n$ 。记 $\mathbf{P} = (p_1, p_2, \dots, p_J)^T$ ， $\mathbf{Q} = (q_1, q_2, \dots, q_J)^T$ ， Δ_2 是对 $\frac{\partial^4}{\partial x^4}$ 的2阶精度的中心差商算子逼近，即

近，即

$$\Delta_2 p = \frac{p_{j-2} - 4p_{j-1} + 6p_j - 4p_{j+1} + p_{j+2}}{h^4},$$

$$\Delta_2 q = \frac{q_{j-2} - 4q_{j-1} + 6q_j - 4q_{j+1} + q_{j+2}}{h^4}.$$

对无穷维哈密顿系统(9)在空间方向用 Δ_2 进行离散，得半离散的有限维哈密顿系统

$$\frac{d\mathbf{Z}}{dt} = \mathbf{J}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{Z},$$

$$\text{其中 } \mathbf{Z} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix}, \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \Delta_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Delta_2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

设 J 阶方阵 \mathbf{M} 为算子 Δ_2 对应的矩阵(周期边界条件)，则

$$\mathbf{M} = \frac{1}{h^4} \begin{pmatrix} 6 & -4 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -4 \\ -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -4 & 6 & -4 \\ -4 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -4 & 6 \end{pmatrix}_{J \times J}.$$

从而方程(10)可以写为

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{M} \\ \mathbf{M} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{M}\mathbf{Q} \\ \mathbf{M}\mathbf{P} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

容易求得 J 阶方阵 \mathbf{M} 的特征值为 $\frac{16}{h^4} \sin^4 \frac{k\pi}{2J}$ ， $k = 1, 2, \dots, J$ 。

2 分裂步显式辛格式的构造和稳定性分析

这部分主要是构造新的数值格式和分析格式的稳定性条件。首先讨论有限维线性哈密顿系统(11)利用块RK辛方法进行离散；然后考虑其分裂步辛格式；最后分析格式的稳定性。

分别用1阶和2阶的块RK辛方法离散有限维线性哈密顿系统(11)得

$$\mathbf{P}^{n+1} = \mathbf{P}^n - \tau \mathbf{M} \mathbf{Q}^n, \quad \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{Q}^n + \tau \mathbf{M} \mathbf{P}^{n+1}, \quad (12)$$

$$\begin{cases} \mathbf{P}_1 = \mathbf{P}^n, \quad \mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}^n + \frac{\tau \mathbf{M}}{2} \mathbf{P}_1, \\ \mathbf{P}^{n+1} = \mathbf{P}_1 - \tau \mathbf{M} \mathbf{Q}_1, \quad \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{Q}_1 + \frac{\tau \mathbf{M}}{2} \mathbf{P}^{n+1}. \end{cases} \quad (13)$$

格式(13)式可以改写为

$$\begin{cases} \mathbf{P}^{n+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{\tau^2 \mathbf{M}^2}{2} \right) \mathbf{P}^n - \tau \mathbf{M} \mathbf{Q}^n, \\ \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{Q}^n + \frac{\tau \mathbf{M}}{2} \mathbf{P}^n + \frac{\tau \mathbf{M}}{2} \mathbf{P}^{n+1}. \end{cases}$$

因而,对于无限维哈密顿系统(6)可以得到如下整体显式的辛格式:

$$(I) \begin{cases} u_j^* = u_j^n e^{i(G(|u_j^n|^2) + V(x_j))\tau}, \\ p_j^* = \operatorname{Re}(u_j^*) \quad q_j^* = \operatorname{Im}(u_j^*), \\ P^{n+1} = P^* - \tau M Q^* \quad Q^{n+1} = Q^* + \tau M P^{n+1}. \end{cases} \quad (14)$$

$$(II) \begin{cases} u_j^* = u_j^n e^{i(G(|u_j^n|^2) + V(x_j))(\tau/2)}, \\ p_j^* = \operatorname{Re}(u_j^*) \quad q_j^* = \operatorname{Im}(u_j^*), \\ P^{**} = \left(I - \frac{\tau^2 M^2}{2}\right) P^* - \tau M Q^*, \\ Q^{**} = Q^* + \frac{\tau M}{2} (P^* + P^{**}), \\ U^{**} = P^{**} + i Q^{**}, \\ u_j^{n+1} = u_j^{**} e^{i(G(|u_j^{**}|^2) + V(x_j))(\tau/2)}. \end{cases} \quad (15)$$

下面分析格式的稳定性.

引理 1^[9] 2 次多项式 $f(z) = z^2 + 2bz + 1$ $b \in \mathbf{R}$ 的所有零点满足根条件的充要条件是 $|b| \leq 1$.

