

doi:10.3969/j.issn.1673-9833.2020.01.004

二维薛定谔方程的全离散有限元两层网格方法

王建云¹, 田智鲲², 张丹¹

(1. 湖南工业大学 理学院, 湖南 株洲 412007; 2. 湖南工程学院 理学院, 湖南 湘潭 411104)

摘要: 针对一类二维依赖于时间的线性薛定谔方程, 在空间方向采用双线性有限元进行离散, 时间方向利用向后欧拉方法得到全离散有限元格式, 构造一种全离散有限元两层网格算法, 对薛定谔方程耦合的实部和虚部进行解耦。从而将在细网格上进行求解, 简化为在粗网格上求解原问题以及在细网格上求解两个泊松方程。数值实验结果表明, 两层网格有限元方法比标准有限元方法更高效, 且当粗细网格尺寸满足一定条件时, 数值解具有相同的最优误差阶。

关键词: 薛定谔方程; 两层网格方法; 有限元方法; 向后欧拉方法

中图分类号: O241.82

文献标志码: A

文章编号: 1673-9833(2020)01-0019-05

引文格式: 王建云, 田智鲲, 张丹. 二维薛定谔方程的全离散有限元两层网格方法 [J]. 湖南工业大学学报, 2020, 34(1): 19-23.

A Two-Grid Algorithm for Fully Discrete Finite Element Based on the Two-Dimensional Schrödinger Equation

WANG Jianyun¹, TIAN Zhikun², ZHANG Dan¹

(1. College of Science, Hunan University of Technology, Zhuzhou Hunan 412007, China;

2. College of Science, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan Hunan 411104, China)

Abstract: In view of a class of two-dimensional time-dependent linear Schrodinger equation, the bilinear finite element method is used for a discretization in space in conjunction with backward Euler method used to obtain the full discrete finite element scheme in the temporal direction, thus constructing a two-grid algorithm for fully discrete finite element to decouple the real and imaginary parts of the coupled Schrodinger equation. Thus, the solution on fine grids is simplified as solving the original problem on coarse grids and solving two Poisson equations on fine grids. The numerical results show that the two-grid algorithm for fully discrete finite element is more efficient than the standard finite element method, and the numerical solution has the same optimal error order with the size of coarse and fine meshes meeting certain conditions.

Keywords: Schrödinger equation; two-grid method; finite element method; backward Euler method

收稿日期: 2019-06-09

基金项目: 湖南省教育厅科学研究基金资助项目(18C0518), 国家自然科学基金资助项目(11747095), 湖南省自然科学基金资助项目(2017JJ3064), 湖南工业大学教育教学改革研究基金资助重点项目(2018B04)

作者简介: 王建云(1981-), 男, 湖南常宁人, 湖南工业大学讲师, 博士, 主要从事偏微分方程数值方法及应用方面的教学与研究, E-mail: wjy8137@163.com

通信作者: 田智鲲(1979-), 女, 湖南龙山人, 湖南工程学院讲师, 博士, 主要从事偏微分方程数值方法方面的教学与研究, E-mail: tianzhikun@163.com

1 研究背景

量子力学是描述微观世界结构、运动与变化规律的物理学科。它的发现与建立是20世纪人类文明发展的一个重大飞跃,而且引发了一系列划时代的科学发现与技术发明。

薛定谔(Schrödinger)方程是量子力学最基本的方程,由奥地利物理学家薛定谔于1926年提出,揭示了原子世界中物质运动的基本规律。例如,最简单的一维无界域上依赖于时间的薛定谔方程,就反映了一个在守恒场中无旋转的粒子的运动状态,而其解的平方就表示该粒子在给定时刻出现在给定位置上的概率密度。许多物理问题,如高能物理、非线性媒体中的激光束扫描、浓缩问题等的数学模型也都可归结为(非线性)薛定谔方程。

薛定谔方程也是量子力学的一个基本假定,不能用比它更根本的假定来证明,其正确性只能靠实践来检验,而且在实际中复杂的薛定谔方程不易求得精确解。因此,关于其数值解的研究越来越受到人们的重视和关注。

本文主要考虑如下二维依赖于时间的线性薛定谔方程的初边值问题:

$$\begin{cases} iu_t(x, y, t) = -\Delta u(x, y, t) + \\ V(x, y)u(x, y, t) + f(x, y, t), \text{ in } \Omega \times [0, T]; \\ u(x, y, t) = 0, \text{ on } \partial\Omega \times [0, T]; \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y), \text{ in } \Omega. \end{cases} \quad (1)$$

