DOI:10.13657/j.cnki.gxkxyxb.1986.01.006

非线性复Schrödinger方程的数值计算

尹业民　　刘连芳

（广西计算中心）

摘　　要

我们采用释能法在FELIX—512机器上求出了有外势场的非线性复Schrödinger方程的三个定态解，得到了比D.Kaup等用微扰法要好的结果，并在数值计算过程中，进一步探讨如果选取差分格式和步长最为适应，以供今后解同类型方程参考。

§1　前　　言

在“复Schrödinger方程差分求解的机器计算实践”一文中[1]，我们探讨了求解齐次复Schrödinger方程的差分格式及步长的选取。管克英同志在“有外势场的非线性Schrödinger方程的孤子问题”[2]一文中，找到了这种方程存在孤子解的条件。在此基础上，我们在FELIX C—512机器上对有外势场的非线性Schrödinger方程进行了数值计算，采用释能法[3]求出了非线性Schrödinger方程的三个定态解，得到了比D.Kaup等用微扰法要好的结果，并在数值计算过程中进一步进行了差分格式和步长选取的试验，以便为今后解同类型方程提供参考。

§2　方程及差分格式

继文[1]对齐次Schrödinger方程采用四点及六点对称格式比较之后，我们又将六点对称格式与如下两种格式[4]进行了比较。

（1）非对称六点格式（比对称六点格式少交叉项）

$$\frac{\psi_j^{n+1(s+1)}-\psi_j^n}{\Delta t}+\frac{1}{2}\frac{\psi_{j+1}^{n+1(s+1)}-2\psi_j^{n+1(s+1)}+\psi_{j-1}^{n+1(s+1)}}{(\Delta x)^2}+\frac{1}{2}\frac{\psi_{j+1}^n-2\psi_j^n+\psi_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}$$
$$+\left|\psi_j^{n+1(s)}\right|^2\psi_j^{n+1(s+1)}+\left|\psi_j^n\right|^2\psi_j^n=0$$

整理后得到

$$A_j\psi_{j-1}^{n+1(s+1)}+B_j^{n+1(s)}\psi_j^{n+1(s+1)}+C_j\psi_{j+1}^{n+1(s+1)}=D_j$$

其中：　$A_j=C_j=\dfrac{1}{2(\Delta x)^2}$

本文1986年元月收到

$$B_j^{n+1(s)}=\frac{2}{\triangle x}-\frac{1}{(\triangle x)^2}+\psi_j^{n+1(s)}{}_2$$

$$D_j=\left(-\frac{2}{\triangle t}+\frac{1}{(\triangle x)^2}-\left|\psi_j^n\right|^2\right)\psi_j^n-\frac{\psi_{j+1}^n-\psi_{j-1}^n}{2(\triangle x)^2}$$

$$(2)\quad i\frac{\psi_j^{n+1(s+1)}-\psi_j^n}{\triangle t}+\frac{\left(\psi_{j+1}^{n+1(s+1)}-\psi_j^{n+1(s+1)}\right)-\left(\psi_j^n-\psi_{j-1}^n\right)}{(\triangle x)^2}+\frac{1}{2}\Big[\psi_j^n\big(\psi_j^{*n}\psi_{j-1}^n+\psi_{j-1}^{n+1(s+1)}\psi_j^{*n+1(s)}\big)+\psi_j^{n+1(s+1)}\big(\psi_{j+1}^n\psi_j^{*n}+\psi_{j+1}^{n+1(s)}\psi_j^{*n+1(s)}\big)\Big]=0$$

整理后得到：

$$A_j\psi_{j-1}^{n+1(s+1)}+B_j^{n+1(s)}\psi_j^{n+1(s+1)}+C_j\psi_{j+1}^{n+1(s+1)}=D_j$$

其中：$A_j=\frac{1}{2}\psi_j^n\psi_j^{*n+1(s)}$

$$B_j^{n+1(s)}=\frac{i}{\triangle t}+\frac{1}{(\triangle x)^2}+\frac{1}{2}\left[\psi_{j+1}^n\psi_j^{*n}+\psi_{j+1}^{n+1(s)}\psi_j^{*n+1(s)}\right]$$

$$C_j=\frac{1}{(\triangle x)^2}$$

$$D_j^{n+1(s)}=\left(\frac{i}{\triangle t}+\frac{1}{(\triangle x)^2}-\frac{1}{2}\psi_j^{*n}\psi_{j-1}\right)\psi_j^n-\frac{\psi_{j-1}^n}{(\triangle x)^2}$$

