

文章编号: 1000-5862(2016)05-0515-05

Schrödinger 方程的紧致修正交替方向格式

王 兰, 周媛兰, 符莉丹

(江西师范大学数学与信息科学学院, 江西 南昌 330022)

摘要: 研究了多维 Schrödinger 方程的紧致修正交替方向格式. 通过对 J. Douglas 等提出的交替方向格式进行误差分析可以发现其分裂误差远远大于时间离散的截断误差. 为提高计算精度和效率, 在格式中加入 1 个扰动项以提高分裂误差的阶数, 使时间离散误差占优. 数值实验验证了格式的优越性和扰动项的作用.

关键词: Schrödinger 方程; 修正交替方向格式; 高阶紧致格式.

中图分类号: O 241.8 文献标志码: A DOI: 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2016.05.14

0 引言

交替方向隐式(ADI)格式是 20 世纪 50 年代中后期由 J. Douglas 等^[1-2]提出用来求解多维热传导方程、椭圆型方程非常有效的数值方法, 后来发展为分裂步方法, 它解决了求解多维问题需要求解阶数巨大代数方程组的难题^[3-5]. 这类方法具有分裂格式灵活、易于模块化和并行计算、稳定性好等优点, 在微分方程的数值求解中得到了广泛应用^[6-10]. 然而, 由于分裂步技术的应用产生了分裂误差, 而且常常远远大于时间离散所产生的截断误差, 也就是分裂误差占优. 这样较没有使用分裂技术的格式来说, 实际上降低了了解的精度. 为了弥补这一不足, J. Douglas 等^[11]在对抛物型方程原交替方向格式分析的基础上, 通过在格式中加入 1 个与分裂误差相近的扰动项, 使得分裂误差的阶较时间截断误差的阶高, 从而仍然保持时间截断误差占优. 本文将此技术应用用于多维 Schrödinger 方程的 ADI 格式的构造中.

为了改善空间方向的收敛速度, 同时避免谱方法计算速度慢、光滑性要求高的不足, 在空间方向采用高阶紧致格式进行离散^[7, 10-15]. 本文只涉及到 2 阶空间导数的离散, 下面给出逼近 2 阶导数的 6 阶紧致格式^[16]:

$$\mathcal{A}_x(u_{xx})_k = \mathcal{B}_x u_k \Rightarrow (u_{xx})_k = \mathcal{D}_x u_k, \quad (1)$$

其中 $\mathcal{D}_x = \mathcal{A}_x^{-1} \mathcal{B}_x$, $\mathcal{A}_x u_k = 2u_{k-1}/11 + u_k +$

$2u_{k+1}/11$, $\mathcal{B}_x u_k = 3(u_{k+2} - 2u_k + u_{k-2})/(44h^2) + 12(u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1})/(11h^2)$. 此处采用了一致空间网格剖分 h 为空间步长. 对应的矩阵形式为

$$\mathbf{A}_x u_{xx} = \mathbf{B}_x u \Rightarrow u_{xx} = \mathbf{A}_x^{-1} \mathbf{B}_x u = \mathbf{D}_x u,$$

其中 $\mathbf{A}_x = C(11 \ 2 \ \mathbf{0}_{N-3} \ 2)/11$, $\mathbf{B}_x = C(-102 \ 48, 3 \ \mathbf{0}_{N-5} \ 3 \ 48)/(44h^2)$, $\mathbf{D}_x = \mathbf{A}_x^{-1} \mathbf{B}_x$. 此处 $C(V)$ 表示首行为行向量 V 的循环矩阵, $\mathbf{0}_m$ 表示元素全为零的 m 维行向量. 由循环矩阵的性质可知 \mathbf{D}_x 是对称循环矩阵. 同样, 关于 u_{yy} 也有类似的算子 $\mathcal{A}_y, \mathcal{B}_y, \mathcal{D}_y$ 及对应矩阵 $\mathbf{A}_y, \mathbf{B}_y, \mathbf{D}_y$. 假设原问题满足周期边界条件.

