

算子分裂法: 薛定谔方程

武帅

2025 年 5 月

摘要

本文介绍了算子分裂法在求解薛定谔方程中的应用, 重点探讨了哈密顿算子的拆分及其时间离散化的实现方法. 通过对算子的分解, 展示了分而治之的数值策略.

1 算子分裂法简介

1.1 薛定谔方程的改写

对于薛定谔方程

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{x},t),$$

其中 \hat{H} 是哈密顿算子, 定义为

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}) = \hat{T} + \hat{V}.$$

将方程改写为

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = -i\hat{H}\psi(\mathbf{x},t) \quad \Leftrightarrow \quad \psi_t = -i\hat{H}\psi,$$

将 \mathbf{x} 视为参数, 时间上的解满足

$$\psi(t, \cdot) = e^{-i\hat{H}(\cdot)t}.$$

考虑时间离散化, 可得

$$\psi(t + \Delta t, \cdot) = e^{-i\hat{H}(\cdot)(t+\Delta t)} = e^{-i\hat{H}(\cdot)\Delta t}\psi(t, \cdot).$$

1.2 算子分裂法

算子分裂法, 顾名思义, 通过将哈密顿算子拆分为多个子算子之和, 实现分而治之的数值求解. 一种简单的方法是将算子 \hat{H} 分解为动能项 \hat{T} 和势能项 \hat{V} , 即通过

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}.$$

将指数算子展开¹

$$e^{-i\Delta t\hat{H}} = e^{-i\Delta t(\hat{T}+\hat{V})} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\Delta t)^n(\hat{T} + \hat{V})^n}{n!}.$$

我们会发现由于

$$\hat{T}\hat{V} \neq 0,²$$

¹指数算子的定义为

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}.$$

²事实上, 我们称满足

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

导致算子

$$e^{\hat{H}} = e^{\hat{T}+\hat{V}} \neq e^{\hat{T}} \cdot e^{\hat{V}}.$$

上述证明在附录 A 中展示, 有兴趣可以自行阅读. 那么如何计算 $e^{\hat{H}}$? 这需要引入 Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) 公式.

定理 1.1 (Baker-Campbell-Hausdorff 公式) 设 \hat{A} 和 \hat{B} 为李代数中的两个非对易算子 (即 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$), 其中 $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ 表示交换子. 则它们的指数乘积可以表示为:

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{C}},$$

其中算子 \hat{C} 由下式给出:

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12}([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]) + \frac{1}{24}[\hat{B}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots,$$

该级数包含更高阶的嵌套交换子. 若 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, 则 $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, 从而 $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}}$.

1.2.1 利用 BCH 分析 Lie-Trotter 分裂

Lie-Trotter 分裂 (一阶) 的一种形式是:

$$e^{-i\Delta t(\hat{T}+\hat{V})} \approx e^{-i\Delta t\hat{T}}e^{-i\Delta t\hat{V}} = e^{\hat{X}}e^{\hat{Y}},$$

根据 BCH 公式, 乘积 $e^{-i\Delta t\hat{T}}e^{-i\Delta t\hat{V}}$ 的二阶展开为

$$\hat{Z}_{LT} = \hat{X} + \hat{Y} + \frac{1}{2}[\hat{X}, \hat{Y}] + \mathcal{O}((\Delta t)^3),$$

计算对易项

$$[\hat{X}, \hat{Y}] = [-i\Delta t\hat{T}, -i\Delta t\hat{V}] = (-i\Delta t)^2[\hat{T}, \hat{V}] = -(\Delta t)^2[\hat{T}, \hat{V}],$$

所以有,

$$\begin{aligned}\hat{Z}_{LT} &= -i\Delta t\hat{T} - i\Delta t\hat{V} + \frac{1}{2}(-(\Delta t)^2[\hat{T}, \hat{V}]) + \mathcal{O}((\Delta t)^3) \\ &= -i\Delta t(\hat{T} + \hat{V}) - \frac{(\Delta t)^2}{2}[\hat{T}, \hat{V}] + \mathcal{O}((\Delta t)^3).\end{aligned}$$

