

文章编号: 1000-5862(2013)06-0633-04

具有坍塌势的 4 阶薛定谔方程的紧致守恒格式

周晶晶, 孔令华*, 黄 红, 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: 利用紧致方法离散 4 阶薛定谔方程的空间导数, 构造出具有坍塌势的 4 阶薛定谔方程的紧致守恒格式. 理论分析表明该格式具有精度高、模版小的特点, 且保持离散的电荷守恒律以及能量守恒律. 最后通过数值实验验证理论分析的正确性.

关键词: 薛定谔方程; 高阶紧致格式; 守恒律

中图分类号: O 241.8

文献标志码: A

0 引言

本文主要考虑在量子力学中有广泛应用的具有坍塌势的 4 阶薛定谔方程

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

的高阶紧致格式, 其中 $i = \sqrt{-1}$, $N(|u|^2)$ 关于变量 $|u(x, t)|^2$ 是可微函数, $T(x)$ 是已知坍塌势函数, 当系统中的凝聚原子数达到某一临界数目时, 由于此坍塌势的作用, 使得凝聚变得不稳定. 4 阶薛定谔方程的周期初边值问题(1) 满足:

(i) 电荷守恒律

$$Q(t) = \int_0^L |u(x, t)|^2 dx = \int_0^L |u_0(x)|^2 dx = Q(0);$$

(ii) 能量守恒律

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(t) = \int_0^L \left[\left| \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right|^2 + N(|u(x, t)|^2) + \right. \\ \left. T(x)|u(x, t)|^2 \right] dx = \mathcal{E}(0). \end{aligned}$$

此 2 个守恒律说明系统的电荷量和能量始终保持不变, 在设计数值格式时也应该尽可能多地保持这些守恒律不变, 这就是通常所说的守恒格式. 数值

格式对守恒律的保持情况已经成为衡量一个数值格式好坏的重要指标^[1]. 薛定谔方程在流体动力学、非线性光学、量子力学、等离子体物理中有广泛应用, 对其数值解法的研究是近年来科学计算的热点, 有大量的研究成果^[2-6], 其中有能量守恒格式、辛守恒格式等. 然而, 这些格式大部分都是完全隐式的, 计算精度较低, 要得到指定准确度的近似解需要的网格点数较多.

为了在不增加网格节点的情况下加快计算速度, 采用高阶紧致格式, 即充分利用原控制方程信息, 把空间导数离散后的截断误差主项保留下来, 其中的高阶空间导数充分利用原方程部分转化成时间导数, 从而降低空间导数的阶数, 这样也就降低了格式对网格点数的要求, 其本质上就是把通常差分格式中用若干个离散点的函数值逼近某一个中心点的导数值, 转变为用这些点的函数值的线性组合表示这些点附近点的导数值的线性组合, 也就是把通常差分中的导数值显式逼近转化成隐式逼近. 如果所构造的格式是隐式格式, 将不会增加任何计算复杂度. 它以其精度高、模版小、边界易于处理而颇受欢迎^[7-10], 在各类微分方程的数值求解中得到了有效应用. 本文利用原方程考虑具有坍塌势的 4 阶薛定谔方程的高阶紧致格式. 此类格式在每个时间层只要用到与 2 阶中心差分格式一样的模版, 但是得到的精度要高 2 阶, 而且计算复杂度相同.

收稿日期: 2013-05-16

基金项目: 国家自然科学基金(11301234, 11271171), 江西省自然科学基金(20114BAB201011) 和 2010 年江西师范大学青年成长基金资助项目.

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.

1 高阶守恒格式的构造

将时空区域 $[0, L] \times [0, T]$ 采取如下一致网格剖分: $x_j = jh, j = 0, 1, \dots, M; t^n = n\tau, n = 0, 1, \dots, N$, 其中 h, τ 分别为时间步长和空间步长, M, N 均为正整数.

记 u_j^n 为 $u(x, t)$ 的在 (x_j, t^n) 处的近似值, 为方便起见, 引进下面的记号:

$$\begin{aligned} u_j^{n+1/2} &= (u_j^{n+1} + u_j^n) / 2, \delta_x^2 u_j^n = (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) / h^2, \delta_t u_j^n = (u_j^{n+1} - u_j^n) / \tau, \delta_x^4 u_j^n = (u_{j+2}^n - 4u_{j+1}^n + 6u_j^n - 4u_{j-1}^n + u_{j-2}^n) / h^4, Au_j^n = (u_{j-1}^n + 4u_j^n + u_{j+1}^n) / 6, \langle u^n, v^n \rangle = h \sum_{j=1}^M u_j^n \bar{v}_j^n, \|u^n\|^2 = \langle u^n, u^n \rangle. \end{aligned}$$

