

doi:10.3969/j.issn.1673-9833.2025.05.014

## 二维线性薛定谔方程的一种高效数值解法

王建云<sup>1</sup>, 钟子新<sup>1</sup>, 田智鲲<sup>2</sup>

(1. 湖南工业大学 理学院, 湖南 株洲 412007; 2. 湖南工程学院 计算科学与电子学院, 湖南 湘潭 411104)

**摘要:** 针对二维线性薛定谔方程, 构造了一种新的半离散有限元两网格算法。将原本在细网格上求解薛定谔方程的有限元解, 简化为先在粗网格上求解原方程的有限元解, 然后利用在粗网格上求得的数值解, 在细网格上将方程的实部和虚部进行解耦, 求解两个椭圆方程的有限元解。分析了两网格有限元解与精确解在  $H^1$  范数下的误差, 并进行了数值计算实验, 得到的数值结果与文献 [10] 中的误差具有相同的误差阶, 且在不同时刻的误差更小。

**关键词:** 两网格算法; 薛定谔方程; 有限元方法

**中图分类号:** O241.82

**文献标志码:** A

**文章编号:** 1673-9833(2025)05-0098-05

**引文格式:** 王建云, 钟子新, 田智鲲. 二维线性薛定谔方程的一种高效数值解法 [J]. 湖南工业大学学报, 2025, 39(5): 98-102.

## An Efficient Numerical Solution for the Two-Dimensional Linear Schrödinger Equation

WANG Jianyun<sup>1</sup>, ZHONG Zixin<sup>1</sup>, TIAN Zhikun<sup>2</sup>

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

2. School of Computational Science and Electronics, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan Hunan 411104, China)

**Abstract:** In view of the two-dimensional linear Schrödinger equation, a new semi-discrete finite element two-grid algorithm has thus been constructed. The finite element solution of the Schrödinger equation originally solved on a fine grid is simplified to first solve the finite element solution of the original equation on a coarse grid, followed by the adoption of the numerical solution obtained on the coarse grid to decouple the real and imaginary parts of the equation on the fine grid, thus solving the finite element solutions of two elliptical equations. An analysis has been made of the error between the two-grid finite element solution and the exact solution in the  $H^1$  norm, with numerical experiments conducted. The numerical results show that the error order remains the same as that in reference [10], with the error smaller at different times.

**Keywords:** two-grid algorithm; Schrödinger equation; finite element method

收稿日期: 2024-07-02

基金项目: 湖南省自然科学基金资助项目 (2025JJ70080); 湖南省普通高校教学改革基金资助项目 (HNJG-20230951); 湖南省教育厅科学研究基金资助重点项目 (24A0518, 21A0361)

作者简介: 王建云, 男, 湖南工业大学副教授, 博士, 硕士生导师, 主要研究方向为微分方程数值方法及应用,

E-mail: wjy8137@163.com

通信作者: 田智鲲, 女, 湖南工程学院副教授, 博士, 主要研究方向为偏微分方程数值方法及应用,

E-mail: tianzhikun@163.com

### 1 研究背景

在 20 世纪初, 经典的理论物理显现出局限性, 尤其是在描述微观系统的时候, 从而众多物理学家开始研究微观系统理论。薛定谔方程在这种背景下被提出, 并广泛应用于非线性光学、等离子体物理学、流体力学等领域。例如, 薛定谔方程可用于描述光孤子的数学模型, 而光孤子通信系统是光纤通信的前沿技术方向。目前, 高速且廉价的网络服务很大程度上依赖于光纤通信的贡献, 光纤通信已经成为整个通信网络的底层支柱。但是, 在很多实际问题中, 要找到薛定谔方程的精确解是一件比较困难的事情。因此, 研究薛定谔方程的数值解法在理论和实践中都具有重要的意义。

考虑如下二维线性薛定谔方程:

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

式中:  $\Delta$  为拉普拉斯算子;

$i$  为虚数单位;

$\Omega \subset R^2$  是一个具有光滑边界的凸多边形区域;