因此, Lie-Trotter 近似实际上是:

$$e^{-i\Delta t\hat{T}}e^{-i\Delta t\hat{V}} = \exp\left(-i\Delta t(\hat{T} + \hat{V}) - \frac{(\Delta t)^2}{2}[\hat{T}, \hat{V}] + \mathcal{O}((\Delta t)^3)\right),$$

与目标算符 $e^{-i\Delta t(\hat{T}+\hat{V})}$ 相比, 指数中多了一个误差项, 其主项为 $-\frac{(\Delta t)^2}{2}[\hat{T}, \hat{V}]$. 这个误差项是 $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$ 的, 因此 Lie-Trotter 分裂的局部误差是 $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$, 使其成为一个一阶精度的全局方法.

的算子是对易的, 上述条件也等价于

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}.$$

1.2.2 利用 BCH 分析 Strang (对称) 分裂

Strang 分裂 (二阶) 的一种形式是:

$$e^{-i\Delta t(\hat{T}+\hat{V})} \approx e^{-i\frac{\Delta t}{2}\hat{V}} e^{-i\Delta t\hat{T}} e^{-i\frac{\Delta t}{2}\hat{V}}.$$

通过更详细的 BCH 展开, 对于 Strang 分裂有

$$e^{-i\frac{\Delta t}{2}\hat{V}} e^{-i\Delta t\hat{T}} e^{-i\frac{\Delta t}{2}\hat{V}} = \exp\left(-i\Delta t(\hat{T} + \hat{V}) + C_3(-i\Delta t)^3 + \mathcal{O}((\Delta t)^5)\right),$$

其中 C_3 是一个与 \hat{T} 和 \hat{V} 的嵌套对易子相关的特定组合. 不难发现指数中 $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$ 的项 (即与 $[\hat{V}, \hat{T}]$ 成比例的项) 被消除了. 因此 Strang 分裂的局部误差是 $\mathcal{O}((\Delta t)^3)$, 使其成为一个二阶精度的全局方法.

2 利用 Lie-Trotter 分裂求解薛定谔方程

我们的目标是从初始时刻 $t_0 = 0$ 的波函数 $\psi(\mathbf{x}, 0)$ 开始, 逐步计算后续时刻 $t_n = n\Delta t$ 的波函数 $\psi(\mathbf{x}, t_n)$.

2.1 算子的作用

在之前我们将算子 \hat{H} 拆分成简单算子, 那么如何将算子作用到我们的算法当中呢? 这里分别对上述两个指数算子进行讨论.

作用势能演化算符 $e^{-i\Delta t\hat{V}}$: 计势能指数算子作用于波函数 (也可以是一般函数)

$$\Psi(\mathbf{x}, \cdot) = e^{-i\Delta t\hat{V}(\mathbf{x})}\psi(\mathbf{x}, \cdot),$$

这一步在直接进行即可.

作用动能演化算符 $e^{-i\Delta t\hat{T}}$: 接下来对波函数作用指数动能算子,

$$\Psi(\mathbf{x}, \cdot) = e^{-i\Delta t\hat{T}}\psi(\mathbf{x}, \cdot),$$

动能算符 $\hat{T} = -\frac{1}{2}\nabla^2$ 是一个微分算符. 我们可以将其转换到傅里叶空间中计算, 此时, 动能算符对应于一个简单的乘法算符:

$$\mathcal{F}\{e^{\hat{T}}u(\mathbf{x})\}(\mathbf{k}) = e^{\frac{-i\Delta t|\mathbf{k}|^2}{2}}\tilde{u}(\mathbf{k}).$$

上式的详细推导在附录 B 中. 故我们要求指数动能算子的一般流程为,

1. **傅里叶变换**: 将位置空间的中间波函数 $\psi(\mathbf{x})$ 通过快速傅里叶变换得到其动量表示 $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$;
2. **傅里叶空间演化**: 在傅里叶空间中, 将 $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$ 的每个分量乘以相应的相位因子

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}, \cdot) = e^{-i\Delta t\frac{|\mathbf{k}|^2}{2}}\tilde{\psi}(\mathbf{k}, \cdot);$$

3. **傅里叶逆变换**: 将演化后的结果通过快速傅里叶逆变换转换回物理空间.

