

有限差分 - 配点法求解Schrödinger方程

孙浩然, 黄思雨*, 周铭扬, 李依伦

华侨大学数学科学学院, 福建 泉州

收稿日期: 2022年4月27日; 录用日期: 2022年5月21日; 发布日期: 2022年5月31日

摘要

本文将重心插值配点法结合Crank-Nicolson差分格式求解线性Schrödinger方程。首先, 对方程中的空间方向上采用重心插值Chebyshev配点格式进行离散, 时间方向采用Crank-Nicolson差分格式, 从而导出对应的代数方程组。最后, 数值算例验证该计算格式具有高精度性, 并且满足质量和能量守恒性。

关键词

重心插值配点格式, 线性Schrödinger方程, Crank-Nicolson差分格式, 质量和能量守恒

Finite Difference-Collocation Method for the Schrödinger Equation

Haoran Sun, Siyu Huang*, Mingyang Zhou, Yilun Li

School of Mathematical Sciences, Huaqiao University, Quanzhou Fujian

Received: Apr. 27th, 2022; accepted: May 21st, 2022; published: May 31st, 2022

Abstract

In this paper, the barycentric interpolation collocation method combined with Crank-Nicolson difference scheme is used to solve the linear Schrödinger equation. Firstly, the space direction is discretized by the Chebyshev collocation method of barycentric interpolation, and the time direction is discretized by the Crank-Nicolson difference scheme. Finally, numerical examples show that the numerical scheme has high precision and satisfies the conservation of mass and energy.

*通讯作者。

Keywords

Barycentric Interpolation Collocation Scheme, Linear Schrödinger Equation, Crank-Nicolson Scheme, The Conservation of Mass and Energy

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

1926年,奥地利物理学家薛定谔提出了著名的 Schrödinger 方程[1],用以解决微观世界的不确定性,揭示了微观物理世界物质运动的基本规律,就像牛顿定律在经典力学中所起的作用一样,是原子物理学中处理一切非相对论问题的有力工具。Schrödinger 方程的应用非常广泛,在原子、分子、固体物理、核物理、化学等领域中都大放异彩。可是 Schrödinger 方程通常难以找到解析解,必须通过数值解来分析。因此在过去的几十年里,对 Schrödinger 方程的数值计算研究已经引起了学者们的广泛关注。

近几年来,专家学者们针对 Schrödinger 方程的数值解进行了系统性的研究,例如:文献[2]主要介绍了通过分步傅里叶变换法对 Schrödinger 方程进行数值仿真。文献[3]提出了带有五次项的差分格式,并对数值格式的理论进行分析。文献[4]提出了一类非自共轭的 Schrödinger 方程的三层的差分格式,并证明了差分格式解的存在唯一性以及先验估计,最后数值实验证明了其差分格式在空间和时间上都达到了二阶收敛精度。在文献[5]中主要对带有波动算子的 Schrödinger 方程进行了研究,并提出几类守恒的差分格式。文献[6]首次提出了局部间断有限元法求解 Schrödinger 方程,并且证明了该方法的稳定性。文献[7]用有限差分显格式求解 Schrödinger 方程,并给出最大范数意义下的误差分析。文献[8]提出用有限差分显格式结合人工边界条件求解无界区域的 Schrödinger 方程,并给出算法的稳定性和收敛性分析。文献[9]用伪谱傅里叶方法结合分裂步求解光纤中的 Schrödinger 方程。文献[10]使用了一种 hr 自适应方法来求解带有三次 Schrödinger 方程。文献[11]使用了三次 B 样条 Galerkin 方法求解耦合 Schrödinger 方程的数值解。文献[12]利用积分因子法、对角阵技巧结合 FFT 算法求解高维带有阻尼薛定谔方程。

相较于显格式的有条件稳定,隐格式往往具有无条件稳定的特点,例如 Crank-Nicolson 格式。Patel 等[13]对于偏微分方程提出一种无条件稳定的紧致有限差分格式。文献[14]结合不同的差分格式对 Schrödinger 方程进行数值求解。文献[15]用四阶精度差分法解定态薛定谔方程,并用于求解几个常见势场中的定态方程。利用隐式格式在进行数值模拟时,可以取较大的时间步长,但是每一时间层需要求解线性或者非线性的代数方程组。

上述方法都是依赖网格剖分来求解 Schrödinger 方程,本文利用一种新型的无网格计算方法——重心插值配点格式[16]来求解这类问题,通过选取 Chebyshev 节点能有效克服数值不稳定现象,具有格式简单、精度高、程序简便、节点适应性好等特点。不同于以单元为基础的传统数值方法,重心插值配点格式是无网格配点法的一种,其没有对计算区域进行网格划分,而是采用节点的近似来构造近似函数,能有效避免网格重构带来的累积误差,其计算结果的精度更高。最近,文献[17]利用重心插值配点格式求解微分方程初边值问题,很多研究学者将该方法推广到求解各类微分方程中,比如平面弹性问题[18]、Fredholm 积分方程[19]、热传导方程[20]、Allen-Cahn 方程[21] [22] [23] [24]、二维时间分数阶电报方程[25]、Burgers 方程[26]、Cahn-Hilliard 方程[27]和 Black-Scholes 方程[28]等微分方程。如今,重心插值配点格式广泛地

被应用于弹性力学、微波技术及流体力学等多个方面。

因此, 本文希望在上述工作的研究基础上, 主要利用重心插值配点法设计线性 Schrödinger 方程的高精度数值算法格式, 通过数值算例验证格式的高精度和有效性。与前人工作比较, 我们的格式用较少的节点个数就可以达到高精度, 以进一步推动求解非线性 Schrödinger 方程的高精度数值算法的发展。

2. 线性 Schrödinger 方程的重心插值配点格式

2.1. 线性 Schrödinger 方程

线性 Schrödinger 方程的初值、边值问题考虑如下:

$$\begin{cases} i \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \Delta u(\mathbf{x}, t) + v(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, t) = 0, & (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T] \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega \end{cases} \quad (1)$$