$u(x, t)$ 、 $u_0(x)$ 、 $f(x, t)$  为复函数;

$V(x)$  为非负有界的实函数。

本研究假设存在一个实数  $V_0 > 0$ , 使得

$$V(x) \leq V_0, \quad \forall x \in \Omega. \quad (2)$$

有限元方法是求解薛定谔方程数值解的重要方法之一, 目前利用有限元方法求解薛定谔方程有不少研究<sup>[1-5]</sup>。针对求解非对称椭圆问题提出的两网格方法<sup>[6-7]</sup>, 是一种高效的偏微分方程数值解法。两网格法的基本思想是先在粗网格上求解原复杂问题, 然后在细网格上求解时利用粗网格上的解将原问题进行简化, 从而求解一个相对简化的问题。文献[8]针对非线性抛物方程, 利用有限差分法构造了一种两网格算法, 并进行了误差分析。后来两网格方法也被应用于求解薛定谔方程<sup>[9-15]</sup>。文献[9]首次将两网格有限元方法应用于求解耦合的线性薛定谔方程。文献[10-11]针对二维线性薛定谔方程, 分别在三角形和矩形剖分的网格上, 构建了向后欧拉全离散有限元两网格算法。

本文基于文献[10]的基础上构造了一种新的半离散有限元两网格算法。该算法的主要思路是先在粗网格上求解原来的耦合方程, 接着在细网格上将方程的实部和虚部进行解耦, 求解关于实部和虚部的两个

椭圆方程。其优势在于保持计算误差精度的条件下能极大地节省计算时间。然后, 对两网格数值解进行误差估计, 得到  $H^1$  范数下两网格解与精确解的误差结果。最后通过数值算例验证了理论的正确性和算法的高效性, 当粗细网格步长满足一定条件时, 两网格数值解具最优误差阶。数值计算结果显示, 在不同时刻, 本半离散有限元的网格算法得到的数值解比文献[10]中方法所求得数值解的结果更精确。

### 2 半离散有限元算法

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

对于两个不同的复函数  $u(x)$ 、 $v(x) \in L^2(\Omega)$ , 可定义内积如下:

$$(u, v) = \int_{\Omega} u(x) \bar{v}(x) dx,$$

式中  $\bar{v}(x)$  是  $v(x)$  的共轭。

那么问题(1)的弱解  $u(x, t)$  可定义为如下形式: 对于任意的  $t \in (0, T]$ , 求一个复函数  $u(x, t) \in H_0^1(\Omega)$ , 使得

$$\begin{cases} i(u_t, v) = a(u, v) + (f, v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega); \\ u(x, 0) = u_0(x). \end{cases} \quad (3)$$

式中:

$$a(u, v) = (\nabla u, \nabla v) + (Vu, v).$$

设  $\Gamma_h$  是一个网格步长为  $0 < h < 1$  的三角形剖分,  $S^h \subset H_0^1(\Omega)$  是  $\Gamma_h$  上对应的线性有限元空间。对给定的任意复函数  $w(x, t) \in H_0^1(\Omega)$ , 它的椭圆投影算子可被定义为  $P_h w(x, t) \in S^h$ , 且满足

$$a(P_h w, v_h) = a(w, v_h), \quad v_h \in S^h. \quad (4)$$

则问题(1)的半离散有限元解  $u_h(x, t)$  可以定义为满足如下方程:

$$\begin{cases} i(u_{ht}, v_h) = a(u_h, v_h) + (f, v_h), \quad \forall v_h \in S^h; \\ u_h(x, 0) = P_h u_0(x). \end{cases} \quad (5)$$