2.2 整体算法

我们可以将时间演化分为三步解决, 分别为

- 初始化: 给定初始波函数 $\psi(\mathbf{x}, t=0)$ 在所有空间格点上的值;
- 时间迭代: 对于每一个时间步, 从 t_n 到 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, 更新波函数;
- 重复: 将 t_n 更新为 t_{n+1} , $\psi(\mathbf{x}, t_n)$ 更新为 $\psi(\mathbf{x}, t_{n+1})$, 然后重复以上步骤, 直到达到所需的最终演化时间.

通过这种迭代方式, 我们就可以使用 Lie-Trotter 分裂方法来模拟波函数随时间的演化其伪代码为 1.

Algorithm 1: 使用 Lie-Trotter 分裂法进行时间演化

```

输入参数: 初始波函数  $\psi_0(\mathbf{x})$  (在空间格点上)
输入参数: 势能函数  $V(\mathbf{x})$  (在空间格点上)
输入参数: 时间步长  $\Delta t$ 
输入参数: 总演化时间  $T$ 
输出结果: 最终时刻  $T$  的波函数  $\psi_n(\mathbf{x})$ ,  $n = [T/\Delta t]$ 

/* 1. 初始化 */
1  $\Psi_{temp}(\mathbf{x}) \leftarrow \Psi_0(\mathbf{x});$ 
2  $t \leftarrow 0;$ 

/* 2. 时间迭代循环 */
3 while  $t < T$  do
    /* 步骤 A: 作用势能演化算符  $e^{-i\Delta t \hat{V}}$  (位置空间) */
    4 for 所有空间格点  $\mathbf{x}_j$  do
    5      $\psi_{temp}(\mathbf{x}_j) \leftarrow e^{-i\Delta t V(\mathbf{x}_j)} \cdot \psi_{temp}(\mathbf{x}_j);$ 

    /* 步骤 B: 作用动能演化算符  $e^{-i\Delta t \hat{T}}$  (傅里叶空间) */
    6  $\tilde{\Psi}_{temp}(\mathbf{k}) \leftarrow \text{FFT}(\psi_{temp}(\mathbf{x}))$   $\triangleright$  1. 物理空间到频率空间
    7 for 所有动量空间格点  $\mathbf{k}_j$  do
    8      $\tilde{\psi}_{temp}(\mathbf{k}_j) \leftarrow e^{-i\Delta t |\mathbf{k}_j|^2/2} \cdot \tilde{\Psi}_{temp}(\mathbf{k}_j)$   $\triangleright$  2. 乘以相位因子
    9  $\psi_{temp}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{IFFT}(\tilde{\psi}_{temp}(\mathbf{k}))$   $\triangleright$  3. 傅里叶逆变换回位置空间

    /* 3. 更新时间 */
    10  $t \leftarrow t + \Delta t;$ 

11  $\psi_n(\mathbf{x}) \leftarrow \psi_{temp}(\mathbf{x});$ 
12 return  $\psi_n(\mathbf{x});$ 

```

2.3 Strang 分裂数值格式

事实上, 更常用的是 Strang 分裂法, 一方面 Strang 分裂法可以保证 3 阶收敛, 另一方面此方法数值实现同样简单. 不难得到, 我们的时间迭代数值求解为

$$\psi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = e^{-i\frac{\Delta t}{2}\hat{V}} e^{-i\Delta t\hat{T}} e^{-i\frac{\Delta t}{2}\hat{V}} \psi(\mathbf{x}, t).$$

其实际操作与之前方法并无实际不同.

2.4 数值实例

接下来测试几个数值实例, 分别包含经典自由粒子以及谐振子的演化.