构造薛定谔方程 (1) 的高阶紧致差分格式:

$$iA\delta_t u_j^n + \delta_x^4 u_j^{n+1/2} + A \frac{N(|u_j^{n+1}|^2) - N(|u_j^n|^2)}{|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2} u_j^{n+1/2} + AT(x_j) u_j^{n+1/2} = 0. \quad (2)$$

为了后面的数值分析, 将 (2) 式写成向量的形式:

$$i\delta_t u^n + HBu^{n+1/2} + Tu^{n+1/2} = 0, \quad (3)$$

其中

$$A_1 = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & 4 & 1 & \cdots & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \cdots & \cdots & 1 & 4 & 1 \\ 1 & \cdots & \cdots & 1 & 4 \end{pmatrix}_{M \times M}, \quad H = (A_1)^{-1},$$

$$B = \frac{1}{h^4} \begin{pmatrix} 6 & -4 & 1 & \cdots & 1 & -4 \\ -4 & 6 & -4 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 & -4 & 6 & -4 \\ -4 & 1 & \cdots & 1 & -4 & 6 \end{pmatrix}_{M \times M},$$

$$B_+ = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \cdots & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 1 & \cdots & \cdots & 1 & -2 \end{pmatrix}_{M \times M},$$

T 是对角元为 $[N(|u_j^{n+1}|^2) - N(|u_j^n|^2)] / [|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2] + T(x_j)$ 的对角矩阵.

易知 A_1 是对称正定矩阵, 其逆矩阵 H 也为对称正定矩阵. 另外经计算有 $B = (B_+)^2, A_1 B = B A_1, HB = BH, B_+ H = H B_+$.

通过 Taylor 展开和前面的构造过程可知, 格式 (2) 在时间方向上是 2 阶收敛的, 在空间方向上是 4 阶收敛的, 这比通常的中心差分格式在空间方向上

高 2 阶, 而格式的模版是一样的, 从而具有一样的计算复杂度, 也就是紧致格式并没有增加计算量.

2 能量守恒与稳定性分析

引理 1^[11] 对任一实对称正定矩阵 H , 总存在实对称正定矩阵 R , 使得 $H = R^2$. 进一步地, 任一能与 H 交换的矩阵亦能与 R 交换.

由引理 1 知, 存在实对称矩阵 R , 使得 $H = R^2$.

定理 1 设 u_j^n 是差分格式 (3) 的解, 则

$$Q^{n+1} = \|u^{n+1}\|^2 = \|u^0\|^2 = Q^0.$$

证 在 (3) 式两边与 $u^{n+1} + u^n$ 作内积得

$$\begin{aligned} \langle (u^{n+1} - u^n) / \tau, \mu^{n+1} + u^n \rangle + \frac{1}{2} \langle HB(u^{n+1} + u^n), u^{n+1} + u^n \rangle + \frac{1}{2} \langle T(u^{n+1} + u^n), \mu^{n+1} + u^n \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

(4) 式的第 1 项为 $i \langle u^{n+1} - u^n, \mu^{n+1} + u^n \rangle / \tau = i [\langle \|u^{n+1}\|^2 - \|u^n\|^2 \rangle + 2i \text{Im}(\langle u^{n+1}, \mu^n \rangle)] / \tau$, 其中 Im 表示取其虚部.

(4) 式的第 2 项为

$$\begin{aligned} \langle HB(u^{n+1} + u^n), \mu^{n+1} + u^n \rangle / 2 &= \langle RRB_+(u^{n+1} + u^n), \mu^{n+1} + u^n \rangle / 2 = \langle RB_+(u^{n+1} + u^n), R(u^{n+1} + u^n) \rangle / 2 = \langle RB_+(u^{n+1} + u^n), RB_+(u^{n+1} + u^n) \rangle / 2 = \|RB_+(u^{n+1} + u^n)\|^2 / 2, \end{aligned}$$

所以, 第 2 项为实数. 由 T 是实对角矩阵知第 3 项是实数. 在 (4) 式两边取虚部得 $\|u^{n+1}\|^2 = \|u^n\|^2$. 写成分量形式即为电荷守恒.

