

分数阶非线性 Schrödinger 方程的时间分裂算法

靳 珊, 梁宗旗

(集美大学理学院, 福建 厦门 361021)

[摘要] 主要研究分数阶非线性 Schrödinger 方程的时间分裂算法, 将分数阶非线性 Schrödinger 方程分裂成一个线性方程和一个非线性方程分别求解。其中, 非线性方程可精确求解, 并满足“点点守恒”, 而线性方程利用 Crank-Nicolson 差分格式离散求解。证明了该算法在离散形式下保持了原方程的质量和能量的守恒性, 是无条件稳定的, 收敛误差为 $O(h^2 + \tau^2)$ 。最后通过数值实验验证了该算法的可行性和精度, 说明该算法是一种简单有效的算法。

[关键词] 分数阶非线性 Schrödinger 方程; 分裂算法; 守恒律; 收敛性; 数值实验

[中图分类号] O 175

Time-splitting Method for the Fractional Nonlinear Schrödinger Equation

JIN Shan, LIANG Zongqi

(School of Science, Jimei University, Xiamen 361021, China)

Abstract: A time-splitting method for solving the fractional nonlinear Schrödinger equation with space fractional derivative was proposed. In this method, the fractional nonlinear Schrödinger equation was split into a linear equation and a nonlinear equation, where the nonlinear equation could be solved exactly and satisfy ‘conservation of point’, and the linear equation could be solved by using Crank-Nicolson discretization method. The conservation of mass and energy for the original equation was kept in this method. The unconditional stability and the convergence with the truncation error $O(h^2 + \tau^2)$ were proved. Finally, numerical examples were presented to show that the method was both effective and accurate, which indicated that the method was simple and effective.

Keywords: fractional nonlinear Schrödinger equation; split method; conservation; convergence; numerical experiment

0 引言

分数阶微积分的计算是一个古老而新鲜的研究领域, 特别是近年来, 分数阶偏微分方程在数学, 生物, 化学, 医学, 控制理论, 信号和图像处理, 以及物理中的应用受到越来越广泛的关注。因为分数阶微分算子在很多地方比整数阶微分算子更贴近实际, 如分数阶微分算子具有的非局限性, 使得它能较好地用于描述事物的记忆性以及遗传性质。在数值计算方面, 由于分数阶微分方程的解析解或者很难显式给出, 或者含有特殊函数, 使其计算相当困难。所以, 用数值方法模拟其解是一个自然的想

[收稿日期] 2017-04-16

[修回日期] 2017-06-15

[基金项目] 福建省科技计划重点项目 (2014H0034, 2017H6015); 福建省自然科学基金项目 (2017J01557, 2016J01310, 2016J01309); 集美大学李尚大基金项目 (ZC2016022); 福建省教育厅基金项目 (JAT160247)

[作者简介] 靳珊 (1976—), 女, 讲师, 硕士, 从事计算数学方向研究。通信作者: 梁宗旗 (1964—), 男, 教授, 硕导, 从事计算数学方向研究, E-mail: liangzq2719@163.com。

法,也使得分数阶偏微分方程的数值解法成为国内外研究的热点之一,很多学者对此也已取得了一定的研究成果,如:文献[1-2]对时间分数阶慢扩散问题,用 G-L 逼近建立了向前 Euler 差分格式和加权差分格式,并分析了两种差分格式的稳定性;文献[3-4]对慢扩散方程初边值问题建立了几个隐式差分格式,并分析了差分格式的稳定性及收敛性;文献[5]对该问题进行数值离散,分析了差分格式的逼近误差,并用 Fourier 方法分析了所得差分格式的无条件稳定性;文献[6]对时间分数阶扩散方程提出在时间方向采用有限差分,在空间方向采用谱方法,并证明了时间方向上 $(2-\alpha)$ 阶收敛,而空间方向上具有谱精度;文献[7]对时间分数阶导数,用换元法将一个高阶方程转化成低阶扩散方程组来逼近并构造其差分格式,且严格证明了时间方向上的收敛阶为 $(2-\alpha)$ 阶。