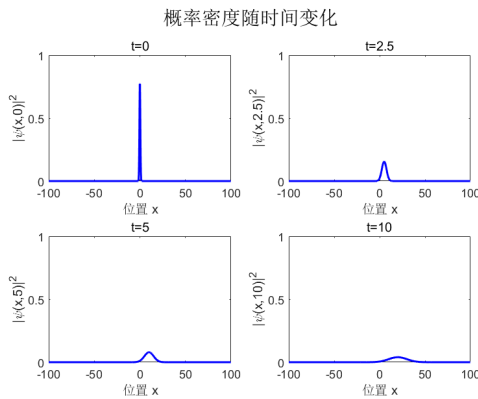
算例 2.1 首先对于一般自由粒子, 即

$$V(x) = 0,$$

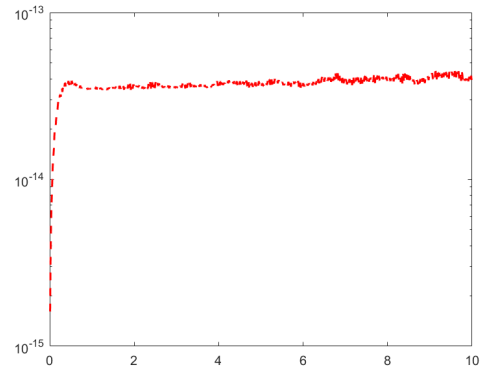
在物理中表示无势能场的影响下的粒子演化. 取解析解

$$\psi = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \cdot (1 + 2it)^{-1/2} \cdot \exp\left(-\frac{(x - 2t)^2}{1 + 2it} + 2ix - 2it\right).$$

首先利用 *Lie-Trotter* 分裂进行逼近, 我们取空间区间为 $[-L, L]$, $L = 300$, 傅里叶自由度为 $N = 800$ 进行测试, 其中 $\Delta t = 0.01$, $t \in [0, 10]$. 我们将波函数的概率密度呈现在图 1 左侧, 右侧为随时间变化误差变化. 接下来, 我们对比两种分裂方法在不同时间自由度下的区别, 见图 2, 不难发现, 二者误差曲线相吻合这是因为在无势场下两种算子是对易的.



(a) 自由粒子波函数概率密度



(b) 随时间演化误差变化

图 1: 无势场

算例 2.2 考虑谐振子, 即

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2,$$

在物理中表示振子场的影响下的粒子演化. 取解析解

$$\pi^{-1/4} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{it}{2}\right).$$