1 高阶紧致修正交替方向格式的构造

首先考虑满足一定初始条件的 2 维线性 Schrödinger 方程^[9-10, 14]

$$i u_t + u_{xx} + u_{yy} = f(x, y, t), \quad (2)$$

为简单起见, 设问题(2)满足周期边界条件.

首先对时空区域作一致网格剖分, 网格节点记为 (x_k, y_j, t^n) . 记 $t^{n-1/2} = (t^n + t^{n-1})/2$. 在点 $(x_k, y_j, t^{n-1/2})$ 处有原方程成立, 即

$$i u_t(x_k, y_j, t^{n-1/2}) + u_{xx}(x_k, y_j, t^{n-1/2}) + u_{yy}(x_k, y_j, t^{n-1/2}) = f(x_k, y_j, t^{n-1/2}).$$

用高阶紧致格式(1)对空间导数进行离散, 得到半离散紧致格式

$$i(u_t)_{kj}^{n-1/2} + \mathcal{A}_x^{-1} \mathcal{B}_x u_{kj}^{n-1/2} + \mathcal{A}_y^{-1} \mathcal{B}_y u_{kj}^{n-1/2} = f_{kj}^{n-1/2}, \quad (3)$$

其中 $f_{kj}^{n-1/2} = f(x_k, y_j, t^{n-1/2})$.

收稿日期: 2016-05-20

基金项目: 国家自然科学基金(11301234, 11211171)和江西省自然科学基金(20161ACB20006, 20142BCB23009, 20151BAB201012)资助项目.

作者简介: 王 兰(1979-), 女, 安徽池州人, 讲师, 主要从事微分方程数值方法研究.

时间方向采用 Crank-Nicolson (CN) 格式对 (3) 式进一步离散可得

$$i(u_{kj}^n - u_{kj}^{n-1})/\tau + (\mathcal{A}_x^{-1}\mathcal{B}_x + \mathcal{A}_y^{-1}\mathcal{B}_y) \cdot (u_{kj}^n + u_{kj}^{n-1})/2 = f_{kj}^{n-1/2}, \quad (4)$$

其中 $j, k = 1, 2, \dots, N, n = 1, 2, \dots$. 此格式记为 HOC-CN 格式. 利用 Taylor 展开易知其截断误差为

$$R_{CNkj}^n = \left\{ \frac{1}{24} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_k, y_j, \theta^n) + \frac{1}{8} \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2}(x_k, y_j, \tilde{\theta}_k^n) + \frac{1}{8} \frac{\partial^4 u}{\partial y^2 \partial t^2}(x_k, y_j, \bar{\theta}_j^n) \right\} \tau^2 + \frac{23}{11 \times 7!} \left\{ \frac{\partial^8 u}{\partial x^8}(\tilde{\xi}_{kj}^n, \tilde{\eta}_{kj}^n, \tilde{t}_{kj}^n) + \frac{\partial^8 u}{\partial y^8}(\bar{\xi}_{kj}^n, \bar{\eta}_{kj}^n, \bar{t}_{kj}^n) \right\} h^6 = O(h^6 + \tau^2), \quad (5)$$

其中 $\tilde{\xi}_{kj}^n, \bar{\xi}_{kj}^n \in (x_{k-1}, x_{k+1}), \tilde{\eta}_{kj}^n, \bar{\eta}_{kj}^n \in (y_{k-1}, y_{k+1}), \tilde{\theta}_k^n, \bar{\theta}_j^n, \tilde{t}_{kj}^n, \bar{t}_{kj}^n \in (t_{k-1}, t_k)$.

对 HOC-CN 格式 (4) 进行简单分析不难发现, 在每一个时间递进的过程中, 将产生 1 个 N^2 阶的代数方程组^[7]. 对于计算精度要求稍高的问题, 一般计算机很难实现, 特别是当算法推广到 3 维空间变量的问题时, 实现起来非常困难. 基于隐格式存在的不足, J. Douglas 等^[1-2] 提出了交替方向隐式 (ADI) 格式. 经过理论分析可知这种格式本质就是在 CN 格式中加入 1 个与其截断误差同阶的扰动项.

