非线性Schrödinger方程的高效保结构算法

钱 旭

(合作者: 宋松和, 张弘, 傅浩, 宋明展)

国防科技大学数学系

E-mail: qianxu@nudt.edu.cn

湘潭大学，2019年05月

Outline

当代计算方法研究的一条不成文的基本法则是，问题原型的基本特征在离散后应该尽可能地得到保持。而为了达到这一效果，则离散化应尽可能在问题原型的同一个形式框架中进行。

这些不同的数学形式是陈述同一个物理规律。由于形式不同，它们对实践上“解题”而言，自然会提供完全不同的技术途径。因此，等价的数学形式，实践上可以是不等价的。

冯康

现有的保结构算法（几何算法）

1. 辛算法（Hamiltonian ODEs）；
2. 多辛算法（Hamiltonian PDEs）；
3. 保能量或保动量格式;
4. 无源系统的保体积格式;
5. 保首次积分格式;
6. 接触系统的接触格式;
7. 李群方法;

……

Schrödinger方程

- 量子力学的核心理论归结为五个公设,其中之一就是 Schrödinger 方程假设.

Schrödinger方程

- 量子力学的核心理论归结为五个公设,其中之一就是 Schrödinger 方程假设.
- 微观粒子体系的状态波函数满足如下 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t,x)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\psi(t,x)+V(x)\psi(t,x),\quad (t,x)\in R^+\times\Omega. \tag{1}$$

其中$\psi(t,x)$是关于时间t和空间$x=(x_1,x_2,\cdots,x_d)^T$的波函数, i是虚数单位, $\hbar$是普朗克常量, $V=V(x)\geq 0$ 代表势能. $\Omega\subset R^d$是波函数在空间的定义域.

Schrödinger方程

- 量子力学的核心理论归结为五个公设,其中之一就是 Schrödinger 方程假设.
- 微观粒子体系的状态波函数满足如下 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t,x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\psi(t,x)+V(x)\psi(t,x), \quad (t,x)\in R^+\times\Omega. \tag{1}$$

其中$\psi(t,x)$是关于时间t和空间$x=(x_1,x_2,\cdots,x_d)^T$的波函数, i是虚数单位, $\hbar$是普朗克常量, $V=V(x)\geq 0$ 代表势能. $\Omega\subset R^d$是波函数在空间的定义域.

- 在量子力学中, 粒子以概率密度的形式存在于整个空间中, 因此, 所有可观察的力学量都是以概率密度的形式存在.

非线性Schrödinger方程

- 考虑d ($d=1,2,3$)维非线性 Schrödinger (NLS)方程:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2}\Delta_x\psi+V\psi+\beta\hbar^{\alpha}|\psi|^{2\sigma}\psi,\quad (t,x)\in R^{+}\times R^{d} \quad (2)$$

其中$\sigma>0$, α 和 β 是给定的实常数.

非线性Schrödigner方程

- 考虑d ($d=1,2,3$)维非线性 Schrödinger (NLS)方程:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2}\Delta_x\psi+V\psi+\beta\hbar^\alpha|\psi|^{2\sigma}\psi,\quad (t,x)\in R^+\times R^d \quad (2)$$

其中$\sigma>0$, α 和 β 是给定的实常数.

- 方程(2)又被称为 Gross-Pitaevskii 方程，它描述了现代物理中重要的**波色-爱因斯坦凝聚** (Bose-Einstein condensate).

非线性Schrödinger方程

- 考虑d ($d=1,2,3$)维非线性 Schrödinger (NLS)方程:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2}\Delta_x\psi+V\psi+\beta\hbar^\alpha|\psi|^{2\sigma}\psi,\quad (t,x)\in R^+\times R^d \quad (2)$$

  其中$\sigma>0$, α 和 β 是给定的实常数.
- 方程(2)又被称为 Gross-Pitaevskii 方程，它描述了现代物理中重要的**波色-爱因斯坦凝聚** (Bose-Einstein condensate).
- 相比之下，非线性问题的数学理论较为复杂，因为此时能量泛函无法像线性问题那样表示成自伴随算子的作用，而且适定性理论往往需要对势能函数$V(x)$ 加上一定的限制条件.

Proposal

- 在数学上，由于单个粒子的状态高度集中在某条近似经典轨道附近，那么**波函数会在局部形成强烈震荡**，这给理论研究和数值计算带来较大困难.