以上两种格式与六点对称格式相比，仍以六点对称格式为最佳[4]。

齐次方程所用差分格式对非齐次方程同样适用，所以我们对外势场为$4x^2$的非齐次schrödinger方程就采用了六点对称格式。

方程：$i\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+2\bar{\psi}\psi^2=v\psi$

差分方程：$i\frac{\psi_j^{n+1}-\psi_j^n}{\triangle t}+\frac{1}{2}\frac{\psi_{j+1}^{n+1}-2\psi_j^{n+1}+\psi_{j-1}^{n+1}}{(\triangle x)^2}+\frac{1}{2}\frac{\psi_{j+1}^n-2\psi_j^n+\psi_{j-1}^n}{(\triangle x)^2}+\frac{1}{2}\left(\left|\psi_j^{n+1}\right|^2+\left|\psi_j^n\right|^2\right)\left(\psi_j^{n+1}+\psi_j^n\right)=\frac{1}{2}v_j\left(\psi_j^{n+1}+\psi_j^n\right)$

整理后得到：

$$A_j\psi_{j-1}^{n+1(s+1)}+B_j^{n+1(s)}\psi_j^{n+1(s+1)}+C_j\psi_{j+1}^{n+1(s+1)}=D_j$$

其中：$A_j=C_j=\frac{1}{2(\triangle x)^2}$

$$B_j^{n+1(S)}=\frac{i}{\triangle t}-\frac{1}{(\triangle x)^2}+\frac{1}{2}\left(\left|\psi_j^{n+1(s)}\right|^2+\left|\psi_j^n\right|^2\right)-\frac{1}{2}v_j$$

$$D_j=\left[\frac{i}{\triangle t}+\frac{1}{(\triangle x)^2}-\frac{1}{2}\left(\left|\psi_j^{n+1(s)}\right|^2+\left|\psi_j^n\right|^2+v_j\right)\right]\psi_j^n-\frac{\psi_{j+1}^n+\psi_{j-1}^n}{2(\triangle x)^2}$$

所得差分方程系数矩阵为三对角形，所以仍用追赶迭代法。本文中所有计算均采用上述格式及方法，以后不再赘述。

§3 计 算

为了比较D·Kaup等的微扰法[3]与释能法，我们采用这两种方法计算上节给出的非线性非齐次Schrödinger方程。

A、对D·Kaup所给的近似孤子解的验证。

D·Kaup等用微扰理论给出了非线性Schrödinger方程的近似孤立子解的振幅函数为$2\eta\mathrm{sech}2\theta$[3]，其以正比于$\sqrt{\beta}$的频率在$\alpha=0$附近振动，形状保持不变，但这里的$\beta$仅仅是个小量，$\beta$较大时结果如何没见探讨，所以我们用微扰法取较大$\beta$（$\beta=2$）对方程求解。

初值：$\psi(x,0)=\mathrm{sech}(x+4)$

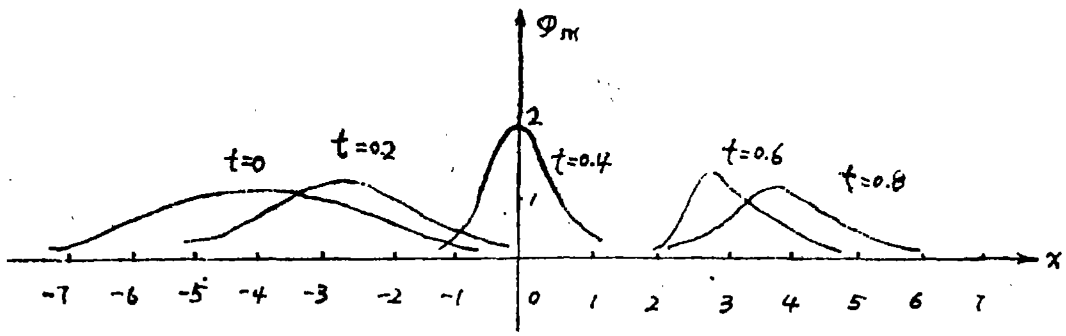
步长：$\triangle x=0.1$，$\triangle t=0.00025$

根据文[1]中$\triangle t=10^{-3}$的计算结果可知，时间步长取10^{-3}基本达到了速度v、波宽a、$\int_{-\infty}^{\infty}\bar{\psi}\psi dx$等守恒量的要求，但为进一步提高精度，以检验D·Kaup等所给的孤子解是否为定态，所以取$\triangle t=0.00025$，结果见表一。