对于 Schrödinger 方程 (2) 而言, 其 CN 高阶紧致 ADI (记为 HOC-ADI) 格式为

$$\begin{cases} (u_{kj}^* - u_{kj}^{n-1})/\tau - i\mathcal{A}_x^{-1}\mathcal{B}_x(u_{kj}^* + u_{kj}^{n-1})/2 - i\mathcal{A}_y^{-1}\mathcal{B}_y u_{kj}^{n-1} = -if_{kj}^{n-1/2}, \\ (u_{kj}^n - u_{kj}^{n-1})/\tau - i\mathcal{A}_x^{-1}\mathcal{B}_x(u_{kj}^* + u_{kj}^{n-1})/2 - i\mathcal{A}_y^{-1}\mathcal{B}_y(u_{kj}^n + u_{kj}^{n-1})/2 = -if_{kj}^{n-1/2}. \end{cases} \quad (6)$$

HOC-ADI 格式 (6) 可以写成为

$$\begin{cases} (I_N - i\tau D_x/2) \mathbf{u}_j^* = (I_N + i\tau D_x/2 + i\tau D_y) \mathbf{u}_j^{n-1} - i\tau f_{ij}^{n-1/2}, \quad j = 1, 2, \dots, N, \\ (I_N - i\tau D_y/2) \mathbf{u}_k^n = \mathbf{u}_k^* - i\tau D_y \mathbf{u}_k^{n-1}/2, \\ k = 1, 2, \dots, N. \end{cases} \quad (7)$$

其中 I_N 表示单位矩阵 $\mathbf{u}_j = [u_{1j}, u_{2j}, \dots, u_{Nj}]^T, \mathbf{u}_k = [u_{k1}, u_{k2}, \dots, u_{kN}]$. 为习惯与方便, 此处仍然用 $D_y \mathbf{u}_k$, 而没有按照矩阵乘法写成 $\mathbf{u}_k^T D_y$. 消去 (7) 式中的过渡变量 \mathbf{u}^* , 同时令 $D = D_x + D_y$, 可得

$$(I_N - i\tau D/2 + i^2 \tau^2 D_x D_y/4) \mathbf{u}^n = (I_N + i\tau D/2 + i^2 \tau^2 D_x D_y/4) \mathbf{u}^{n-1} - i\tau f^{n-1/2}, \quad (8)$$

为便于比较, 把 (8) 式改写成

$$i(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1})/\tau + D(\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1})/2 - i\tau^2 D_x D_y (\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1})/(4\tau) = f^{n-1/2}. \quad (9)$$

将 (9) 式与 (4) 式进行比较后, 可以发现

HOC-ADI 格式 (9) 比 HOC-CN 格式 (4) 多了 1 个扰动项 $-i\tau^2 D_x D_y (\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1})/(4\tau)$. 称之为分裂误差项. 从而 HOC-ADI 格式 (9) 的误差为 $O(\tau^2 + h^6)$, 即

$$R_{ADkj}^n = \frac{i\tau^2}{4} \mathcal{D}_x \mathcal{D}_y \frac{\partial u(x_k, y_j, t_{kj}^n)}{\partial t} + \frac{23}{11 \times 7!} \cdot \left[\frac{\partial^8 u(\tilde{\xi}_{kj}^n, \tilde{\eta}_{kj}^n, \tilde{t}_{kj}^n)}{\partial x^8} + \frac{\partial^8 u(\bar{\xi}_{kj}^n, \bar{\eta}_{kj}^n, \bar{t}_{kj}^n)}{\partial y^8} \right] h^6 + \left[\frac{1}{24} \frac{\partial^3 u(x_k, y_j, \theta^n)}{\partial t^3} + \frac{1}{8} \frac{\partial^4 u(x_k, y_j, \tilde{\theta}_k^n)}{\partial x^2 \partial t^2} + \frac{1}{8} \frac{\partial^4 u(x_k, y_j, \bar{\theta}_j^n)}{\partial y^2 \partial t^2} \right] \tau^2, \quad (10)$$