式中: $\Omega \subset \mathbf{R}^2$ 为凸多边形区域; 初始函数 $u_0(x, y)$ 和右端项函数 $f(x, y, t)$ 及未知函数 $u(x, y, t)$ 都为复函数; 势能函数 $V(x, y)$ 为已知的有界实函数; i 为虚数单位。

有限元方法是求解偏微分方程数值解的一种重要方法,它的基本思想是根据变分原理,利用有限元空间上的离散解近似无穷维空间上的连续解。目前,许多数值求解方法被应用到线性或非线性薛定谔方程中,其中有限元方法为常见的方法之一,具体参见文献[1-10]。

文献[1]利用 Galerkin 有限元方法将空间离散,用 Crank-Nicolson 方法将时间方向离散得到有限元全离散格式,证明了数值解在全离散格式下的存在性和唯一性,并给出了在时间和空间步长满足一定条件下的最优阶 L^2 误差估计。文献[2]利用人工边界条件,构造和分析了无界域二维依赖于时间的薛定谔方程的一种全离散格式,并证明了该格式具有无条件稳定和收敛。文献[7]讨论了二维薛定谔方程的有限元超收敛问题,利用椭圆投影算子得到数值解的 H^1 误差具有超收敛性,并运用插值后处理技术得到整体超收

敛结果。

两层网格方法是求解偏微分方程的一种高效数值计算方法,其基本思想是通过构造两种不同尺度(基于粗网格和细网格)的有限元空间。首先在粗网格上求解原来的非对称或非线性问题;然后利用粗网格上的数值解,将原问题用合适的方式进行对称化或线性化;再在细网格上求解相应的对称化或线性化问题。与直接在细网格上数值求解原问题相比,两层网格方法减少了计算量,大幅提高了算法效率。该方法最初由许进超提出,他在文献[11-13]中,通过求解非对称不定以及非线性椭圆问题,引入粗细两个子空间进行离散,构造了椭圆型问题有限元的一系列两层网格算法。几乎在同一时期,黄云清等在文献[14]中,研究了非线性奇异两点边值问题的多层迭代校正算法的收敛性误差估计与逼近解的渐近展开。金继承等在文献[15]中,首次将两层网格方法运用到求解一类耦合的偏微分方程组,构造了解耦的有限元两层网格算法,并进行了误差估计。

后来两层网格有限元方法被应用到线性和非线性薛定谔方程,具体见文献[16-19]。文献[18]针对一类二维依赖于时间的线性薛定谔方程,其空间方向是在三角形网格上采用线性元进行离散,而时间方向采用向后欧拉方法进行离散,得到一种全离散的两层网格有限元算法,并且进行了理论分析。本文基于已有研究,主要考虑空间方向在矩形网格上利用双线性元进行离散,并通过数值算例验证了两层网格方法的高效性,且数值解在相同网格尺寸下比文献[18]中数值解的误差更小。

2 全离散有限元格式

记 $L^p(\Omega)$ 为标准的 Banach 空间,具有范数 $\|\cdot\|^p$, $W^{m,p}$ 为定义在区域 Ω 上的标准 Sobolev 空间,其范数定义为 $\|\phi\|_{m,p} = \sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha \phi\|_{L^p(\Omega)}$, 并且当 $p=2$ 时,记 $W^{m,p} = H^m$, 相应的范数简记为 $\|\cdot\|_m = \|\cdot\|_{m,2}$, $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{0,2}$ 。

对于任意两个复函数 $\phi(x, y), \psi(x, y) \in L^2(\Omega)$, 定义其内积为

$$(\phi, \psi) = \int_{\Omega} \phi(x, y) \bar{\psi}(x, y) dx dy,$$

对应的 L^2 范数为

$$\|\phi\| = \sqrt{(\phi, \phi)},$$

其中 $\bar{\psi}(x, y)$ 为函数 $\psi(x, y)$ 的共轭。

记任意复函数 $\phi(x, y) = \phi_r(x, y) + i\phi_i(x, y)$, 其中 $\phi_r(x, y)$ 和 $\phi_i(x, y)$ 分别为 $\phi(x, y)$ 的实部和虚部函数。