作为经典的 Schrödinger 方程,其数值解法一直是学者关注的热点之一,由应用而扩展出的分数阶 Schrödinger 方程,也有不少成果,如:文献[8]针对线性分数阶 Schrödinger 方程提出了配点法;文献[9]对 Hartree 方程提出了时间分裂拟谱法。这些研究主要集中在线性方程,对分数阶非线性微分方程还没有太多的数值解法,文献[10]通过能量方法研究了分数阶非线性 Schrödinger 方程光滑解的整体唯一性;文献[11]则对耦合非线性分数阶 Schrödinger 方程给出了 Crank-Nicolson (C-N) 格式。

本文利用分裂算法来研究一维分数阶非线性 Schrödinger 方程,将原方程分裂成一个线性方程和一个非线性方程。对线性方程采用 C-N 格式离散,其中 Riesz 分数阶导数 $-(-\Delta_x)^{\alpha/2}u$ 采用了中心差分算子近似。对非线性方程利用其“点点守恒”的特性可精确求解。本文提供了一种分步计算方法,首先证明了该分裂算法在离散意义下保持了原方程所具有的质量及能量守恒性,也证明了格式的收敛性和稳定性,收敛精度为二阶精度,且无条件稳定。最后利用数值例子验证了质量及能量的守恒性及收敛精度,理论和数值都表明,该方法是一个简单有效且守恒的新的算法。

1 分数阶非线性 Schrödinger 方程

本文考虑如下分数阶非线性 Schrödinger 方程初边值问题:

$$i\partial_t u - (-\Delta_x)^{\alpha/2}u + q|u|^2u = 0, \quad a < x < b, 0 < t \leq T, \quad (1)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad a \leq x \leq b, \quad (2)$$

$$u(a, t) = u(b, t) = 0, \quad 0 < t \leq T, \quad (3)$$

其中: $1 < \alpha \leq 2$; q 为实常数; $i = \sqrt{-1}$ 为虚数单位; $u_0(x)$ 为已知复值函数; $u(x, t)$ 为未知复值函数; Riesz 分数阶导数 $-(-\Delta_x)^{\alpha/2}u$ 定义^[12]如下:

$$-(-\Delta_x)^{\alpha/2}u = -[{}_{-\infty}D_x^\alpha u(x, t) + {}_x D_{+\infty}^\alpha u(x, t)]/[2\cos(\alpha/2)], \quad (4)$$

其中, ${}_{-\infty}D_x^\alpha$ 、 ${}_x D_{+\infty}^\alpha$ 分别表示左右 Riemann-Liouville (R-L) 分数阶导数。当 $\alpha = 2$ 时, 方程就是经典的非线性 Schrödinger 方程。

引理 1^[13] 设 $u(x, t)$ 是问题 (1)~(3) 的解, 问题 (1)~(3) 具有质量守恒 $Q(t)$ 和能量守恒 $E(t)$ 两个守恒律。

记 $Q(t) = \int_{\mathbf{R}} |u(x, t)|^2 dx$, $E(t) = \int_{\mathbf{R}} \bar{u}(-\Delta_x)^{\alpha/2}u dx/2 - q \int_{\mathbf{R}} |u|^4 dx/4$, 有

$$Q(t) = Q(0), \quad 0 \leq t \leq T, \quad E(t) = E(0), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (5)$$

一个算法的好坏,除了精度、收敛速度、稳定性问题之外,还有一个很重要的指标,即构造的格式是否很好地模拟了原方程具有的特性,如守恒性。

2 时间分裂算法

2.1 记号

对正整数 M 和 N , 取空间步长 $h = (b-a)/M$, 时间步长 $\tau = T/N$, 记 $\Omega_h = \{x_j = a + jh, 0 \leq j \leq M\}$, $\Omega_\tau = \{t_k = k\tau, k = 0, 1, \dots, N\}$, $\Omega_{h\tau} = \Omega_h \times \Omega_\tau$ 。设 $\Omega = \{v_j^k: 0 \leq j \leq M, 0 \leq k \leq N\}$ 为 $\Omega_{h\tau}$

上的离散函数, $\Omega_{h0} = \{v | v = (v_0, v_1, \dots, v_M), v_0 = v_M = 0\}$ 为 Ω_τ 上复网格函数, 且 $U^k = (U_0^k, U_1^k, U_2^k, \dots, U_M^k)^T$, 定义离散内积及范数: $v_j^{k+1/2} = (v_j^{k+1} + v_j^k)/2$, $\delta_t v_j^{k+1/2} = (v_j^{k+1} - v_j^k)/\tau$, $\|v^k\| = (v^k, v^k)^{1/2}$, $(v^k, \omega^k) = h \sum_{j=1}^{M-1} (v_j^k \bar{\omega}_j^k)$, $\|v^k\|_p = \sqrt[p]{h \sum_{j=1}^{M-1} |v_j^k|^p}$, $1 \leq p < \infty$, 其中 $\bar{\omega}_j^k$ 表示 ω_j^k 的复共轭, 且 $U_j^k = u(x_j, t_k)$ 表示 $u(x_j, t_k)$ 数值近似解。