其中 $t_{kj}^n \in (t_{k-1}, t_k)$. 比较误差项 (5) 式与 (10) 式可以发现, 由于交替方向技术的引入, 格式 (6) 的时间方向的误差不仅包含 (10) 式的第 3 项 (截断误差), 还包含第 1 项, 而且第 1 项还可能大于第 3 项. 由此可知采用交替方向方法, 将会产生分裂误差, 进而使整个格式的误差变大. 不过注意到若在 (9) 式右边加上 $-i\tau^2 D_x D_y (\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1})/(4\tau)$, 则 HOC-ADI 格式的分裂误差主项便可消去, 但这样右端会含有未知网格函数 \mathbf{u}^n 的关于空间变量 x, y 的导数逼近项 $-i\tau^2 D_x D_y \mathbf{u}^n$, 格式需求解 N^2 阶的代数方程组. 为此, 用 $\mathbf{u}^{n-1} - \mathbf{u}^{n-2}$ 近似代替 $\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}$, 对格式右端进行修正. 于是当 $n \geq 2$ 时有

$$\begin{cases} F_{AD}^n = f^{n-1/2} - i\tau D_x D_y (\mathbf{u}^{n-1} - \mathbf{u}^{n-2})/4, \\ (I_N - i\tau D_x/2) \mathbf{u}_j^* = (I_N + i\tau D_x/2 + i\tau D_y) \mathbf{u}_j^{n-1} - i\tau F_{ADj}^n, \\ (I_N - i\tau D_y/2) \mathbf{u}_k^n = \mathbf{u}_k^* - i\tau D_y \mathbf{u}_k^{n-1}/2. \end{cases} \quad (11)$$

消去 (11) 式的中间变量得

$$i(\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1})/\tau + D(\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1})/2 - i\tau^3 D_x D_y (\mathbf{u}^n - 2\mathbf{u}^{n-1} + \mathbf{u}^{n-2})/(4\tau^2) = f^{n-1/2},$$

由此可知交替方向而产生的分裂扰动项变为 $-i\tau^3 D_x D_y (\mathbf{u}^n - 2\mathbf{u}^{n-1} + \mathbf{u}^{n-2})/(4\tau^2) = O(\tau^3)$, 也就是说通过修正提高了扰动项的阶, 不过格式的整体时间阶还是 2 阶. 时间方向的误差是截断误差占优, 它所得到的数值解在精度上与 HOC-CN 格式相当. 称之为高阶紧致修正交替方向格式 (HOC-MADI).

下面把上述算法推广到更一般的 2 维非线性 Schrödinger 方程^[7]

$$i u_t + \lambda(u_{xx} + u_{yy}) + F(|u|^2, x, y) u = f^{n-1/2} \quad (12)$$

其中 $F(|u|^2, x, y)$ 是可微的实函数, λ 是参数. 在点 $(x_k, y_j, t^{n-1/2})$ 处, 时间方向用 CN 格式, 而空间方向

用 HOC 格式(1) 离散此方程得

$$i(u_{kj}^n - u_{kj}^{n-1})/\tau + \lambda(\mathcal{B}_x^{-1}\mathcal{B}_x + \mathcal{B}_y^{-1}\mathcal{B}_y)(u_{kj}^n + u_{kj}^{n-1})/2 + F'(|u_{kj}^{n-1/2}|^2 \kappa_k \vartheta_j) u_{kj}^{n-1/2} = f_{kj}^{n-1/2}, \quad (13)$$