另外,定义复函数 $\phi(x, y)$ 的范数为

$$\|\phi\|_m = \sqrt{\|\phi_R\|_m^2 + \|\phi_I\|_m^2}.$$

将区域 Ω 拟一致剖分为矩形网格 Γ_h , 其中网格步长 $0 < h < 1$, 而 S^h 为 Γ_h 上相应的双线性有限元空间, S_R^h 为 S^h 的实部构成的有限元实空间。

记 $\tau = T/N$ 为区间 $[0, T]$ 上的时间步长, $t_j = j\tau$, $j=0, 1, \dots, N$ 为区间上的时间节点, 其中 N 为某个正整数。

为简单起见, 将函数 $\omega(x, y, t_j)$ 简记为 ω^j 。另外, 对任意函数序列 $\omega^j(x, y)$, $j=1, 2, \dots$, 利用向后欧拉方法定义其关于时间的差商, 为

$$\partial_t \omega^j = (\omega^j(x, y) - \omega^{j-1}(x, y)) / \tau.$$

那么, 问题 (1) 的全离散有限元解

$$U_h^n(x, y) \in S^h, \quad n=0, 1, \dots, N$$

可定义为满足

$$\begin{cases} i(\partial_t U_h^n, v_h) = (\nabla U_h^n, \nabla v_h) + (V U_h^n, v_h) + \\ \quad (f^n, v_h), \quad \forall v_h \in S^h; \\ U_h^0(x, y) = P_h u_0(x, y). \end{cases} \quad (2)$$

式中 $P_h u_0(x, y)$ 为 $u_0(x, y)$ 在 S^h 空间的椭圆投影^[18]。

因此, 类似文献 [18], 可得如下定理 1。

定理 1 设 $u(x, y, t)$ 为问题 (1) 的精确解, 函数序列 $U_h^n(x, y)$ 为满足问题 (2) 的全离散有限元解, 则有误差估计

$$\|u^n - U_h^n\|_1 \leq Ch + C\tau,$$

其中 C 为与 h 无关的任意常数。

在实际编程计算时, 需要将问题 (2) 按实部和虚部分开, 则可以写成如下等价的耦合方程组:

$$\begin{cases} (\partial_t U_{hR}^n, v_h) = (\nabla U_{hI}^n, \nabla v_h) + (V U_{hI}^n, v_h) + \\ \quad (f_I^n, v_h), \quad \forall v_h \in S_R^h, \\ (\partial_t U_{hI}^n, v_h) = -(\nabla U_{hR}^n, \nabla v_h) - (V U_{hR}^n, v_h) - \\ \quad (f_R^n, v_h), \quad \forall v_h \in S_R^h; \\ U_{hR}^0(x, y) = P_h u_{0R}(x, y), \\ U_{hI}^0(x, y) = P_h u_{0I}(x, y). \end{cases} \quad (3)$$

式中 $P_h u_{0R}(x, y)$ 、 $P_h u_{0I}(x, y)$ 分别为 $u_{0R}(x, y)$ 、 $u_{0I}(x, y)$ 在 S^h 空间的椭圆投影。

3 两层网格算法

将 Ω 拟一致剖分为矩形网格 Γ_H , 其网格尺寸 $H \gg h$, 而 S^H 为定义在 Γ_H 上的另一个有限元空间。利用向后 Euler 方法在时间方向离散, 构造问题 (1) 的一种全离散两网格有限元算法, 先在粗网格上对原问题进行求解, 然后在细网格上计算时利用粗网格上已算得的部分数值作为已知数据代入, 将薛定谔方程耦合的实部和虚部进行解耦, 从而简化为在细网格上

求解两个泊松方程。这样, 由于粗网格尺寸 $H \gg h$, 因此该算法比直接在细网格上求解原问题要简便很多, 将大大减少数值计算的时间。

算法具体步骤如下。

步骤 1 求函数序列 $\{u_h^n(x, y)\}_{n=1}^N \subset S^H \subset S^h$ 满足

$$\begin{cases} (\partial_t u_{hR}^n, v_H) = (\nabla u_{hI}^n, \nabla v_H) + (V u_{hI}^n, v_H) + \\ \quad (f_I^n, v_H), \quad \forall v_H \in S_R^H, \\ (\partial_t u_{hI}^n, v_H) = -(\nabla u_{hR}^n, \nabla v_H) - (V u_{hR}^n, v_H) - \\ \quad (f_R^n, v_H), \quad \forall v_H \in S_R^H; \\ u_{hR}^0(x, y) = P_h u_{0R}(x, y), \\ u_{hI}^0(x, y) = P_h u_{0I}(x, y). \end{cases} \quad (4)$$

