doi:10.3969/j.issn.1673-9833.2023.06.009

定常线性薛定谔方程的一种高精度数值解法

张红梅 [1]，尹江华 [2]

（1. 湖南工业大学 理学院，湖南 株洲 412007；2. 株洲欧科亿数控精密刀具股份有限公司，湖南 株洲 412008）

摘　要：针对定常线性薛定谔方程构建了一种高效、快速的数值解法——两网格有限体积元算法。将求解区域剖分成了粗、细两种网格，先在粗网格上求原问题的有限体积元解，再在细网格上求一个解耦问题的解。算例验证了该方法极大地提高了求解效率，理论上也证明了该解与原问题的有限体积元解有相同的收敛阶。

关键词：薛定谔方程；有限体积元算法；高精度；数值解法

中图分类号：O241.8　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：1673-9833(2023)06-0069-05

引文格式：张红梅，尹江华 . 定常线性薛定谔方程的一种高精度数值解法 [J]. 湖南工业大学学报，2023，37(6)：69-73.

A High-Precision Numerical Solution Method for the Linear Steady Schrödinger Equation

ZHANG Hongmei[1]，YIN Jianghua[2]

（1. College of Science，Hunan University of Technology，Zhuzhou Hunan 412007，China；
2. Zhuzhou OKE Precision Cutting Tools Co., Ltd.，Zhuzhou Hunan 412008，China）

Abstract：An highly efficient and fast numerical solution, i.e. two-grid finite volume element method, has been constructed for the solution of the steady linear Schrödinger equation. With the solution domain divided into coarse and fine grids, an initial acquisition of the finite volume element solution of the original problem can be achieved on the coarse grid, followed by the solution of a decoupling problem on the fine grid. The numerical example verifies the improved solving efficiency in the proposed scheme. It has also been theoretically proven that the solution is characterzied with the same convergence order as the finite volume element solution of the original problem.

Keywords：Schrödinger equation；finite volume element；high-precision；numerical solution method

1　研究背景

薛定谔方程是量子力学的基本方程之一，其地位与牛顿方程在经典力学中的地位相当。薛定谔方程已被广泛应用于理论物理、核物理、等离子物理、电磁波理论、化学、光学工程、地震学等领域之中。但对于这些实际应用中的大量复杂问题，用经典的解析方法和实验研究方法大多难以求解。随着计算机技术的快速发展，数值解法已成为其另一重要且有效的求解方法。薛定谔方程是耦合方程组，它还涉及复函数，采用经典的离散方法在单层网格下离散原方程所得的离散系统，通常规模较大，耗费大量的计算时间。因此，构建快速的数值解法十分必要。

有限体积元算法除了处理边界灵活、计算简便外，

收稿日期：2023-06-17

基金项目：湖南省自然科学省市联合基金资助项目（2021JJ50055）；湖南工业大学教学改革研究基金资助项目（2022YB19）；湖南省教育厅科学研究基金资助重点项目（23A0443）；湖南省教育改革基金资助项目（HNJG-20230754）

作者简介：张红梅（1976-），女，湖南邵阳人，湖南工业大学讲师，博士，主要研究方向为偏微分方程数值解，E-mail：1045562230@qq.com

还能够在一定程度上保持物理量的局部和全局守恒性。这些性质使得有限体积元算法成为一种重要方法。近年来，学者们分别采用不同的有限体积元算法求解椭圆方程 [1]、Navier-Stokes 方程 [2]、扩散方程 [3] 等。

在求非对称问题或非正定问题的有限元解时，提出了两网格离散算法 [4]，并将该算法应用到求解非线性边值问题 [5]、Navier-Stokes 问题 [6]、流体问题 [7] 等。随后，两网格有限元算法又被成功地应用于求解耦合方程组 [8]，并进行了一系列的推广与应用 [9-12]。在上述研究的基础上，C. S. Chien 等 [13] 采用两网格差分法求解非线性薛定谔方程组；Wu L.[5] 用两网格混合有限元算法求解非线性薛定谔方程组。