其中 $u_{kj}^{n-1/2} = (u_{kj}^n + u_{kj}^{n-1})/2 = u(x_k, y_j, t^{n-1/2}) + O(\tau^2)$. 与线性问题类似,把 HOC-CN 格式(13) 改写成 ADI 格式. 为避免在前一个时间步计算中同时含有未知格点函数 u_{kj}^* 与 u_{kj}^n , 同时避免求解非线性方程组,把非线性项 $F'(|u_{kj}^{n-1/2}|^2 \kappa_k \vartheta_j) u_{kj}^{n-1/2}$ 中的 $u_{kj}^{n-1/2}$ 用 2 阶的外推算法,即用 $\hat{u}_{kj}^n = 2u_{kj}^{n-1} - u_{kj}^{n-2}$ 代替,从而得到 HOC-ADI 格式:

$$\begin{cases} (u_j^* - u_j^{n-1})/\tau - i\lambda D_x(u_j^* + u_j^{n-1})/2 - i\lambda D_y u_j^{n-1} = \\ iF'(|\hat{u}_j^n| \kappa_k \vartheta_j) \hat{u}_j^n - if_j^{n-1/2} \triangleq if_j^{n-1/2}, \\ (u_k^n - u_k^{n-1})/\tau - i\lambda D_x(u_k^* + u_k^{n-1})/2 - \\ i\lambda D_y(\hat{u}_k^n + \hat{u}_k^{n-1})/2 = iF'(|u_k^n| \kappa_k \vartheta_j) u_k^n - \\ if_k^{n-1/2} \triangleq if_k^{n-1/2}. \end{cases} \quad (14)$$

进一步把(14) 式改写成

$$\begin{cases} (I_N - i\tau\lambda D_x/2) u^* = (I_N + i\tau\lambda D_x/2 + \\ i\tau\lambda D_y) u^{n-1} - i\tau\hat{f}^{n-1/2}, \\ (I_N - i\tau\lambda D_y/2) u^n = u^* - i\tau\lambda D_x u^{n-1}/2. \end{cases}$$

消去中间变量 u^* 得

$$\begin{aligned} i(u^n - u^{n-1})/\tau + \lambda D(u^n + u^{n-1})/2 - \\ i\tau^2 \lambda^2 D_x D_y (u^n - u^{n-1})/(4\tau) = -\hat{f}^{n-1/2}. \end{aligned} \quad (15)$$

易知格式(15) 与原方程(12) 相容,且格式的截断误差为 $O(\tau^2 + h^6)$.

同样可得紧致修正交替方向格式,当 $n \geq 2$ 时,

$$\begin{cases} F_{AD}^n = f^{n-1/2} - F'(|\hat{u}^n|^2 \kappa \vartheta) \hat{u}^n - \\ i\tau\lambda^2 D_x D_y (u^{n-1} - u^{n-2})/4, \\ i(u_j^* - u_j^{n-1})/\tau + \lambda D_x(u_j^* + u_j^{n-1})/2 + \\ \lambda D_y u_j^{n-1} = F_{ADj}^n, \\ i(u_k^n - u_k^{n-1})/\tau + \lambda D_x(u_k^* + u_k^{n-1})/2 + \\ \lambda D_y(u_k^n + u_k^{n-1})/2 = F_{ADk}^n. \end{cases} \quad (16)$$

经过与前面类似地分析,可得分裂误差为 $-i\tau^3 \lambda^2 D_x D_y (u^n - 2u^{n-1} + u^{n-2})/(4\tau^2) = O(\tau^3)$. 分裂误差由 $O(\tau^2)$ 提高至 $O(\tau^3)$,但是此格式采用的 Crank-Nicolson 离散时间方向的离散误差为 $O(\tau^2)$ 不改变,所以采用修正方法只能减少误差,不能整体提高误差的收敛阶. 需要注意的是 HOC-MADI 格式(16) 为 3 层格式,不是自启动格式.

2 数值试验

用数值例子检验所构造的新数值格式,主要考虑其时空方向的收敛率,同时与通常的 HOC-ADI 格式在精度方面进行比较分析,从而说明对交替方向格式进行修正的必要性.