Proposal

- 在数学上，由于单个粒子的状态高度集中在某条近似经典轨道附近，那么**波函数会在局部形成强烈震荡**，这给理论研究和数值计算带来较大困难.
- 量子力学系统沿用了经典力学中关于动量、势能、动能等物理量的定义. 一般地，Schrödinger方程依然满足质量和能量守恒律，并且具有Hamilton 系统的辛与多辛几何结构.

Proposal

- 在数学上，由于单个粒子的状态高度集中在某条近似经典轨道附近，那么**波函数会在局部形成强烈震荡**，这给理论研究和数值计算带来较大困难.
- 量子力学系统沿用了经典力学中关于动量、势能、动能等物理量的定义. 一般地，Schrödinger方程依然满足质量和能量守恒律，并且具有Hamilton 系统的辛与多辛几何结构.
- 在设计数值格式的时候，**如何保持这些结构和守恒律**，对于有效求解Schrödinger方程具有十分重要的意义.

强耦合非线性Schrödinger方程的多辛小波分裂算法

提出了一种多辛小波分裂（MSWS）算法用于求解强耦合非线性Schrödinger（SCNLS）系统

$$\begin{cases} iu_t + \beta u_{xx} + [\alpha_1|u|^2 + (\alpha_1 + 2\alpha_2)|v|^2]u + \gamma u + \Gamma v = 0, \\ iv_t + \beta v_{xx} + [\alpha_1|v|^2 + (\alpha_1 + 2\alpha_2)|u|^2]v + \gamma v + \Gamma u = 0, \end{cases} \tag{3}$$

其中u和v为两个复振幅，β为群速度色散系数，α_1 是描述一种双折射介质的脉冲信号聚焦的系数。$(\alpha_1 + 2\alpha_2)$为交叉相位调制系数，Γ和γ为线性耦合系数。

SWCM求解SCNLS方程

系统(3)可以写成Hamilton偏微分方程

$$M z_t + K z_x = \nabla_z S(z), \tag{4}$$

多辛形式(4)可以被分裂成多辛子系统

$$M z_t + K_i z_x = \nabla_z S^i(z), \qquad i = 1, 2, \ldots, N, \tag{5}$$

其中，$K = \sum_{i=1}^N K_i$，$S(z) = \sum_{i=1}^N S^i(z)$. SCNLS方程(3)可被分裂成一个线性子系统

$$\mathcal{L}: \quad \begin{cases} i u_t + \beta u_{xx} + \gamma u + \Gamma v = 0, \\ i v_t + \beta v_{xx} + \gamma v + \Gamma u = 0, \end{cases} \tag{6}$$

和一个非线性子系统

$$\mathcal{N}: \quad \begin{cases} i u_t + [\alpha_1 |u|^2 + (\alpha_1 + 2\alpha_2)|v|^2] u = 0, \\ i v_t + [\alpha_1 |v|^2 + (\alpha_1 + 2\alpha_2)|u|^2] v = 0. \end{cases} \tag{7}$$

小波配点方法

考虑计算区域为$[a,b]$上的周期函数$u(x,t)$，其中a和b为整数。尺度为J，V_J为DM小波尺度函数的自相关函数$\theta(x)$张成的空间，利用I_J逼近$u(x,t)$。$I_J u(x,t)$可表示为

$$u_J(x,t)=I_J u(x,t)=\sum_{m=0}^{N-1}u(x_m,t)\theta(2^J x-(a\cdot 2^J+m)), \tag{8}$$

其中，$x_m=a+m/2^J$为配置点，$m=0,1,\cdots,N-1$. 由$\theta(x)$的性质，$u_J(x_m,t)=u(x_m,t)$.

要求得关于$u_J(x_m,t)$的方程，关键是将空间偏导数$\frac{\partial^k u_J(x,t)}{\partial x^k}$在配置点处的值用函数值$u_J(x_m,t)$表示。具体地，首先对(8)中的$u_J(x,t)$求$k$次导，然后在$x_m$这个配置点处取值，即有

$$\frac{\partial^k u_J(x,t)}{\partial x^k}\Big|_{x_m}=\sum_{m'=0}^{N-1}u(x_{m'},t)\cdot\frac{d^k\theta(2^J x-(a\cdot 2^J+m'))}{dx^k}\Big|_{x_m}=(B_k U_J)_m, \tag{9}$$