定义 $u^*(x, t) = \begin{cases} u(x, t), & x \in [a, b], \\ 0, & x \in (-\infty, a) \cup (b, +\infty). \end{cases}$

引理2 对于 $0 < \alpha \leq 2$, Riesz 分数阶导数 $-(-\Delta_x)^{\alpha/2}u$ 中心差分算子定义^[2]如下:

$$-(-\Delta_x)^{\alpha/2}u^* = -\sum_{l=-\infty}^{\infty} [c_l^{(\alpha)} u^*(x - lh, t)]/h^\alpha + O(h^2),$$

因为当 $x \in (-\infty, a) \cup (b, +\infty)$ 时, $u^*(x, t) = 0$, 从而

$$-(-\Delta_x)^{\alpha/2}u = -\sum_{l=-[(b-x)/h]}^{[(x-a)/h]} [c_l^{(\alpha)} u(x - lh, t)]/h^\alpha + O(h^2), \quad (6)$$

其中 $c_l^{(\alpha)} = (-1)^l \Gamma(\alpha + 1) / [\Gamma(\alpha/2 - l + 1) \Gamma(\alpha/2 + l + 1)]$ 。

记 $u_j^k = u(x_j, t_k)$ 并注意边界条件式 (3), 式 (6) 也可以写成

$$\begin{aligned} -(-\Delta_x)^{\alpha/2}u_j^k &= -\sum_{l=-M+j}^j (c_l^{(\alpha)} u_{j-l}^k)/h^\alpha + O(h^2) = -\sum_{l=1}^{M-1} (c_{j-l}^{(\alpha)} u_l^k)/h^\alpha + O(h^2) = \\ &= -\Delta_h^\alpha u_j^k + O(h^2), \quad 1 \leq j \leq M-1, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $\Delta_h^\alpha u_j^k = \sum_{l=1}^{M-1} (c_{j-l}^{(\alpha)} u_l^k)/h^\alpha$ 。

2.2 分数阶非线性 Schrödinger 方程时间分裂方法

对于分数阶非线性 Schrödinger 方程, 采用时间分裂方法。对时间变量从 $t = t_n$ 到 $t = t_{n+1}$, 将式 (1) 分裂为两个方程来进行分步计算。

第一步是计算线性方程

$$i\partial_t u(x, t) - (-\Delta_x)^{\alpha/2}u(x, t) = 0, \quad a < x < b, t \geq t_n, \quad (8)$$

其满足齐次边界条件式 (3)。

第二步是计算非线性方程

$$i\partial_t u(x, t) + q|u(x, t)|^2 u(x, t) = 0, \quad a < x < b. \quad (9)$$

首先处理非线性方程。对式 (8) 两边同乘以 $\bar{u}(x, t)$ 得

$$\partial_t |u(x, t)|^2 = 0, \quad a < x < b, t \geq t_n, \quad (10)$$

即

$$|u(x, t)|^2 = |u(x, t_n)|^2 = |u(x, t_0)|^2, \quad a < x < b, t \geq t_n. \quad (11)$$

对式 (9) 在 (t_n, t) 上积分, 并利用式 (11) 得

$$u(x, t) = e^{iq|u(x, t_n)|^2(t-t_n)} u(x, t_n), \quad a < x < b, t \geq t_n. \quad (12)$$

即可对式 (9) 精确求解且具有“点点守恒”的特性 $|u(x, t_n)|^2 = |u(x, 0)|^2$ 。

对线性方程式 (8), 考虑如下的 Crank-Nicolson 差分格式, 并利用引理 1 得

$$i\delta_t u_j^{k+1/2} - \Delta_h^\alpha u_j^{k+1/2} = R_j^k, \quad 1 \leq j \leq M-1, 0 \leq k \leq N-1. \quad (13)$$