式中  $P_h u_0(x) \in S^h$  为  $u_0(x)$  的椭圆投影。

**引理 1**<sup>[4]</sup> 若对于任意的  $t \in [0, T]$ , 有  $u(x, t)$  且  $u_t(x, t) \in H^2(\Omega)$ , 则椭圆投影  $P_h u_0(x) \in S^h$  有如下误差估计:

$$\|u - P_h u\|_s \leq Ch^{2-s} \|u\|_2, \quad s = 0, 1. \quad (6)$$

$$\|(u - P_h u)_t\|_s \leq Ch^{2-s} \|u_t\|_2, \quad s = 0, 1. \quad (7)$$

引理 2<sup>[5]</sup> 设  $u(x, t)$  和  $u_h(x, t)$  分别为式 (3) 和 (5) 的解, 并且  $u(x, t)$ 、 $u_h(x, t)$ 、 $u_{tt}(x, t) \in H^2(\Omega)$ , 则有

$$\|u_h - P_h u\|_s \leq Ch^2, \quad (8)$$

$$\|(u_h - P_h u)_t\|_s \leq Ch^2. \quad (9)$$

### 3 两网格算法

设  $\Gamma_H$  是  $\Omega$  上网格步长为  $H \gg h$  的拟一致三角形剖分,  $S^H \subset S^h$  是  $\Gamma_H$  上的线性有限元空间。接下来构造一个求解方程 (3) 的半离散有限元两网格算法。利用该算法, 在细网格上求解薛定谔方程可以简化为在粗网格上求解原问题以及在细网格上求解两个椭圆方程。

算法具体步骤如下:

步骤 1 在粗网格  $\Gamma_H$  上求  $u_H(x, t) \in S^H$  满足

$$\begin{cases} i(u_{Ht}, v_H) = a(u_H, v_H) + (f, v_H), \quad \forall v_H \in S^H; \\ u_H(x, 0) = P_H u_0(x). \end{cases} \quad (10)$$

步骤 2 在细网格  $\Gamma_h$  上求  $\tilde{u}_h(x, t) \in S^h$  满足

$$\begin{cases} (\nabla \tilde{u}_h, \nabla v_h) + (V \tilde{u}_h, v_h) = \\ i(u_H, v_h) - (f, v_h), \quad \forall v_h \in S^h; \\ \tilde{u}_h(x, 0) = P_h u_0(x). \end{cases} \quad (11)$$

定理 1 设  $u(x, t)$  是式 (3) 的解,  $\tilde{u}_h(x, t)$  满足式 (11) 的两网格有限元解, 则有

$$\|\tilde{u}_h - P_h u\| \leq Ch^2 + CH^2, \quad (12)$$

$$\|u - \tilde{u}_h\| \leq Ch + CH^2. \quad (13)$$

证明 由式 (3) 和 (11) 有

$$(\nabla(u - \tilde{u}_h), \nabla v_h) + (V(u - \tilde{u}_h), v_h) = i((u - u_H)_t, v_h). \quad (14)$$

令  $u - \tilde{u}_h = \rho - \xi$ ,

其中

$$\rho = u - P_h u, \quad \xi = \tilde{u}_h - P_h u. \quad (15)$$

根据式 (4) 和 (15) 有

$$a(\rho, v_h) = 0, \quad (16)$$

结合式 (14) 和 (16) 可得

$$(\nabla \xi, \nabla v_h) + (V \xi, v_h) = i((u_H - P_h u)_t, v_h) - i(\rho_t, v_h). \quad (17)$$

在式 (17) 中, 取  $v_h = \xi$ , 有

$$(\nabla \xi, \nabla \xi) + (V \xi, \xi) \leq \left| \left( (u_H - P_h u)_t, \xi \right) \right| + |(\rho_t, \xi)|, \quad (18)$$

根据式 (2) 和 (18) 可得

$$\|\nabla \xi\|^2 + V_0 \|\xi\|^2 \leq \left\| (u_H - P_h u)_t \right\| \|\xi\| + \|\rho_t\| \|\xi\|,$$

利用柯西不等式, 有

$$\|\nabla \xi\|^2 + C \|\xi\|^2 \leq C \left\| (u_H - P_h u)_t \right\|^2 + C \|\rho_t\|^2. \quad (19)$$