近年来，国内外许多学者将两网格离散思想与有限体积元算法相结合，用于求解椭圆方程定解问题 [14]、非线性双曲方程定解问题 [15]、抛物方程定解问题 [16] 等。本文将有限体积元算法计算的灵活性与两网格算法的快速性相结合，构建两网格有限体积元算法，用于求解耦合方程组——定常线性薛定谔方程边值问题：

$$\begin{cases}-\lambda\Delta\boldsymbol{u}(x)+\boldsymbol{V}(x)\boldsymbol{u}(x)=\boldsymbol{f}(x),\ \forall x\in\Omega;\\ \boldsymbol{u}(x)=0,\ \forall x\in\partial\Omega。\end{cases}\tag{1}$$

式中：$\Omega\subset\mathbf{R}^2$ 为一个凸多边形区域；

$\lambda\Delta$ 为动能算子，且 λ 为正实数；

$\boldsymbol{u}(x)$、$\boldsymbol{V}(x)$、$\boldsymbol{f}(x)$ 分别为未知函数、位势函数、右端项，均为复函数。

在实际计算时要将解的实部与虚部分开成如下等价的耦合方程组：

$$\begin{cases}-\lambda\Delta u_1(x)+V_1(x)u_1(x)-V_2(x)u_2(x)=f_1(x),\ \ \forall x\in\Omega;\\ -\lambda\Delta u_2(x)+V_1(x)u_2(x)+V_2(x)u_1(x)=f_2(x),\ \ \forall x\in\Omega;\\ u_j(x)=0(j=1,\ 2),\ \ \forall x\in\partial\Omega。\end{cases}\tag{2}$$

式中：$u_1(x)$、$u_2(x)$ 分别为 $\boldsymbol{u}(x)$ 的实部和虚部函数；

$V_1(x)$、$V_2(x)$ 分别为 $\boldsymbol{V}(x)$ 的实部和虚部函数；

$f_1(x)$、$f_2(x)$ 分别为 $\boldsymbol{f}(x)$ 的实部和虚部函数。

为了方便，假设

$$\begin{cases}\boldsymbol{f}(x)\in L^2(\Omega)\times L^2(\Omega);\\ \boldsymbol{V}(x)\in L^\infty(\Omega)\times L^\infty(\Omega);\\ V_i(x)\geqslant 0,\ \forall x\in\Omega,\ i=1,2。\end{cases}\tag{3}$$

2 线性有限体积元算法及误差估计

方程（2）的变分形式可描述为：

求 $\boldsymbol{u}\in H_0^1\times H_0^1$，满足

$$a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{w})=(\boldsymbol{f},\boldsymbol{w}),\ \forall\boldsymbol{w}\in H_0^1\times H_0^1。\tag{4}$$

式中：$a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{w})=(\lambda\nabla u_1,\nabla w_1)+(\lambda\nabla u_2,\nabla w_2)+$

$$(V_1u_1-V_2u_2,w_1)+(V_1u_2+V_2u_1,w_2);\tag{5}$$

$$(\boldsymbol{f},\boldsymbol{w})=(f_1,w_1)+(f_2,w_2)。\tag{6}$$

为了简便，本文不等式 $b\lesssim d$ 表示 $b\leqslant kd$，k 为常数因子。在假设条件（3）下，方程（4）的弱解有正则性估计 [8]

$$\|\boldsymbol{u}\|_2\lesssim\|\boldsymbol{f}\|。\tag{7}$$

设 $T^h=\{e_i\}$、Z_h 分别是形状正则的三角形网格剖分所有单元和剖分点的集合 [9]，h 为剖分步长。定义线性有限元空间

$$V_0^h=\left\{\varphi\in H_0^1(\Omega):\varphi|_e\in P_1(e),\ \forall e\in T^h\right\},$$

式中 $P_1(e)$ 表示三角形单元 e 上线性多项式全体。设复函数线性有限元空间为 $S_0^h:=\left(V_0^h\right)^2$。

变分问题（4）的线性有限元解 $\boldsymbol{u}_h$ 满足的变分问题可描述为求 $\boldsymbol{u}_h\in S_0^h$ 满足

$$a(\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{w}_h)=(\boldsymbol{f},\boldsymbol{w}_h),\ \forall\boldsymbol{w}_h\in S_0^h。\tag{8}$$

由式（4）和（8）可得正交关系

$$a(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{w}_h)=0,\ \forall\boldsymbol{w}_h\in S_0^h。$$

由文献 [8] 知，双线性形式 $a(\cdot,\cdot)$ 满足

$$a(\boldsymbol{w},\boldsymbol{w})\gtrsim\|\boldsymbol{w}\|_1,\ \forall\boldsymbol{w}\in\left(H_0^1(\Omega)\right)^2,\tag{9}$$