其中 R_j^k 为截断误差。由 Taylor 展式及式 (7) 知, 存在正常数 C_1 , 有

$$|R_j^k| \leq C_1(\tau^2 + h^2). \quad (14)$$

在式 (13) 中略去小量项 R_j^k , 并用数值解 U_j^k 代替 u_j^k , 得如下差分格式:

$$i\delta_t U_j^{k+1/2} - \Delta_h^\alpha U_j^{k+1/2} = 0, \quad 1 \leq j \leq M-1, 0 \leq k \leq N-1, \quad (15)$$

$$U_j^0 = u_0(x_j), 1 \leq j \leq M-1, \quad (16)$$

$$U_0^k = U_M^k = 0, 0 \leq k \leq N. \quad (17)$$

将式(15)改写成

$$iU_j^{k+1}/\tau - \Delta_h^\alpha U_j^{k+1}/2 = iU_j^k/\tau + \Delta_h^\alpha U_j^k/2, 1 \leq j \leq M-1, \quad (18)$$

$$\text{令 } \mathbf{C}_x = \begin{pmatrix} c_0^{(\alpha)} & c_{-1}^{(\alpha)} & \cdots & c_{-M+2}^{(\alpha)} \\ c_{-1}^{(\alpha)} & c_0^{(\alpha)} & \cdots & c_{-M+3}^{(\alpha)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{M-2}^{(\alpha)} & c_{M-3}^{(\alpha)} & \cdots & c_0^{(\alpha)} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(M-1) \times (M-1)}, \text{ 其中 } c_l^{(\alpha)} \text{ 由式(6)定义。}$$

引理 3^[5] 系数 $c_l^{(\alpha)}$ ($-1 < \alpha \leq 2$) 满足以下性质: i) $c_0^{(\alpha)} > 0$, $c_l^{(\alpha)} = c_{-l}^{(\alpha)} \leq 0, l = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$; ii) 矩阵 \mathbf{C}_x 为实对称正定矩阵, 若记 λ_i 为其特征值, 则 $0 < \lambda_i < 2c_0^{(\alpha)}, 1 \leq i \leq M-1$ 。

记 $\mu = \tau/(2h^\alpha)$, 式(18)也可写成 $(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x) \mathbf{U}^{(2)} = (\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x) \mathbf{U}^{(1)}$ 的矩阵表示形式, 于是对式(1)可建立如下时间为二阶的分步计算格式:

$$U_j^{(1)} = e^{iq\tau} |U_j^k|^{2/2} U_j^k, 1 \leq j \leq M-1, \quad (19)$$

$$(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x) \mathbf{U}^{(2)} = (\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x) \mathbf{U}^{(1)}, \quad (20)$$

$$U_j^{k+1} = e^{iq\tau} |U_j^{(2)}|^{2/2} U_j^{(2)}, 0 \leq k \leq N-1, \quad (21)$$

$$U_j^0 = u_0(x_j), 1 \leq j \leq M-1, \quad (22)$$

$$U_0^k = 0, 0 \leq k \leq N. \quad (23)$$

2.3 分裂算法解的守恒性

该分裂算法是一个守恒的格式, 即在离散意义下满足质量和能量守恒这一原方程的特性。由 \mathbf{C}_x 的性质可知 $(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)$ 可逆, 于是

$$\mathbf{U}^{(2)} = (\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^{-1} (\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x) \mathbf{U}^{(1)} = \mathbf{H} \mathbf{U}^{(1)}, \quad (24)$$

其中 $\mathbf{H} := (\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^{-1} (\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x)$ 。

引理 4 矩阵 \mathbf{H} 是酉矩阵 (\mathbf{H}^* 为 \mathbf{H} 的西共轭矩阵)。

证明 因为 \mathbf{C}_x 对称, $(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^{-1}$ 与 $(\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x)$ 可交换, $\mathbf{H}^* = (\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x)^* ((\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x) - \mathbf{I})^* = (\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x) ((\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^*)^{-1} = (\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x) (\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x)^{-1} = (\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x)^{-1} (\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)$, 所以 $\mathbf{H} \mathbf{H}^* = \mathbf{I}$, 故 \mathbf{H} 是酉矩阵。

定理 1 设 U_j^k 是格式(19)~(21)的解, 则其解满足如下的质量守恒律,

$$\tilde{Q}^k \|\mathbf{U}^k\|^2 = \|\mathbf{U}^0\|^2 = \tilde{Q}^0, 1 \leq k \leq N. \quad (25)$$