其中，$U_J=(u_J(x_0,t),u_J(x_1,t),\cdots,u_J(x_{N-1},t))^{\mathrm{T}}$，$B_k$是一$N\times N$的矩阵。

小波配点方法

B_k的元素可表示为

$$(B_k)_{m,m'} = \frac{d^k\theta(2^Jx-(a\cdot 2^J+m'))}{dx^k}|_{x_m} = 2^{kJ}\theta^{(k)}(m-m'). \tag{10}$$

由于$\theta(x)$具有局部紧支撑的特点，其中，支撑区间为$[-M+1, M-1]$, 因此，当$m' < m-M+1$ 或$m' > m+M-1$时，$(B_k)_{m,m'} = 0$. 同时，考虑周期边界条件，B_k 可写为

$$(B_k)_{m,m'} = \begin{cases} 2^{kJ}\theta^{(k)}(m-m'), & m-(M-1)\leq m'\leq m+(M-1); \\ 2^{kJ}\theta^{(k)}(-l), & m-m' = N-l, 1\leq l\leq M-1; \\ 2^{kJ}\theta^{(k)}(l), & m'-m = N-l, 1\leq l\leq M-1; \\ 0, & \text{else}. \end{cases} \tag{11}$$

易知，B_k为一$N\times N$的稀疏矩阵，每行仅有$2M-1$ 个非零元，且有下式成立

$$(B_kU_J)_m = \sum_{m'=m-M+1}^{m+M-1} u_J(x_{m'})2^{kJ}\theta^{(k)}(m-m'). \tag{12}$$

小波配点方法

设$M=4$，即D4小波，对于其自相关函数，B_k可表示为

$$
B_k = 2^{kJ}\begin{pmatrix}
b_0 & b_{-1} & b_{-2} & b_{-3} & & & b_3 & b_2 & b_1 \\
b_1 & b_0 & b_{-1} & b_{-2} & b_{-3} & & & b_3 & b_2 \\
b_2 & b_1 & b_0 & b_{-1} & b_{-2} & b_{-3} & & & b_3 \\
b_3 & b_2 & b_1 & b_0 & b_{-1} & b_{-2} & b_{-3} & & \\
 & & & & \ddots & & & & \\
 & & b_3 & b_2 & b_1 & b_0 & b_{-1} & b_{-2} & b_{-3} \\
b_{-3} & & & b_3 & b_2 & b_1 & b_0 & b_{-1} & b_{-2} \\
b_{-2} & b_{-3} & & & b_3 & b_2 & b_1 & b_0 & b_{-1} \\
b_{-1} & b_{-2} & b_{-3} & & & b_3 & b_2 & b_1 & b_0
\end{pmatrix}, \qquad (13)
$$

其中，$b_l=\theta^{(k)}(l)$, l是区间$-3\le l\le 3$上的整数。

小波配点方法

定理1: 对于DM小波的自相关函数，空间离散矩阵B_k具有以下性质:
(1) B_{2k} 是对称矩阵，B_{2k+1} 是反对称的。
(2) B_k是带宽为$2M-1$的循环矩阵，$B_{2k}B_{2k'+1}$是带宽为$4M-3$的循环矩阵。一般地，$C=B_{2k_1}^{n_1}B_{2k_2}^{n_2}B_{2k_3+1}^{n_3}B_{2k_4+1}^{n_4}$ 是带宽为$2(n_1+n_2+n_3+n_4)(M-1)+1$的循环矩阵，若$n_3+n_4$为偶数，$C$是对称的，反之，为反对称的。
(3) 循环矩阵B_k的特征值为

$$\lambda_j=2^{kJ}\hat{\theta}^{(k)}(\omega_j),\omega_j=-\frac{2\pi}{N}j,j=0,1,\cdots,N-1, \tag{14}$$

其中$\hat{\theta}^{(k)}(\omega)$ 是$\theta^{(k)}(x)$的Fourier变换，且满足以下关系式

$$FB_kF^*=2^{kJ}diag(\hat{\theta}^{(k)}(\omega_0),\hat{\theta}^{(k)}(\omega_1),\cdots,\hat{\theta}^{(k)}(\omega_{N-1})), \tag{15}$$

