

引用格式:王普, 姜珊珊, 肖聪. 高阶紧致差分方法在五次非线性 Schrödinger 方程中的应用[J]. 北京化工大学学报(自然科学版), 2021, 48(1): 115–118.

WANG Pu, JIANG ShanShan, XIAO Cong. A high-order compact splitting method for the nonlinear Schrödinger equation with a quintic term[J]. Journal of Beijing University of Chemical Technology (Natural Science), 2021, 48(1): 115–118.

高阶紧致差分方法在五次非线性 Schrödinger 方程中的应用

王 普 姜珊珊* 肖 聪

(北京化工大学 数理学院, 北京 100029)

摘要:用紧致分裂的思路给出五次非线性 Schrödinger 方程的一个数值格式,使其收敛阶为 $O(\tau^2 + h^4)$ 。首先在时间上用 Strang-type 方法将原方程离散分为两个子方程,其中一个有显示解,这样仅对另一个子方程进行高阶差分即可。然后证明此分裂差分格式满足电荷守恒。最后给出数值实验证明格式的收敛阶。

关键词:非线性 Schrödinger 方程; 紧致差分格式; Strang-type 分裂; 电荷守恒定律

中图分类号: O241.82 DOI: 10.13543/j.bhxbzr.2021.01.016

引言

非线性 Schrödinger 方程最开始用于非均匀介质的研究,后广泛用于非线性光学、等离子物理等领域^[1-4]。对于带五次项的此类方程的显示解以及解的性质已有学者进行了深入的研究^[5-7]。基于此,本文考虑如下的 Schrödinger 方程

$$iu_t + u_{xx} - (|u|^2 + |u|^4)u = f(x, t)u, \quad (x, t) \in (a, b) \times (0, 1) \quad (1)$$

其初边值为

$$u(x, 0) = u_0(x), x \in [a, b] \quad (2)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 1, t \in [0, T] \quad (3)$$

式中 u 为未知函数, $f(x, t)$ 为给定的实函数, $u_0(x)$ 为给定的复函数。容易证明此方程满足电荷守恒, 即满足

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

对于此方程 Zhang 等^[8]构造了一个差分格式, 收敛阶为 $O(\tau^2 + h^2)$, 初日辉^[9]将之改进为紧致格式, 收敛阶为 $O(\tau^2 + h^4)$, 魏新新^[10]在保持精度不

变的前提下引进分裂方法, 将原方程分裂为线性子方程和非线性子方程。本文在此基础上进一步改进分裂算法, 使其中一个子方程有解析解, 以进一步简化计算。

1 数值算法

1.1 符号

记文中所用符号的含义为 $x_j = a + jh, j = 0, 1, \dots, J-1; t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, N-1; \Omega_h = \{x_j | 0 \leq j \leq J-1\}, \Omega_\tau = \{t_n | 0 \leq n \leq N-1\}, \Omega_h^\tau = \Omega_h \times \Omega_\tau$ 。其中 h, τ 分别为空间和时间步长, J 和 N 为正整数。并记方程在时间节点 t_n 、空间节点 x_j 的差分解为 u_j^n 。对 Ω_h^τ 上的网格函数 V_j^n 记为 $lg(h)$

$$(V_j^n)_x = \frac{V_{j+1}^n - V_j^n}{h} \quad (V_j^n)_t = \frac{V_{j+1}^n - V_j^n}{\tau}$$

$$(V_j^n)_{\bar{x}} = \frac{V_j^n - V_{j-1}^n}{h} \quad V_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{V_j^n + V_{j+1}^n}{2}$$

$$\delta_x^2 V_j^n = V_{j+1}^n - 2V_j^n + V_{j-1}^n$$

$$A_h V_j^n = \left(1 + \frac{h^2}{12} \delta_x^2\right) V_j^n = V_j^n + \frac{h^2}{12} \delta_x^2 V_j^n = (V_{j+1}^n + 10V_j^n + V_{j-1}^n)/12$$

1.2 Strang-type 分裂

使用时间分裂算法将方程(1)分为两个子方程, 使其中一个方程具有解析解, 然后对另一个方程

收稿日期: 2020-04-22

第一作者: 男, 1993 年生, 硕士生

*通信联系人

E-mail: jiangss@mail.buct.edu.cn

进行差分求解, 最后将两个子方程结合进行数值求解。

对方程(1), 将其表示为

$$i \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = (A + B) u(x, t) \quad (5)$$

