文章编号:1674-7070(2010)06-0553-04

非线性 Schrödinger 方程差分格式的计算稳定性

赵海坤[1]　吴华[2]　周伟灿[1]

摘要

运用判定非线性发展方程差分格式计算稳定性的 Hirt 启发性分析方法,对一类非线性 Schrödinger 方程差分格式的计算稳定性进行分析,得到了保证差分格式计算稳定的必要条件.数值试验结果进一步表明,得到的稳定性判据不仅是保证差分格式计算稳定的必要条件,而且在实际中也是非常有效的.

关键词

非线性 Schrödinger 方程;差分格式;计算稳定性;启发性分析

中图分类号 P456.7

文献标志码 A

收稿日期 2010-08-14

资助项目 江苏省研究生创新工程项目(CX09B_224Z)

作者简介

赵海坤,男,博士,讲师.研究方向为台风气候及其大气动力学.zhk2004y@nuist.edu.cn.

1　南京信息工程大学　气象灾害省部共建重点实验室,南京,210044

2　南京信息工程大学　遥感学院,南京,210044

0　引言
Introduction

本文重点考虑非线性 Schrödinger 方程:

$$i\frac{\partial u}{\partial t}+\alpha\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+q\mid u\mid^2 u=0. \tag{1}$$

这里 $u(x,t)$ 是未知复值函数,α,q 是已知实常数,$i=\sqrt{-1}$.

非线性 Schrödinger 方程的研究已经得到学术界的广泛关注[1-10],这是因为该类非线性方程可以用来描述许多物理现象,例如描述脉冲稳态波的自聚焦现象,非线性光学系统的自陷现象以及描述具有色散缓变及多光子吸收的光导纤维的波传播等.高守亭等[1]在研究多维约化摄动法时,对非线性波推导了 Schrödinger 方程.罗德海[2]在研究旋转正压大气中的方程和大气阻塞中也推导了 Schrödinger 方程.但由于方程本身的复杂性,很难求得解析解,因此,研究差分格式计算稳定性是一个关键性的问题.

1968 年 Hirt[3]提出一种分析差分格式计算稳定性的新方法,即启发性分析方法.林万涛等[4]针对非线性发展方程的非守恒差分格式和非周期边界条件,以一维非线性平流方程为例,给出了一种判定差分格式计算稳定性的新方法,即启发性分析方法,得到的稳定性判据是保证差分格式计算稳定的必要条件.之后,林万涛等[5]又针对线性与非线性发展方程的几种差分格式,以一维线性和非线性平流方程为例,对线性与非线性发展方程差分格式的计算稳定性进行了比较分析,揭示了差分格式结构和初值形式与计算稳定性的关系,并指出线性与非线性发展方程差分格式计算稳定性在本质上是完全不同的.杨晓忠等[6-7]又相继将启发性分析方法应用于判定 Burgers 方程和 KdV 方程的差分格式计算稳定性,着重讨论了两类较普遍的三时间层和二时间层差分格式的计算稳定性问题,得到了计算稳定性判据.文献[8]将启发性分析方法推广到一维和二维非线性浅水波方程,对非守恒各式的计算稳定性进行了分析,给出了计算稳定的必要条件.本文将此方法运用到非线性 Schrödinger 方程,对其差分格式计算稳定性进行了讨论,给出了计算稳定的必要条件.

1　差分格式
Difference schemes

下面,采用文献[3]中 Hirt 的启发性分析方法来研究非线性

Schrödinger 方程(1)的差分格式计算稳定性.

对式(1),常用差分格式为

格式Ⅰ:

$$i\frac{u_j^n-u_j^{n-1}}{\tau}+\alpha\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n)+q|u_j^n|^2u_j^n=0. \tag{2}$$

格式Ⅱ:

$$i\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+\alpha\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n)+q|u_j^n|^2u_j^n=0. \tag{3}$$

令 $u(x,t)=a(x,t)+b(x,t)i$,其中 $a(x,t)$,$b(x,t)$ 为实函数,将其代入式(1),得

$$i\left(\frac{\partial a}{\partial t}+\frac{\partial b}{\partial t}i\right)+\alpha\left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}i\right)+q(a^2+b^2)(a+bi)=0. \tag{4}$$

对式(4)分离出实部、虚部得

$$\begin{cases}\dfrac{\partial a}{\partial t}+\alpha\dfrac{\partial^2 b}{\partial x^2}+q(a^2+b^2)b=0,\\ \dfrac{\partial b}{\partial t}-\alpha\dfrac{\partial^2 a}{\partial x^2}-q(a^2+b^2)a=0.\end{cases} \tag{5}$$