其中，F^* 是Fourier矩阵。
(4) B_{4k+2} 是半负定矩阵，B_{4k} 是半正定矩阵。

SWCM求解SCNLS方程

对于线性子系统(6)，在时空方向分别利用**辛Euler格式**和**多辛小波配点格式**进行离散。

对于非线性子系统(7)，应用**辛中点格式**；

利用如下的二阶组合方法把两个子问题的解结合起来

$$u_i(x, t+\Delta t) = \exp(\frac{\Delta t}{2}\mathcal{N})\exp(\Delta t\mathcal{L})\exp(\frac{\Delta t}{2}\mathcal{N})u_i(x, t). \quad (16)$$

数值结果

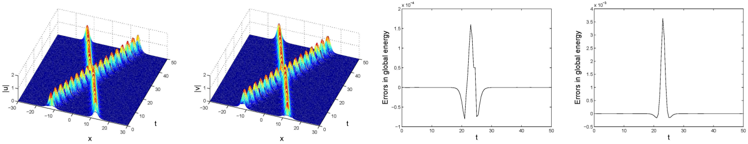

Figure: MSWS模拟双孤立波弹性碰撞，以及MSWS和MSFP算法全局能量误差的比较。

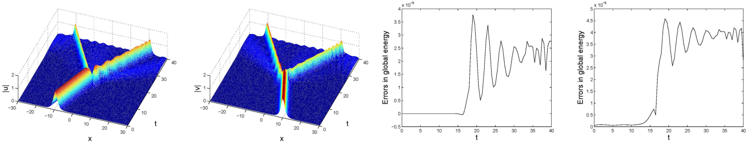

Figure: MSWS模拟双孤立波非弹性碰撞，以及MSWS和MSFP算法全局能量误差的比较。

变系数Schrödinger方程的守恒算法

变系数的一维非线性Schrödinger（1D-NLS）方程

$$i\psi_t + \alpha(t)\psi_{xx} + v(x)\psi + \beta(t)|\psi|^2\psi = 0, \tag{17}$$

命题：方程(17)的解ψ满足
(1) 电荷守恒:

$$\mathcal{Q}(\psi) = \int_{\mathbb{R}} |\varphi|^2 dx = \mathcal{Q}(\varphi); \tag{18}$$

(2) 全局动量守恒: 若$v(x)$为常数时，则

$$\mathcal{M}(\psi) = \int_{\mathbb{R}} (\Re(\psi)\Im(\psi_x) - \Re(\psi_x)\Im(\psi))dx = \mathcal{M}(\varphi), \tag{19}$$

其中$\Re$和$\Im$分别表示实部和虚部;
(3) 全局能量守恒: 若$\alpha(t)$和$\beta(t)$ 独立于t (即$\alpha(t)=\alpha$, $\beta(t)=\beta$), 则

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\psi) &= \int_{\mathbb{R}} (\alpha|\psi_x|^2 - v(x)|\psi|^2 - \frac{\beta}{2}|\psi|^4)dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} (\alpha|\varphi_x|^2 - v(x)|\varphi|^2 - \frac{\beta}{2}|\varphi|^4)dx = \mathcal{E}(\varphi).\end{aligned} \tag{20}$$

1D-NLS分裂技术

把一个非线性系统

$$w_t = (\mathcal{L}(t) + \mathcal{N}(t, w))w, \tag{21}$$

在每个时间层分裂成一个线性的子系统

$$w_t = \mathcal{L}(t)w, \tag{22}$$

和一个非线性的子系统

$$w_t = \mathcal{N}(t, w)w, \tag{23}$$

根据Strang的分裂思想求解(22)(23) ($t \in [t_n, t_{n+1}]$)，有

$$\begin{aligned} w^* &= \exp\left[\frac{1}{2}\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{N}(t, w(t_n))dt\right] w(t_n), \\ w^{**} &= \exp\left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{L}(t)dt\right] w^*, \\ w(t_{n+1}) &= \exp\left[\frac{1}{2}\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{N}(t, w^{**})dt\right] w^{**}. \end{aligned} \tag{24}$$

变系数Schrödinger方程的守恒算法

具体地，提出了一种小波分裂（WCS）方法，以及一种与之类似的Fourier拟谱分裂（FPSS）方法来作为比较。主要求解以下三类方程：

(1) 立方1D-NLS方程

$$i\psi_t + \alpha(t)\psi_{xx} + \beta(t)|\psi|^2\psi = 0. \tag{25}$$

(2) Gross−Pitaevskii（GP）方程

$$i\psi_t + \alpha\psi_{xx} + v(x)\psi + \beta|\psi|^2\psi = 0. \tag{26}$$

(3) 二维线性Schrödinger（2D-LS）方程

$$i\psi_t + \frac{1}{2}\psi_{xx} + \frac{1}{2}\psi_{yy} + (v(x,y) - \varepsilon(t)x)\psi = 0, \tag{27}$$

WCS算法格式（一维情形）

现利用小波配点方法离散方程的线性部分

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_j = i\alpha(t)(B_2\Psi)_j, \tag{28}$$

其中，$\Psi = (\psi_0, \psi_1, \ldots, \psi_{N-1})^{\mathrm{T}}$, $j = 0, 1, \ldots, N-1$.