并在条件（3）成立的情况下，问题（8）的有限元解 $\boldsymbol{u}_h$ 满足

$$\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h\|_s\lesssim h^{2-s}\|\boldsymbol{u}\|_2,\ \ s=0,\ 1。\tag{10}$$

$\forall x_p\in Z_h$，以剖分点 x_p 为顶点的各三角形单元 e 的重心与过顶点 x_p 的单元边界线段中点的连线构成一个控制体 b_p，控制体也称为对偶单元 [11]。所有对偶单元的集合记为 B^h，称为三角形剖分 T^h 的重心对偶剖分。定义与对偶剖分 B^h 有关的函数空间

$$V_B=\left\{\varphi\in L^\infty(\Omega):\varphi\,|\,b_p=K,\ \forall b_p\in B^h\right\}。$$

设 $C\left(\bar{\Omega}\right)$ 是定义在 $\bar{\Omega}$ 上的连续函数集，$\forall\varphi(x)\in C\left(\bar{\Omega}\right)$ 定义算子 $\mathrm{I}_h:C\left(\bar{\Omega}\right)\to V_B$ 满足

$$\mathrm{I}_h\varphi(x)=\begin{cases}\varphi(x_p),\ \forall x\in b_p\subset B^h;\\ 0,\ 其它。\end{cases}$$

由文献 [1] 可知算子 I_h 满足引理 1。

引理 1 设 $e\in T^h$，如果 $\varphi(x)\in V_0^h$，$q\geqslant 1$，恒有

$$\int_e(\varphi(x)-\mathrm{I}_h\varphi(x))\mathrm{d}x=0,\tag{11}$$

$$\|\varphi(x)-\mathrm{I}_h\varphi(x)\|_{0,q,e}\lesssim h_e|\varphi(x)|_{1,q,e}。\tag{12}$$

为简化方程组（2）的计算，将方程组（2）的前

两式在控制体 b_p 上积分，并利用 Green 公式可得

$$-\int_{\partial b_p}\lambda\frac{\partial u_1}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s+\int_{b_p}\left(V_1u_1-V_2u_2\right)\mathrm{d}x=\int_{b_p}f_1\mathrm{d}x,\ \forall b_p\in B^h,$$

$$-\int_{\partial b_p}\lambda\frac{\partial u_2}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s+\int_{b_p}\left(V_1u_2+V_2u_1\right)\mathrm{d}x=\int_{b_p}f_2\mathrm{d}x,\ \forall b_p\in B^h。$$

式中 $\boldsymbol{n}$ 为控制体边界的单位外法向量。

对上两式等号左边第二项进行近似计算，即控制体 b_p 上的积分，被积分函数 $u_i(x)$ 取近似值 $u_i(b_p)$, i=1, 2，进行计算，得

$$-\int_{\partial b_p}\lambda\frac{\partial u_1}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s+u_1^h(x_p)\int_{b_p}V_1\mathrm{d}x-u_2^h(x_p)\int_{b_p}V_2\mathrm{d}x=\int_{b_p}f_1\mathrm{d}x,$$

$$-\int_{\partial b_p}\lambda\frac{\partial u_2}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s+u_1^h(x_p)\int_{b_p}V_2\mathrm{d}x+u_2^h(x_p)\int_{b_p}V_1\mathrm{d}x=\int_{b_p}f_2\mathrm{d}x。$$

对 $\forall w_1,w_2\in V_0^h$，将上面两个方程两边分别乘以 I_hw_1 和 I_hw_2，并对 b_p 求和，则有

$$-\sum_{x_p\in Z_h}\int_{\partial b_p}\lambda\frac{\partial u_1^h}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{I}_hw_1\mathrm{d}s+\sum_{x_p\in Z_h}u_1^h(x_p)\mathrm{I}_hw_1\int_{b_p}V_1\mathrm{d}x-\sum_{x_p\in Z_h}u_2^h(x_p)\mathrm{I}_hw_1\int_{b_p}V_2\mathrm{d}x=\sum_{x_p\in Z_h}\int_{b_p}f_1\mathrm{I}_hw_1\mathrm{d}x,\tag{13}$$

$$-\sum_{x_p\in Z_h}\int_{\partial b_p}\lambda\frac{\partial u_2^h}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{I}_hw_2\mathrm{d}s+\sum_{x_p\in Z_h}u_1^h(x_p)\mathrm{I}_hw_2\int_{b_p}V_2\mathrm{d}x+\sum_{x_p\in Z_h}u_2^h(x_p)\mathrm{I}_hw_2\int_{b_p}V_1\mathrm{d}x=\sum_{x_p\in Z_h}\int_{b_p}f_2\mathrm{I}_hw_2\mathrm{d}x。\tag{14}$$