步骤 2 求函数序列 $\{u_h^n(x, y)\}_{n=1}^N \subset S^h$ 满足

$$\begin{cases} (\nabla u_{hR}^n, \nabla v_h) = (\partial_t u_{hI}^n, v_h) - (V u_{hR}^n, v_h) - \\ \quad (f_R^n, v_h), \quad \forall v_h \in S_R^h, \\ (\nabla u_{hI}^n, \nabla v_h) = (\partial_t u_{hR}^n, v_h) - (V u_{hI}^n, v_h) - \\ \quad (f_I^n, v_h), \quad \forall v_h \in S_R^h; \\ u_{hR}^0(x, y) = P_h u_{0R}(x, y), \\ u_{hI}^0(x, y) = P_h u_{0I}(x, y). \end{cases} \quad (5)$$

因此, 类似文献 [18], 可得如下定理 2。

定理 2 设 $u(x, y, t)$ 为问题 (1) 的精确解, 函数序列 $u_h^n(x, y)$ 为两层网格算法中满足问题 (5) 的两层网格有限元解, 则有误差估计

$$\|u^n - u_h^n\|_1 \leq Ch + CH^2 + C\tau,$$

其中 C 为与 h 和 H 无关的任意常数。

4 数值实验

考虑如下二维依赖于时间的线性薛定谔方程

$$\begin{cases} i u_t(x, y, t) = -\Delta u(x, y, t) + \\ \quad u(x, y) + f(x, y, t), \quad \text{in } \Omega \times [0, T]; \\ u(x, y, t) = 0, \quad \text{on } \partial\Omega \times [0, T]; \\ u(x, y, 0) = i \sin(\pi(1+x)) \sin(\pi(1+y)), \quad \text{in } \Omega. \end{cases}$$

式中: $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$; $T=1$; 右端项函数 $f(x, y, t)$ 选择满足如下精确解^[18]

$$u(x, y, t) = 2t^4(1-x^2)(1-y^2) + ie \sin(\pi(1+x)) \sin(\pi(1+y)).$$

采用空间步长为 h 的均匀网格, 对区域 Ω 进行拟一致矩形网格剖分 Γ_h , 利用双线性有限元进行数值求解。取时间步长为 $\tau=10^{-3}$, 分别取细网格步长 $h=1/4, 1/16, 1/64$, 而 Γ_H 为粗网格步长 $H=\sqrt{h}$ 的矩形剖分。 U_h^n 为细网格 Γ_h 上, 时间方向利用向后欧拉格式, 空间方向利用有限元方法, 得到的标准有限元解;

u_h^n 为粗网格 Γ_H 和细网格 Γ_h 上, 利用两层网格算法得到的两层网格有限元解。分别计算精确解与标准有限元解的误差 $\|u^n - U_h^n\|_1$ 及与两层网格有限元解的误差 $\|u^n - u_h^n\|_1$ 。不同时刻的误差结果及 CPU 运行时间, 如表 1~3 所示。

表 1 数值解在 $t=0.2$ 时的误差及 CPU 运行时间

Table 1 Errors of numerical solutions and CPU running time with $t=0.2$

1/H	1/h	标准有限元法			两层网格有限元法		
		$\ u^n - U_h^n\ _1$		CPU 时间 /s	$\ u^n - u_h^n\ _1$		CPU 时间 /s
		取值	精度阶		取值	精度阶	
2	4	1.248 0e-0		0.71	1.505 6e-0		0.59
4	16	3.078 8e-1	1.01	3.97	3.935 8e-1	0.97	0.86
8	64	7.690 1e-2	1.00	77.18	9.900 8e-2	1.00	1.82

表 2 数值解在 $t=0.5$ 时的误差及 CPU 运行时间

Table 2 Errors of numerical solutions and CPU running time with $t=0.5$

1/H	1/h	标准有限元法			两层网格有限元法		
		$\ u^n - U_h^n\ _1$		CPU 时间 /s	$\ u^n - u_h^n\ _1$		CPU 时间 /s
		取值	精度阶		取值	精度阶	
2	4	1.668 0e-0		1.61	1.769 8e-0		1.35
4	16	4.154 5e-1	1.00	9.66	4.715 3e-1	0.95	1.83
8	64	1.038 4e-1	1.00	179.33	1.199 6e-1	0.99	3.88