定理 2 设 u_j^n 是差分格式 (3) 的解, 则

$$\begin{aligned} \varepsilon^{n+1} &= \|RB_+ u\|^2 + h \sum_{j=1}^M T(x_j) |u_j^{n+1}|^2 + h \sum_{j=1}^M N(|u_j^{n+1}|^2) = \|RB_+ u^n\|^2 + h \sum_{j=1}^M T(x_j) |u_j^n|^2 + h \sum_{j=1}^M N(|u_j^n|^2) = \varepsilon^n. \end{aligned} \quad (5)$$

证 将 (3) 式与 $u^{n+1} - u^n$ 作内积得

$$\begin{aligned} \langle \frac{i}{\tau} (u^{n+1} - u^n), \mu^{n+1} - u^n \rangle + \frac{1}{2} \langle HB(u^{n+1} + u^n), u^{n+1} - u^n \rangle + \frac{1}{2} \langle T(u^{n+1} + u^n), \mu^{n+1} - u^n \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

(6) 式的第 1 项为 $i \|u^{n+1} - u^n\|^2 / \tau$, 它是纯虚数.

(6) 式的第 2 项为

$$\frac{1}{2} \langle HB(u^{n+1} + u^n), \mu^{n+1} - u^n \rangle = \frac{1}{2} \langle RRB(u^{n+1} + u^n), \mu^{n+1} - u^n \rangle,$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n &= \frac{1}{2} \langle \mathbf{RB}(\mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{u}^n) \mathbf{R}(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) \rangle = \\
&\frac{1}{2} \langle \mathbf{RB}_+ \mathbf{B}_+ (\mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{u}^n) \mathbf{R}(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) \rangle = \\
&\frac{1}{2} \langle \mathbf{B}_+ \mathbf{B}_+ \mathbf{R}(\mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{u}^n) \mathbf{R}(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) \rangle = \\
&\frac{1}{2} \langle \mathbf{B}_+ \mathbf{R}(\mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{u}^n) \mathbf{B}_+ \mathbf{R}(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) \rangle = \\
&\frac{1}{2} (\|\mathbf{RB}_+ \mathbf{u}^{n+1}\|^2 - \|\mathbf{RB}_+ \mathbf{u}^n\|^2) + \text{Im} \langle \mathbf{B}_+ \mathbf{R} \mathbf{u}^{n+1}, \\
&\mathbf{B}_+ \mathbf{R} \mathbf{u}^n \rangle,
\end{aligned}$$

所以,第2项为实数.

(6)式的第3项为

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2} \langle T(\mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{u}^n) \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n \rangle = \\
&\frac{h}{2} \sum_{j=1}^M \left[(N(|u_j^{n+1}|^2) - N(|u_j^n|^2)) / (|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2) + T(x_j) \right] (u_j^{n+1} + u_j^n) (u_j^{n+1} - u_j^n) = \\
&\frac{h}{2} \sum_{j=1}^M \left[(N(|u_j^{n+1}|^2) - N(|u_j^n|^2)) / (|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2) - \right. \\
&\left. |u_j^n|^2 + T(x_j) \right] (|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2 + 2\text{Im}(u_j^{n+1} \overline{u_j^n})),
\end{aligned}$$

取其实部为

$$\begin{aligned}
&\frac{h}{2} \sum_{j=1}^M \left[(N(|u_j^{n+1}|^2) - N(|u_j^n|^2)) / (|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2) + \right. \\
&\left. T(x_j) \right] (|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2) = \frac{h}{2} \sum_{j=1}^M \left[N(|u_j^{n+1}|^2) - \right. \\
&\left. N(|u_j^n|^2) \right] + \frac{h}{2} \sum_{j=1}^M T(x_j) (|u_j^{n+1}|^2 - |u_j^n|^2).
\end{aligned}$$

在(6)式两边均取实部,经整理可得离散能量守恒律(5).

由此2个守恒律可知,格式(2)是稳定的.

3 数值实验

本部分旨在用数值算例考察数值格式的收敛性和对守恒量的保持情况.4阶薛定谔方程为

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

它的精确解为 $u(x, t) = 5\exp(i(t + \pi/4)) \sin x$.

表1和表2给出了数值解在最大模范数下的误差

$\|e^n\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq M} |u_j^n - u(x_j, t^n)|$ 和收敛阶 $\text{Order} = \ln(\|e^n(k_1)\|_\infty / \|e^n(k_2)\|_\infty) / \ln(k_1/k_2)$, 其中

k_1, k_2 是2种不同的时间或者空间步长.