再由式 (7) 和 (9) 可得

$$\|(u - u_h)_t\| \leq \left\| (u - P_h u)_t \right\| + \left\| (u_h - P_h u)_t \right\| \leq Ch^2, \quad (20)$$

从而有

$$\|(u - u_H)_t\| \leq CH^2. \quad (21)$$

结合式 (7) (20) (21) 可得

$$\begin{aligned} \|(u_H - P_h u)_t\| &\leq \left\| (u - P_h u)_t \right\| + \left\| (u - u_H)_t \right\| + \\ \|(u - u_H)_t\| &\leq Ch^2 + CH^2. \end{aligned} \quad (22)$$

根据式 (7) (19) (22) 可得

$$\|\xi\|^2 \leq Ch^4 + CH^4,$$

因此

$$\|\xi\| \leq Ch^2 + CH^2.$$

即式 (12) 得证, 而式 (13) 可由式 (6) 和 (12) 得到。

### 4 数值计算

本节采用数值实验验证两网格算法的高效性。在数值实验中, 使用 Matlab 2022a 进行计算, 计算机配置为 Intel Core i9-11900H, 16 GB RAM 以及 2.50 GHz CPU。

考虑如下线性薛定谔方程<sup>[10]</sup>:

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

式中:  $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$ ;  $f(x, t)$  是一个满足如下精确解的右端项函数,

$$u(x_1, x_2, t) = 2t^4 (1 - x_1^2)(1 - x_2^2) + ie^t \sin(\pi(1 + x_1)) \sin(\pi(1 + x_2)).$$

将区域  $\Omega$  分别进行拟一致三角剖分  $\Gamma_H$  和  $\Gamma_h$ , 时间方向利用向后欧拉格式, 空间方向利用线性有限元。接下来给出全离散两网格有限元格式, 由于在实际计算时, 需要将方程的实部和虚部分开。记任意的复函数  $\phi(x, y) = \phi_R(x, y) + i\phi_I(x, y)$ , 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。则两网格算法可以写成如下等价形式。

步骤 1 在粗网格  $\Gamma_H$ , 令  $u_H(x, t) \in S^H$  满足

$$\begin{cases} (\partial_t u_{HR}^n, v_H) = (\nabla u_{H1}^n, \nabla v_H) + (Vu_{H1}^n, v_H) + (f_1^n, v_H), \quad \forall v_H \in S_R^H; \\ (\partial_t u_{HR}^n, v_H) = -(\nabla u_{HR}^n, \nabla v_H) - (Vu_{HR}^n, v_H) - (f_R^n, v_H), \quad \forall v_H \in S_R^H; \\ u_{HR}^0(x) = P_h u_{0R}(x); \\ u_{H1}^0(x) = P_h u_{01}(x). \end{cases}$$

步骤 2 在细网格  $\Gamma_h$ , 找到  $\tilde{u}_h(x, t) \in S^h$  满足

$$\begin{cases} (\nabla \tilde{u}_{h1}^n, \nabla v_h) + (V\tilde{u}_{h1}^n, v_h) = (\partial_t u_{HR}^n, v_h) - (f_1^n, v_h), \quad \forall v_h \in S_h^h; \\ (\nabla \tilde{u}_{hR}^n, \nabla v_h) + (V\tilde{u}_{hR}^n, v_h) = -(\partial_t u_{HR}^n, v_h) - (f_R^n, v_h), \quad \forall v_h \in S_h^h; \\ \tilde{u}_{hR}^0(x) = P_h u_{0R}(x); \\ \tilde{u}_{h1}^0(x) = P_h u_{01}(x). \end{cases}$$

为了观察数值分析结果, 取时间步长  $\tau=10^{-3}$ , 令  $h=H^2$ , 并分别取空间粗网格步长  $H_1=1/2$ 、 $H_2=1/4$ 、 $H_3=1/8$  进行计算, 得到了不同时刻两网格有限元解与精确解的误差  $\|u^n - \tilde{u}_h^n\|_1$ , 以及文献 [10] 中的方法求解的误差  $\|u^n - \hat{u}_h^n\|_1$ , 如表 1~3 所示。