式中, 算子 $A = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + f(x, t)$, 覆盖线性项和非线性项的一部分, 算子 $B = |u|^2 + |u|^4$, 仅覆盖非线性项的一部分。在 $[t, t + \tau]$ 有如下时间二阶 Strang 分裂格式

$$u^*(x, t + \tau) = \exp\left(-iB \frac{\tau}{2}\right) u(x, t) \quad (6)$$

$$u^{**}(x, t + \tau) = \exp\left(-iA \frac{\tau}{2}\right) u^*(x, t + \tau) \quad (7)$$

$$u(x, t + \tau) = \exp\left(-iA \frac{\tau}{2}\right) u^{**}(x, t + \tau) \quad (8)$$

式中 $u^*(x, t + \tau)$ 、 $u^{**}(x, t + \tau)$ 为中间值, 该分裂格式误差为 $O(\tau^2)$ 。

式(6)、(8)有显式解

$$u(x, t) = e^{-i(|u(x, 0)|^2 + |u(x, 0)|^4)t} u(x, 0) \quad (9)$$

这样只需构造式(7)的差分格式。Strang-type 分裂方法在时间上有二阶误差, 因此仅从空间方面入手, 构造空间四阶格式。

1.3 空间四阶格式

对式(6)应用 Crank-Nicolson 格式, 可以得到

$$i \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + \frac{1}{2h^2} \delta_x^2 (u_j^n + u_j^{n+1}) = \frac{1}{2} (f_j^{n+\frac{1}{2}} (u_j^n + u_j^{n+1})) \quad (10)$$

将格式(10)中二阶算子 δ_x^2 用四阶差分算子

$$\frac{\delta_x^2}{h^2 \left(1 + \frac{1}{12} \delta_x^2\right)} \text{ 代替并整理可得}$$

$$iA_h(u_j^n)_t + \frac{(u_j^{n+1})_{x\bar{x}} + (u_j^n)_{x\bar{x}}}{2} = \frac{1}{2} A_h (f_j^{n+\frac{1}{2}} (u_j^n + u_j^{n+1})) \quad (11)$$

将式(11)改写为矩阵形式有

$$iA \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\tau} + \mathbf{B} \frac{\mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{U}^n}{2h^2} = \frac{1}{2} \mathbf{A} (\mathbf{F}^{n+\frac{1}{2}} (\mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{U}^n)) \quad (12)$$

式中 \mathbf{U}^n 表示第 n 层数值解即 $(u_1^n, u_2^n, \dots, u_{J-1}^n)^T$, $\mathbf{F}^{n+\frac{1}{2}}$ 表示矩阵 $\text{diag}(f_1^{n+\frac{1}{2}}, f_2^{n+\frac{1}{2}}, \dots, f_{J-1}^{n+\frac{1}{2}})$ 。

矩阵 \mathbf{A} 为

$$\begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 10 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 10 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 10 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 10 \end{pmatrix}_{(J-1) \times (J-1)}$$

矩阵 \mathbf{B} 为

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{pmatrix}_{(J-1) \times (J-1)}$$

将式(12)拆分组合, 有

$$\left(\frac{iA}{\tau} + \frac{\mathbf{B}}{2h^2} - \frac{\mathbf{A} \mathbf{F}^{\frac{1}{2}}}{2} \right) \mathbf{U}^{n+1} = \left(\frac{iA}{\tau} - \frac{\mathbf{B}}{2h^2} + \frac{\mathbf{A} \mathbf{F}^{\frac{1}{2}}}{2} \right) \mathbf{U}^n \quad (13)$$

令

$$\mathbf{C} = \left(\frac{iA}{\tau} + \frac{\mathbf{B}}{2h^2} - \frac{\mathbf{A} \mathbf{F}^{\frac{1}{2}}}{2} \right)^{-1} \left(\frac{iA}{\tau} - \frac{\mathbf{B}}{2h^2} + \frac{\mathbf{A} \mathbf{F}^{\frac{1}{2}}}{2} \right) \quad (14)$$

这样有

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{C} \mathbf{U}^n \quad (15)$$

式(7)有显式解

$$u(x, t) = e^{-i(|u(x, 0)|^2 + |u(x, 0)|^4)t} u(x, 0) \quad (16)$$

这样有

$$u(x, t + \Delta t) = e^{-i(|u(x, t)|^2 + |u(x, t)|^4)\Delta t} u(x, t) \quad (17)$$

综上所述, 时间分裂空间四阶格式可以表示如下。

步骤 1

$$\mathbf{U}^* = e^{-i(|\mathbf{U}^n|^2 + |\mathbf{U}^n|^4) \frac{\tau}{2}} \mathbf{U}^n \quad (18)$$

步骤 2

$$\mathbf{U}^{**} = \mathbf{C} \mathbf{U}^* \quad (19)$$

步骤 3

$$\mathbf{U}^{n+1} = e^{-i(|\mathbf{U}^n|^2 + |\mathbf{U}^n|^4) \frac{\tau}{2}} \mathbf{U}^{**} \quad (20)$$

