文章编号: 1000_0887(2006) 03_300_05

Schrödinger 方程的时空有限元方法与守恒性*

汤 琼[1,2], 陈传淼[1], 刘罗华[2]

(1. 湖南师范大学 数学与计算机科学学院, 长沙 410081;
2. 株洲工学院 信息与计算科学系, 株洲 412008)

(吕和祥推荐)

摘要: 对非线性 Schrödinger 常微分方程, 利用常微分方程连续有限元法证明了能量守恒; 对非线性 Schrödinger 偏微分方程利用时空都连续的全离散有限元方法证明了能量积分守恒和利用空间连续、时间间断的有限元法得到电荷近似守恒, 误差为高阶量. 并在数值计算上探讨了守恒性和近似程度, 结果与理论相吻合.

关 键 词: 非线性 Schrödinger 方程; 时空有限元方法; 能量积分; 守恒性

中图分类号: O242.21 文献标识码: A

引 言

非线性Schrödinger 方程在量子力学、地震学、非线性光学等学科中有着广泛的应用, 许多学者对它进行了大量的研究, 如 Delfour 等人提出了有限差分格式[1], Ohannes Karakashian, 李宏等人利用时间间断的时空有限元方法讨论其弱解的存在性及收敛性[2,3], 张鲁明等人提出了一种新的守恒差分格式[4]. 本文对非线性 Schrödinger 方程常微分和偏微分的两种情形, 利用空间方向, 时间方向都连续的时空有限元方法得到能量积分守恒, 利用空间方向连续, 时间方向间断的时空有限元方法得到电荷近似守恒, 误差为高阶量 $O(h^{2m+1})$.

下面介绍常微分方程的连续有限元方法和间断有限元方法, 见文献[5], 在此基础上可得到抛物问题时空连续全离散有限元方法和空间方向连续、时间方向间断的时空全离散有限元方法. 利用上述方法可得到 Schrödinger 方程的守恒性.

在区间 $J = [0, T]$ 上考虑一阶常微分方程初值问题

$$u' + a(t)u = b(t), \quad u(0) = u_0, \tag{1}$$

其中 $a(t)$, $b(t)$ 为适当光滑函数. 将 J 作拟一致剖分 J^h: $t_0 = 0 < t_1 < \cdots < t_N = T$, 单元 $I_j = (t_{j-1}, t_j)$, 最大步长 $h = \max h_j$, $h_j \geqslant ch$, $1 \leqslant j \leqslant N$. 常数 C 与 j, h 无关. 在此剖分上定义 m 次连续有限元空间如下

$$S^h = \left\{ w \mid w \in C(J), w|_{I_j} \in P_m,\ P_m \text{ 为 } m \text{ 次多项式} \right\}.$$

* 收稿日期: 2004_11_23; 修订日期: 2005_11_18
基金项目: 国家 973 基金资助项目(G1999032804)
作者简介: 汤琼(1972—), 女, 湖南浏阳人, 副教授, 博士(联系人. Tel: +86_733_2622838; E_mail: zzgxysx@163.com);
陈传淼(Tel: +86_731_8871806; E_mail: zzgxysx@163.com).

若 $w(0)=0, w\in S^h$, 则记为子空间 S_0^h•

在每个单元上的 m 次多项式有 $m+1$ 个参数, 解初值问题时, 在 I_j 上的起始值 $U(t_{j-1})$ 已知, 故只有 m 个自由度• 定义 m 次连续有限元 $U\in S^h$ 满足

$$\int_{I_j}(U'+aU-b)v\,\mathrm{d}t=0,\quad v\in P_{m-1},\quad U(0)=u_0, \tag{2}$$

即在单元 I_j 上与任意 $m-1$ 次多项式 P_{m-1} 正交• 若取 $w\in S^h$, 其导数 w' 是 $m-1$ 次多项式, 故在(2) 式中可取 $v=w'\in P_{m-1}$•