边值条件为

$$u(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, t \in (0, T] \quad (2)$$

其中 i 是一个虚数, 满足 $i^2 = -1$, Ω 是 R^d ($d=1, 2$) 的有界域, $u(\mathbf{x}, t)$ 是需要我们求解的未知波函数, $v(\mathbf{x})$ 是势函数。

具有狄利克雷边界的 Schrödinger 方程保持了很多物理量。本文也将会验证格式的质量守恒和能量守恒:

$$M(t) = \iint_{\Omega} |u(\mathbf{x}, t)|^2 d\Omega = M(0), \quad t \in R^+ \quad (3)$$

以及

$$E(t) = -\frac{1}{2} \iint_{\Omega} |\nabla u(\mathbf{x}, t)|^2 d\Omega + \frac{v(\mathbf{x})}{2} \iint_{\Omega} |u(\mathbf{x}, t)|^2 d\Omega = E(0), \quad t \in R^+ \quad (4)$$

其中, $M(t)$ 和 $E(t)$ 分别代表不同时间的质量值和能量值。

2.2. 重心 Lagrange 插值

设有插值节点 x_j 和一组对应的实数 f_j ($j=0, 1, \dots, m$), 采用多项式插值, 则在次数不超过 m 的多项式空间可以找到唯一的插值多项式 $p(x)$, 满足 $p(x_j) = f_j, j=0, 1, \dots, m$, 写成 Lagrange 插值公式, 即

$$p(x) = \sum_{j=0}^m \gamma_j(x) f_j \quad (5)$$

其中 $\gamma_j(x) = \prod_{i=0, i \neq j}^m (x - x_i) / \prod_{i=0, i \neq j}^m (x_j - x_i)$, $j=0, 1, \dots, m$, 为 Lagrange 插值基函数, 满足性质

$$\gamma_j(x_i) = \delta_{ji} = \begin{cases} 1, & j=i, \\ 0, & j \neq i, \end{cases} \quad (i, j=0, 1, \dots, m) \quad (6)$$

以及

$$\sum_{j=0}^m \gamma_j(x) = 1 \quad (7)$$

令 $l(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_m)$, 定义重心权: $w_j = \frac{1}{\prod_{i=0, i \neq j}^m (x_j - x_i)}$, $j = 0, 1, \dots, m$

则插值基函数可以表示为

$$\gamma_j(x) = l(x) \frac{w_j}{x - x_j}, \quad j = 0, 1, \dots, m \quad (8)$$

将(8)代入(5), 得

$$p(x) = l(x) \sum_{j=0}^m \frac{w_j}{x - x_j} f_j \quad (9)$$

由(7)~(9)可得重心 Lagrange 插值公式

$$p(x) = \frac{\sum_{j=0}^m \frac{w_j}{x - x_j} f_j}{\sum_{j=0}^m \frac{w_j}{x - x_j}} \quad (10)$$

重心 Lagrange 插值对于等距节点是病态的, 通过选用服从密度比为 $(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}$ 的节点族, 可使其具有非常好的数值稳定性。满足这样条件的最简单的节点分布是 Chebyshev 点族, 因此本文采用第二类 Chebyshev 点族: $x_j = \cos\left(\frac{j}{m}\pi\right)$, $j = 0, 1, \dots, m$, 保证重心 Lagrange 插值的数值稳定性。

2.3. Schrödinger 方程的半离散数值解格式

下面对一维 Schrödinger 方程的半离散格式进行推导, 二维 Schrödinger 方程的推导类似。

对于 Schrödinger 方程的空间区域 $[a, b]$ 进行离散成为 $m+1$ 个第二类 Chebyshev 节点, 即

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_m = b$$

则区域上的 $m+1$ 个 Chebyshev 节点为 (x_i, t) , $i = 0, 1, \dots, m$, 将未知函数 $u(x, t)$ 在空间域节点 x_0, x_1, \dots, x_m 上的值记作

$$u(x_i, t) = u_i(t), \quad i = 0, 1, \dots, m \quad (11)$$

然后, 将未知函数 $u(x, t)$ 表示为在节点 x_0, x_1, \dots, x_m 上的重心型插值近似函数, 即

$$u(x, t) = \sum_{j=0}^m L_j(x) u_j(t) \quad (12)$$

其中, $L_j(x)$ 为此重心型插值的插值基函数。将式(12)代入方程, 并且让方程(12)在节点 x_0, x_1, \dots, x_m 上成立, 可得常微分方程组, 即

$$i \left(\sum_{j=0}^m L_j(x_i) \frac{du_j(t)}{dt} \right) + \sum_{j=0}^m L_j''(x_i) u_j(t) + V \left(\sum_{j=0}^m L_j(x_i) u_j(t) \right), \quad i = 0, 1, \dots, m \quad (13)$$

注意到 $L_j(x_i) = \delta_{ij}$, $L_j''(x_i) = \frac{d^2 L_j(x_i)}{dx^2} = C_{ij}^{(2)}$, $V(u) = v(x)u$

其中, $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, i=j \\ 0, i \neq j \end{cases}$, $C_{ij}^{(p)}$, $p=1,2$ 。为节点 x_0, x_1, \dots, x_m 上重心型插值 p 阶微分矩阵的元素。则方程(13)

可以记作下面的矩阵形式, 即

$$i \begin{pmatrix} \frac{du_0(t)}{dt} \\ \vdots \\ \frac{du_m(t)}{dt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} C_{00}^{(2)} & \dots & C_{0m}^{(2)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{m0}^{(2)} & \dots & C_{mm}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0(t) \\ \vdots \\ u_m(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(u_0(x,t)) \\ \vdots \\ V(u_m(x,t)) \end{pmatrix} = 0 \quad (14)$$

若令 $U = [u_0(t), u_1(t), \dots, u_m(t)]^T$

则方程(14)可以改写为以下矩阵形式:

$$i \frac{dU}{dt} + (C^{(2)} \otimes I_m)U + V(U) = 0 \quad (15)$$

上式中: 符号 \otimes 表示矩阵的 Kronecker 积, $C^{(2)}$ 为关于节点 x_0, x_1, \dots, x_m 的重心型插值 2 阶微分矩阵; I_m 分别为 m 阶单位矩阵。