证明 $\|\mathbf{U}^{k+1}\|^2 = \sum_{j=1}^{M-1} |U_j^{k+1}|^2 = \sum_{j=1}^{M-1} |e^{iq\tau} |U_j^{(2)}|^{2/2} U_j^{(2)}|^2 = \sum_{j=1}^{M-1} |U_j^{(2)}|^2 = (\mathbf{U}^{(2)})^T \mathbf{U}^{(2)} = [\mathbf{H} \mathbf{U}^{(1)}]^T \mathbf{H} \mathbf{U}^{(1)} = (\mathbf{U}^{(1)})^T \mathbf{H}^T \mathbf{H} \mathbf{U}^{(1)} = (\mathbf{U}^{(1)})^T \mathbf{U}^{(1)} = \sum_{j=1}^{M-1} |U_j^k|^2 = \|\mathbf{U}^k\|^2$, 即 $Q^k = Q^0$ 。说明本文采用的数值格式保证了原方程的质量守恒性。

推论 1 由定理 1 可知, 若 $\mathbf{U}^0 \in C^1$, 则存在常数 $c > 0$, 使得 $\|\mathbf{U}^k\| = \|\mathbf{U}^0\| \leq c, 1 \leq k \leq N$, 即格式是无条件稳定的。

定理 2 设 U_j^k 是式(19)~(21)的解, 则其解满足如下的能量守恒律, 即 $E^k = E^0, 1 \leq k \leq N-1$, 其中 $E^k := (h \sum_{j=1}^{M-1} U_j^k \cdot \Delta_h^\alpha U_j^k) / (2h^\alpha) - (q \sum_{j=1}^{M-1} |U_j^k|^4) / 4$ 。

证明 记 $\mathbf{U}_\#^{(2)} = (e^{iq\tau} |U_j^{(2)}|^{2/2} \mathbf{U}_1^{(2)}, e^{iq\tau} |U_j^{(2)}|^{2/2} \mathbf{U}_2^{(2)}, \dots, e^{iq\tau} |U_j^{(2)}|^{2/2} \mathbf{U}_{M-1}^{(2)})^T$, 则 $E^{k+1} = h \sum_{j=1}^{M-1} \bar{U}_j^{k+1} \cdot$

$$\begin{aligned} & (\sum_{l=1}^{M-1} c_{j-l}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{U}_l^{k+1}) / (2h^\alpha) - q \sum_{j=1}^{M-1} |\mathbf{U}_j^{k+1}|^2 |\mathbf{U}_j^{k+1}|^2 / 4 = h(\mathbf{U}^{k+1})^T \cdot \mathbf{C}_x \cdot \mathbf{U}^{k+1} / 2h^\alpha - q(|\bar{\mathbf{U}}|^{k+1})^T \cdot |\bar{\mathbf{U}}|^{k+1} / 4 \\ & = h(\mathbf{U}_\#^{(2)})^T / (2h^\alpha) \cdot \mathbf{C}_x \cdot \mathbf{U}_\#^{(2)} - q(|\mathbf{U}|_\#^{(2)})^T \cdot |\mathbf{U}|_\#^{(2)} / 4 = h\mathbf{U}^{(2)T} \mathbf{C}_x (\mathbf{U}^{(2)})^T / (2h^\alpha) - \\ & q\mathbf{U}^{(2)T} (\mathbf{U}^{(2)})^T (\mathbf{U}^{(2)} (\mathbf{U}^{(2)})^T)^T / 4 = h(\mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)})^T \mathbf{C}_x \mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)} / (2h^\alpha) - q(\mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)})^T \mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)} (\mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)})^T (\mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)})^T / 4 = \\ & h\mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)T} \mathbf{C}_x (\mathbf{U}^{(1)})^T \mathbf{H}^T / (2h^\alpha) - q\mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)T} (\mathbf{U}^{(1)})^T \mathbf{H}^T \mathbf{H}\mathbf{U}^{(1)} (\mathbf{U}^{(1)})^T \mathbf{H}^T / 4 = h\mathbf{U}^{(1)T} \mathbf{C}_x (\mathbf{U}^{(1)})^T / (2h^\alpha) - \\ & q\mathbf{U}^{(1)T} (\mathbf{U}^{(1)})^T (\mathbf{U}^{(1)} (\mathbf{U}^{(1)})^T)^T / 4 = h(\sum_{j=1}^{M-1} \bar{\mathbf{U}}_j \cdot \Delta_h^\alpha \mathbf{U}_j^k) / (2h^\alpha) - q \sum_{j=1}^{M-1} |\mathbf{U}_j^k|^4 / 4, \text{ 即 } E^k = E^0, \text{ 说明满足能量} \end{aligned}$$