为了对式（13）和（14）化简，先给出如下引理 2[2]。

引理 2　如果 $\boldsymbol{A}=(a_{jk})_{2\times 2}$ 满足 $a_{jk}\in V_B\ (1\leqslant j,\ k\leqslant 2)$，则对 $\forall w,v\in V_0^h$ 有

$$-\sum_{b_p\in B^h}\int_{\partial b_p}(\nabla w)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{An}\mathrm{I}_hv\mathrm{d}s=\int_{\Omega}(\nabla w)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\nabla v\mathrm{d}s。$$

利用引理 2 可得

$$-\sum_{x_p\in Z_h}\int_{\partial b_p}\lambda\frac{\partial u_k^h}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{I}_hw_k\mathrm{d}s=\left(\lambda\nabla u_k^h,\nabla w_k\right),\ k=1,\ 2。\tag{15}$$

由直接验证可知

$$\sum_{x_p\in Z_h}u_k^h(x_p)\mathrm{I}_hw_j\int_{b_p}V_l\mathrm{d}x=\left(V_l\mathrm{I}_hu_k^h,\mathrm{I}_hw_k\right),\ j,k=1,2,\tag{16}$$

式中 $V_l=\begin{cases}V_1,\ j=k；\\ V_2,\ j\neq k。\end{cases}$

将式（15）和（16）代入式（13）和（14），可得如下线性有限体积元变分问题：

求 $\boldsymbol{u}^h\in S_0^h$ 满足

$$a_h(\boldsymbol{u}^h,\boldsymbol{w})=(\boldsymbol{f},\boldsymbol{w})_h,\ \forall\boldsymbol{w}\in S_0^h。\tag{17}$$

式中：
$$\begin{aligned}a_h(\boldsymbol{u},\boldsymbol{w}):=&(\lambda\nabla u_1,\nabla w_1)+(\lambda\nabla u_2,\nabla w_2)+\\&(V_1\mathrm{I}_hu_1,\mathrm{I}_hw_1)-(V_2\mathrm{I}_hu_2,\mathrm{I}_hw_1)+\\&(V_2\mathrm{I}_hu_1,\mathrm{I}_hw_2)+(V_1\mathrm{I}_hu_2,\mathrm{I}_hw_2)；\end{aligned}\tag{18}$$

$$(\boldsymbol{f},\boldsymbol{w})_h:=(\boldsymbol{f},\mathrm{I}_h\boldsymbol{w}):=(f_1,\mathrm{I}_hw_1)+(f_2,\mathrm{I}_hw_2)。$$

定义范数 $\|\boldsymbol{w}\|_h^2=(\mathrm{I}_h\boldsymbol{w},\mathrm{I}_h\boldsymbol{w})$，$\forall\boldsymbol{w}\in S_0^h$，容易证得

$$\|\boldsymbol{w}\|_h\lesssim\|\boldsymbol{w}\|\lesssim\|\boldsymbol{w}\|_h,\ \forall\boldsymbol{w}\in S_0^h。\tag{19}$$

根据式（18）（19）以及 $\|\cdot\|_1$ 的定义容易得到引理 3。

引理 3　在假设条件（3）下，双线性泛函 $a_h(\cdot,\cdot)$ 满足强制性和有界性，即有

$$|a_h(\boldsymbol{u},w)|\lesssim\|\boldsymbol{u}\|_1\|\boldsymbol{w}\|_1,\ \forall\boldsymbol{u},\boldsymbol{w}\in S_0^h；\tag{20}$$

$$a_h(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})\gtrsim\|\boldsymbol{u}\|_1^2,\ \forall\boldsymbol{u}\in S_0^h。\tag{21}$$

由引理 3 和 Lax-Milgram 定理知，变分问题（17）的解存在且唯一。

根据文献 [9] 有引理 4。

引理 4　如果 $\forall g\in W^{1,p}(e)$，$g_e=\dfrac{1}{|e|}\int_e g\mathrm{d}x$，则 $\|g-g_e\|_{0,p,e}\lesssim h\|g\|_{1,p,e}$，$p\geqslant 1$。