式(18)、(20)的 \mathbf{U}^n 、 \mathbf{U}^{n+1} 不再表示子方程(7)的数值解, 而是原方程(1)的数值解。

1.4 格式电荷守恒

定理 1 格式(18)~(20)满足电荷守恒

$$\|\mathbf{U}^{n+1}\| = \|\mathbf{U}^n\| = \cdots = \|\mathbf{U}^0\| \quad (21)$$

由式(12)、(13)易知

$$\|\mathbf{U}^*\| = \|\mathbf{U}^n\|$$

$$\| \mathbf{U}^{n+1} \| = \| \mathbf{U}^{**} \|$$

这样仅需证明

$$\| \mathbf{U}^* \| = \| \mathbf{U}^{**} \|$$

将式(13)表示为

$$iA \frac{\mathbf{U}^{**} - \mathbf{U}^*}{\tau} + \mathbf{B} \frac{\mathbf{U}^{**} + \mathbf{U}^*}{2h^2} = \frac{1}{2} A (\mathbf{F}^{n+\frac{1}{2}} (\mathbf{U}^{**} +$$

$\mathbf{U}^*)$)

将上式与向量 $\mathbf{U}^{**} + \mathbf{U}^*$ 取内积, 然后取等式两边, 有

$$\frac{\| \mathbf{U}^{**} \|^2 - \| \mathbf{U}^* \|^2}{\tau} = 0$$

这样就证明了

$$\| \mathbf{U}^{n+1} \| = \| \mathbf{U}^n \|$$

定理1得证。

2 数值实验

考虑如下算例

$$f(x, t) = 4(x - 2t)^2 - \exp(-2(x - 2t)^2) - \exp(-4(x - 2t)^2)$$

$$u_0 = \exp(-x^2 + ix)$$

此时, 方程有孤波解

$$u(x, t) = \exp(-(x - 2t)^2 + i(x - 3t))$$

取 $\Omega_h \times \Omega_\tau = [-15, 15] \times [0, 1]$, $\tau = h^2$, 为验证数值格式的收敛性, 分别取 $h = 0.5, 0.25, 0.125, 0.0625$, 则收敛阶 Order 可以用下式求得

$$Order = \lg \left(\| E(h, \tau) \|_\infty / \left\| E \left(\frac{h}{2}, \frac{\tau}{4} \right) \right\|_\infty \right) /$$

$\lg 2$

式中 $\| E(h, \tau) \|_\infty$ 表示 $t = 1$ 时, 数值解在无穷范数下的误差。

从表1和图1可以看出格式以 L_∞ 收敛, 且收敛阶为 $O(\tau^2 + h^4)$ 。图2表示 $\tau = 0.25$ 时的数值解, 图3表示 $\tau = 0.25$ 时的精确解, 容易看出两个图像的波形一致。图4结果表明电荷是守恒的。数值实验与理论相吻合。

表1 不同步长的收敛阶

Table 1 Rates of convergence of different steps

h	$\ E(h, \tau) \ _\infty$	Order
1/2	0.3364	
1/4	0.0109	4.9516
1/8	6.9938×10^{-4}	3.9584
1/16	4.1085×10^{-5}	4.0894
1/32	2.5669×10^{-6}	4.0005