引理 2^[10] 设 A, B, C, D 均是 J 阶方阵,若 $AC = CA$ 则

$$|\lambda I - M| = \begin{vmatrix} \lambda I - A & -B \\ -C & \lambda I - D \end{vmatrix} = |(\lambda I - A)(\lambda I - D) - CB|,$$

特别地,如果存在可逆矩阵 P 使得 A, B, C, D 均可对角化为 $\operatorname{diag}(a_1, a_2, \dots, a_J)$, $\operatorname{diag}(b_1, b_2, \dots, b_J)$, $\operatorname{diag}(c_1, c_2, \dots, c_J)$, $\operatorname{diag}(d_1, d_2, \dots, d_J)$ 则

$$|\lambda I - M| = |(\lambda I - A)(\lambda I - D) - CB| = \prod_{j=1}^J [\lambda^2 - (a_j + d_j)\lambda + a_j d_j - c_j b_j].$$

格式(12)可以写成形式

$$\begin{pmatrix} P^{n+1} \\ Q^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & -\tau M \\ \tau M & I - \tau^2 M^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P^n \\ Q^n \end{pmatrix}.$$

表 1 当 $t=1$ 时格式(I) 及(II) 的稳定性条件验证

格式	N	$\tau \times 10^{-4}$	$r = \tau/h^4$	$\ e\ _2 / \times 10^{-2}$	$\ e\ _\infty / \times 10^{-2}$
格式(I)	5 400	1.861 9	0.125 3	NAN	NAN
	5 500	1.818 2	0.122 0	4.436 6	5.649 0
	5 600	1.785 7	0.120 0	5.605 4	5.605 4
	5 300	1.886 8	0.127 0	NAN	NAN
格式(II)	5 400	1.851 9	0.125 0	2.516 1	3.203 6
	5 500	1.818 2	0.122 0	2.516 1	3.203 6

由表 1 可知,格式(I)与格式(II)的稳定性条件均为 $r = \tau/h^4 \leq 0.125$,这一稳定性条件与理论分析的稳定性条件一致,从验证了格式的正确性.

下面展现格式(I)与格式(II)对带有正弦阻尼项的 4 阶薛定谔方程的数值模拟实验图形,取 $t \in$

由引理 2 可得格式(12)的特征方程为 $\prod_{k=1}^J [\lambda^2 - (2 - \tau^2 \mu_k^2)\lambda + 1] = 0$,其中 μ_k 为 M 的特征值,则由引理 1 可知,特征方程的所有根按模小于等于 1 的充要条件为 $|2 - \tau^2 \mu_k^2| \leq 2$ $k = 1, 2, \dots, J$. 将 $\mu_k = [16 \sin^4(k\pi)/(2J)]/h^4$ 代入上式不等式,可得 $\left|2 - \frac{\tau^2}{h^8} [16 \sin^4(k\pi)/(2J)]^2\right| \leq 2 \Rightarrow \tau/h^4 \leq 1/8$,

所以格式(12)的稳定性条件为 $r = \tau/h^4 \leq 0.125$. 同理可证格式(13)的稳定条件也为 $r \leq 0.125$.

显式辛格式(14)和(15)的非线性问题由点点质量守恒是可以精确求解的,因此显式辛格式(14)和(15)的稳定条件为 $r = \tau/h^4 \leq 0.125$.

3 数值实验

下面对显式辛格式(14)和(15)进行数值实验. 考虑如下带有正弦阻尼项的 4 阶薛定谔方程的周期初边值问题

$$\begin{cases} iu_t + u_{xxxx} + 6|u|^2 u - 150(\sin^2 x)u = 0, \\ u(x, 0) = 5e^{i\pi/4} \sin x, \\ u(x, t) = u(x + 2\pi, t), \end{cases} \quad (16)$$

此问题具有解析解 $u(x, t) = 5e^{i(t+\pi/4)} \sin x$.

为方便起见,引进记号: $e_j^n = u_j^n - u(x_j, t_n)$,

$$\|e^n\|_2 = h \sqrt{\sum_{j=1}^N |e_j^n|^2}, \quad \|e^n\|_\infty = \max_j |e_j^n|, \\ \operatorname{Res}(Q^n) = Q^n - Q^0, \quad \operatorname{Res}(E^n) = E^n - E^0.$$

下面固定空间步长 h , 时间步长 τ 取不同的值,验证格式(I)和格式(II)的稳定性条件. 令 $T = 1$, $x \in [0, 2\pi]$, $h = \pi/16$, $\pi = T/N$, N 的取值如表 1,从而可得不同的 r 值.

$[0, 2\pi]$, $x \in [0, 2\pi]$, $h = \pi/16$, $\pi = 2/50000$.