令 $u_j^n=a_j^n+b_j^n i$,其中 a_j^n,b_j^n 为实函数,将其分别带入格式Ⅰ、Ⅱ得

$$i\left(\frac{a_j^n-a_j^{n-1}}{\tau}+\frac{b_j^n-b_j^{n-1}}{\tau}i\right)+\alpha\left[\frac{1}{h^2}(a_{j+1}^n-2a_j^n+a_{j-1}^n)+\frac{1}{h^2}(b_{j+1}^n-2b_j^n+b_{j-1}^n)i\right]+q[(a_j^n)^2+(b_j^n)^2](a_j^n+b_j^n i)=0, \tag{6}$$

$$i\left(\frac{a_j^{n+1}-a_j^n}{\tau}+\frac{b_j^{n+1}-b_j^n}{\tau}i\right)+\alpha\left[\frac{1}{h^2}(a_{j+1}^n-2a_j^n+a_{j-1}^n)+\frac{1}{h^2}(b_{j+1}^n-2b_j^n+b_{j-1}^n)i\right]+q[(a_j^n)^2+(b_j^n)^2](a_j^n+b_j^n i)=0. \tag{7}$$

对式(6)、(7)分别分离出实部、虚部,即得:

格式Ⅰ′:

$$\begin{cases}\dfrac{a_j^n-a_j^{n-1}}{\tau}+\alpha\dfrac{1}{h^2}(b_{j+1}^n-2b_j^n+b_{j-1}^n)+q[(a_j^n)^2+(b_j^n)^2]b_j^n=0,\\ \dfrac{b_j^n-b_j^{n-1}}{\tau}-\alpha\dfrac{1}{h^2}(a_{j+1}^n-2a_j^n+a_{j-1}^n)-q[(a_j^n)^2+(b_j^n)^2]a_j^n=0.\end{cases} \tag{8}$$

格式Ⅱ′:

$$\begin{cases}\dfrac{a_j^{n+1}-a_j^n}{\tau}+\alpha\dfrac{1}{h^2}(b_{j+1}^n-2b_j^n+b_{j-1}^n)+q[(a_j^n)^2+(b_j^n)^2]b_j^n=0,\\ \dfrac{b_j^{n+1}-b_j^n}{\tau}-\alpha\dfrac{1}{h^2}(a_{j+1}^n-2a_j^n+a_{j-1}^n)-q[(a_j^n)^2+(b_j^n)^2]a_j^n=0.\end{cases} \tag{9}$$

2 差分格式的计算稳定性分析

Computational stability of difference schemes

参照文献[3],对格式Ⅰ、Ⅱ进行计算稳定性分析.以格式Ⅰ为例,在此过程中,对时间和空间都进行均匀网格剖分,步长分别为 τ,h;将(8)式做 Taylor 展开,略去上、下标可得

$$\frac{\partial a}{\partial t}+\alpha\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}+q(a^2+b^2)b=\frac{1}{2}\frac{\partial^2 a}{\partial t^2}\tau+O(\tau^2,h^2), \tag{10}$$

$$\frac{\partial b}{\partial t}-\alpha\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}-q(a^2+b^2)a=\frac{1}{2}\frac{\partial^2 b}{\partial t^2}\tau+O(\tau^2,h^2). \tag{11}$$

由式(10)、(11)可得

$$\frac{\partial a}{\partial t}=-\alpha\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}-q(a^2+b^2)b+O(\tau,h^2), \tag{12}$$

$$\frac{\partial b}{\partial t}=\alpha\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}+q(a^2+b^2)a+O(\tau,h^2). \tag{13}$$

式(12)对 t 微分,可得

$$\frac{\partial^2 a}{\partial t^2}=-\alpha\frac{\partial^3 b}{\partial x^2\partial t}-2qab\frac{\partial a}{\partial t}-q(a^2+3b^2)\frac{\partial b}{\partial t}+O(\tau,h^2). \tag{14}$$

式(13)对 x 微分,可得

$$\frac{\partial^2 b}{\partial t\partial x}=\alpha\frac{\partial^3 a}{\partial x^3}+2qab\frac{\partial b}{\partial x}+q(3a^2+b^2)\frac{\partial a}{\partial x}+O(\tau,h^2). \tag{15}$$

式(15)对 x 微分,可得

$$\frac{\partial^3 b}{\partial t\partial x^2}=\alpha\frac{\partial^4 a}{\partial x^4}+4qb\frac{\partial a}{\partial x}\frac{\partial b}{\partial x}+2qa\left(\frac{\partial b}{\partial x}\right)^2+6qa\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)^2+2qab\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}+q(3a^2+b^2)+\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}O(\tau,h^2). \tag{16}$$