定义 m 次间断有限元空间 S^h 如下: 设 $U\in S^h$ 在每个单元 I_j 上是 $m\geqslant 0$ 次多项式• 在每个节点 t_j 上定义左右极限分别为 $U_j^-=U(t_j-0)$, $U_j^+=U(t_j+0)$• 一般地间断元 $U\in S^h$ 跃度 $[U_j]=U_j^+-U_j^-\neq 0$• 已给初值 $U(0)=U_0$, 由于在节点上不要求 $U\in S^h$ 是连续的, 因此在每个单元 I_j 上 U 有 $m+1$ 个自由度, 比连续有限元多一个自由度• 这就使得逼近精度更好•

定义 m 次间断有限元 $U\in S^h$ 满足

$$\int_{I_j}(U'+aU-b)w\,\mathrm{d}t+[U_{j-1}]w_{j-1}^+=0,\qquad w\in S^h• \tag{3}$$

在柱体 $Q_T=\Omega\times(0,T]$ 中考虑抛物初边值问题

$$\begin{cases} u_t+Au=f, & \text{在 } Q_T \text{ 中},\ u(x,0)=\varphi(x), \quad \text{在 } \Omega \text{ 中;} \\ u=0, & \text{在 } \Gamma=\partial\Omega\times(0,T] \text{ 上,} \end{cases} \tag{4}$$

其中 Ω 是二维有界域, $A=-D_j(a_{ij}(x)D_i)+a_0(x)$ 是一致椭圆算子, 且 A 的系数与 t 无关• 记双线性、内积、范数分别是

$$A(u,v)=\int_\Omega(a_{ij}D_iuD_jv+a_0w)\,\mathrm{d}x,$$

$$(f,v)=\int_\Omega fv\,\mathrm{d}x,\ \|u\|_k=\left[\int_\Omega\sum_{|\alpha|\leqslant k}|D^\alpha u|^2\mathrm{d}x\right]^{1/2}•$$

设空间区域 Ω 和时间区域 $J=(0,T]$ 的剖分都是拟一致的• $\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$ 是区域 Ω 的节点, k 为小单元 τ 的最大尺寸• 区间 J 的节点 $\{t_0,t_1,u_2,\cdots,t_m\}$, 单元 $I_j=(t_{j-1},t_j)$ 的步长 $h_j=t_j-t_{j-1}$, $h=\max h_j$• n 次空间有限元空间 $S^k=\{v\mid v\in H_0(\Omega)-v\mid\tau_j\in P_n, j=1,2,\cdots,n\}$, 时间的连续分片 m 次有限元空间 $S^h=\{v\mid v\in C(J), v|_{I_j}\in P_m, j=1,2,\cdots,m\}$•

设 $U(t,x)$ 对空间变量已作 n 次有限元离散, 又对时间变量作 m 次有限元离散, 它们构成张量积空间 $S_0^k\times S^h=S^{k,h}$• 在单元 I_j 上 $U(t)\in S^{k,h}$ 是时间的 m 次多项式, 由于在前一个单元 I_{j-1} 上以已求出节点值 $U(t_{j-1})$• 故 U 在单元 I_j 上只有 m 个自由度, 故空间、时间都连续的时空有限元 U 满足

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{I_j}((U_t,\xi)+A(U,\xi)-(f,\xi))\eta(t)\,\mathrm{d}t=0, \qquad \eta\in P_{m-1}, \xi\in S_0^k, \\ U(0)=\varphi_k=R_k\varphi\in S_0^k, \qquad j=1,2,\cdots,m• \end{cases} \tag{5}$$

在实际计算时可取 $\eta=(t-t_{j-1})^i$, $i=0,1,2,\cdots,m-1$, 唯一确定 U•

空间连续、时间间断的时空有限元 U 在单元 I_j 上有 $m+1$ 个自由度, 故满足

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{I_j}((U_t,\xi)+A(U,\xi)-(f,\xi))\eta(t)\,\mathrm{d}t+([U_{j-1}],\eta_{j-1}^+\xi)=0, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \eta\in P_m,\ \xi\in S_0^k, \\ U(0)=\varphi_k=R_k\varphi\in S_0^k, \qquad j=1,2,\cdots,m• \end{cases} \tag{6}$$

可取 $\eta=(t-t_{j-1})^i$, $i=0,1,2,\cdots,m$, 唯一确定 U.