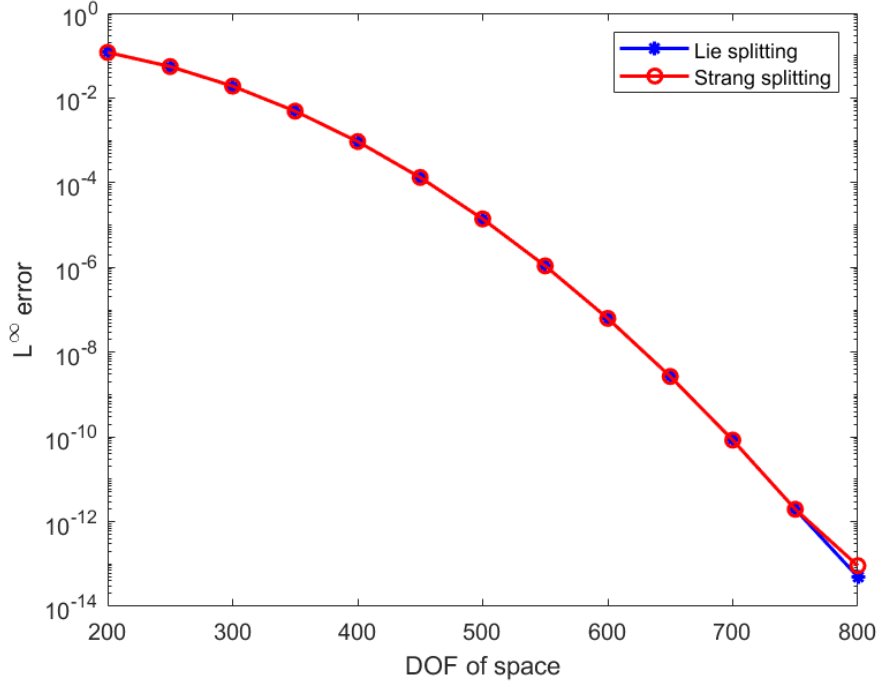
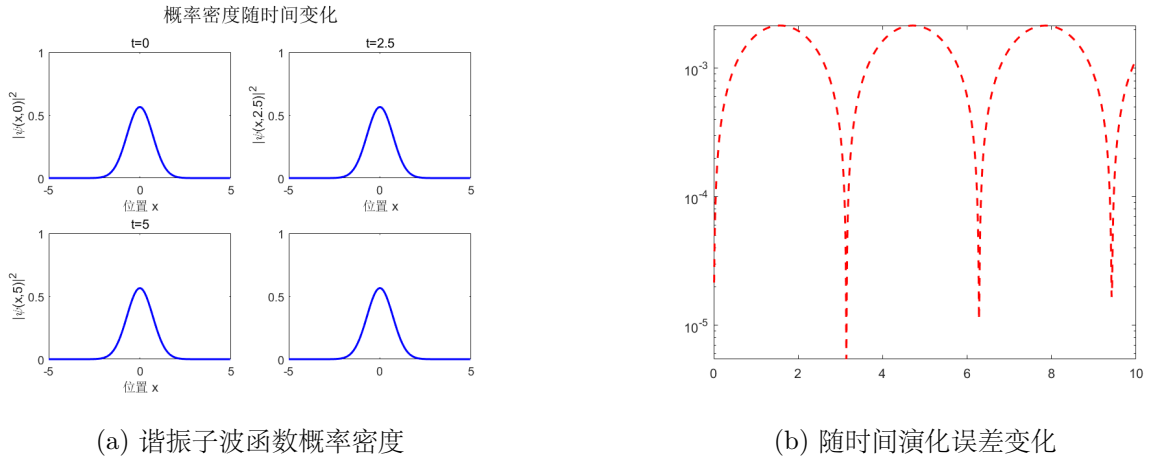


图 2: 两种分裂方法误差对比

取空间区间为 $[-L, L]$, $L = 7.5$, 傅里叶自由度为 $N = 200$ 进行测试, 其中 $\Delta t = 0.01$, $t \in [0, 10]$. 我们将 *Lie-Trotter* 分裂进行逼近, 得到波函数概率密度, 见图 3 左侧, 右侧为随时间变化的误差变化, 不难发现, 对比自由粒子, 谐振子的误差显著的随着时间推进而上升. 我们对比两种分裂方法的误差 (图 4), 可以看到, *Strang* 分裂法效果显著优于 *Lie* 分裂法.



(a) 谐振子波函数概率密度

(b) 随时间演化误差变化

图 3: 谐振子势场

3 立方非线性薛定谔方程解法

薛定谔方程的主要难点在于非线性部分, 非线性模型方程为

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + 2V(\mathbf{x}) \right) \psi(t, \mathbf{x}),$$

