文章编号:1007-2985(2010)06-0019-04

解 Schrödinger 方程的高精度外推差分格式*

热娜·阿斯哈尔,阿布都热西提·阿布都外力
(新疆大学数学与系统科学学院,新疆 乌鲁木齐 830046)

摘 要:通过构造 Schrödinger 方程的 Crank-Nicolson 格式,再利用 Richardson 外推法得到了一种高精度差分格式,这种格式具有 $O(\tau^4+h^4)$ 阶精度,且是无条件稳定的.数值算例表明,该算法比古典 Crank-Nicolson 格式精度更高.

关键词:Crank-Nicolson 格式;Richardson 外推算法;Schrödinger 方程;截断误差
中图分类号:O241.82 **文献标志码**:A

Schrödinger 方程在量子力学、非线性光学及流体力学中有广泛的应用.笔者主要研究一维 Schrödinger 方程的周期初值问题:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \mathrm{i}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad 0<x<L, 0<t<T, & (1) \\ u(x,0) = u_0(x) \quad 0<x<L, & (2) \\ u(0,t) = u(L,t) = 0 \quad 0<t<T. & (3) \end{cases}$$

这里 $u(x,t)$ 是复值函数,$\mathrm{i}^2=-1$,L 为周期,$u_0(x)$ 是以 L 为周期的已知周期函数.

用差分方法求解上述问题,目前已经有了一些较好的格式.由文献[1-3]可知,显格式常常对稳定性条件要求较苛刻;而文献[4-5]给出了稳定性较好的显式格式,但这些格式的截断误差阶都不高.文中首先构造截断误差为 $O(\tau^2+h^2)$ 的 Crank-Nicolson 格式,然后以此格式为基础,用 Richardson 外推算法解 Schrödinger 方程,其截断误差阶可达 $O(\tau^4+h^4)$.数值结果表明该算法具有很高的数值精度,是一种有效的算法.

1 差分格式的构造

记 $t_{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(t_k+t_{k+1})$,$\delta_t u_j^{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{\tau}(u_j^{k+1}-u_j^k)$,$\delta_x^2 u_j^k=\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k)$.在点 $(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})$ 处考虑微分方程(1),有

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})-\mathrm{i}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})=0 \qquad 1\leqslant j\leqslant m-1, 0\leqslant k\leqslant n-1.$$

这里:将区间 $(0,L)$ 作 m 等分,取空间步长 h;将区间 $(0,T)$ 作 n 等分,取时间步长 τ;u_j^k 表示 $u(x,t)$ 在节点 $(jh,k\tau)$ 上的值;$x_j=jh, 0\leqslant j\leqslant m$;$t_k=k\tau, 0\leqslant k\leqslant n$.

应用公式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+1})\right]-\frac{\tau^2}{8}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}(x_j,\zeta_{jk}),$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)=\delta_x^2 u_j^k-\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_{jk},t_k),$$

* 收稿日期:2010-08-31
基金项目:国家自然科学基金资助项目(10961024);新疆高校科研计划资助项目(XJEDU2007I02)
作者简介:热娜·阿斯哈尔(1984-),女,新疆维吾尔族人,硕士研究生,主要从事偏微分方程数值解研究
通讯作者:阿布都热西提·阿布都外力(1963-),男(维吾尔族),新疆乌鲁木齐人,教授,博士后,主要从事偏微分方程数值解研究.E-mail:rashit@xju.edu.cn.

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})=\delta_t u_j^{k+\frac{1}{2}}-\frac{\tau^2}{24}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j,\eta_{jk}),$$

其中

$$\xi_{jk}\in(x_{j-1},x_{j+1}),\zeta_{jk},\eta_{jk}\in(t_k,t_{k+1}),$$

得到

$$\begin{cases}\delta_t u_j^{k+\frac{1}{2}}-\mathrm{i}\delta_x^2 u_j^{k+\frac{1}{2}}=R_{jk}, & (4)\\ u_j^0=u_0(x_j) \quad 0\leqslant j\leqslant m, & (5)\\ u_0^k=u_m^k=0 \quad 1\leqslant k\leqslant n, & (6)\end{cases}$$