1　非线性 Schrödinger 方程有限元的守恒性

考虑非线性 Schrödinger 常微分方程, $w=u+\mathrm{i}v$, λ为实数,

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}t}=\lambda|w|^2w,\quad w(0)=w_0. \tag{7}$$

由(2)式得 m 次连续有限元解 W 满足 $\int_0^{t_j}(\mathrm{i}W'-\lambda|W|^2W)\psi'\mathrm{d}t=0,\quad \psi\in S^h$.

令 $\psi=\overline{W}$ 为 W 的共轭复函数, 得

$$-\int_0^{t_j}|W|^2\frac{1}{2}\partial_t|W|^2\mathrm{d}t=\frac{1}{4}|W|^4\Big|_0^{t_j}=\frac{1}{4}(W(t_j)^4-W(0)^4)=0.$$

由连续有限元定义, $W(0)=w(0)$, 即有如下守恒律

$$|W(t_j)|^4=|W(0)|^4=|w(0)|^4. \tag{8}$$

考虑非线性 Schrödinger 偏微分方程, $w=u+\mathrm{i}v$, λ为实数

$$\begin{cases}\mathrm{i}w_t+\lambda|w|^2w+\Delta w=0, & \text{在 } Q \text{ 中},\\ w|_{t=0}=w_0, \quad \text{在 } \Omega \text{ 中}; & w|_{\partial\Omega}=0, \quad \text{在 } \Gamma=\partial\Omega\times J \text{ 上}.\end{cases} \tag{9}$$

Ω 为二维有界域, $Q=\Omega\times J$, $J=(0,T)$. 分开实部虚部可化为方程组

$$-u_t=\Delta v+\lambda(u^2+v^2)v,\quad v_t=\Delta u+\lambda(u^2+v^2)u. \tag{10}$$

记 W 为时间方向连续的全离散有限元, $W=U+\mathrm{i}V$, 满足方程

$$\int_0^t(-U_t,\eta)\mathrm{d}t+\int_0^tA(V,\eta)\mathrm{d}t=\int_0^t(\lambda(U^2+V^2)V,\eta)\mathrm{d}t, \tag{11}$$

$$\int_0^t(V_t,\eta)\mathrm{d}t+\int_0^tA(U,\eta)dt=\int_0^t(\lambda(U^2+V^2)U,\eta)\mathrm{d}t,\qquad \eta\in S^{k,h}, \tag{12}$$

(11)式取 $\eta=V_t$, (12)式取 $\eta=U_t$, 两式相加, 可得

$$0=\frac{1}{4}\int_\Omega\lambda(U^2+V^2)^2\mathrm{d}x-\frac{1}{4}\int_\Omega\lambda(U(0)^2+V(0)^2)^2\mathrm{d}x-$$
$$\frac{1}{2}\int_\Omega(|DV|^2+|DU|^2)\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\int_\Omega(|DV(0)|^2+|DU(0)|^2)\mathrm{d}x.$$

故可得出能量积分守恒

$$\frac{1}{2}\int_\Omega|DW|^2\mathrm{d}x-\frac{1}{4}\int_\Omega\lambda|W|^4\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\int_\Omega|DW(0)|^2\mathrm{d}x-\frac{1}{4}\int_\Omega\lambda(W(0))^4\mathrm{d}x, \tag{13}$$

上式右端与初始值 w_0 离散精度有关, 只是与时间无关. 用时间连续有限元的全离散格式求解非线性Schrödinger 的方程能较好的保持能量积分

$$E(w(t))=\frac{1}{2}\int_\Omega|Dw|^2\mathrm{d}x-\frac{1}{4}\int_\Omega|w|^4\mathrm{d}x$$

守恒.