类似一维问题的推导, 二维 Schrödinger 方程的半离散格式写成矩阵形式如下:

$$i \frac{dU}{dt} + (C^{(2)} \otimes I_m)U + (I_n \otimes D^{(2)})U + V(U) = 0 \quad (16)$$

其中 $C^{(2)}$ 为关于节点 x_0, x_1, \dots, x_m 的重心型插值 2 阶微分矩阵, $D^{(2)}$ 为关于节点 y_0, y_1, \dots, y_n 的重心型插值 2 阶微分矩阵。

2.4. Schrödinger 方程的有限差分配点全离散格式

为了得到非线性 Schrödinger 方程的全离散格式, 进一步对时间方向上用等距剖分成 $n+1$ 个节点, 故节点为 $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n = T$ 。

将未知函数 $u_i(t)$ 在时间域节点 t_0, t_1, \dots, t_n 上的值记作 $u_i(t_k) = u(x_i, t_k) = u_i^k, i=0,1,\dots,m; k=0,1,\dots,n$

在时间方向上采用 Crank-Nicolson 差分格式, 则可以改写出以下矩阵形式:

$$\frac{i}{\tau} (U_i^{k+1} - U_i^k) + \frac{1}{2} (C^{(2)} \otimes I_m) (U_i^{k+1} + U_i^k) + \frac{1}{2} (V_i^{k+1} + V_i^k) = 0 \quad (17)$$

其中 I_m 为 m 阶单位矩阵, $V(u) = v(x)u$ 从而得到 Schrödinger 方程的 Crank-Nicolson 差分 - 配点全离散数值格式。

那么, 方程(17)可以化简为如下格式:

$$\left[iI + \frac{\tau}{2} (C^{(2)} \otimes I_m) + \frac{\tau}{2} \text{diag}(v(x)) \right] U_i^{k+1} = F_i^k \quad (18)$$

其中, $F^k = \left[iI - \frac{\tau}{2} (C^{(2)} \otimes I_m) - \frac{\tau}{2} \text{diag}(v(x)) \right] U_i^k$ 。

最后进行迭代求解得出相应数值解。

同样类似一维方程的推导, 二维 Schrödinger 方程的全离散格式写成矩阵形式如下:

$$\left[iI + \frac{\tau}{2} (C^{(2)} \otimes I_m) + \frac{\tau}{2} (I_n \otimes D^{(2)}) + \frac{\tau}{2} \text{diag}(v(x)) \right] U_i^{k+1} = F_i^k \quad (19)$$

其中, $F^k = \left[iI - \frac{\tau}{2} (C^{(2)} \otimes I_m) - \frac{\tau}{2} (I_n \otimes D^{(2)}) - \frac{\tau}{2} \text{diag}(v(x)) \right] U_i^k$ 。

3. 数值算例

为验证利用重心插值配点格式求解 Schrödinger 方程的有效性和合理性, 下面我们通过四个算例对一维、二维 Schrödinger 方程运用重心插值配点格式, 对此格式的高精度和质量能量守恒进行验证。

为了方便, 定义如下的最大绝对误差和相对误差符号:

$$\text{最大绝对误差: } E_\infty = \max_{0 \leq i \leq N} |U_i - u_i|$$

$$\text{最大相对误差: } Er_\infty = \frac{\max_{0 \leq i \leq N} |U_i - u_i|}{\max_{0 \leq i \leq N} |u_i|}$$

其中, u_i 表示点 x_i 处的精确解, U_i 表示点 x_i 处的数值解。

3.1. 算例一

对于一维 Schrödinger 方程的边界条件为 $u(0, t) = u(1, t) = 0, 0 \leq t \leq 1$ 时函数 $v(x) = 0$ 。

初值条件为 $u(x, 0) = \sin(\pi x), 0 \leq x \leq 1$ 此问题的带右端项的精确解为 $u(x, t) = \cos t \sin(\pi x), 0 \leq x \leq 1$ 。

表 1 表明, 对于一维 Schrödinger 方程, 推导得出其在时间上是二阶精度的。

Table 1. The time convergence order of one-dimensional Schrödinger equation

表 1. 一维 Schrödinger 方程的时间收敛阶

τ	E_∞	Rate
1/10	4.61E-05	\
1/20	1.14E-05	2.02
1/40	2.82E-06	2.00
1/80	7.02E-07	2.01
1/160	1.75E-07	2.00

固定时间节点, 改变空间节点, 表 2 给出了二阶有限差分格式和重心插值配点格式所得的最大绝对误差和最大相对误差, 经过比较可以看出, 重心插值配点格式在空间上可以用较少的点便能达到更高的精度。比如, 当 $\tau = 10^{-4}$ 时, 重心 Lagrange 插值只需要在空间上取 8 个点就可以达到 10^{-5} 的精度, 但二阶有限差分格式需要取 256 个点才能达到这个精度。

下表中 $M+1$ 是为空间的节点数, N 取 10,000 等分。

Table 2. Maximum absolute error and maximum relative error of second-order finite difference scheme and barycentric interpolation collocation scheme ($\tau = 10^{-4}$)

表 2. 二阶有限差分格式和重心插值配点格式的最大绝对误差和最大相对误差 ($\tau = 10^{-4}$)

二阶有限差分格式			重心 Lagrange 插值配点格式		
M	E_∞	Er_∞	M	E_∞	Er_∞
16	8.1000E-03	6.1000E-03	4	5.1238E-01	5.0878E-03
32	2.0000E-03	1.5000E-03	6	3.5897E-03	2.9133E-05

Continued

64	5.0659E-04	3.8028E-04	8	1.7186E-05	1.2079E-07
128	1.2662E-04	9.5054E-05	10	7.0623E-08	5.4396E-10
256	3.1656E-05	2.3764E-05	12	5.7170E-08	2.7069E-10