表 3 数值解在 $t=1.0$ 时的误差及 CPU 运行时间

Table 3 Errors of numerical solutions and CPU running time with $t=1.0$

1/H	1/h	标准有限元法			两层网格有限元法		
		$\ u^n - U_h^n\ _1$		CPU 时间 /s	$\ u^n - u_h^n\ _1$		CPU 时间 /s
		取值	精度阶		取值	精度阶	
2	4	2.802 5e-0		3.31	2.841 7e-0		2.66
4	16	7.007 1e-1	1.00	20.53	7.495 3e-1	0.96	3.43
8	64	1.753 2e-1	1.00	416.81	1.908 5e-1	0.99	6.95

从表 1~3 中的数值结果可以得出, 当粗网格与细网格满足 $H=\sqrt{h}$ 时, 两层网格方法得到的数值解与标准有限元方法直接求得的有限元解在 H^1 范数下的误差非常接近, 且具有相同的最优阶 $O(h)$, 数值结果与理论结果相符合。与利用 Matlab 软件运算比较可知, 两层网格有限元算法的计算效率更高; 而且随着空间网格尺寸的增大, 计算规模较大时, 更加能够体现出两层网格方法的优势, 能大幅度节省 CPU 运行时间。

图 1 和图 2 分别给出了本文与文献 [18] 中的两层网格有限元解在不同时刻的误差比较, 从图中可以看出, 本文的两层网格有限元解在每一时刻都要更加精确。

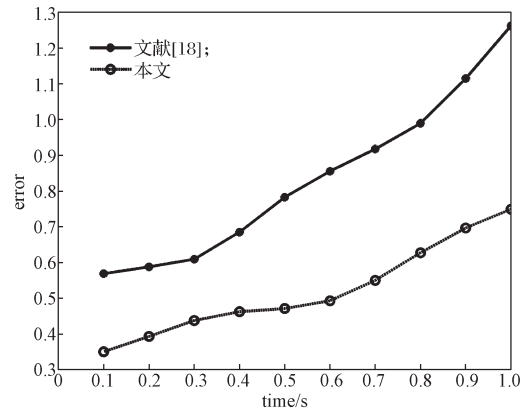


图 1 16 × 16 网格上两层网格解在不同时刻的误差
Fig. 1 Errors of two-grid solutions at different time levels on 16 × 16 meshes

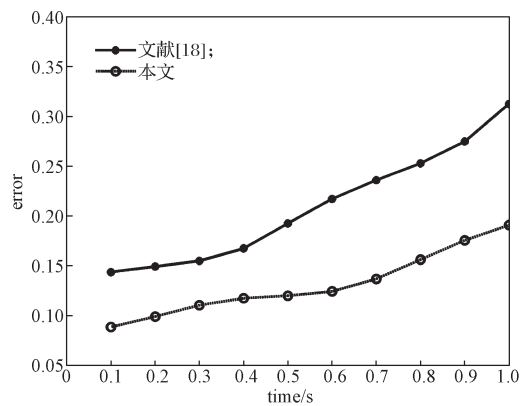


图 2 64 × 64 网格上两层网格解在不同时刻的误差
Fig. 2 Errors of two-grid solutions at different time levels on 64 × 64 meshes

5 结语

本文研究了两层网格方法在二维线性薛定谔方程中的应用, 对空间区域进行拟一致矩形网格剖分, 构建了一种向后欧拉全离散有限元格式的两层网格算法, 解释了两层网格算法在 H^1 求解线性薛定谔方程中的思想和原理, 给出了数值解在范数下的误差阶, 最后通过一个数值算例验证了该算法的可行性和高效性。

参考文献:

[1] AKRIVIS G D, DOUGALIS V A, KARAKASHIAN O A. On Fully Discrete Galerkin Methods of Second-Order Temporal Accuracy for the Nonlinear Schrödinger Equation[J]. Numerische Mathematik, 1991, 59(1): 31-53.

[2] JIN Jicheng, WU Xiaonan. Convergence of a Finite Element Scheme for the Two-Dimensional Time-Dependent Schrödinger Equation in a Long Strip[J].