守恒。

2.4 分裂算法的收敛性

分裂算法(19) ~ (21) 由于其非线性部分是可精确求解, 故其误差主要来源于线性部分的误差。令 $\mathbf{e}_j^k = \mathbf{u}_j^k - \mathbf{U}_j^k, 1 \leq j \leq M-1, 0 \leq k \leq N$ 。

定理 3 设初边值问题(1) ~ (3) 具有光滑解, 则 $\|\mathbf{e}^k\| \leq c(\tau^2 + h^2), 0 \leq k \leq N$, 其中 $c = C_{\mathbf{R}} T \sqrt{(b-a)}$ 。

证明 从矩阵形式有 $\mathbf{e}^{k+1} = (\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x) - 1(\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x) \mathbf{e}^k + \tau(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^{-1} \mathbf{R}^{k+1/2}, 0 \leq k \leq N$, 其中 $\mathbf{e}^k = (e_1^k, e_2^k, \dots, e_{M-1}^k)^T, \mathbf{R}^k = (R_1^k, R_2^k, \dots, R_{M-1}^k)^T$ 。因为 \mathbf{C}_x 为对称矩阵, 所以 $(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^* = (\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)(\mathbf{I} - i\mu \mathbf{C}_x) = (\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^*(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)$ 。因为 $\|(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^{-1}\| = \sqrt{\rho(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^{-1}} \leq 1$, 于是, $\|\mathbf{e}^{k+1}\| \leq \|\mathbf{H}\| \|\mathbf{e}^k\| + \tau \|(\mathbf{I} + i\mu \mathbf{C}_x)^{-1}\| \|\mathbf{R}^{k+1/2}\| \leq \|\mathbf{e}^k\| + \tau \|\mathbf{R}^{k+1/2}\| \leq \|\mathbf{e}^0\| + \tau \sum_{l=0}^k \|\mathbf{R}^{l+1/2}\|$ 。又 $\|\mathbf{e}^0\| = 0$, 故得证。

3 数值实验

为了更好地验证该数值格式的有效性、精度和守恒性, 取 $h = 0.16, \tau = 0.01$, 初值函数为 $u_0(x) = 2e^{-x^2} / \sqrt{\pi}, x \in (-8, 8)$ 。对于线性问题, 即 $q = 0$, 在时间区间 $[0, 10]$ 上, α 分别取 1.5, 1.8 及 2, 利用分裂格式(19) ~ (23) 来分别计算质量 Q^k 和能量 E^k 。

图 1 和图 2 分别表明了 α 各种取值状态下的质量值和能量值, 从图 1 和图 2 可以看出, 其质量值 Q^k 和能量值 E^k 基本保持了一个数值, 且质量值 Q^k 与 α 的取值无关, 而能量值 E^k 则与 α 相关, 与理论完全相吻合, 同时时间步长和空间步长取得较大。