通过下面的图1和图2我们可以看出,重心插值配点格式的数值解和解析解的等势线图像基本一致,这进一步说明该数值格式的稳定性。

下图为 $M=16, N=1000$ 时的图像:

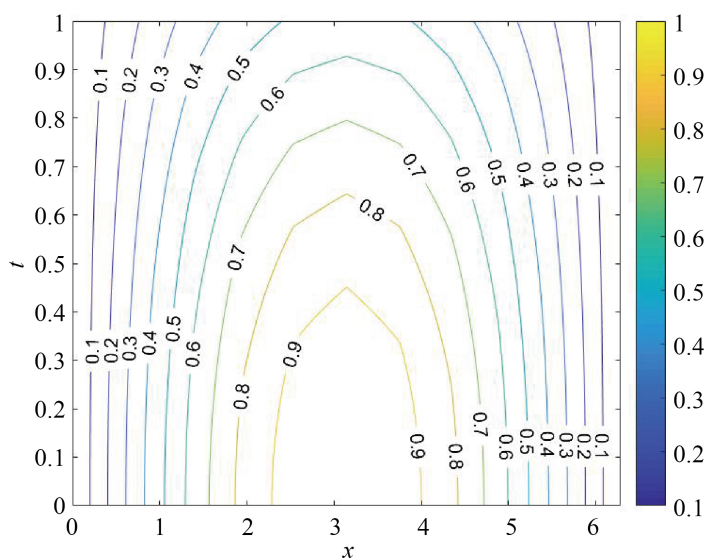


Figure 1. Analytical solution of example one
图 1. 算例一的解析解

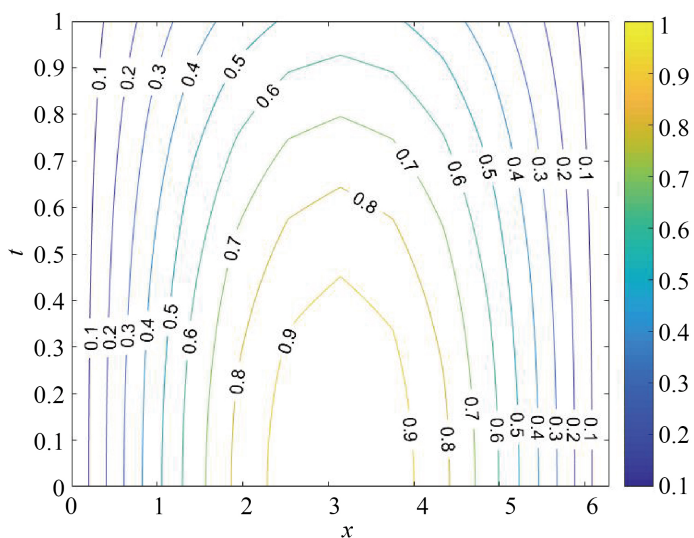


Figure 2. Example one numerical solution of barycentric interpolation collocation scheme
图 2. 算例一重心插值配点法格式数值解

为了进一步说明该格式优越性, 画出两种格式的绝对误差图。由图 3 和图 4 可知, 当时间剖分一致时, 重心插值配点格式在空间上取 16 个点的时候, 绝对误差精度就达到 10^{-9} , 而二阶有限差分格式在空间上取 128 个点的时候, 精度只有 10^{-5} 。

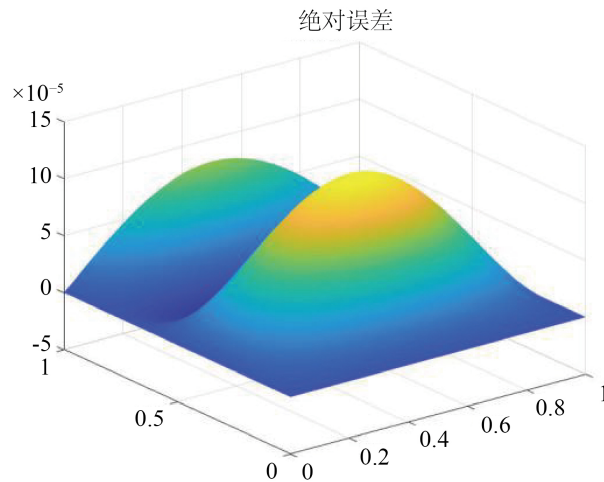


Figure 3. Example one absolute error figure of second-order finite difference scheme

图 3. 算例一二阶有限差分格式绝对误差图

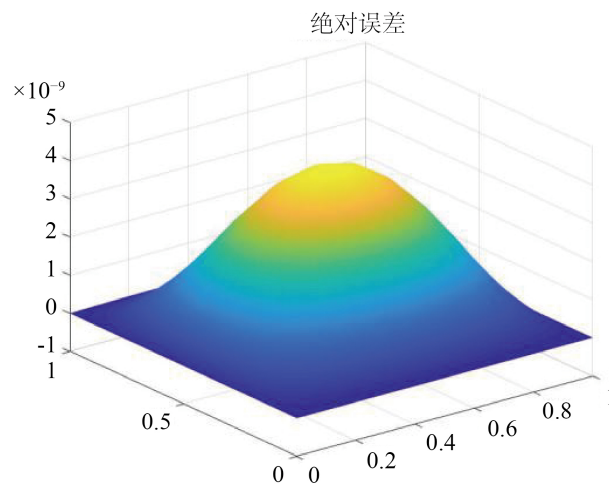


Figure 4. Example one absolute error figure of barycentric interpolation collocation scheme

图 4. 算例一重心插值配点格式绝对误差图

3.2. 算例二

Schrödinger 方程的边界条件为 $u(0,t) = u(1,t) = 0$, $0 \leq t \leq 1$ 时函数 $v(x) = \cos^2 x$ 。

初值条件为 $u(x,0) = \sin x$, $0 \leq x \leq 2\pi$, $0 \leq t \leq 1$ 此问题的精确解

$$u(x,t) = \exp\left(-\frac{3it}{2}\right) \sin x, 0 \leq x \leq 2\pi, 0 \leq t \leq 1。$$