由图 1 和图 2 知,格式(I)与格式(II)解得的方程(16)的数值解的实部与虚部图像和精确解的实部与虚部图像几乎是重合的,因而本文提出的新格式作用于方程(16)时的数值解可以用来逼近精

确解,说明格式(I)与格式(II)的实用性与有效性.
最后,验证格式(I)与格式(II)是否具有离散

的质量和能量守恒性质,数值实验模拟质量残差与能量残差图形.根据残差图像,判断格式对守恒性质

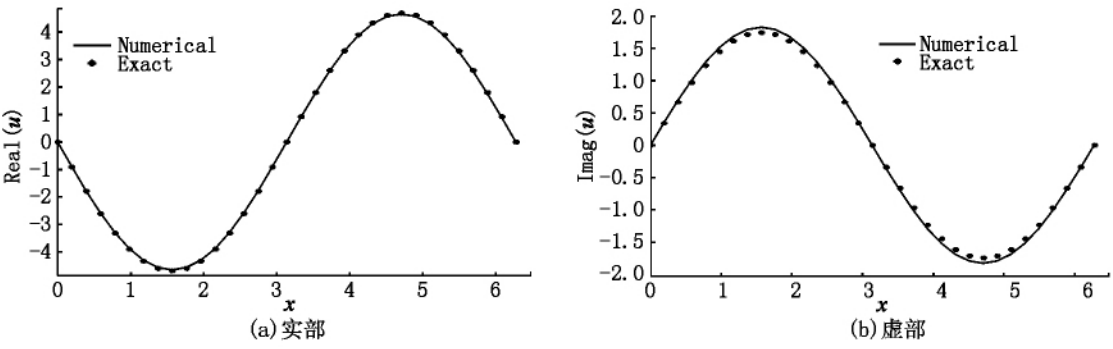


图 1 格式(I)的数值解与精确解

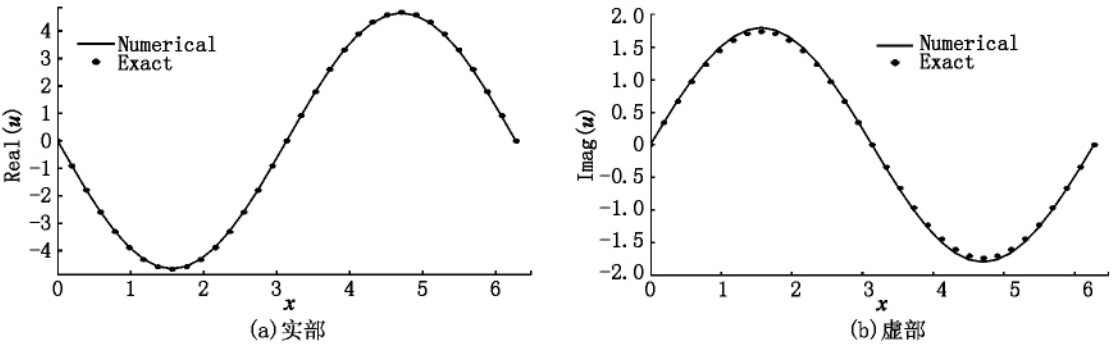


图 2 格式(II)的数值解与精确解

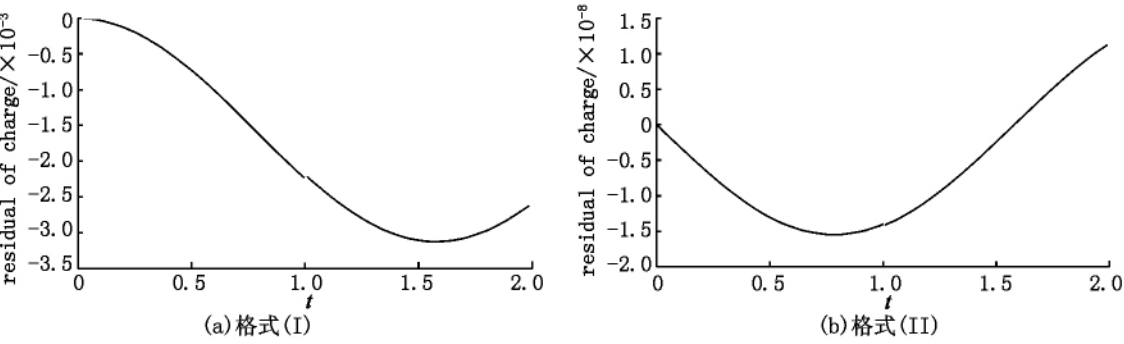


图 3 质量残差图

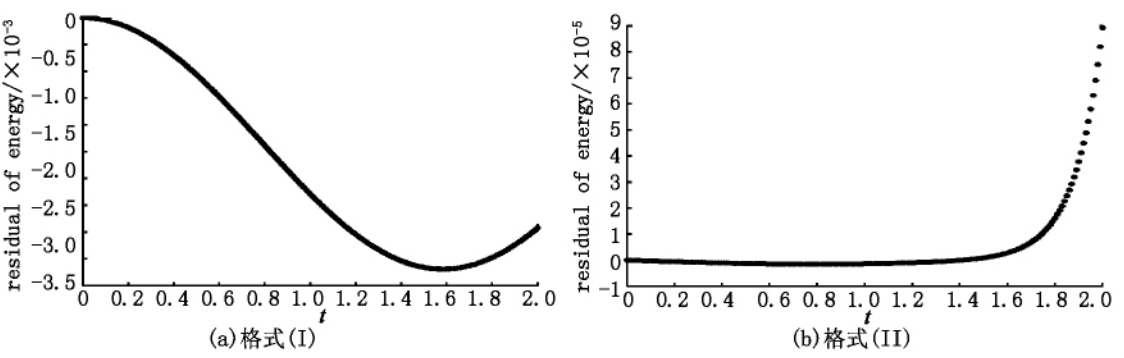


图 4 能量残差图

的保持情况.

由图 3 和图 4 可知,虽然显式辛格式(I) 和(II) 不保持质量和能量守恒,但是它们的残差较小,可以很好地进行控制,从而减少质量与能量的损失.

4 总结

本文主要是讨论带有正弦阻尼项的 4 阶非线性薛定谔方程,构造了分裂步的显式辛格式,其思想是对方程分裂,得到 1 个线性子问题和 1 个非线性子问题,非线性可以通过解常微分方程方法直接解得其精确解^[11];对于线性子问题,本文分别运用 1 阶精度和 2 阶精度的显式辛格式,从而构造了 2 种新的数值格式,即格式(I) 和(II),并分析了这 2 种数值格式的稳定性条件,最后通过数值算例验证了分析的稳定性条件的正确性与新的数值格式的实用性和有效性.

5 参考文献

- [1] 冯康,秦孟兆. 哈密尔顿系统的辛几何算法 [M]. 杭州: 浙江科学技术出版社, 2002.
- [2] Zeng Wenping. A leap frog finite difference scheme for a class of nonlinear Schrödinger equations of high order [J]. J Comput Math, 1999, 17(2): 133-138.
- [3] Kong Linghua, Hong Jialin, Wang Lan, et al. Symplectic integrator for nonlinear high order Schrödinger equation with a trapped term [J]. J Comput Appl Math, 2009, 231(2): 664-679.
- [4] Hong Jialin, Jiang Shanshan, Li Chun. Explicit multi-symplectic methods for Klein-Gordon-Schrödinger equations [J]. J Comput Phys, 2009, 228(9): 3517-3532.
- [5] Kong Linghua, Cao Ying, Wang Lan, et al. Split-step multi-symplectic integrator for the fourth-order Schrödinger equation with cubic nonlinear term [J]. J Chin Comput Phys, 2011, 28(5): 76-82.