下文中的 p、q 都满足 $\dfrac{1}{p}+\dfrac{1}{q}=1$，且 $p,q\geqslant 1$。

引理 5　如果方程（1）中的 $\boldsymbol{f}\in\left(W^{1,p}(\Omega)\right)^2$，则对任意 $\boldsymbol{w}\in S_0^h$ 有

$$\left|(\boldsymbol{f},\boldsymbol{w}-\mathrm{I}_h\boldsymbol{w})\right|\lesssim h^2\|\boldsymbol{f}\|_{1,p}\|\boldsymbol{w}\|_{1,q}。\tag{22}$$

证　$\forall e\in T^h$，记 $f_{j,e}:=\dfrac{1}{|e|}\int_e f_j\mathrm{d}x$，$j=1,\ 2$。由式（11）（12）和引理 4 可得

$$\begin{aligned}&\left|(\boldsymbol{f},\boldsymbol{w}-\mathrm{I}_h\boldsymbol{w})\right|=\\&\left|\sum_{e\in T^h}\int_e\left[(f_1-f_{1,e})(w_1-\mathrm{I}_hw_1)+(f_2-f_{2,e})(w_2-\mathrm{I}_hw_2)\right]\mathrm{d}x\right|\lesssim\\&\sum_{e\in T^h}\left(\|f_1-f_{1,e}\|_{0,p,e}\|w_1-\mathrm{I}_hw_1\|_{0,q,e}+\right.\\&\left.\|f_2-f_{2,e}\|_{0,p,e}\|w_2-\mathrm{I}_hw_2\|_{0,q,e}\right)\lesssim\\&h^2\|f\|_{1,p}\|w\|_{1,q}。\end{aligned}$$

引理 5 证毕。

根据文献 [2] 中的式（3.10）有

$$\left|(\alpha\mathrm{I}_hw,\mathrm{I}_hv)-(\alpha w,v)\right|\lesssim h^2\|w\|_{1,p}\|v\|_{1,q},\tag{23}$$

式中：$\alpha\in W^{1,\infty}$；$w,v\in V_0^h$。

引理 6　对任意 $\boldsymbol{w},\boldsymbol{v}\in S_0^h$，如果 $\boldsymbol{V}\in(W^{1,\infty})^2$，则

$$\left|a(\boldsymbol{w},\boldsymbol{v})-a_h(\boldsymbol{w},\boldsymbol{v})\right|\lesssim h^2\|\boldsymbol{w}\|_{1,p}\|\boldsymbol{v}\|_{1,q}。\tag{24}$$

证　将式（5）减去式（18），并由 $\boldsymbol{V}\in(W^{1,\infty})^2$ 可得

$$\left|a(\boldsymbol{w},\boldsymbol{v})-a_h(\boldsymbol{w},\boldsymbol{v})\right|\lesssim$$
$$\left|(V_1w_1,v_1)-(V_1\mathrm{I}_hw_1,\mathrm{I}_hv_1)\right|+$$
$$\left|(V_2w_2,v_1)-(V_2\mathrm{I}_hw_2,\mathrm{I}_hv_1)\right|+$$
$$\left|(V_1w_2,v_2)-(V_1\mathrm{I}_hw_2,\mathrm{I}_hv_2)\right|+$$
$$\left|(V_2w_1,v_2)-(V_2\mathrm{I}_hw_1,\mathrm{I}_hv_2)\right|。$$

利用上式和式（23）可得式（24）。引理 6 证毕。

引理 7 设 $\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{u}^h$ 分别为方程（2）和（17）的解，则有

$$\left\|\boldsymbol{u}^h\right\|_1\lesssim\left\|\boldsymbol{f}\right\|。\tag{25}$$

证 由式（21）、（17）和（19）得

$$\left\|\boldsymbol{u}^h\right\|_1^2\lesssim a_h(\boldsymbol{u}^h,\boldsymbol{u}^h)=(\boldsymbol{f},\boldsymbol{u}^h)_h\lesssim\left\|\boldsymbol{f}\right\|\left\|\mathrm{I}_h\boldsymbol{u}^h\right\|\lesssim\left\|\boldsymbol{f}\right\|\left\|\boldsymbol{u}^h\right\|。$$