将式(12)、(13)、(16)代入式(14),可得

$$\frac{\partial^2 a}{\partial t^2}=-\alpha^2\frac{\partial^4 a}{\partial x^4}-4q\alpha(a^2+b^2)\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}-2q\alpha\left[2b\frac{\partial a}{\partial x}\frac{\partial b}{\partial x}+a\left(\frac{\partial b}{\partial x}\right)^2+3a\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)^2\right]-q^2a(a^2+b^2)^2+O(\tau,h^2). \tag{17}$$

类似地,可得

$$\frac{\partial^2 b}{\partial t^2}=-\alpha^2\frac{\partial^4 b}{\partial x^4}-4q\alpha(a^2+b^2)\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}-$$

$$2q\alpha\left[2a\frac{\partial a}{\partial x}\frac{\partial b}{\partial x}+b\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)^2+3b\left(\frac{\partial b}{\partial x}\right)^2\right]-$$
$$q^2b(a^2+b^2)^2+O(\tau,h^2). \tag{18}$$

将式(17)、(18)分别代入式(10)、(11),可得差分格式的修正微分方程:

$$\frac{\partial a}{\partial t}+\alpha\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}+q(a^2+b^2)b=$$
$$\frac{1}{2}\tau\Big\{-\alpha^2\frac{\partial^4 a}{\partial x^4}-4q\alpha(a^2+b^2)\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}-$$
$$2q\alpha\left[2b\frac{\partial a}{\partial x}\frac{\partial b}{\partial x}+a\left(\frac{\partial b}{\partial x}\right)^2+3a\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)^2\right]-$$
$$q^2a(a^2+b^2)^2\Big\}+O(\tau^2,h^2), \tag{19}$$

$$\frac{\partial b}{\partial t}-\alpha\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}-q(a^2+b^2)a=$$
$$\frac{1}{2}\tau\Big\{-\alpha^2\frac{\partial^4 b}{\partial x^4}-4q\alpha(a^2+b^2)\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}-$$
$$2q\alpha\left[2a\frac{\partial a}{\partial x}\frac{\partial b}{\partial x}+b\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)^2+3b\left(\frac{\partial b}{\partial x}\right)^2\right]-$$
$$q^2b(a^2+b^2)^2\Big\}+O(\tau^2,h^2). \tag{20}$$

同样可求出格式Ⅱ的修正微分方程为

$$\frac{\partial a}{\partial t}+\alpha\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}+q(a^2+b^2)b=$$
$$\frac{1}{2}\tau\Big\{\alpha^2\frac{\partial^4 a}{\partial x^4}+4q\alpha(a^2+b^2)\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}+$$
$$2q\alpha\left[2b\frac{\partial a}{\partial x}\frac{\partial b}{\partial x}+a\left(\frac{\partial b}{\partial x}\right)^2+3a\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)^2\right]+$$
$$q^2a(a^2+b^2)^2\Big\}+O(\tau^2,h^2), \tag{21}$$

$$\frac{\partial b}{\partial t}-\alpha\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}-q(a^2+b^2)a=$$
$$\frac{1}{2}\tau\Big\{\alpha^2\frac{\partial^4 b}{\partial x^4}+4q\alpha(a^2+b^2)\frac{\partial^2 b}{\partial x^2}+$$
$$2q\alpha\left[2a\frac{\partial a}{\partial x}\frac{\partial b}{\partial x}+b\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)^2+3b\left(\frac{\partial b}{\partial x}\right)^2\right]+$$
$$q^2b(a^2+b^2)^2\Big\}+O(\tau^2,h^2). \tag{22}$$

由文献[3]知道要使得差分格式计算稳定,必须要求相应的修正微分方程中的二阶耗散系数为正,即式(19)—(22)右端的二阶耗散系数必须为正,于是有以下定理:

定理1 非线性 Schrödinger 方程差分格式Ⅰ计算稳定的必要条件为 $q\alpha<0$.

定理2 非线性 Schrödinger 方程差分格式Ⅱ计算稳定的必要条件为 $q\alpha>0$.

3 数值试验
Numerical experiments

为近一步验证非线性 Schrödinger 方程差分格式的计算稳定性与格式结构的关系,做如下数值试验:

1)当 $\alpha=1,q=2$ 时,

$$i\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2|u|^2u=0,$$
$$-20<x<20,\quad 0<t<1;$$
$$u(x,0)=\operatorname{sech}(x)\exp(2ix),$$
$$-20\leqslant x\leqslant 20;$$
$$u(-20,t)=u(20,t)=0,\quad 0\leqslant t\leqslant 1.$$

取 $h=0.1$,再分别取 $\tau=0.005,0.01$. 结果表明在该条件下差分格式Ⅰ不稳定,差分格式Ⅱ稳定.

2)当 $\alpha=-1,q=2$ 或者 $\alpha=-1/2,q=2$ 时,做类似地计算,可发现差分格式Ⅰ稳定,差分格式Ⅱ不稳定;而当 $\alpha=1/2,q=2$ 时,差分格式Ⅰ不稳定,差分格式Ⅱ稳定.