表 1 两网格解在  $t=0.1$  时的误差

Table 1 Error of two-grid solutions with  $t=0.1$

参数	本文算法		文献 [10] 算法	
	$\ u^n - \tilde{u}_h^n\ _1$	比值	$\ u^n - \hat{u}_h^n\ _1$	比值
$H_1$	2.004 0E+0		2.099 8E+0	
$H_2$	5.432 8E-1	3.688	5.691 4E-1	3.689
$H_3$	1.370 4E-1	3.964	1.435 8E-1	3.963

表 2 两网格解在  $t=0.5$  时的误差

Table 2 Error of two-grid solutions with  $t=0.5$

参数	本文算法		文献 [10] 算法	
	$\ u^n - \tilde{u}_h^n\ _1$	比值	$\ u^n - \hat{u}_h^n\ _1$	比值
$H_1$	2.836 0E+0		2.897 4E+0	
$H_2$	7.397 7E-1	3.833	7.829 5E-1	3.700
$H_3$	1.847 1E-1	4.005	1.926 1E-1	4.064

表 3 两网格解在  $t=1.0$  时的误差

Table 3 Error of two-grid solutions with  $t=1.0$

参数	本文算法		文献 [10] 算法	
	$\ u^n - \tilde{u}_h^n\ _1$	比值	$\ u^n - \hat{u}_h^n\ _1$	比值
$H_1$	4.722 2E+0		4.731 7E+0	
$H_2$	1.221 4E+0	3.866	1.262 6E+0	3.747
$H_3$	3.106 2E-1	3.932	3.125 8E-1	4.039

对比分析表 1~3 中的误差数值结果可知, 当粗、细网格的步长满足  $H=O(h^{1/2})$  时, 本文与文献 [10] 中的两网格有限元解一样, 在  $H^1$  范数下均可以达到标准有限元解相同的最优误差阶  $O(h)$ 。而且, 本算法比标准有限元算法节约了较大的计算工作量, 例如在  $H_3=1/8$  时, 在每一时间层上, 标准有限元方法要在细网格上计算原耦合方程, 即要计算一个 32 768 阶线性方程组。而本算法只要先在粗网格上计算原耦合方程, 即计算一个 512 阶线性方程组, 然后在细网格上计算解耦的两个方程, 即计算两个 16 384 阶线性方程组。显然计算工作量要比标准有限元方法小得多, 而且, 随着网格的不断加密, 这种优势更加明显。图 1~3 分别给出了在细网格  $h=1/4, 1/16, 1/64$  上, 本算法与文献 [10] 中的两网格有限元解在不同时刻的误差比较, 从图中可以看出, 本文的半离散两网格有限元解在每一时刻的误差都更小一些。

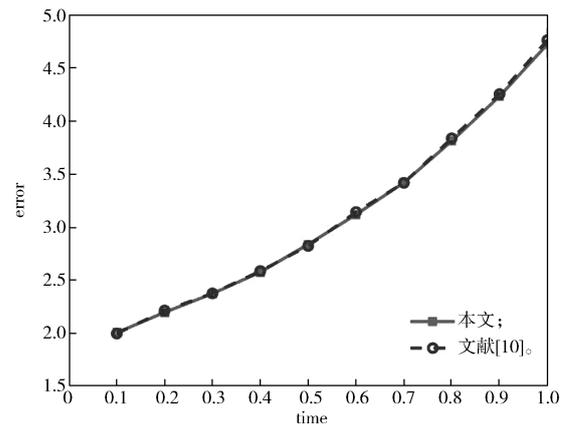


图 1  $h=1/4$  网格上两网格解在不同时刻的误差

Fig. 1 Error of two-grid solutions at different time points on meshes with  $h=1/4$