表一

λ	0	0.2	0.4	0.6	0.8
峰值点χ	−4	−2.8	−0.2	2.8	3.8
Ψm	1.00000	1.17235	1.95519	1.36072	1.00019
波宽α	6	4.4	1.6	3.2	5.4
波 形	对 称	对 称	对 称	严重非对称	非对称

注：其中a为$\frac{1}{10}$m处波宽



图一

从表一、图一可以看出在$\beta=2$时，D·Kaup等所给的孤子解的振幅函数ψ_m在动振中严重变形，所以作为近似孤子解是不适宜的。

B、根据最小势能原理，孤子在外场中运动必定在势能最小时才能达到稳定状态，而在势阱中运动的孤子的能量自己不会减少，要使其达到稳态，管克英同志提出了人为释放能量

的方法，即运动一段时间后，人为地将幅角变化所决定的能量$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2\left(\frac{d\theta}{dx}\right)^2$去掉，具体办法是N步之后（N由人为确定）将其振幅函数ψ（x，t）作为第（N+1）步的ψ（x，0），如此循环，直至能量不再减少，振幅峰值附近θ为一常数，就视其达到了能量最小值。

我们在计算中首先检验了用释能法能否得到定态解，然后求出了三个定态解。

1．取ψ（x，0）= sechx，用以验证释能法是否行之有效，在此初值下也进行了步长选取的比较：

a、取$\triangle t = 0.00025$，$\triangle x = 0.1$用simpsou公式计算释能后剩余能量$E_n\int_{-15}^{15}\left[\left|\frac{\partial\psi_n}{\partial x}\right|^2 - |\psi_n|^4 + 4x^2 + |\psi_n|^2\right]dx$每50个△t释能一次（管克英同志已证明$E_{n+1}\leqslant E_n$[3]）。计算结果见表二。

表中$\overline{\theta}$为振幅峰值附近的幅角，t = 12.8时，$-13\leqslant x\leqslant 1.3$处θ近似为一个常数$\overline{\theta}$，t = 0时，$\overline{\theta}=0$。

计算结果证明释能法是求孤子解的有效方法。

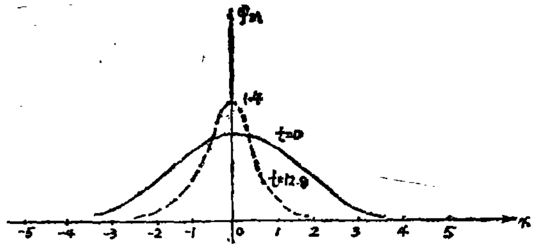
b、作为与a的比较，在区域：$1.6\leqslant t\leqslant 8.0$，$-15\leqslant x\leqslant 15$内取$\triangle t = 0.001$进行计算，$\psi(x, 1.6) = |\overline{\psi}(x, 1.6)|$（$\overline{\psi}$为$\triangle t = 0.00025$时的计算结果），见表三。

表二

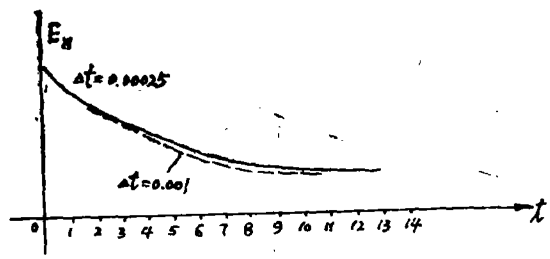
t	Ψm	$\overline{\theta}$	En	α
0	1.00000	0	5.9156	6
12.8	1.40007	0.0294	1.52750	2.6

表三

t	Ψm	$\overline{\theta}$	En	α
1.6	1.07968	0	4.14613	5.2
8.0	1.40066	0.0295	1.5267	2.6



图二



图三

利用释能法求定态孤子解我们关心和需要的仅仅是最终得到的定态解。从表二、三、四及图三可以看出，得到相似的定态解，取$\triangle t = 0.001$比取$\triangle t = 0.00025$大大节省用机时间：释能时间缩短且计算时间随步长增大而减少，所以取$\triangle t = 0.001$比较恰当。

表四

	达定态所需时间t	达定态时En	达定态时Ψm
△t＝0.00025	11.2	1.52750	1.40007
△t＝0.001	6.4	1.5297	1.40066