例 1 模拟 Schrödinger 方程满足周期边界条件的初值问题

$$\begin{cases} iu_t = -(u_{xx} + u_{yy}), \\ u(x, y, 0) = e^{i(x+y)}. \end{cases}$$

对此问题采用分离变量法可知,其精确解为 $u(x, y, t) = e^{i(x+y-2t)}$.

首先,考察修正的 HOC-MADI 格式(11) 的收敛率. 取时空区域为 $[0, 2\pi]^2 \times [0, 1]$. 为计算空间收敛阶,选择相对小的时间步长 $\tau = 1/50\,000$,采用不同的空间步长来计算此问题,得到的数值解与精确解的实部在 L^2 模意义下的误差如表 1 所示. 同样,为考察时间收敛率,取相对小的空间步长 $h = \pi/32$,在不同时间步长下得到的数值结果如表 2 所示.

表 1 空间误差及收敛阶

h	$\pi/4$	$\pi/8$	$\pi/16$	$\pi/32$
L^2 误差	$6.58e-4$	$1.00e-5$	$1.56e-7$	$3.60e-9$
阶	-	6.03	6.00	5.44

表 2 时间误差及收敛阶

τ	1/100	1/200	1/400	1/800
L^2 误差	$2.93e-4$	$7.38e-5$	$1.86e-5$	$4.78e-6$
阶	-	1.99	1.99	1.96

由表 1 和表 2 可以看出, HOC-MADI 格式(11) 在空间方向具有 6 阶收敛精度,而时间方向为 2 阶,格式能够非常准确地模拟原问题.

下面分别用 HOC-ADI 格式(6) 与 HOC-MADI 格式(11) 分别计算上述问题,步长均取为 $h = \pi/20$, $\tau = 1/10\,000$. 这 2 种格式计算得到的数值解和精确解之间的误差的实部随时间的演化关系如图 1 所示. 由图 1 可以看出, HOC-MADI 格式(11) 较 HOC-ADI 格式(6) 准确,前者的误差约为后者的 1/2.

例 2 考虑带有阻尼效应的非线性问题

$$\begin{cases} iu_t = -(u_{xx} + u_{yy})/2 + V(x, y)u + |u|^2 u, \\ u(x, y, 0) = \sin x \sin y, \end{cases}$$

其中 $(x, y) \in [0, 2\pi]^2$, $V(x, y) = 1 - \sin^2 x \sin^2 y$ 为周期坍塌势函数,该问题的精确解为 $u(x, y, t) = e^{-2it} \sin x \sin y$.

用 HOC-MADI 格式 (16) 模拟此问题到 $t = 100$. 所得到的数值解在中间时刻和最后时刻的等高线如图 2 所示. 由图 2 可以看到, HOC-MADI 格式 (16)

能够很好地模拟原问题的解. 解始终保持为正弦波形或者余弦波形.