引理 7 证毕。

引理 8 如果 $\boldsymbol{V}\in(W^{1,\infty})^2$，$\boldsymbol{f}\in(H^1)^2$，$\boldsymbol{u}_h$、$\boldsymbol{u}^h$ 分别为方程（8）和（17）的有限元和有限体积元解，则

$$\left|a(\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v})\right|\lesssim h^2\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1\left\|\boldsymbol{v}\right\|_1,\ \forall\boldsymbol{v}\in S_0^h,\tag{26}$$

因而有

$$\left\|\boldsymbol{u}_h-\boldsymbol{u}^h\right\|_1\lesssim h^2\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1。\tag{27}$$

证 由式（8）和（17）有

$$\left|a(\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v})\right|=\left|a(\boldsymbol{u}^h,\boldsymbol{v})-a(\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v})\right|=$$
$$\left|a(\boldsymbol{u}^h,\boldsymbol{v})-(\boldsymbol{f},\boldsymbol{v})\right|=\left|a(\boldsymbol{u}^h,\boldsymbol{v})-a_h(\boldsymbol{u}^h,\boldsymbol{v})+(\boldsymbol{f},\boldsymbol{v})_h-(\boldsymbol{f},\boldsymbol{v})\right|\lesssim$$
$$\left|a(\boldsymbol{u}^h,\ \boldsymbol{v})-a_h(\boldsymbol{u}^h,\boldsymbol{v})\right|+\left|(\boldsymbol{f},\boldsymbol{v})_h-(\boldsymbol{f},\boldsymbol{v})\right|。$$

当式（22）和（24）中 $p=q=2$ 时，再联合式（25）则有

$$\left|a(\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_h,\boldsymbol{v})\right|\lesssim h^2\left\|\boldsymbol{u}^h\right\|_1\left\|\boldsymbol{v}\right\|_1+h^2\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1\left\|\boldsymbol{v}\right\|_1\lesssim$$
$$h^2\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1\left\|\boldsymbol{v}\right\|_1。$$

在式（26）中，令 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_h$，再由式（9）可得式（27）。引理 8 证毕。

定理 1 如果 $\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{u}^h$ 分别为问题（2）和式（17）的解，在区域 Ω 内假设条件（3）成立，且 $\boldsymbol{V}\in(W^{1,\infty})^2$，$\boldsymbol{f}\in(H^1)^2$，则有

$$\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}^h\right\|_s\lesssim h^{2-s}\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1,\ s=0,\ 1。\tag{28}$$

证 由式（7）、（10）和（27）得

$$\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}^h\right\|_s\lesssim\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h\right\|_s+\left\|\boldsymbol{u}_h-\boldsymbol{u}^h\right\|_1\lesssim$$
$$h^{2-s}\left\|\boldsymbol{u}\right\|_2+h^2\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1\lesssim h^{2-s}\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1,\ s=0,\ 1。$$

定理 1 证毕。

3 两网格有限体积元算法及误差估计

为了简化式（18），将其拆成两部分并引入记号：

$$\tilde{a}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{w}):=(\lambda\nabla u_1,\nabla w_1)+(\lambda\nabla u_2,\nabla w_2),$$
$$\tilde{N}_h(\boldsymbol{u},\boldsymbol{w}):=(V_1u_1-V_2u_2,I_hw_1)+(V_1u_2+V_2u_1,I_hw_2)。$$

两网格有限体积元算法：

步聚 1（粗网格） 求 $\boldsymbol{u}^H\in S_0^H$，满足

$$\begin{cases}a_H(\boldsymbol{u}^H,\boldsymbol{w})=(\boldsymbol{f},\boldsymbol{w})_H,\ \forall\boldsymbol{w}\in S_0^H;\\ \boldsymbol{u}^H(x)=0,\ \forall x\in\partial\Omega。\end{cases}$$

步聚 2（细网格） 求 $\boldsymbol{u}_v^h\in S_0^h$，满足

$$\begin{cases}\tilde{a}\left(\boldsymbol{u}_v^h,\boldsymbol{w}\right)+\tilde{N}_H(\boldsymbol{u}^H,\boldsymbol{w})=(f,\boldsymbol{w})_h,\ \forall\boldsymbol{w}\in S_0^h;\\ \boldsymbol{u}_v^h(x)=0,\ \forall x\in\partial\Omega。\end{cases}\tag{29}$$