2. 将$\psi(x, 0) = \mathrm{Sech}x$时定解的振幅函数左移四位作为方程的初值，即上述计算所得定态解在外场中运动，检查其是否为孤子解。

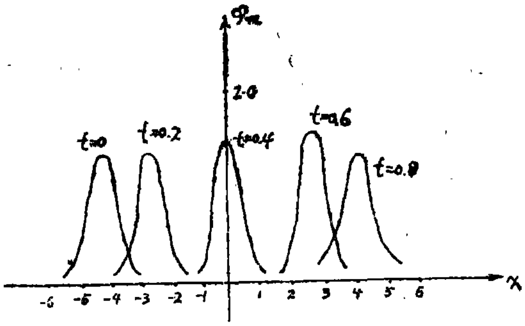
取$\triangle t = 0.00025$，$\triangle x = 0.1$，结果见表五

表五

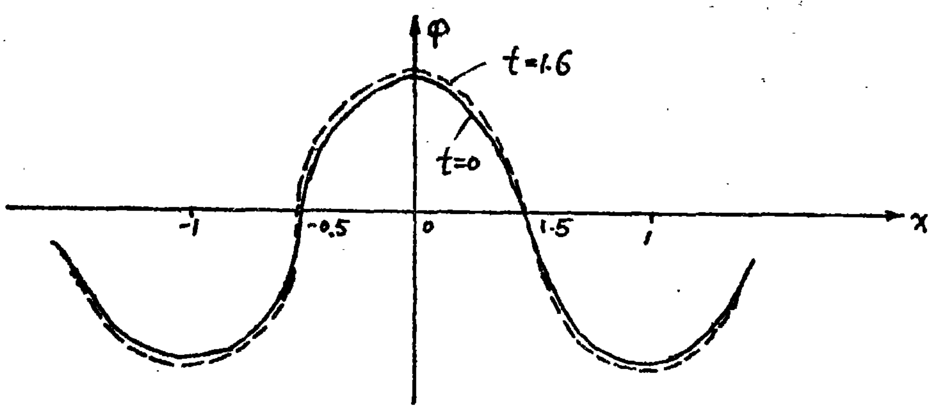
t	0	0.2	0.4	0.6	0.8
峰值点χ	－4	－2.8	－0.2	2.6	4.0
Ψm	1.40000	1.41294	1.51818	1.59256	1.35525
波宽α	2.6	2.6	2.4	2.0	2.8
波 形	对 称	稍不对称	对 称	对 称	对 称

这次计算不仅得到了定态解，而且给出了与A法相比较的结果。

将表一、图一与表五、图四相比可明显看出对同一方程，同初一值用释能 法 比D·Kaup等用微扰理论给出近似孤子解有较大的改进，释能法在β较大时适用。



图四



图五

3. $\psi(x, 0) = \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}}(1-4x^2)e^{-x^2}$

a、$\triangle t = 0.001$，$\triangle x = 0.1$

表六

t	0	0.4	0.8	1.2	1.6
峰$_1$ $\chi=-1.1$处Ψm	−1.02283	−1.05003	−1.04787	−1.04673	−1.04617
峰$_2$ $\chi=0$处Ψm	0.893244	0.910090	0.914865	0.917180	0.918243
峰$_3$ $\chi=1.1$处Ψm	−1.02283	−1.05004	−1.04786	−1.04672	−1.04016

其中t＝0时，$E_n=18.4894$；t＝16时达稳态$E_n=18.4627$，即得到了一个定态解。

因为在释能过程中E_n稍有跳动，所以又做如下两次步长选取试验，以寻找原因，找出最佳步长。

b、$\triangle t=0.0005$，$\triangle x=0.1$

表七

t	0	0.4	0.8	1.2	1.6
峰$_1$ $\chi=-1.1$处Ψm	−1.02283	−1.04707	−1.04909	−1.04740	−1.04711
峰$_2$ $\chi=0$处Ψm	0.893244	0.90108	0.908711	0.913668	0.915190
峰$_3$ $\chi=1.1$处Ψm	−1.02283	−1.04766	−1.04907	−1.04738	−1.04715

计算结果表明，在释能过程中波形基本保持不变，情况如a。

c、$\triangle t=0.001$，$\triangle x=0.05$

表八

t	0	0.4	0.8	1.2	1.6
峰$_1$ $\chi=-1.1$处Ψm	−1.02283	−1.05024	−1.04909	−1.04740	−1.04700
峰$_2$ $\chi=0$处Ψm	0.893244	0.897556	0.908711	0.913968	0.911558
峰$_3$ $\chi=1.1$处Ψm	−1.02283	−1.05024	−1.04907	−1.04948	−1.04697