其中

$$R_{jk}=(\frac{1}{24}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j,\eta_{jk})-\frac{\mathrm{i}}{8}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}(x_j,\zeta_{jk}))\tau^2-\frac{\mathrm{i}}{24}(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_{jk},t_k)+\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_{j,k+1},t_{k+1}))h^2$$

$$\xi_{jk}\in(x_{j-1},x_{j+1}),\zeta_{jk},\eta_{jk}\in(t_k,t_{k+1}).$$

在(4)中略去小量项 R_{jk},得到如下 Crank-Nicolson 格式:

$$\begin{cases}\delta_t u_j^{k+\frac{1}{2}}-\mathrm{i}\delta_x^2 u_j^{k+\frac{1}{2}}=0 \quad 1\leqslant j\leqslant m-1,0\leqslant k\leqslant n-1, & (7)\\ u_j^0=u_0(x_j) \quad 0\leqslant j\leqslant m, & (8)\\ u_0^k=u_m^k=0 \quad 1\leqslant k\leqslant n. & (9)\end{cases}$$

由文献[6]可知如下结论成立:

定理1 Crank-Nicolson 格式(7)至(9)的截断误差为 $O(\tau^2+h^2)$,并且是无条件稳定的.

2 Richardson 外推法

记差分格式(7)至(9)的近似解为 $u_j^k(h,\tau)$.

定理2 设定解问题

$$\begin{cases}\frac{\partial v}{\partial t}-\mathrm{i}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}=p(x,t) \quad 0<x<L,0<t<T,\\ v(x,0)=0 \quad 0<x<L,\\ v(0,t)=v(L,t)=0 \quad 0<t<T\end{cases} \tag{10}$$

和

$$\begin{cases}\frac{\partial \omega}{\partial t}-\mathrm{i}\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2}=q(x,t) \quad 0<x<L,0<t<T,\\ \omega(x,0)=0 \quad 0<x<L,\\ \omega(0,t)=\omega(L,t)=0 \quad 0<t<T\end{cases} \tag{11}$$

存在光滑解,其中 $p(x,t)=\frac{1}{24}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x,t)-\frac{\mathrm{i}}{8}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}(x,t),q(x,t)=-\frac{\mathrm{i}}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x,t)$,则有

$$u_j^k(h,\tau)=u(x_j,t_k)-(\tau^2 v(x_j,t_k)+h^2\omega(x_j,t_k))+O(\tau^4+h^4),$$

$$\max_{\substack{1\leqslant j\leqslant m-1\\1\leqslant k\leqslant n}}|u(x_j,t_k)-(\frac{4}{3}u_{2j}^{2k}(\frac{h}{2},\frac{\tau}{2})-\frac{1}{3}u_j^k(h,\tau))|=O(\tau^4+h^4).$$

证明 设 $\{u(x,t)\mid 0<x<L,0<t<T\}$ 为定解问题(1)至(3)的解,$\{u_j^k\mid 0\leqslant j\leqslant m,0\leqslant k\leqslant n\}$ 为差分格式(7)至(9)的解.记 $e_j^k=u(x_j,t_k)-u_j^k$.将(4)至(6)式分别与(7)至(9)式相减,得到误差方程如下:

$$\begin{cases}\delta_t e_j^{k+\frac{1}{2}}-\mathrm{i}\delta_x^2 e_j^{k+\frac{1}{2}}=R_{jk}, & (12)\\ e_j^0=0 \quad 0\leqslant j\leqslant m, & (13)\\ e_0^k=e_m^k=0 \quad 1\leqslant k\leqslant n. & (14)\end{cases}$$

细致分析可知 $R_{jk}=p(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})\tau^2+q(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})h^2+O(\tau^4+h^4)$,于是误差方程(12)至(14)可写为

$$\begin{cases}\delta_t e_j^{k+\frac{1}{2}}-\mathrm{i}\delta_x^2 e_j^{k+\frac{1}{2}}=p(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})\tau^2+q(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})h^2+O(\tau^4+h^4),\\ e_j^0=0,e_0^k=e_m^k=0.\end{cases} \tag{15}$$

对(10)式构造 Crank-Nicolson 格式

$$\begin{cases}\delta_t v_j^{k+\frac{1}{2}}-\mathrm{i}\delta_x^2 v_j^{k+\frac{1}{2}}=p(x_j,t_{k+\frac{1}{2}}),\\ v_j^0=0,v_0^k=v_m^k=0,\end{cases} \tag{16}$$

可知

$$v(x_j,t_k)-v_j^k(h,\tau)=O(\tau^2+h^2). \tag{17}$$

同理，对(11)式构造 Crank-Nicolson 格式

$$\begin{cases}\delta_t\omega_j^{k+\frac{1}{2}}-\mathrm{i}\delta_x^2\omega_j^{k+\frac{1}{2}}=q(x_j,t_{k+\frac{1}{2}}),\\ \omega_j^0=0,\omega_0^k=\omega_m^k=0,\end{cases} \tag{18}$$