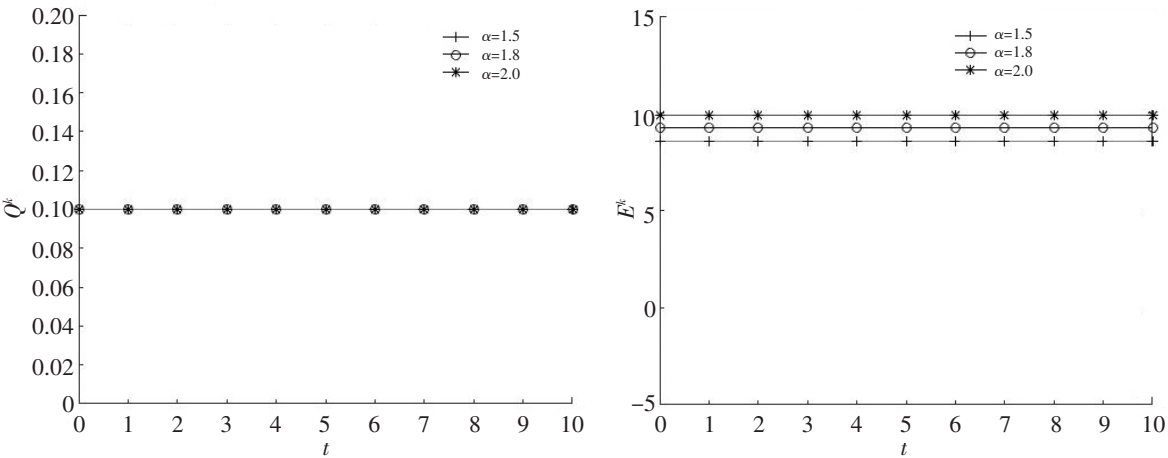


图 1 线性方程质量的变化 ($T=10, h=0.16, \tau=0.01, q=0.00$)

图 2 线性方程能量的变化 ($T=10, h=0.16, \tau=0.01, q=0.00$)

Fig.1 Evolution of mass for the linear equation
($T=10, h=0.16, \tau=0.01, q=0.00$)

Fig.2 Evolution of energy for the linear equation
($T=10, h=0.16, \tau=0.01, q=0.00$)

对于分数阶非线性 Schrödinger 方程，取 $q = 1$ ，从图 3 和图 4 可以看出，该数值格式也保持了质量和能量的守恒。同时注意到，该计算格式是在取得步长较大的情况下进行模拟的，数值结果仍然保持了非常好的稳定性，这也很好地说明了该格式的优越性。

对于非线性方程，取时间区间为 $[0,1]$ ， α 分别取 1.3，1.6 及 2，计算相同时间步长及空间步长下能量的误差值及误差的阶，阶的计算公式为： $\text{order} = \log_2(e(\tau_1, h_1)/e(\tau_2, h_2))$ 。从表 1 中可以看出阶的精度达到 $O(h^2 + \tau^2)$ ，完全符合理论结果。由表 1 还可以看出，随着 α 值的增加，阶的精度在提高，表明其收敛阶与 α 有关，具体需进一步研究讨论。

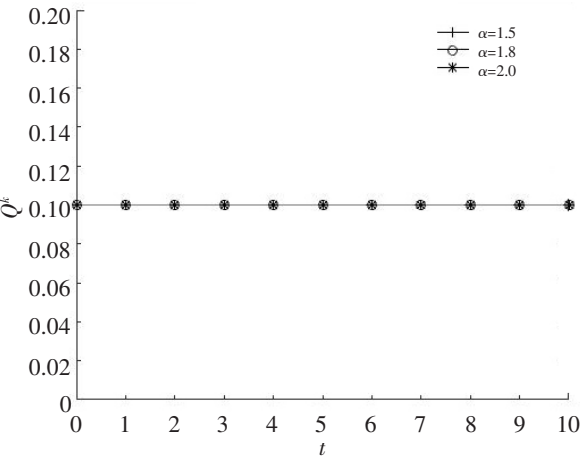


图 3 非线性方程质量的变化
($T=10, h=0.16, \tau=0.01, q=0.00$)

Fig.3 Evolution of mass for the nonlinear equation
($T=10, h=0.16, \tau=0.01, q=0.00$)

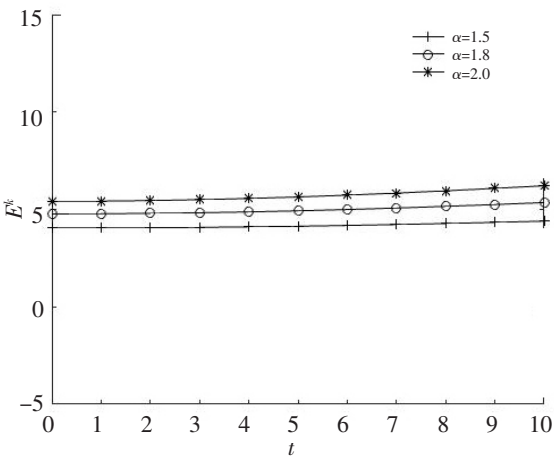


图 4 非线性方程能量的变化
($T=10, h=0.16, \tau=0.01, q=0.00$)

Fig.4 Evloution of energy for the nonlinear equation
($T=10, h=0.16, \tau=0.01, q=0.00$)