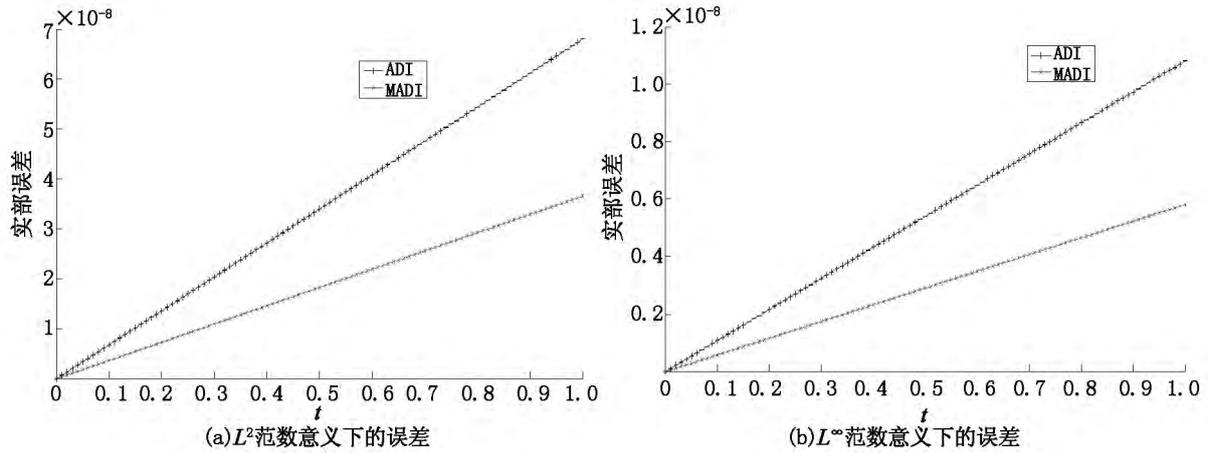


图 1 HOC-ADI 格式(6) 与 HOC-MADI 格式(11) 的实部误差比较

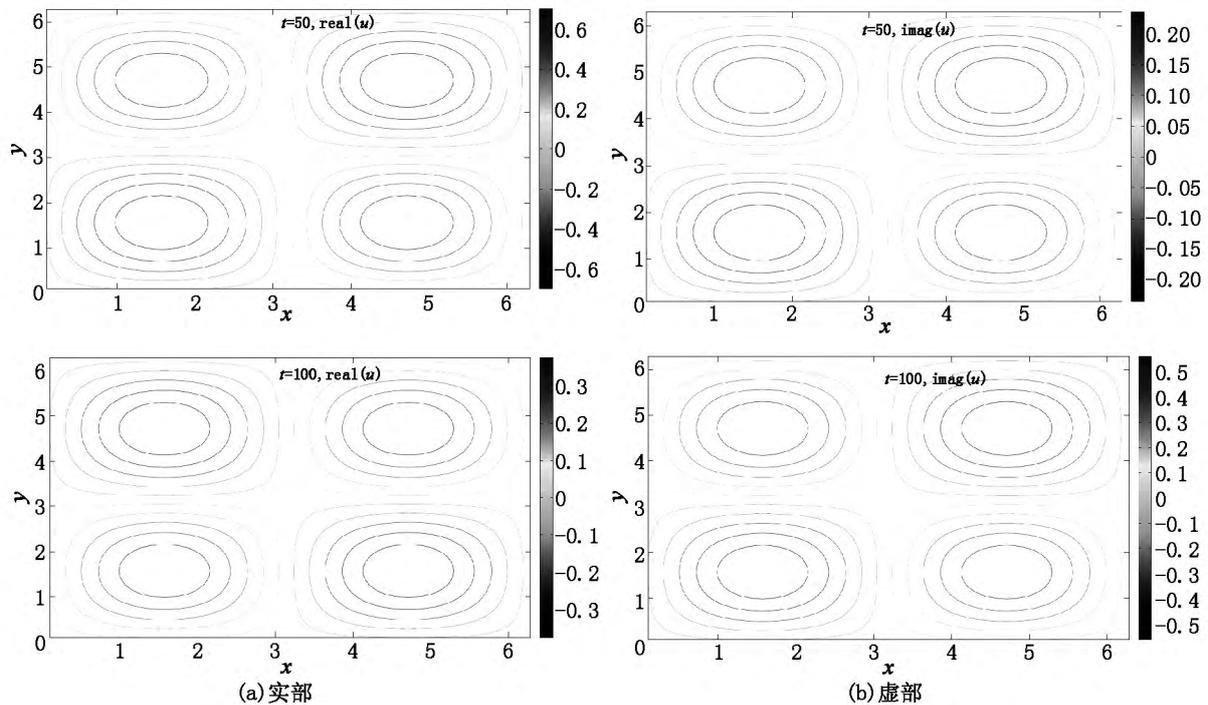


图 2 数值解在不同时刻的等高线

3 参考文献

[1] Douglas J, Peaceman D W. Numerical solution of two-dimensional heat flow problems [J]. Am Inst Chem Eng, 1955, 1(4): 505-512.
 [2] Douglas J, Rachford H H. On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables [J]. Trans Am Math Soc, 1956, 136(82): 421-439.
 [3] Strang G. On the construction and comparison of difference