可知

$$\omega(x_j,t_k)-\omega_j^k(h,\tau)=O(\tau^2+h^2). \tag{19}$$

记 $r_j^k=e_j^k-\tau^2v_j^k-h^2\omega_j^k$. 将(16)式同乘以 τ^2，将(18)式同乘以 h^2，并将所得结果和(15)式相减，得到

$$\begin{cases}\delta_t r_j^{k+\frac{1}{2}}-\mathrm{i}\delta_x^2 r_j^{k+\frac{1}{2}}=O(\tau^4+h^4),\\ r_j^0=0,r_0^k=r_m^k=0.\end{cases}$$

由此可得 $\|r^k\|_\infty=O(\tau^4+h^4)$，即 $e_j^k-\tau^2v_j^k-h^2\omega_j^k=O(\tau^4+h^4)$. 利用(17)和(18)式得

$$u(x_j,t_k)-u_j^k(h,\tau)-(\tau^2v(x_j,t_k)+h^2\omega(x_j,t_k))=O(\tau^4+h^4), \tag{20}$$

同理有

$$u(x_j,t_k)-u_{2j}^{2k}(\frac{h}{2},\frac{\tau}{2})-((\frac{\tau}{2})^2v(x_j,t_k)+(\frac{h}{2})^2\omega(x_j,t_k))=O((\frac{\tau}{2})^4+(\frac{h}{2})^4). \tag{21}$$

将(21)式两边同乘以 $\frac{4}{3}$，将(20)式两边同乘以 $\frac{1}{3}$，并将所得结果相减可得

$$u(x_j,t_k)-(\frac{4}{3}u_{2j}^{2k}(\frac{h}{2},\frac{\tau}{2})-\frac{1}{3}u_j^k(h,\tau))=O(\tau^4+h^4).$$

定理 2 证毕.

3　数值例子

考虑如下周期初值问题：

$$\begin{cases}\frac{\partial u}{\partial t}=\mathrm{i}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & 0<x<L,0<t<T,\\ u(x,0)=\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sin x & 0<x<L,\\ u(x+2\pi,t)=u(x,t) & 0<x<L,0<t<T.\end{cases}$$

其精确解为 $u(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t+\frac{\pi}{4})}\sin x$.

对上述问题利用文中所构造的差分格式和 C-N 格式分别求数值解，并进行比较. 取 $L=2\pi,h=2\pi/64,r=\tau/h^2$，计算到 $n=500$ 层.

表 1,2 分别给出了网格比 r 分别取 1/2,2 时，2 种格式的数值计算结果. 表 3 给出了取不同空间步长时，文中格式与 C-N 格式的最大误差(定义最大误差 E 分别为精确解的实部和虚部减去差分解的实部和虚部取模的最大值)和收敛阶(rate $=\ln(E_1/E_2)/\ln 2$). 图 1—4 分别给出了网格比 r 分别取 1/2,2 时，文中格式与 C-N 格式数值解的实部的误差曲线. 计算结果表明，文中格式达到了 4 阶精度，而 C-N 格式精度只有 2 阶；并且当网格比 r 为 1/2,2 时，计算均是收敛的，表明文中格式是无条件稳定的. 这与文中的理论分析结果一致.

表 1　文中格式与 C-N 格式的数值结果比较(n=500,r=1/2)

	x			
	5π/32	22π/32	39π/32	56π/32
文中格式	−0.470 725 59+0.025 149 69i	−0.830 285 82+0.044 360 09i	0.633 490 08−0.033 845 78i	0.706 100 05−0.037 725 15i
精确解	−0.470 725 37+0.025 149 75i	−0.830 285 43+0.044 360 20i	0.633 489 78−0.033 845 87i	0.706 099 71−0.037 725 25i
C-N 格式	−0.470 773 26+0.024 236 79i	−0.830 369 90+0.042 749 88i	0.633 554 22−0.032 617 23i	0.706 171 55−0.036 355 78i

表 2　文中格式与 C-N 格式的数值结果比较(n=500,r=2)

	x			
	5π/32	22π/32	39π/32	56π/32
文中格式	−0.255 133 03+0.396 390 72i	−0.450 014 49+0.699 170 82i	0.343 351 30−0.533 452 17i	0.382 705 87−0.594 595 90i
精确解	−0.255 130 64+0.396 387 74i	−0.450 010 28+0.699 165 55i	0.343 348 09−0.533 448 15i	0.382 702 28−0.594 591 42i
C-N 格式	−0.258 307 98+0.394 324 57i	−0.455 614 61+0.695 526 45i	0.347 624 07−0.530 671 60i	0.387 468 38−0.591 496 63i