当t＝0时，En＝18.4694；t＝1.6时达到稳态，En＝18.5187。

从表六、七、八可以看出，以上三种步长所得结果基本相同，均得到$E_n=18.5$左右的定态解，而a法所用时间若为y，则计算相同区域（$0\leqslant t\leqslant 1.6$，$-15\leqslant x\leqslant 15$），b法用2.68y，C法所用时间为2.23y；a、b法所需内存相同，而c法所需内存增大一倍，超过了64k，程序需分段覆盖，比较复杂；b、c法释能后达稳态时E_n略高于a法；三种方法中E_n的跳动现象基本相同。

综上几点可知，1）取$\triangle t=0.001$，$\triangle x=0.1$既可得到较为满意的结果，又可大大节省机时和内存；2）E_n的微小跳动并非步长选取不当所致。

4．$\psi(x,0)=\dfrac{\psi x}{\sqrt[4]{2\pi}}e^{-x^2}$

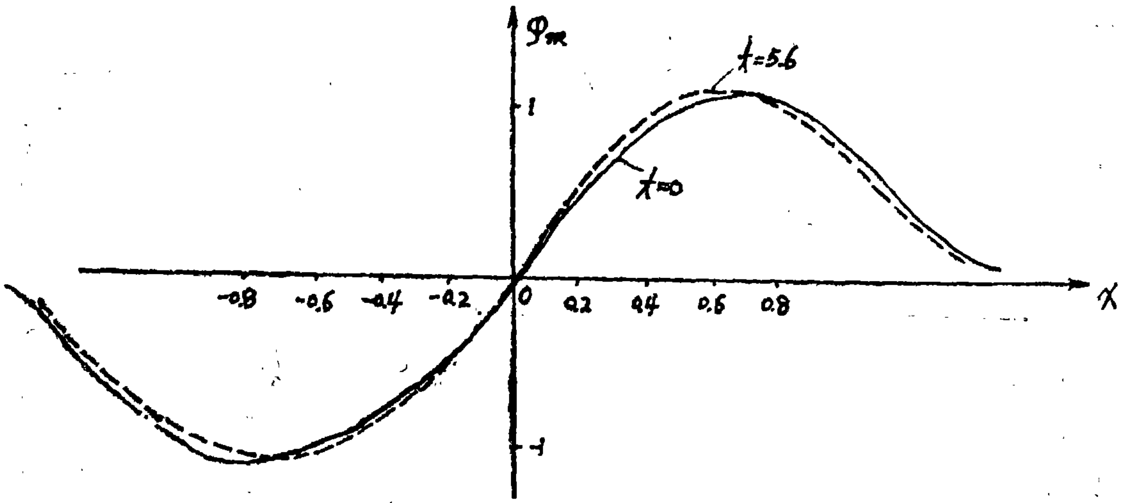
$\triangle t=0.001$

$\triangle x=0.1$

表九

λ		0	0.4	2.8	5.6
峰$_1$	χ	−0.7	−0.8	−0.6	−0.6
	Ψm	−1.08345	−1.09356	−1.09876	−1.09933
零点	Ψm	0.722831E−0.5	0.17861E−0.4	0.94654E−0.3	0.132039E−0.3
峰$_2$	χ	0.7	0.8	0.6	0.6
	Ψm	1.08345	1.08345	1.09846	1.09896

计算结果：x = 0时，$E_n = 10.2825$；x = 5.6时达到定态，$E_n = 10.2297$；释能过程中波形基本不变。



图六

§4 小 结

1.经多次试验证明，解非线性非齐次复Schrödinger方程采用六点对称格式，步长取△t = 0.01，△t = 0.1，既可达到精度要求，又可节省机时及内存。

2.释能法在β取较大值时比D・Kaup等的微扰法有很大改进，能求出定态孤子解。从而，释能法是求解非线性非齐次复Schrödinger方程定态孤子解的行之有效的方法。

3.通过计算给出了无零点、一个零点、两个零点的三个定态孤子解。但在计算过程中E_n略有跳动的原因尚待探讨。

本工作是在秦元勋教授指导下进行的，物理问题由管克英同志提出。全部研究结果（物理问题、数学方法、数值计算）由秦元勋教授于1980年9月8日在北京国际双微会议上报告。

参 考 文 献

〔1〕 尹业民、刘连芳：“复Schrödinger方程差分求解的机器计算实践，《数学研究与应用》1980年第2期

〔2〕 管克英：“有外势场的非线性Schrödinger方程的孤子问题”，《数学研究与应用》，1980年第2期

〔3〕 管克英：“有外场的非线性Schrödinger的孤子解、定态解的函数逼近法——释能逼近法”，《数学研究与应用》，1980年3期

〔4〕 常谦顺：“一类非线性Schrödinger方程的守恒差分格式”，《科学通报》，1981年第10期