类似于式（21），在假设条件（3）下，双线性泛函 $\tilde{a}(\cdot,\cdot)$ 满足强制性

$$\tilde{a}_h(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})\gtrsim\left\|\boldsymbol{u}\right\|_1^2,\ \forall\boldsymbol{u}\in S_0^h。\tag{30}$$

定理 2 如果在区域 Ω 内假设条件（3）成立，且 $\boldsymbol{V}\in(W^{1,\infty})^2$，$\boldsymbol{u}\in\left(H_0^1\right)^2$，$\boldsymbol{f}\in(H^1)^2$，对两网格有限体积元算法的解有如下估计式

$$\left\|\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_v^h\right\|_1\lesssim(h+H^2)\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1,\tag{31}$$

因而有

$$\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_v^h\right\|_1\lesssim(h+H^2)\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1。$$

证 将式（17）减去式（29），再由式（18）得

$$\tilde{a}\left(\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_v^h,\boldsymbol{w}\right)=\left(V_2\mathrm{I}_hu_2^h-V_2u_2^H,\mathrm{I}_hw_1\right)-$$
$$\left(V_1\mathrm{I}_hu_1^h-V_1u_1^H,\mathrm{I}_hw_1\right)-\left(V_2\mathrm{I}_hu_1^h-V_2u_1^H,\mathrm{I}_hw_2\right)-$$
$$\left(V_1\mathrm{I}_hu_2^h-V_1u_2^H,\mathrm{I}_hw_2\right)。\tag{32}$$

由假设条件（3）及式（12）、（19）、（25）和（28）可得

$$\left|\left(V_2\mathrm{I}_hu_2^h-V_2u_2^H,\mathrm{I}_hw_1\right)\right|\lesssim$$
$$\left|(V_2\mathrm{I}_hu_2^h-V_2u_2^h,\mathrm{I}_hw_1)\right|+\left|(V_2u_2^h-V_2u_2^H,\mathrm{I}_hw_1)\right|\lesssim$$
$$\left(\left\|\mathrm{I}_hu_2^h-u_2^h\right\|+\left\|u_2^h-u_2^H\right\|\right)\left\|w\right\|\left\|V_2\right\|_{0,\infty}\lesssim$$
$$(h+H^2)\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1\left\|\boldsymbol{w}\right\|。\tag{33}$$

在式（32）中，令 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_v^h$，右端各项估计类似于式（33），再由式（30）得

$$\left\|\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_v^h\right\|_1^2\lesssim\left|\tilde{a}_h(\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_v^h,\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_v^h)\right|\lesssim(h+H^2)\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1\left\|\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_v^h\right\|,$$

即得式（31）。

再由式（28）和（31）得

$$\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_v^h\right\|_1\lesssim\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}^h\right\|_1+\left\|\boldsymbol{u}^h-\boldsymbol{u}_v^h\right\|_1\lesssim$$
$$h\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1+(h+H^2)\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1\lesssim(h+H^2)\left\|\boldsymbol{f}\right\|_1。$$

定理 2 证毕。

4　两网格有限体积元算法数值实验

算例　求解问题（2），其中：$\Omega=[0,1]\times[0,1]$；$V(x)=\dfrac{x_1^2+x_2^2}{2}+\mathrm{i}\dfrac{x_1^2+x_2^2}{2}$，i 为虚数单位；分别取 $\lambda=1$，$\lambda=100$；右端项 $\boldsymbol{f}=f_1+\mathrm{i}f_2$，式中：$f_1=(\pi^2-0.5)\sin(\pi x_1)\cdot\sin(\pi x_2)$，$f_2=(2\pi^2+1.5)\sin(\pi x_1)\sin(\pi x_2)$。

在对区域 Ω 进行形状正则三角形单元剖分的基础上，得到重心对偶剖分。为观察两网格有限体积元解的收敛性态，令 $h=H^2$，并分别取 $H_1=\dfrac{1}{4}$、$H_2=\dfrac{1}{8}$、$H_3=\dfrac{1}{16}$、$H_4=\dfrac{1}{32}$ 进行计算。

在 $t=10.0$ s 时刻，由本文所构造的两网格有限体积元解 $\boldsymbol{u}_v^h$，与文献 [8] 中算法 A1 计算的两网格有限元解 $\boldsymbol{u}_h^*$ 的误差对比及相关结果如表 1 和表 2 所示。