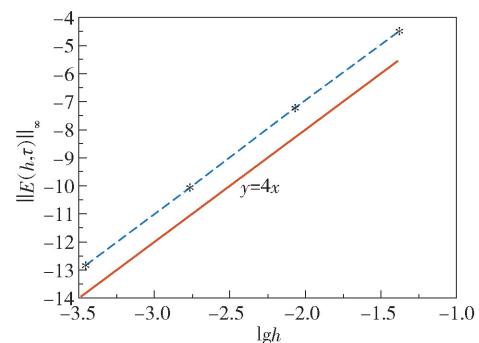


图1 数值格式的收敛阶

Fig. 1 Rate of convergence of the numerical solution

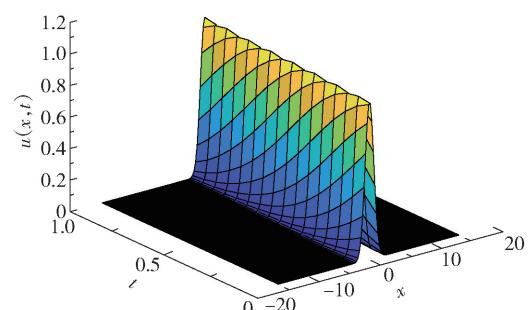


图2 时间步长为 0.25 时的数值解

Fig. 2 Numerical solution of spatial step 0.25

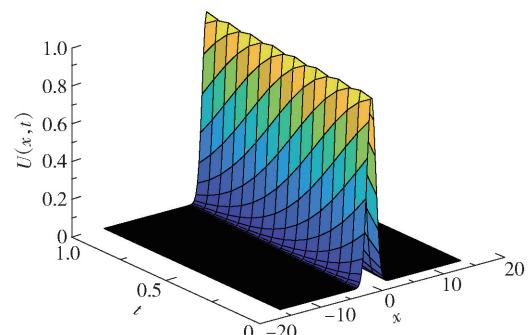


图3 时间步长为 0.25 时的精确解

Fig. 3 Exact solution of spatial step 0.25

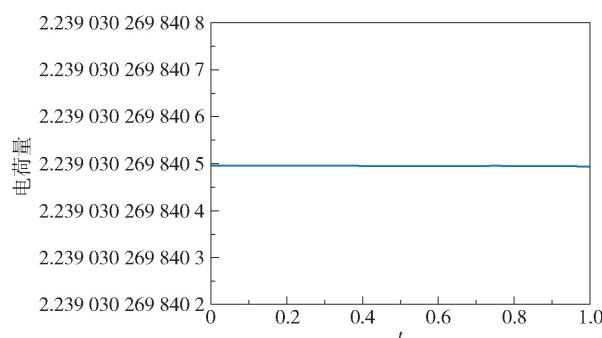


图4 数值格式的电荷量随时间变化情况

Fig. 4 Change in the amount of charge with time

3 结论

本文将分裂算法和紧致差分格式相结合对五次非线性 Schrödinger 方程建立差分格式, 格式的收敛阶为 $O(\tau^2 + h^4)$, 并满足离散的电荷守恒定律。数值实验结果验证了本文理论的正确性。

参考文献:

- [1] HUANG Z Y, JIN S, MARKOWICH P A, et al. A Bloch decomposition based split-step pseudospectral method for quantum dynamics with periodic potentials[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2007, 29(2): 515–538.
- [2] SALMAN H. A time-splitting pseudospectral method for the solution of the Gross–Pitaevskii equations using spherical harmonics with generalised-Laguerre basis functions[J]. Journal of Computational Physics, 2014, 258: 185–207.
- [3] LIAO F, ZHANG L M, WANG S S. Time-splitting combined with exponential wave integrator Fourier pseudospectral method for Schrödinger–Boussinesq system [J]. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2018, 55: 93–104.
- [4] JI B Q, ZHANG L M. Error estimates of a conservative finite difference Fourier pseudospectral method for the Klein–Gordon–Schrödinger equation[J]. Computers and Mathematics with Applications, 2020, 79 (7): 1956–1971.
- [5] DONG S H, GARCÍA-RAVELO J. Exact solutions of the s-wave Schrödinger equation with Manning–Rosen potential[J]. Physica Scripta, 2007, 75 (3): 307–309.
- [6] TAGHIZADEH N, MIRZAZADEH M, FARAHROOZ F. Exact solutions of the nonlinear Schrödinger equation by the first integral method [J]. Journal of Mathematical Analysis and Application, 2011, 374 (2): 549–553.
- [7] EBAID A, KHALED S M. New types of exact solutions for nonlinear Schrödinger equation with cubic nonlinearity [J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2011, 235 (8): 1984–1992.
- [8] ZHANG L M, CHANG Q S. A conservative numerical scheme for a class of nonlinear Schrödinger equation with wave operator [J]. Applied Mathematics and Computation, 2003, 145 (2/3): 603–612.
- [9] 初日辉. 带五次项的非线性 Schrödinger 方程紧致差分格式的研究[D]. 南京:南京航空航天大学, 2014.
- [10] CHU R H. Compact difference scheme for solving the nonlinear Schrödinger equation involving quantic term [D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2014. (in Chinese)
- [11] 魏新新. 一类非线性 Schrödinger 方程分裂步紧致差分算法的研究[D]. 南京:南京航空航天大学, 2019.
- [12] WEI X X. Researches on split-step compact difference methods for a class of nonlinear Schrödinger equations [D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2019. (in Chinese)

A high-order compact splitting method for the nonlinear Schrödinger equation with a quintic term

WANG Pu JIANG ShanShan^{*} XIAO Cong

(College of Mathematics and Physics, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: An order of $O(\tau^2 + h^4)$ different scheme is applied to the nonlinear Schrödinger equation with a quintic term. We first use a Strang-type splitting method to divide the equation into two parts. Only one part needs to be discretized by a high-order compact difference method, because the other part can be solved exactly. The scheme is shown to satisfy the charge conservation law. Some numerical results are given to illustrate the convergence of the scheme.

Key words: nonlinear Schrödinger equation; compact difference method; Strang-type splitting; charge conservation law

(责任编辑:吴万玲)