4 结论
Conclusion

由于差分格式的计算稳定性的重要性,本文主要利用启发性分析方法针对一类非线性 Schrödinger 方程的两种常用差分格式的计算稳定的必要条件进行分析. 通过4组数值试验表明,该启发性分析方法对非线性 Schrödinger 方程差分格式的计算稳定性分析是实用和有效的,得到的稳定性判据确是保证差分格式稳定的必要条件. 虽然启发性分析方法所得到的稳定性判据只是差分格式计算稳定的必要条件,说明差分格式计算稳定必须满足判据,但满足判据的不一定都能计算稳定. 然而,在具体计算中删除明显的计算不稳定问题,避免盲目计算,这个计算稳定的必要条件是非常实用和有效的.

参考文献
References

[1] 高守亭,杨惠君. 多维约化摄动和大气中的非线性波[J]. 大气科学,1986,10(1):35-45
GAO Shouting,YANG Huijun. Multi-dimensional reductive perturbation method and atmosphereic nonlinear waves[J]. Scientia Atomspherica Sinica,1986,10(1):35-45
[2] 罗德海. 旋转正压大气中的非线性 Schrödinger 方程和大气阻塞[J]. 气象学报,1990,48(3):265-274
LUO Dehai. Nonlinear schrodinger equation in the rotational atmosphere and atmospheric blocking [J]. Acta Meterologica Sinica,1990,48(3):265-274
[3] Hirt C W. Heuristic stability theory for finite difference equation [J]. Journal of Computational Physics,1968,2(4):339-355

[4] 林万涛，季仲贞，王斌，等. 一种判定非线性发展方程差分格式计算稳定性的新方法[J]. 科学通报，2000，45(8)：881-885
LIN Wantao, JI Zhongzhen, WANG Bin, et al. A new method for judging the computational stability of the difference schemes of nonlinear evolution equations [J]. Chinese Science Bulletin, 2000, 45(8): 881-885

[5] Lin W T, Ji Z Z, Wang B. A comparative analysis of computational stability for linear and non-linear evolution equations [J]. Advances in Atmospheric Sciences, 2002, 19(4): 699-704

[6] 杨晓忠，王光辉，季仲贞，等. 判定 Burgers 方程差分格式计算稳定性的方法[J]. 华北电力大学学报，2002，29(1)：91-96
YANG Xiaozhong, WANG Guanghui, JI Zhongzhen, et al. A new method for judging computational stability of difference schemes of Burgers equation[J]. Journal of North China Electric Power University, 2002, 29(1): 91-96

[7] 杨晓忠，吴耀红，季仲贞，等. 判定 KDV 方程普遍性差分格式计算稳定性的新方法[J]. 现代电力，2002，19(4)：99-104
YANG Xiongzhong, WU Yaohong, JI Zhongzhen, et al. New method for judging the computational stability of general difference schemes of KDV equation[J]. Modern Electric Power, 2002, 19(4): 99-104

[8] 林万涛，谢正辉. 非线性发展方程的非守恒格式的计算稳定性问题[J]. 大气科学，2004，28(4)：510-516
LIN Wantao, XIE Zhenghui. The computational stability of non-conservative schemes of nonlinear evolution equations [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences, 2004, 28(4): 510-516

[9] 朱杰顺，周伟灿. 非线性平流方程计算稳定性对初值的依赖性研究[J]. 南京气象学院学报，2003，26(3)：419-423
ZHU Jieshun, ZHOU Weican. Dependence of computational stability of nonlinear advection equation on the initial value[J]. Journal of Nanjing Institude of Meteorology, 2003, 26(3): 419-423

[10] 朱利华，周伟灿，邹兰军. 垂直切变流中非线性重力波及其相互作用[J]. 南京气象学院学报，2004，27(3)：405-412
ZHU Lihua, ZHOU Weican, ZOU Lanjun. Nonlinear gravitational waves and their interactions in a vertical shearing flow[J]. Jouranl of Nanjing Institude of Meteorology, 2004, 27(3): 405-412

Computational stability of difference schemes of nonlinear Schrödinger equation

ZHAO Haikun[1] WU Hua[2] ZHOU Weican[1]

1 Key Laboratory of Meteorological Disaster of Ministry of Education, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044

2 School of Remote Sensing, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044

Abstract The computational stability of nonlinear Schrödinger equation is analyzed by the Hirt heuristic analysis in this study. Using the method, the necessary condition of computational stability of difference schemes about the nonlinear Schrödinger equation is given, which is proved to be practical and effective by four sets of numerical examples.

Key words nonlinear Schrödinger equation; difference scheme; computational stability; heuristic analysis