表 1　$\lambda=1$ 时两种算法的结果比较

Table 1　Comparison of results between the two algorithms with $\lambda=1$

参数	本文算法			文献 [8] 算法		
	$\lVert\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_v^h\rVert_1$	比值	CPU 用时 /s	$\lVert\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h^*\rVert_1$	比值	CPU 用时 /s
H_1	1.65E−1		0.03	1.65E−1		0.02
H_2	4.14E−2	3.99	0.28	4.14E−2	3.99	0.10
H_3	1.04E−2	3.98	4.24	1.04E−2	3.98	4.30
H_4	2.59E−3	4.02	140.88	2.59E−3	4.02	660.89

表 2　$\lambda=100$ 时两种算法的结果比较

Table 2　Comparison of results between the two algorithms with $\lambda=100$

参数	本文算法			文献 [8] 算法		
	$\lVert\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_v^h\rVert_1$	比值	CPU 用时 /s	$\lVert\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h^*\rVert_1$	比值	CPU 用时 /s
H_1	1.21E−2		0.04	1.21E−2		0.03
H_2	3.14E−3	3.85	0.31	3.14E−3	3.85	0.29
H_3	7.92E−4	3.96	6.35	7.29E−4	3.96	5.12
H_4	1.99E−4	3.98	188.96	1.99E−4	3.98	696.56

从表 1 和表 2 可知，$\lVert\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_v^h\rVert_1\approx O(H^2)\approx O(h)$，$\lVert\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h^*\rVert_1\approx O(H^2)\approx O(h)$，即在 H^1 范数下，两网格有限体积元解与两网格有限元解有相同的收敛阶，且达到最优收敛阶。但是当计算规模较大时，用两网格有限体积元算法计算，CPU 所用时间远少于两网格有限元算法的。

5　结语

薛定谔方程的实际应用比较广泛，方程的离散系统规模庞大。本文在已求出定常线性薛定谔方程两网格有限元解的基础上，重新构造了薛定谔方程的一种新的快速数值解法——两网格有限体积元算法。从理论上证明了该算法达到最优收敛阶，并用数值实验验证了该算法能节省大量的计算时间，极大地提高了求解效率。

参考文献：

[1]　WU H J，LI R H. Error Estimates for Finite Volume Element Methods for General Second-Order Elliptic Problems[J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations，2003，19(6)：693−708 .

[2]　CHOU S H，KWAK D Y，LI Q. L^p Error Estimates and Superconvergence for Covolume or Finite Volume Element Methods[J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations，2003，19(4)：463−486.

[3]　YANG H T，YU B Y，LI Y H，et al. Monotonicity Correction for Second Order Element Finite Volume Methods of Anisotropic Diffusion Problems[J]. Journal of Computational Physics，2022，449：110759.

[4]　XU J C. A New Class of Iterative Methods for Nonselfadjoint or Indefinite Problems[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis，1992，29(2)：303−319.

[5]　WU L. Two-Grid Mixed Finite-Element Methods for Nonlinear Schrödinger Equations[J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations，2012，28(1)：63−73.

[6]　HE Y N. Two-Level Method Based on Finite Element and Crank-Nicolson Extrapolation for the Time-Dependent Navier-Stokes Equations[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis，2003，41(4)：1263−1285.

[7]　CHEN F，CUI M，ZHOU C G. Numerical Analysis of Two-Dimensional Unsaturated Soil Water Flow Problems with Two-Grid Finite Element Methods[J]. Discrete and Continuous Dynamical Systems-B，2023，28(4)：2768−2788.

[8]　JIN J C，SHU S，XU J C. A Two-Grid Discretization Method for Decoupling Systems of Partial Differential Equations[J]. Mathematics of Computation，2006，75：1617−1626.

[9]　ZHANG H M，YIN J H，JIN J C. A Two-Grid Finite-Volume Method for the Schrödinger Equation[J]. Advances in Applied Mathematics and Mechanics，2021，13(1)：176−190.

[10]　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.

WANG Jianyun，TIAN Zhikun，ZHANG Dan. A Two-Grid Algorithm for Fully Discrete Finite Element Based on the Two-Dimensional Schrödinger Equation[J]. Journal of Hunan University of Technology，2020，34(1)：19−23.

（下转第 102 页）