- Journal of Computational and Applied Mathematics, 2010, 234(3): 777-793.
- [3] KARAKASHIAN O, MAKRIDAKIS C. A Space-Time Finite Element Method for the Nonlinear Schrödinger Equation: The Continuous Galerkin Method[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1999, 36(6): 1779-1807.
- [4] LEE H Y. Fully Discrete Methods for the Nonlinear Schrödinger Equation[J]. Computers and Mathematics with Applications, 1994, 28: 9-24.
- [5] LIN Qun, LIU Xiaoqi. Global Superconvergence Estimates of Finite Element Method for Schrödinger Equation[J]. Journal of Computational Mathematics, 1998, 16(6): 521-526.
- [6] TIAN Zhikun, CHEN Yanping, WANG Jianyun. Superconvergence Analysis of Bilinear Finite Element for the Nonlinear Schrödinger Equation on the Rectangular Mesh[J]. Advances in Applied Mathematics and Mechanics, 2018, 10(2): 468-484.
- [7] WANG Jianyun, CHEN Yanping. Superconvergence Analysis of Bi- k -Degree Rectangular Elements for Two-Dimensional Time-Dependent Schrödinger Equation[J]. Applied Mathematics and Mechanics, 2018, 39(9): 1353-1372.
- [8] WANG Jianyun, HUANG Yunqing. Fully Discrete Galerkin Finite Element Method for the Cubic Nonlinear Schrödinger Equation[J]. Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications, 2017, 10(3): 671-688.
- [9] WANG Jianyun, HUANG Yunqing, TIAN Zhikun, et al. Superconvergence Analysis of Finite Element Method for the Time-Dependent Schrödinger Equation[J]. Computers and Mathematics with Applications, 2016, 71(10): 1960-1972.
- [10] 王建云, 田智鲲. 定常非线性薛定谔方程的有限元方法超收敛估计[J]. 湘潭大学自然科学学报, 2018, 40(1): 24-26.
WANG Jianyun, TIAN Zhikun. Superconvergence Estimation of Finite Element Method for the Time-Independent Nonlinear Schrödinger Equation[J]. Natural Science Journal of Xiangtan University, 2018, 40(1): 24-26.
- [11] XU Jinchao. A New Class of Iterative Methods for Nonselfadjoint or Indefinite Problems[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1992, 29(2): 303-319.
- [12] XU Jinchao. A Novel Two-Grid Method for Semilinear Elliptic Equations[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 1994, 15(1): 231-237.
- [13] XU Jinchao. Two-Grid Discretization Techniques for Linear and Nonlinear PDEs[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1996, 33(5): 1759-1777.
- [14] 黄云清, 陈艳萍. 解非线性奇异两点边值问题有限元的一种分层迭代法[J]. 湘潭大学自然科学学报, 1994, 16(1): 23-26.
HUANG Yunqing, CHEN Yanping. A Multi-Level Iterative Method for Solving Finite Element Equations of Nonlinear Singular Two-Point Boundary Value Problems[J]. Natural Science Journal of Xiangtan University, 1994, 16(1): 23-26.
- [15] JIN Jicheng, SHU Shi, XU Jinchao. A Two-Grid Discretization Method for Decoupling Systems of Partial Differential Equations[J]. Mathematics of Computation, 2006, 75: 1617-1626.
- [16] JIN Jicheng, WEI Ning, ZHANG Hongmei. A Two-Grid Finite-Element Method for the Nonlinear Schrödinger Equation[J]. Journal of Computational Mathematics, 2015, 33(2): 146-157.
- [17] CHEN Huajie, LIU Fang, ZHOU Aihui. A Two-Scale Higher-Order Finite Element Discretization for Schrödinger Equation[J]. Journal of Computational Mathematics, 2009, 27(2/3): 315-337.
- [18] TIAN Zhikun, CHEN Yanping, HUANG Yunqing, et al. Two-Grid Method for the Two-Dimensional Time-Dependent Schrödinger Equation by the Finite Element Method[J]. Computers and Mathematics with Applications, 2019, 77(12): 3043-3053.
- [19] ZHANG Hongmei, JIN Jicheng, WANG Jianyun. Two-Grid Finite-Element Method for the Two-Dimensional Time-Dependent Schrödinger Equation[J]. Advances in Applied Mathematics and Mechanics, 2013, 5(2): 180-193.

(责任编辑: 邓光辉)