表3 文中格式与C-N格式取不同步长时数值解的最大误差($n=500,r=1/2$)

x	文中格式的最大误差	C-N格式的最大误差	文中格式的收敛阶	C-N格式的收敛阶
$2\pi/32$	1.224e−4	7.736e−3	3.969	1.994
$2\pi/64$	8.115e−6	1.939e−3	3.915	1.996
$2\pi/128$	6.297e−7	4.885e−4	3.688	1.989

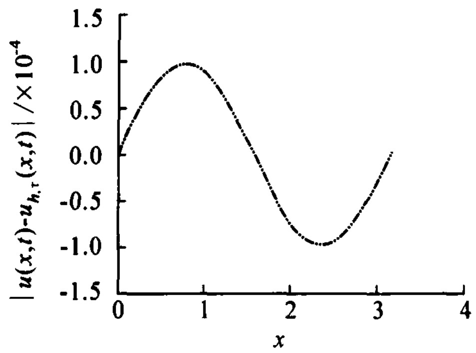

图1 当$r=1/2$时C-N解的误差曲线

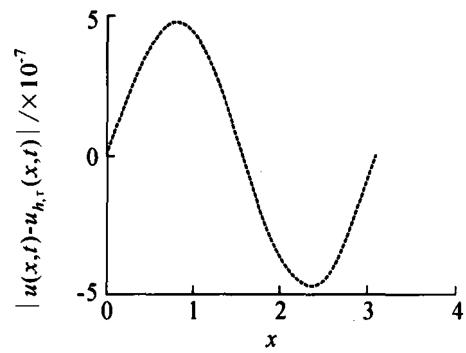

图2 当$r=1/2$时文中格式解的误差曲线

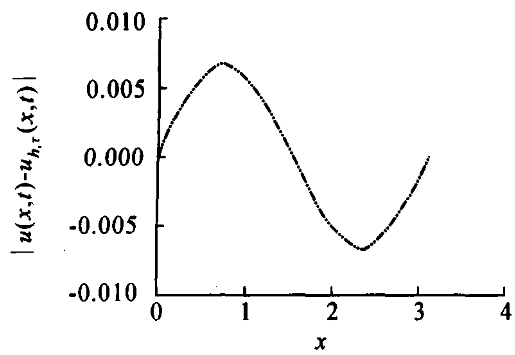

图3 当$r=2$时C-N解的误差曲线

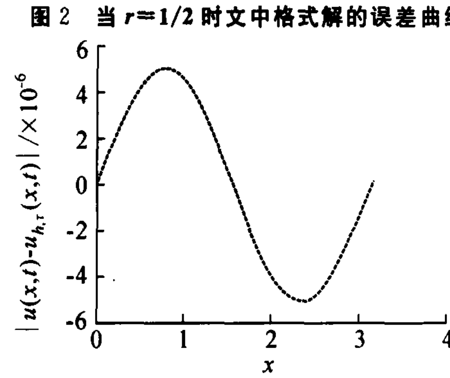

图4 当$r=2$时文中格式解的误差曲线

参考文献:

[1] CHAN T F. Stable Explicit Schemes for Equation of the Schrödinger Type [J]. SIAM J. Numer. Anal.,1986,23(2):274－281.

[2] 曾文平.高阶 Schrödinger 方程的差分格式 [J].应用数学,1996,9(4):523－525.

[3] 曾文平.高阶 Schrödinger 方程的哈密顿型蛙跳格式 [J].高等学校计算数学学报,1995,17(4):305－317.

[4] 戴伟忠.解 Schrödinger 方程的绝对稳定半显式与显式差分格式 [J].计算数学,1989,11(2):128－131.

[5] 金承口.解 Schrödinger 方程的绝对稳定的三层显格式 [J].计算数学,1990,12(2):214－215.

[6] 孙志忠.偏微分方程数值解法 [M].北京:科学出版社,2005.

A High Accuracy Extrapolation Difference Scheme for Solving the Schrödinger Equation

RANA Eskar, ABDIRISHIT Abduwali

(College of Mathmatics and System Science, Xinjiang University, Urumchi 830046, China)

Abstract: The Crank-Nicolson scheme is presented for solving Schrödinger equation. The Richardson's extrapolation method is successfully applied to the scheme. Meanwhile, the numerical solution can be gained with accuracy of $O(\tau^4+h^4)$. This method is shown to be unconditionally stable. The result of numerical experiment shows that the new scheme has higher accuracy than Crank-Nicolson scheme.

Key words: Crank-Nicolson method; Richardson's extrapolation method; Schrödinger equation; truncation error

(责任编辑 向阳洁)