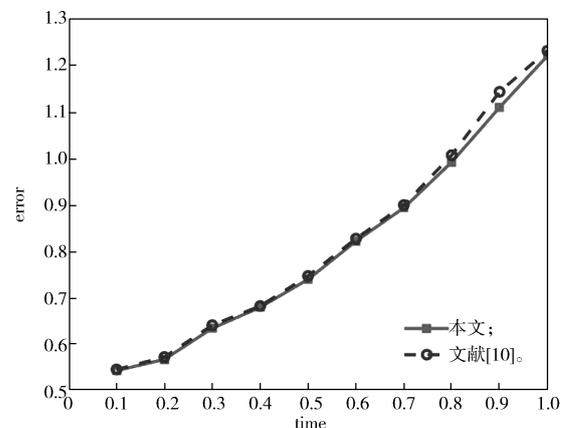


图 2  $h=1/16$  网格上两网格解在不同时刻的误差

Fig. 2 Error of two-grid solutions at different time points on meshes with  $h=1/16$

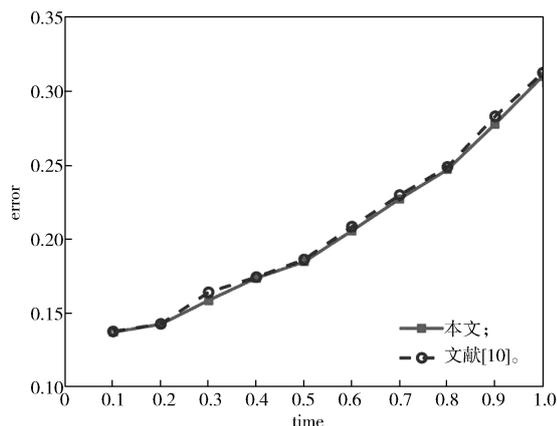


图3  $h=1/64$  网格上两网格解在不同时刻的误差

Fig. 3 Error of two-grid solutions at different time points on meshes with  $h=1/64$

## 5 结语

本文研究了求解薛定谔方程的一种高效数值解法。在拟一致三角形剖分下得到半离散有限元格式，构建了一种新的两网格算法并进行了误差分析，给出了两网格有限元解在  $H^1$  范数下的误差结果。最后用一个数值算例验证了理论结果的正确性及两网格算法的高效性。

### 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] 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.
- [3] LEE H Y. Fully Discrete Methods for the Nonlinear Schrödinger Equation[J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 1994, 28(6): 9-24.
- [4] TIAN Z K, CHEN Y P, WANG J Y. 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.
- [5] WANG J Y, CHEN Y P. 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.
- [6] 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.
- [7] XU J C. A Novel Two-Grid Method for Semilinear Elliptic Equations[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1994, 15(1): 231-237.
- [8] DAWSON C N, WHEELER M F, WOODWARD C S. A Two-Grid Finite Difference Scheme for Nonlinear Parabolic Equations[J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1998, 35(2): 435-452.
- [9] 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.
- [10] TIAN Z K, CHEN Y P, HUANG Y Q, et al. Two-Grid Method for the Two-Dimensional Time-Dependent Schrödinger Equation by the Finite Element Method[J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 2019, 77(12): 3043-3053.
- [11] 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.
- [12] 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, 102.  
ZHANG Hongmei, YIN Jianghua. A High-Precision Numerical Solution Method for the Linear Steady Schrödinger Equation[J]. *Journal of Hunan University of Technology*, 2023, 37(6): 69-73, 102.
- [13] CHIEN C S, HUANG H T, JENG B W, et al. Two-Grid Discretization Schemes for Nonlinear Schrödinger Equations[J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2008, 214(2): 549-571.
- [14] CHEN H J, LIU F, ZHOU A H. A Two-Scale Higher-Order Finite Element Discretization for Schrödinger Equation[J]. *Journal of Computational Mathematics*, 2009, 27(2): 315-337.
- [15] WU L. Two-Grid Mixed Finite-Element Methods for Nonlinear Schrödinger Equations[J]. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 2012, 28(1): 63-73.

(责任编辑: 姜利民)