- [6] 黄红, 王兰. 薛定谔方程的局部 1 维多辛算法 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2011, 35(5): 455-458.
- [7] 王兰. 多辛 Preissmann 格式及其应用 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2009, 33(1): 42-46.
- [8] 王兰, 陈静. 2 维 Schrödinger 方程的多辛格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2010, 34(6): 600-604.
- [9] Miller J H. On the location of zeros of certain class of polynomials with application to numerical analysis [J]. J Inst Math Appl, 1971, 8(3): 397-406.
- [10] Qin Mengzhao, Zhang Meiqing. Multi-stage symplectic schemes of two kinds of Hamiltonian systems for wave equations [J]. Computer Math Appl, 1990, 19(10): 51-62.
- [11] 符芳芳, 孔令华, 王兰. 一类新的含双幂非线性项的 Schrödinger 方程的差分格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2010, 34(1): 22-26.

Explicit Symplectic Scheme for Nonlinear Fourth Order Schrödinger Equation with a Trapped Term

XU Yuan, KONG Ling-hua*, WANG Lan, HUANG Xiao-mei

(College of Mathematics and Informatics, Jiangxi Normal University, Nanchang Jiangxi 330022, China)

Abstract: The Schrödinger equation with trapped term is rewritten into standard Hamiltonian system, which is split into two subsystems. One of them is separable and explicit symplectic scheme can be constructed. Another can be solved exactly due to its pointwise mass conservation law. The whole scheme is explicit symplectic integrator. Therefore, no iterative is required and computational efficiency is improved.

Key words: fourth-order Schrödinger equation; explicit symplectic scheme; Hamiltonian system

(责任编辑: 曾剑锋)