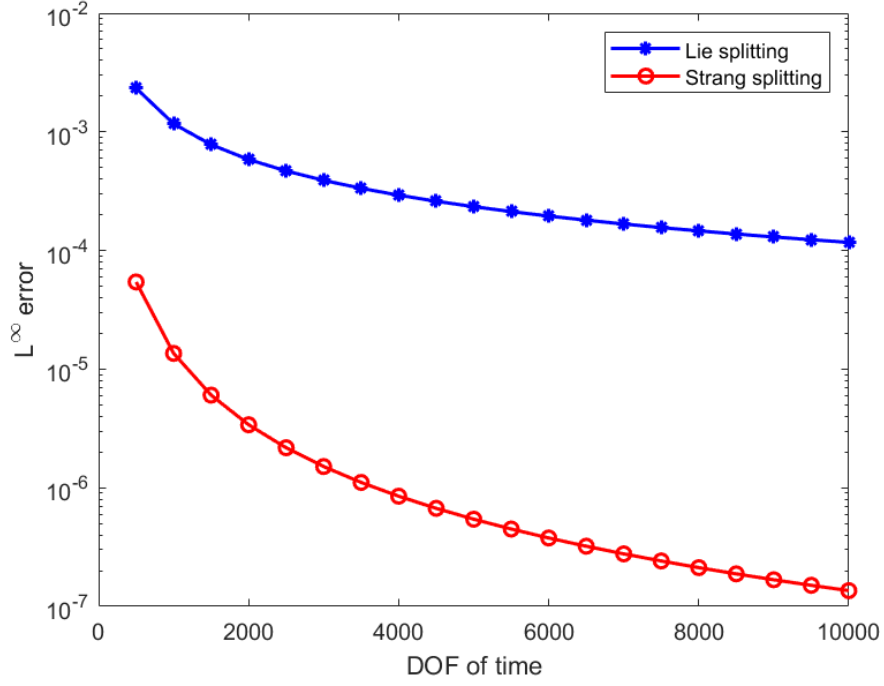


图 4: 两种分裂方法误差对比

其中

$$V = |\psi(t, \mathbf{x})|^2, \quad \hat{V} = |\psi(t, \mathbf{x})|^2(\cdot).$$

我们将求解方程分为以下几步:

- 求解线性子问题:

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} \psi(\mathbf{x}, t) = \Delta \psi(\mathbf{x}, t), \quad t \in [t_n, t_n + \Delta t/2],$$

记解为

$$\psi_{1/2}^- = \psi(\mathbf{x}, t_n + \Delta t/2);$$

- 求解非线性问题:

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi_m(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{V}[\psi_{1/2}^-] \psi_m(\mathbf{x}, t), & t \in [t_n, t_n + \Delta t], \\ \psi_m(\mathbf{x}, t_n) = \psi_{1/2}^-; \end{cases}$$

记解为

$$\psi_{1/2}^+ = \psi_m(\mathbf{x}, t_n + \Delta t);$$

- 求解线性子问题:

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi_f(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \Delta \psi_f(\mathbf{x}, t), & t \in [t_n + \Delta t/2, t_n + \Delta t], \\ \psi_f(\mathbf{x}, t_n + \Delta t/2) = \psi_{1/2}^+, \end{cases}$$

方程解

$$\psi_1(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t + \Delta t).$$

下面考虑一个例子, 其数值算例由 Chang et al. [1999] 给出.