scheme [J]. SIAM J Numer Anal, 1968, 5(3): 506-517.
 [4] McLachlan R I, Quispel G R W. Splitting methods [J]. Acta Numer, 2002, 11: 341-434.
 [5] Ma Yuanping, Kong Linghua, Hong Jialin. High-order compact splitting multisymplectic method for the coupled nonlinear Schrödinger equations [J]. Comput Math with Appl, 2011, 61(2): 319-333.
 [6] Weideman J A C, Herbst B M. Split-step methods for the solution of the nonlinear Schrödinger equation [J]. SIAM J Numer Anal, 1986, 23(3): 485-507.

- [7] Hong Jialin ,Qin Mengzhao. Multisymplecticity of the centered box discretization for Hamiltonian PDEs with $m \geq 2$ space dimensions [J]. Appl Math Letters 2002 ,15(8) : 1006-1011.
- [8] Kong Linghua ,Duan Yali ,Wang Lan. 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] 马院萍 ,孔令华 ,王兰. 2 维 Schrödinger 方程的高阶 ADI 格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版 2010 , 34(4) : 421-425.
- [10] 符莉丹 ,孔令华 ,符芳芳. Schrödinger 方程的交替隐格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版 2014 ,38(2) : 167-172.
- [11] Douglas J ,Kim S. Improved accuracy for locally one-dimensional methods for parabolic equation [J]. Math Models Meth Appl Sci 2001 ,11(9) : 1563-1579.
- [12] 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.
- [13] 赵飞 ,蔡志权 ,葛永斌. 1 维非定向常对流扩散方程的有理型高阶紧致差分格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版 2014 ,38(4) : 413-418.
- [14] Gao Zhen ,Xie Shusen. Fourth-order alternating direction implicit compact finite difference schemes for two-dimensional Schrödinger equations [J]. Appl Numer Math , 2011 ,61(4) : 593-614.
- [15] 开依沙尔·热合曼 ,努尔买买提·黑力力. 求解对流扩散方程的 Padé 逼近格式 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版 2014 ,38(3) : 261-264.
- [16] Lele S K. Compact finite difference schemes with spectral-like solution [J]. J Comput Phys ,1992 ,103(1) : 16-42.

The Compact and Modified ADI Scheme for Schrödinger Equations

WANG Lan ZHOU Yuanlan ,FU Lidan

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

Abstract: A compact and modified alternative direction implicit (ADI) scheme is contributed to multidimensional Schrödinger equations. After analyzing the error of Douglas' ADI scheme ,it is discovered that the splitting error of the ADI scheme is much larger than truncation error from time approximation. A perturbation term is inserted into Douglas and Peaceman's ADI scheme to improve the accuracy and computational efficiency. Moreover ,the order of splitting error is bettered and the error from time discretization is dominant. Numerical tests verified the advantages of the new scheme and the important role of perturbation term.

Key words: Schrödinger equation; modified ADI scheme; high-order compact scheme.

(责任编辑: 曾剑锋)

(上接第 499 页)

The Poles of Meromorphic Solutions of Fermat Type Differential-Difference Equations

WANG Jun¹ ,XIA Kai¹ ,LONG Fang²

(1. School of Mathematical Sciences ,Fudan University ,Shanghai 200433 ,China;

2. Foundational Courses Department ,Jiangxi Vocational College of Mechanical & Electrical Technology ,Nanchang Jiangxi 330013 ,China)

Abstract: Meromorphic solutions of Fermat type differential-difference equations are studied. The distribution of poles of solutions is investigated ,and the lower bound is obtained for the exponent of convergence of the poles.

Key words: meromorphic functions; pole; difference; Fermat type equation

(责任编辑: 王金莲)