进一步针对 Schrödinger 方程的离散质量和能量守恒性进行验证。选取空间步长为 $\tau = 10^{-4}$, 对应的计算区间为 $[0,1] \times [0,t]$, 实验结果以图形的方式给出。图 5 给出重心 Lagrange 插值格式对质量守恒量的

保持情况，图 6 给出重心 Lagrange 插值格式对能量守恒量的保持情况。从图像可以看出我们的配点格式很好地满足离散质量和能量守恒性。

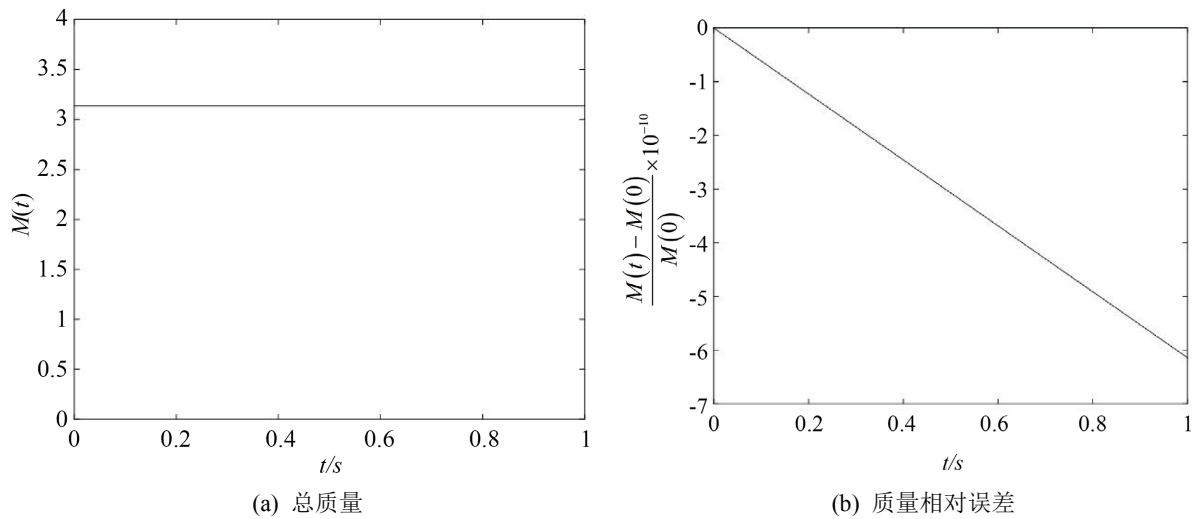


Figure 5. Example two mass conservation
图 5. 算例二质量守恒

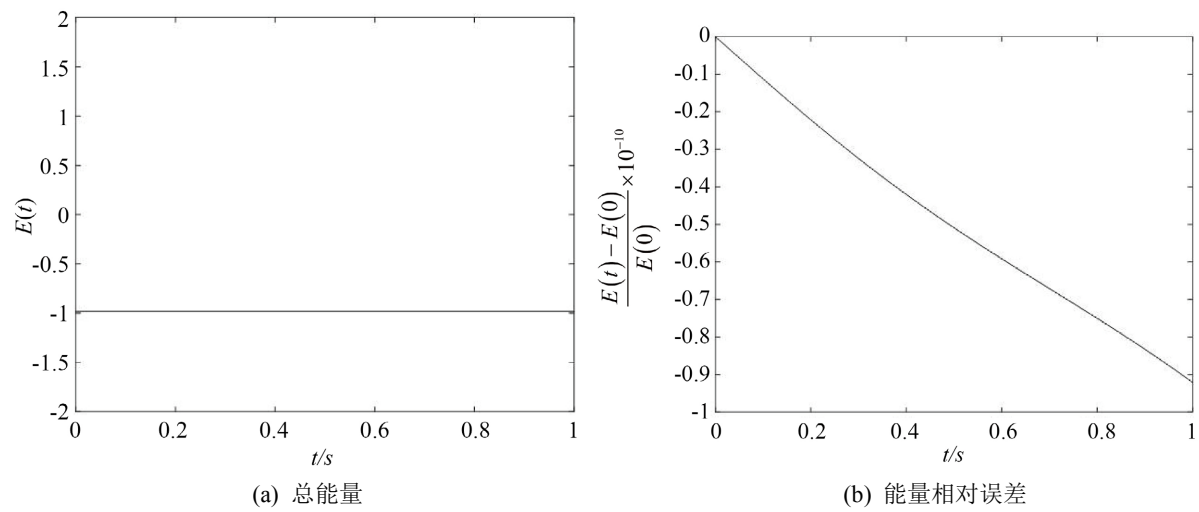


Figure 6. Example two energy conservation
图 6. 算例二能量守恒

3.3. 算例三

对于二维 Schrödinger 方程满足 $\Omega = [-1, 1]^2 \times (0, T]$ ，有

$$\begin{cases} i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f \\ u(x, y, 0) = \sin \pi x \sin \pi y \\ u(-1, y, t) = 0, u(1, y, t) = 0 \\ u(x, -1, t) = 0, u(x, 1, t) = 0 \end{cases}$$

其中

$$\begin{cases} u = \sin \pi x \sin \pi y \cos t \\ f = i \sin t \sin \pi x \sin \pi y - \pi^2 \cos t \sin \pi x \sin \pi y \end{cases}$$

下表中 $M+1$ 是为空间的节点数, N 取 1000 等分。

Table 3. Maximum absolute error and maximum relative error of second-order finite difference scheme and barycentric interpolation collocation scheme ($\tau = 10^{-3}$)

表 3. 二阶有限差分格式和重心插值配点格式的最大绝对误差和最大相对误差($\tau = 10^{-3}$)