取间断有限元 $U,V\in S^{k,h}$ 满足

$$\int_{I_j}((U_t,\xi)-A(V,\xi)+\lambda(|U^2+V^2|V,\xi))\mathrm{d}t+([U_{j-1}],\xi_{j-1}^+)=0,\qquad \xi\in S^{k,h}.$$

$$\int_{I_j}((V_t,\eta)+A(U,\eta)-\lambda(|U^2+V^2|U,\eta))\mathrm{d}t+([V_{j-1}],\eta_{j-1}^+)=0,\qquad \eta\in S^{k,h}.$$

令 $\xi=U$, $\eta=V$, 将上两式相加有

$$\frac{1}{2}\int_{I_j}\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega(U^2+V^2)\mathrm{d}x\mathrm{d}t+([U_{j-1}],U_{j-1}^+)+([V_{j-1}],V_{j-1}^+)=0.$$

完成对 t 的积分, 对所有区间 I_j 求和, 经整理得到等式

$$\sum_{j=0}^{n-1}(\|U_j^+-U_j^-\|^2+\|V_j^+-V_j^-\|^2)+\|U_n^-\|^2+\|V_n^-\|^2=\|U_0^-\|^2+\|V_0^-\|^2.$$

由文献[6], 可知线性常微问题中 $[U_j]=O(h^{m+1})$. 对偏微分方程, 常微分结果可推广到偏微分, 但已超出本文议论范围, 其理论分析见其它参考文献. 设 $[U_j]=O(h^{m+1}),[V_j]=O(h^{m+1})$, 它们平方求和后只有阶数 h^{2m+1}, 故

$$\int_\Omega(U(t_n-0)^2+V(t_n-0)^2)\mathrm{d}x=\int_\Omega(U_0^2+V^2)\mathrm{d}x+O(h^{2m+1}),\tag{14}$$

可见间断有限元并不满足电荷守恒, 但其电荷的变化有高阶超收敛 $O(h^{2m+1})$.

2　常微分情形的数值试验

非线性 Schrödinger 常微分方程: $\mathrm{i}w_t=|w|^2w,\ w|_{t=0}=1,\ 0\leqslant t\leqslant 8$.

已知准确解为 $w=\cos t-\mathrm{i}\sin t$, 用连续二次有限元 $W=U+\mathrm{i}V$ 求解. 分取步长 $h=1/2,\ h=1/4$, 其计算结果见表 1.

表 1　能量误差 $|W(t)|^4-|w(0)|^4$

	$t=2$	$t=4$	$t=6$	$t=8$
$h=1/2$	−0.444E−15	−0.888E−15	−0.111E−14	−0.666E−15
$h=1/4$	0.4441E−15	0.4441E−15	0	0.8882E−15

从以上表 1 可得

1) 能量误差 $|W(t)|^4-|w(0)|^4$ 为 $10^{-15}\sim10^{-16}$即双精度意义下是守恒的.

2) 而且当 t 由 2 增至 8 时, 能量误差没有什么大的改变, 有很好的守恒性.

3　偏微分情形的数值试验

考虑一维非线性 Schrödinger 偏微方程: $w=u+\mathrm{i}v$, Ω 为一维有界域,

$$\mathrm{i}w_t+|w|^2w+\Delta w=0,\qquad 在\ Q=\Omega\times J\ 中,$$
$$w|_{t=0}=w_0,\qquad 在\ \Omega 中;\ w|_{\partial\Omega}=0,\qquad 在\ \Gamma=\partial\Omega\times J\ 上.$$

取初值为 $w_0=e^{-x^2+\mathrm{i}x}$, $\Omega=[-6,6], J=[0,T]$.

用空间方向连续二次元时间方向二次元的全离散格式求解, 记 k 为空间方向步长, h 为时间方向步长, 电荷为 $Q(W(t))=\int_\Omega|W(t)|^2\mathrm{d}t$, 能量积分为

$$E(W(t))=\frac{1}{2}\int_\Omega|DW|^2\mathrm{d}x-\frac{1}{4}\int_\Omega|W|^4\mathrm{d}x.$$

其计算结果如下.

从表 1 可得结论

1) 从表 2 可看出, 当 h 不变, k 改变时, 能量积分能保持守恒. 从表 3 可看出, 当 k 不变, h 改变时, 能量积分仍能保持守恒.