算例 3.1 解析解为孤立波函数

$$\psi = \text{sech}(x + 2 - 4t) \exp(-i(2x + 4 - 3t)).$$

取 $L = 70$, $t \in [0, 1]$, 利用 *Strang* 分裂方法我们得到了如下误差, 见图 5

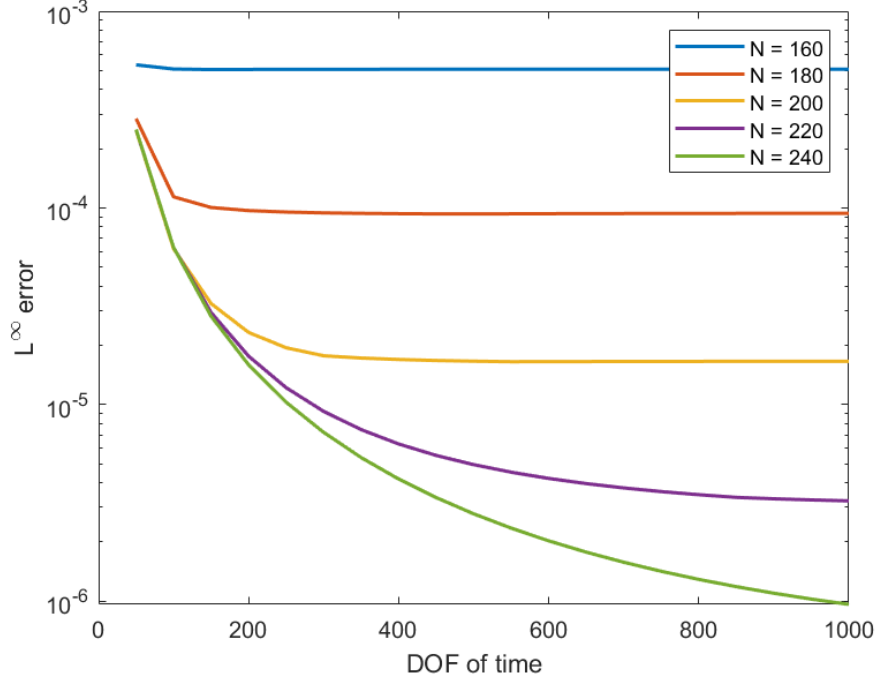


图 5: 不同时间网格下的误差对比

3.1 误差分析

这一章节来源于论文 Lubich [2008].

定理 3.1 对于线性薛定谔方程的而言, 若其解 $\psi \in \mathbb{C}$, $\|\psi(\mathbf{x}, 0)\|_{H^4} < M$, 则利用 *Strang* 分裂法进行求解得到的数值解 ψ_n 有如下误差估计:

$$\begin{aligned} \|\psi_n - \psi(t_n)\|_{L^2} &\leq C(M, T, V)(\Delta t)^2; \\ \|\psi_n - \psi(t_n)\|_{H^2} &\leq C(M, T, V)(\Delta t). \end{aligned}$$

其中 $C(M, T, V)$ 是关于三个变量有关的常数.

对于非线性薛定谔方程而言

定理 3.2 对于非线性薛定谔方程:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\Delta \psi + \kappa |\psi|^2 \psi,$$

其中 $\psi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{C}$, $\kappa = \pm 1$, 初始条件 $\psi(\mathbf{x}, 0) = \psi_0(\mathbf{x}) \in H^4(\mathbb{R})$, 满足 $\|\psi_0\|_{H^4} < M$, 且 $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \psi(\mathbf{x}, t) = 0$. 使用 *Strang* 分裂方求解, 存在常数 $C(M, T)$, 使得对于 $t_n = n\Delta t \leq T$, 数值解 ψ_n 与精确解 $\psi(t_n)$ 满足:

$$\|\psi_n - \psi(t_n)\|_{L^2} \leq C(M, T)(\Delta t)^2,$$

$$\|\psi_n - \psi(t_n)\|_{H^2} \leq C(M, T)(\Delta t).$$

A 不对易算子的指数不可加性

首先展开 $e^{\hat{T}+\hat{V}}$ 可以得到,

$$\begin{aligned} e^{\hat{T}+\hat{V}} &= 1 + (\hat{T} + \hat{V}) + \frac{1}{2!}(\hat{T} + \hat{V})^2 + \mathcal{O}((\hat{T} + \hat{V})^3) \\ &= 1 + \hat{T} + \hat{V} + \frac{1}{2}(\hat{T}^2 + \hat{T}\hat{V} + \hat{V}\hat{T} + \hat{V}^2) + \mathcal{O}((\hat{T} + \hat{V})^3) \end{aligned} \quad (1)$$

再展开 $e^{\hat{T}}e^{\hat{V}}$ 有,

$$\begin{aligned} e^{\hat{T}}e^{\hat{V}} &= (1 + \hat{T} + \frac{1}{2}\hat{T}^2 + \dots)(1 + \hat{V} + \frac{1}{2}\hat{V}^2 + \dots) \\ &= (1 + \hat{V} + \frac{1}{2}\hat{V}^2) + (\hat{T} + \hat{T}\hat{V} + \frac{1}{2}\hat{T}\hat{V}^2) + (\frac{1}{2}\hat{T}^2 + \frac{1}{2}\hat{T}^2\hat{V}) + \dots, \end{aligned}$$

收集同阶项, 精确到二阶

$$e^{\hat{T}}e^{\hat{V}} = 1 + \hat{T} + \hat{V} + (\frac{1}{2}\hat{T}^2 + \hat{T}\hat{V} + \frac{1}{2}\hat{V}^2) + \dots. \quad (2)$$

比较展开式 (1) 和 (2), 不难发现, 若 $e^{\hat{T}+\hat{V}} = e^{\hat{T}}e^{\hat{V}}$, 这两个展开式的所有同阶项都必须相等, 即有如下的系数匹配:

- 零阶项: $1 = 1$;
- 一阶项: $\hat{T} + \hat{V} = \hat{T} + \hat{V}$;
- 二阶项:
 - (1): $\frac{1}{2}(\hat{T}^2 + \hat{T}\hat{V} + \hat{V}\hat{T} + \hat{V}^2)$,
 - (2): $\frac{1}{2}\hat{T}^2 + \hat{T}\hat{V} + \frac{1}{2}\hat{V}^2$.