表 1 $T = 1, q = 1$ 时不同的 α, τ, h 计算出的能量误差

Tab.1 The errors of the energy at $T = 1$ with $q = 1$ for different α, τ and h

α		$h = 0.2, \tau = 0.2$	$h = 0.1, \tau = 0.1$	$h = 0.05, \tau = 0.05$
1.3	e_E	1.229 548 e -01	4.279 556 e -02	1.451 656 e -02
	Order		1.522 6	1.593 6
1.6	e_E	7.481 111 e -02	1.630 393 e -02	3.502 252 e -03
	Order		2.198 0	2.218 9
2.0	e_E	3.549 441 e -02	3.954 015 e -03	4.641 902 e -04
	Order		3.166 2	3.090 5

4 结论

本文对分数阶非线性 Schrödinger 方程构造了一个守恒的数值格式，对分数阶微分算子 Riesz 分数阶导数利用中心差分算子进行了离散，利用二阶时间分裂算法将一非线性问题转化成了一线性子问题和一可精确求解的非线性子问题。从数值实例中也可以看出，该方法简单有效，并保证了原方程的质量守恒和能量守恒，且可以取大步长的，无条件稳定的，其精度为二阶精度。该方法不仅适用于一维问题，而且多维问题及耦合分数阶非线性方程也可以采用该算法进行数值模拟。下一步将继续深入研究，致力于寻找更高效、高精度的数值解法。

[参考文献]

[1] YUSTE S B. Weighted average finite difference method for fractional diffusion equations [J]. Comput Phys, 2006, 216: <http://xuebaobangong.jmu.edu.cn/zkb>

264-274. DOI:10.1016/j.jcp.2005.12.006.

- [2] YUSTE S B, ACEDO L. An explicit finite difference method and a new von Neumann-type stability analysis for fractional diffusion equations [J]. SIAM J Numer Anal, 2005, 42: 1862-1874. DOI:10.1137/030602666.
- [3] CHEN C M, LIU F, ANH V, et al. Numerical schemes with high spatial accuracy for a variable-order anomalous subdiffusion equations [J]. SIAM J Sci Comput, 2010, 32: 1740-1760. DOI:10.1137/090771715.
- [4] ZHUANG P, LIU F, ANH V, et al. New solution and analytical techniques of the implicit numerical method for the anomalous subdiffusion equations [J]. SIAM J Numer Anal, 2008, 46: 1079-1095. DOI:10.1137/060673114.
- [5] LANGLANDS T A M, HENRY B I. The accuracy and stability of an implicit solution method for the fractional diffusion equations [J]. Comput Phys, 2005, 205: 719-736. DOI:10.1016/j.jcp.2004.11.025.
- [6] LIN Y M, XU C J. Finite difference/spectral approximation for the time fractional diffusion equations [J]. Comput Phys, 2007, 2(3): 1533-1552. DOI:10.1016/j.jcp.2007.02.001.
- [7] SUN Z, WU X. A fully discrete difference scheme for a diffusion-wave system [J]. Appl Numer Math, 2006, 56(2): 193-209. DOI:10.1016/j.apnum.2005.03.003.
- [8] AMORE P, FERNÁNDEZ F M, HOFMANN C P, et al. Collocation method for fractional quantum mechanics [J]. Math Phys, 2010, 51(12): 122101. DOI:10.1063/1.3511330.
- [9] BAO W Z, DONG X C. Numerical methods for computing ground state and dynamics of nonlinear relativistic Hartree equation for boson stars [J]. J Comput Phys, 2011, 230: 5449-5469. DOI:10.1016/j.jcp.2011.03.051.
- [10] 郭柏灵, 蒲学科, 黄凤辉. 分数阶偏微分方程及其数值解 [M]. 北京: 科学出版社, 2011.
- [11] WANG D L, XIAO G A, YANG W. Crank-Nicolson difference scheme for the coupled nonlinear Schrödinger equation with Riesz space fractional derivative [J]. J Comput Phys, 2013, 242: 670-681. DOI:10.1016/j.jcp.2013.02.037.
- [12] 孙志忠, 高广花. 分数阶微分方程的有限差分方法 [M]. 北京: 科学出版社, 2015.
- [13] WANG D L, XIAO A G, YANG W. A linearly implicit conservative difference scheme for the space fractional coupled nonlinear Schrödinger equations [J]. Comput Phys, 2014, 272: 644-655. DOI:10.1016/j.jcp.2014.04.047.

(责任编辑 马建华 英文审校 黄振坤)