二阶有限差分格式				重心 Lagrange 插值配点格式			
M	N	E_{∞}	Er_{∞}	M	N	E_{∞}	Er_{∞}
7	7	0.0093	0.0181	7	7	6.27E-04	0.001354
10	10	0.0054	0.0101	8	8	1.18E-04	2.50E-04
20	20	0.0015	0.0027	9	9	9.54E-06	1.77E-05
30	30	6.69E-04	0.0012	10	10	2.63E-06	5.26E-06
40	40	3.78E-04	7.00E-04	15	15	1.92E-07	3.55E-07

固定时间节点, 改变空间节点, 表 3 给出了二维 Schrödinger 方程采用二阶有限差分格式和重心插值配点格式所得的最大绝对误差和最大相对误差。与一维 Schrödinger 方程类似, 重心插值配点格式在空间上可以用较少的点便能达到更高的精度。比如, 当 $\tau = 10^{-3}$ 时, 重心 Lagrange 插值只需要在空间上取 8 个点就可以达到 10^{-4} 的精度, 但二阶有限差分格式需要取 40 个点才能达到这个精度。

表 4 可知, 对于二维 Schrödinger 方程, 推导得出其在时间上是二阶精度的。

Table 4. The time convergence order of two-dimensional Schrödinger equation

表 4. 二维 Schrödinger 方程的时间收敛阶

τ	E_{∞}	Rate
1/16	4.61E-05	\
1/32	1.14E-05	2.02
1/64	2.82E-06	2.00
1/128	7.02E-07	2.01

通过下面的图 7 和图 8 我们可以看出, 重心插值配点格式的数值解和解析解的等势线图像基本一致, 这进一步说明该数值格式的稳定性。

下图为 $M = 16$, $N = 1000$ 时的图像:

画出两种格式的绝对误差图。由图 9 和图 10 可知, 当时间剖分一致时, 重心插值配点格式在空间上取 16 个点的时候, 绝对误差精度就达到 10^{-7} , 而二阶有限差分格式在空间上取 31 个点的时候, 精度只有 10^{-4} 。

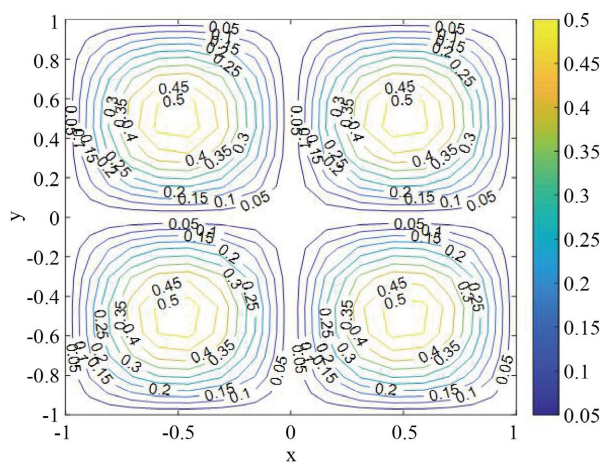


Figure 7. Analytical solution of example three
图 7. 算例三的解析解

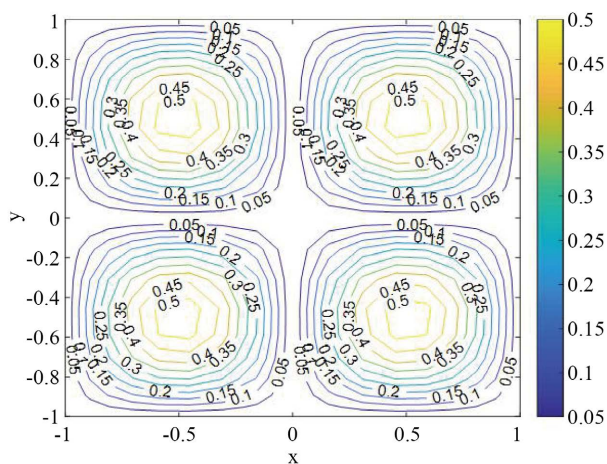


Figure 8. Example three numerical solution of barycentric interpolation collocation scheme
图 8. 算例三重心插值配点法格式数值解

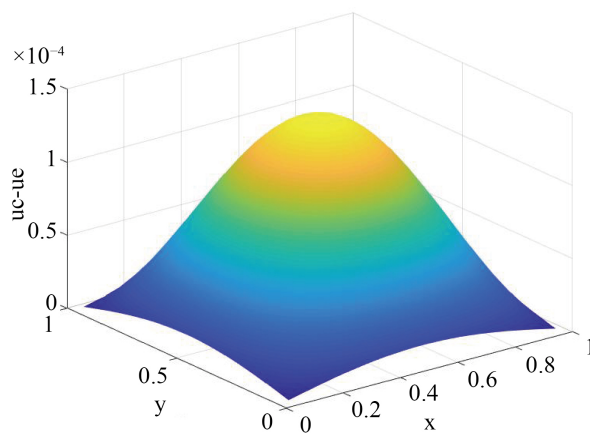


Figure 9. Example three absolute error figure of second-order finite difference scheme
图 9. 算例三二阶有限差分格式绝对误差图

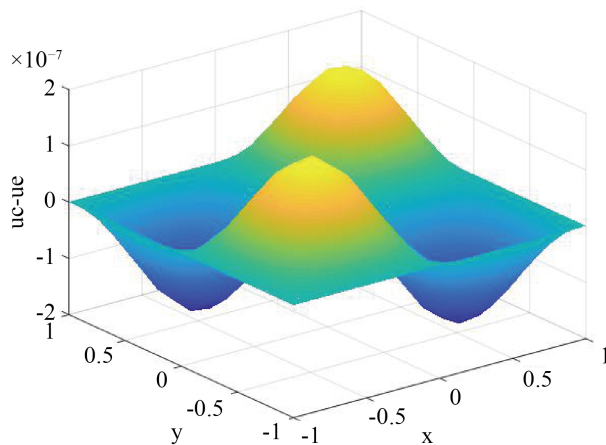


Figure 10. Example three absolute error figure of barycentric interpolation collocation scheme