令这二阶项相等,

$$\frac{1}{2}\hat{T}^2 + \frac{1}{2}\hat{T}\hat{V} + \frac{1}{2}\hat{V}\hat{T} + \frac{1}{2}\hat{V}^2 = \frac{1}{2}\hat{T}^2 + \hat{T}\hat{V} + \frac{1}{2}\hat{V}^2$$

消去相同的 $\frac{1}{2}\hat{T}^2$ 和 $\frac{1}{2}\hat{V}^2$ 项,

$$\frac{1}{2}\hat{T}\hat{V} + \frac{1}{2}\hat{V}\hat{T} = \hat{T}\hat{V}$$

将 $\frac{1}{2}\hat{T}\hat{V}$ 移到等式右边,

$$\frac{1}{2}\hat{V}\hat{T} = \frac{1}{2}\hat{T}\hat{V}$$

这意味着

$$\hat{V}\hat{T} = \hat{T}\hat{V}$$

这正是算符 \hat{T} 和 \hat{V} 对易的条件, 即 $[\hat{T}, \hat{V}] = \hat{T}\hat{V} - \hat{V}\hat{T} = 0$. 因此, 只有当 \hat{T} 和 \hat{V} 对易时, $e^{\hat{T}+\hat{V}}$ 和 $e^{\hat{T}}e^{\hat{V}}$ 的级数展开到二阶的项才相同.

B 动量算符的傅里叶变换形式

我们的目标是推导函数 $e^{\hat{T}}u(\mathbf{x})$ 的傅里叶变换, 即 $\mathcal{F}\{e^{\hat{T}}u(\mathbf{x})\}(\mathbf{k})$. 不难得到动能算符 \hat{T} 在傅里叶空间的表示,

$$\mathcal{F}\{\hat{T}u(\mathbf{x})\}(\mathbf{k}) = \frac{|\mathbf{k}|^2}{2}\tilde{u}(\mathbf{k}),$$

其中 $\tilde{u}(\mathbf{k}) = \mathcal{F}\{u(\mathbf{x})\}(\mathbf{k})$. 再考虑算子函数 $f(\hat{T})$ 在傅里叶空间的表示, 一般地, 如果一个算子 \hat{O} 在傅里叶变换下有

$$\mathcal{F}\{\hat{O}u\}(\mathbf{k}) = o(\mathbf{k})\tilde{u}(\mathbf{k}),$$

那么对于这个算符的任意函数 $f(\hat{O})$, 其在傅里叶空间中的作用将是乘以 $f(o(\mathbf{k}))$,

$$\mathcal{F}\{f(\hat{O})u\}(\mathbf{k}) = f(o(\mathbf{k}))\tilde{u}(\mathbf{k}).$$

将上述结论应用于 $f(\hat{T}) = e^{\hat{T}}$, 可以得到对于函数 $e^{\hat{T}}u(\mathbf{x})$, 其傅里叶变换为

$$\mathcal{F}\{e^{\hat{T}}u(\mathbf{x})\}(\mathbf{k}) = e^{\frac{|\mathbf{k}|^2}{2}}\tilde{u}(\mathbf{k}).$$

参考文献

Qianshun Chang, Erhui Jia, and Weiwei Sun. Difference schemes for solving the generalized nonlinear schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*, 148(2):397–415, 1999.

Christian Lubich. On splitting methods for schrödinger-poisson and cubic nonlinear schrödinger equations. *Mathematics of computation*, 77(264):2141–2153, 2008.