表1 空间误差收敛阶($\tau = 5 \times 10^{-5}$)

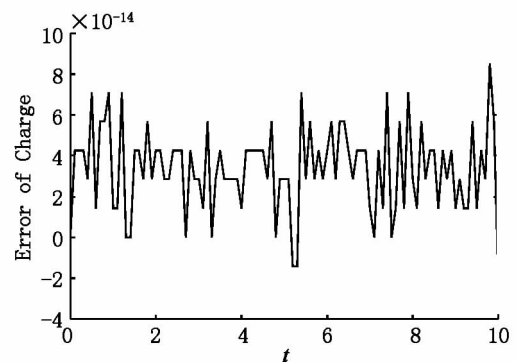
h	$\ e\ _\infty$	order
$\pi/5$	1.129 3e-3	—
$\pi/10$	6.925 1e-5	4.027 4
$\pi/20$	4.253 7e-6	4.025 0
$\pi/40$	2.691 5e-7	3.982 2

表2 时间误差收敛阶($h = \pi/50$)

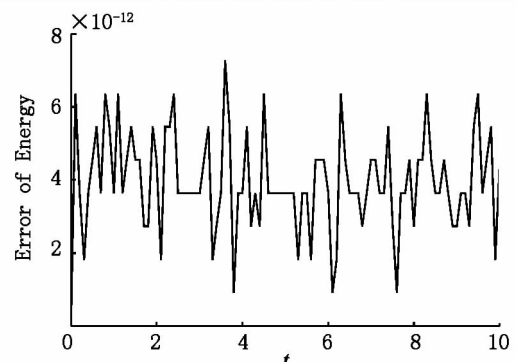
τ	$\ e\ _\infty$	order
1/50	1.629 4e-4	—
1/100	4.082 2e-5	1.996 9
1/200	1.029 0e-5	1.988 1
1/400	2.652 9e-6	1.955 6

从表1和表2中可以看出,该格式在空间方向上是4阶收敛的,在时间方向上是2阶收敛的.这验证了本文提出的格式是高阶的.

取 $\tau = 0.01, h = \pi/50$, 用上述格式离散到 $T = 10$.图1给出了守恒量的数值残差,图1(a)描述了数值解的电荷随时间的演化关系,图1(b)展示了数值解的能量随时间的演化关系.



(a) 电荷误差随时间的变化



(b) 能量误差随时间的变化

图1 守恒量的残差值

由图1可知,与连续问题一样,格式的电荷变化和能量变化的范围较小,这验证了本文构造的高阶

紧致格式是电荷守恒、能量守恒的.

4 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] 常谦顺. 一类非线性 Schrödinger 方程的守恒差分格式 [J]. 科学通报, 1981, 26(18): 1094-1097.
- [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, Liu Ying, Munthe-Kaas Hans, et al. Globally conservative properties and error estimation of a multisymplectic scheme for Schrödinger equations with variable coefficients [J]. Appl Numer Math, 2006, 56(6): 814-843.
- [5] Zeng Wenping. Leap-frog schemes of Hamiltonian system for Schrödinger equations of high order [J]. Numer Math: J of Chin Univer, 1995, 17(4): 305-317.
- [6] Chao Hongyang. A difference scheme for a class of nonlinear Schrödinger equations [J]. J Comput Math, 1987, 5(3): 272-280.
- [7] Lele S K. Compact finite difference schemes with spectral-like solution [J]. J Comput Phys, 1992, 103(1): 16-42.
- [8] Kong Linghua, Duan Yali, Wang Lan, et al. Spectral-like resolution compact ADI finite difference method for the multi-dimensional Schrödinger equations [J]. Math Comput Model, 2012, 55(5/6): 1798-1812.
- [9] Li Jichun, Chen Yitung, Liu Guoqing. High-order compact ADI methods for the parabolic equations [J]. Comput Math Appl, 2006, 52(8/9): 1343-1356.
- [10] 马院萍, 孔令华, 王兰. 2 维 Schrödinger 方程的高阶紧致 ADI 格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2010, 34(4): 421-425.
- [11] 史荣昌. 矩阵分析 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 2004.

Compact and Conserving Scheme of Fourth-Order Schrödinger Equation with Collapse Potential Term

ZHOU Jing-jing, KONG Ling-hua*, HUANG Hong, HUANG Xiao-mei

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

Abstract: The compact and conserving scheme is presented to solve fourth-order Schrödinger equation with collapse term by discretizing spatial direction with compact method. The scheme is not only with high accuracy, but also unconditionally stable. Moreover, it is proved that the scheme preserves discrete charge conservation law and energy conservation law. Detailed numerical results suggest that the scheme is efficient and consistent with our theoretical analysis.

Key words: fourth-order Schrödinger equation; high order compact scheme; conservation law

(责任编辑: 曾剑锋)