图 10. 算例三重心插值配点格式绝对误差图

3.4. 算例四

对于二维 Schrödinger 方程满足 $\Omega = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ ，有

$$\begin{cases} iu_t = -\frac{1}{2}\Delta u + V(X) + f, & (X, t) \in \Omega \times (0, T] \\ u(X, 0) = \sin x \sin y \end{cases}$$

其中

$$V(X) = 1 - \sin^2 x \sin^2 y$$

该问题的精确解为 $u = e^{-2it} \sin x \sin y$ ，再进一步针对 Schrödinger 方程的离散质量和能量守恒性进行验证。图 11 给出重心 Lagrange 插值格式对质量守恒量的保持情况，图 12 给出重心 Lagrange 插值格式对能量守恒量的保持情况。从图像能再一次看出我们的配点格式很好地满足离散质量和能量守恒性。

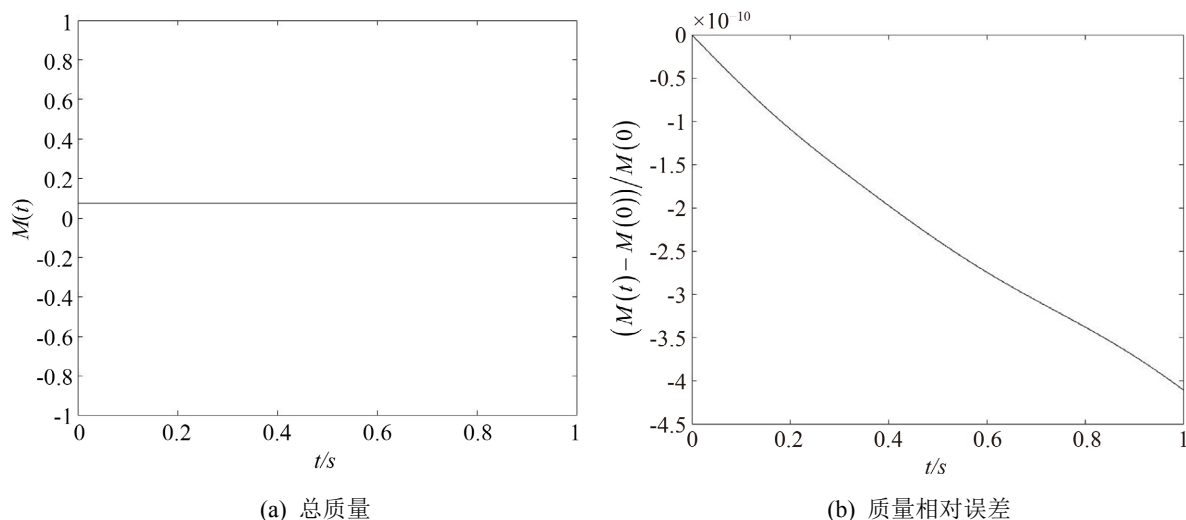


Figure 11. Example four mass conservation

图 11. 算例四质量守恒

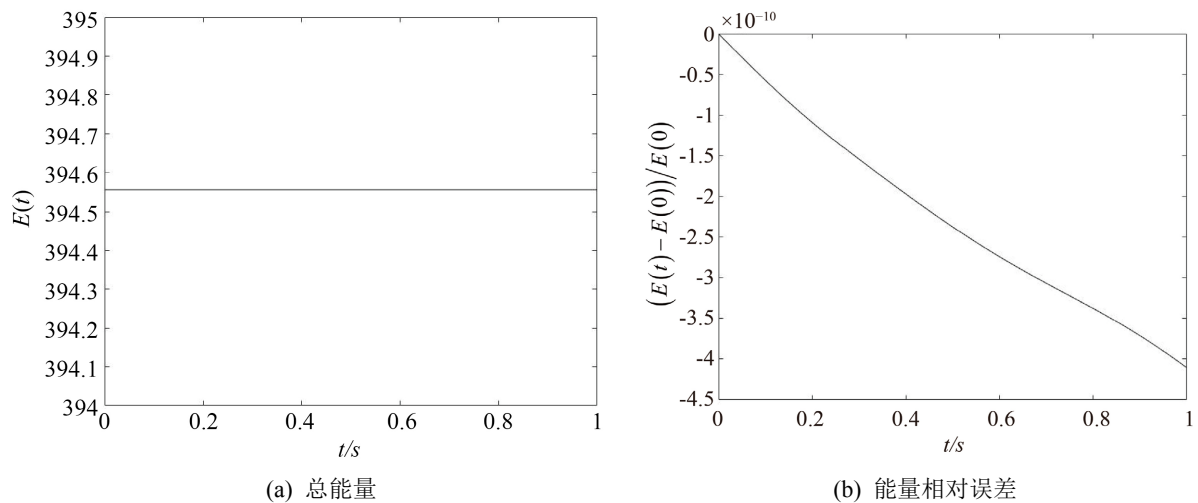


Figure 12. Example four energy conservation
图 12. 算例四能量守恒

4. 结语

本文利用 Crank-Nicolson 格式结合重心 Lagrange 插值配点法求解 Schrödinger 方程一维二维问题, 与经典的二阶有限差分格式进行数值比较, 重心 Lagrange 插值配点格式在空间方向用较少的点时就可以达到很高的精度, 且误差结果与理论分析相吻合, 进一步数值算例也验证配点格式满足方程的质量和能量守恒性。今后, 可以将重心插值配点格式推广到更高维 Schrödinger 方程和时间分数阶 Schrödinger 方程问题, 也可将重心插值配点格式与其他格式相结合, 探讨 Schrödinger 方程的高精度数值格式。