2) 从表 4、表 5 可看出, 当时间区间改变, 空间区间不变时, 能量积分能较好保持守恒. 当空间区间改变, 时间区间不变时, 能量积分仍能保持守恒.

4　结　　论

以上分析可看出: 用连续有限元求解非线性 Schrödinger 常微方程, 能量积分能较好保持守

恒, 与(8)式结论相吻合• 用空间、时间方向都连续的时空全离散有限元方法求解非线性 Schr└dinger 方程, 能量积分能较好保持守恒, 与(13)式结论相吻合•

表 2 t 方向步长 $h = 1/10$, x 方向步长 k 变化, $T = 1$

	$Q(W(t)) - Q(W(0))$	$E(W(t)) - E(W(0))$
$k = 1/4$	1.244 6E-5	-3.189 7E-11
k= 1/8	1.242 2E-5	-5.487 2E-12
k= 1/16	1.242 1E-5	-1.564 7E-12

表 3 x 方向步长 $k = 1/4$, t 方向步长 h 变化, $T = 1$

	$Q(W(t)) - Q(W(0))$	$E(W(t)) - E(W(0))$
$h = 1/5$	1.570 5E-4	-5.353 0E-11
$h = 1/10$	1.244 6E-5	-3.189 7E-11
$h = 1/20$	8.301 5E-7	-1.308 6E-11

表 4 T 改变, $x = (-6, 6)$, $h = 1/5$, $k = 1/4$

	$Q(W(t)) - Q(W(0))$	$E(W(t)) - E(W(0))$
$t = 4$	2.119 2E-4	-7.159 9E-10
$t = 12$	1.926 6E-4	-1.743 7E-9

表 5 x 区间改变, $k = 1/4$, $h = 1/5$, $T = 1$

	$Q(W(t)) - Q(W(0))$	$E(W(t)) - E(W(0))$
$x = [-6, 6]$	1.570 5E-4	-5.353 0E-11
$x = [-12, 12]$	1.523 6E-4	-5.359 2E-11

[参 考 文 献]

[1] Delfour M, Fortin M, Payre G. Finite_difference solution of a non_linear Schr└dinger equation[J]. *Journal of Computational Physics*, 1981, **44**(12): 277—288.

[2] Qhannes Karakashian, Charalambos Makridakis. A space_time finite element method for The nonlinear Schr└dinger equation: the discontiouous Galerkin method[J]. *Mathematics of Computation*, 1998, **67**(1): 479—499.

[3] 李宏, 刘儒勋. 抛物方程的时空有限元方法[J]. 应用数学和力学, 2001, **22**(6): 613—624.

[4] 张鲁明, 常谦顺. 非线性 Schr└dinger 方程的守恒数值格式[J]. 计算物理, 1999, **16**(6): 661—668.

[5] 陈传淼. 有限元超收敛构造理论[M]. 长沙: 湖南科技出版社, 2001, 241—285.

[6] 汤琼, 陈传淼, 刘罗华. 常微分初值问题的间断有限元的超收敛性[J]. 株洲工学院学报, 2004, **18**(2): 30—32.

Space_Time Finite Element Method for the Schrodinger Equation and Its Conservation

TANG Qiong[1,2], CHEN Chuan_miao[1], LIU Luo_hua[2]

(1. Department of Mathematics and Computing Science, Hunan Normal University, Changsha 410081, P.R.China;

2. Department of Information and Computing Science, Zhuzhou Institue of Technology, Zhuzhou 412008, P.R.China)

Abstract: Energy conservation of non_linear Schr└dinger ordinary differential equation was proved through using ordinary differential equation' s continuous finite element methods; Energy integration conservation was proved through using space_time all continuous fully discrete finite element methods and electron nearly conservation with higher order error through using time discontinuous only space continuos finite element methods of non_linear Schr└dinger partial equation. The numerical results are in accordance with the theory.

Key words: non_linear Schr└dinger equation; space_time finite element method; energy integration; conservation