致 谢

由衷感谢华侨大学数学科学学院翁智峰老师对本论文的指导与帮助。

基金项目

国家级大学生创新创业训练计划项目(S202110385029); 华侨大学实验教学与管理改革课题(SY2021J12)。

参考文献

- [1] Schrödinger, E. (1935) The Present Status of Quantum Mechanics. *Die Naturwissenschaften*, **23**, 1-26.
- [2] 李莹, 崔庆丰. 基于分步傅里叶变换法对非线性 Schrödinger 方程的数值仿真[J]. 长春理工大学学报, 2011, 34(1): 43-60.
- [3] 张鲁明, 常谦顺. 带五次项的非线性 Schrödinger 方程差分法[J]. 应用数学学报, 2000, 23(3): 351-358.
- [4] 张鲁明, 刘奋. 一类非自共轭非线性 Schrödinger 方程的三层差分格式[J]. 应用数学学报, 2002, 25(7): 469-475.
- [5] 王廷春, 张鲁明, 陈芳启. 基于带波动算子非线性 Schrödinger 方程数值分析的守恒差分算法[J]. 南京航空航天大学学报, 2006, 23(2): 87-93.
- [6] Xu, Y. and Shu, C.W. (2005) Local Discontinuous Galerkin Methods for Nonlinear Schrödinger Equations. *Journal of Computational Physics*, **205**, 72-97. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.11.001>
- [7] Liao, H.L., Sun, Z.Z. and Shi, H.S. (2010) Maximum Norm Error Analysis of Explicit Schemes for Two-Dimensional Nonlinear Schrödinger Equations. *Scientia Sinica Mathematica*, **40**, 827-842.
- [8] Sun, Z.Z. (2006) The Stability and Convergence of an Explicit Difference Scheme for the Schrödinger Equation on an Infinite Domain by Using Artificial Boundary Conditions. *Journal of Computational Physics*, **219**, 879-898.

- <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.07.001>
- [9] Ibarra-Villalon, H.E., Pottiez, O., Gómez-Vieyra, A., *et al.* (2020) Numerical Approaches for Solving the Nonlinear Schrödinger Equation in the Nonlinear Fiber Optics Formalism. *Journal of Optics*, **22**, Article ID: 043501.
- [10] Mackenzie, J.A. and Mekwi, W.R. (2020) An *hr*-Adaptive Method for the Cubic Nonlinear Schrödinger Equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **364**, Article ID: 112320. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.06.036>
- [11] Iqbal, A., Abd Hamid, N.N. and Ismail, A.I. (2020) Cubic B-Spline Galerkin Method for Numerical Solution of the Coupled Nonlinear Schrödinger Equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, **174**, 32-44. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2020.02.017>
- [12] Cai, J.X. and Zhang, H.H. (2020) Efficient Schemes for the Damped Nonlinear Schrödinger Equation in High Dimensions. *Applied Mathematics Letters*, **102**, Article ID: 106158. <https://doi.org/10.1016/j.aml.2019.106158>
- [13] Patel, K.S. and Mehra, M. (2018) A Numerical Study of Asian Option with High-Order Compact Finite Difference Scheme. *Journal of Applied Mathematics and Computing*, **57**, 467-491. <https://doi.org/10.1007/s12190-017-1115-2>
- [14] 孙传志, 汪佳玲. 非线性薛定谔方程的几种差分格式[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2021, 42(4): 551-560.
- [15] 刘展源, 关成波, 吕英波, 张鹏, 丛伟艳. 四阶精度差分法解定态薛定谔方程[J]. 大学物理, 2021, 40(9): 58-62.
- [16] Berrut, J.P. and Trefethen, L.N. (2004) Barycentric Lagrange Interpolation. *SIAM Review*, **46**, 501-517. <https://doi.org/10.1137/S0036144502417715>
- [17] 李淑萍, 王兆清. 重心插值配点格式求解初值问题[J]. 山东建筑大学学报, 2007, 22(6): 481-485.
- [18] 王兆清, 徐子康. 基于平面问题的位移压力混合配点法[J]. 计算物理, 2018, 35(1): 77-86.
- [19] Liu, H.Y., Huang, J., Pan, Y.B. and Zhang, J.P. (2018) Barycentric Interpolation Collocation Methods for Solving Linear and Nonlinear High-Dimensional Fredholm Integral Equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **327**, 141-154. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2017.06.004>
- [20] Li, J. and Cheng, Y.L. (2021) Linear Barycentric Rational Collocation Method for Solving Heat Conduction Equation. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, **37**, 533-545. <https://doi.org/10.1002/num.22539>
- [21] Deng, Y.F. and Weng, Z.F. (2021) Barycentric Interpolation Collocation Method Based on Crank-Nicolson Scheme for the Allen-Cahn Equation. *AIMS Mathematics*, **6**, 3857-3873. <https://doi.org/10.3934/math.2021229>
- [22] 翁智峰, 姚泽丰, 赖淑琴. 重心插值配点格式求解 Allen-Cahn 方程[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2019, 40(1): 133-140.
- [23] 邓杨芳, 姚泽丰, 汪精英, 翁智峰. 二维 Allen-Cahn 方程的有限差分法-配点法求解[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2020, 41(5): 690-695.
- [24] Deng, Y.F. and Weng, Z.F. (2021) Operator Splitting Scheme Based on Barycentric Lagrange Interpolation Collocation Method for the Allen-Cahn Equation. *Journal of Applied Mathematics and Computing*, 1-19. <https://doi.org/10.1007/s12190-021-01666-y>
- [25] Yi, S.C. and Yao, L.Q. (2019) A Steady Barycentric Lagrange Interpolation Method for the 2D Higher-Order Time-Fractional Telegraph Equation with Nonlocal Boundary Condition with Error Analysis. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, **35**, 1694-1716. <https://doi.org/10.1002/num.22371>
- [26] Hu, Y.D., Peng, A., Chen, L.Q., *et al.* (2021) Analysis of the Barycentric Interpolation Collocation Scheme for the Burgers Equation. *ScienceAsia*, **47**, 758-765. <https://doi.org/10.2306/scienceasia1513-1874.2021.081>
- [27] 邓杨芳, 黄蓉, 翁智峰. 重心插值配点法求解 Cahn-Hilliard 方程[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2022, 43(1): 135-144.
- [28] 赖舒琴, 华之维, 翁智峰. 重心插值配点法求解 Black-Scholes 方程[J]. 聊城大学学报(自然科学版), 2020, 33(5): 1-8.