然后，利用Euler中点格式在时间方向对该子系统进行离散

$$\psi_j^{n+1} = \psi_j^n + \frac{i\tau}{2}(\alpha^{n+1} + \alpha^n)(B_2\Psi^{n+1/2})_j, \tag{29}$$

其中，$\Psi^{n+1/2} = (\Psi^{n+1} + \Psi^n)/2$。

针对1D-NLS方程，可以得到如下的WCS算法:

$$\begin{aligned}
\psi_j^* &= \exp\left[i\left(v(x_j) + |\psi_j^n|^2 \int_{t_n}^{t_{n+1}} \beta(t)dt\right)/2\right]\psi_j^n, \quad j = 0, 1, \ldots, N-1, \\
\psi_j^{**} &= \psi_j^* + \tfrac{i\tau}{4}(\alpha^{n+1} + \alpha^n)(B_2(\Psi^{**} + \Psi^*))_j, \quad j = 1, 2, \ldots, N-2, \\
\psi_0^{**} &= \psi_{N-1}^{**} = 0, \\
\psi_j^{n+1} &= \exp\left[i\left(v(x_j) + |\psi_j^{**}|^2 \int_{t_n}^{t_{n+1}} \beta(t)dt\right)/2\right]\psi_j^{**}, \quad j = 0, 1, \ldots, N-1.
\end{aligned} \tag{30}$$

WCS算法格式（二维情形）

根据分裂技术，可以将2D-LS方程(27)分裂成两个子系统:

$$\mathcal{L}_1 \quad \psi_t = i(\frac{1}{2}\psi_{xx} + \frac{1}{2}\psi_{yy}), \tag{31}$$

$$\mathcal{L}_2 \quad \psi_t = i(v(x,y) - \varepsilon(t)x)\psi. \tag{32}$$

类似于一维情形，针对2D-LS方程(27)，可以得到如下的WCS算法:

$$\begin{aligned}
\psi^*_{l,l'} &= \exp\left[i\left(v(x_l,y_{l'})\tau - x_l\int_{t_n}^{t_{n+1}}\varepsilon(t)dt\right)/2\right]\psi^n_{l,l'}, \quad l,l' = 0,1,\ldots,N-1,\\
\psi^{**}_{l,l'} &= \psi^*_{l,l'} + \tfrac{i\tau}{4}(A(\Psi^{**}+\Psi^*))_{l,l'}, \quad l,l' = 1,2,\ldots,N-2,\\
\psi^{**}_{0,l'} &= \psi^{**}_{N-1,l'} = \psi^{**}_{l,0} = \psi^{**}_{l,N-1} = 0, \quad l,l' = 0,1,\ldots,N-1,\\
\psi^{n+1}_{l,l'} &= \exp\left[i\left(v(x_l,y_{l'})\tau - x_l\int_{t_n}^{t_{n+1}}\varepsilon(t)dt\right)/2\right]\psi^{**}_{l,l'}, \quad l,l' = 0,1,\ldots,N-1.
\end{aligned} \tag{33}$$

其中，$A = B_2 \otimes I_N + I_N \otimes B_2$，$\otimes$是Kronecker内积，$I_N$ 是$N \times N$的单位矩阵，B_k 是$N \times N$ 的循环矩阵。

理论分析

定理2: 假定$p(x,t)$, $q(x,t)\in H^s(a,b)$, $s\geq \frac{5}{2}$, $\forall t\in[0,T]$, $p(x,t)$, $q(x,t)\in C^4(a,b)$, $\alpha(t)\equiv\alpha$. 则WCS算法的截断误差R^n

$$\|R^n\|\leq O(\tau+2^{-J(s-2)}).$$

定理3: 假设$\psi(x,t)$ 与定理2定义一致，则WCS算法的误差估计e^M 满足

$$\|e^M\|\leq O(\tau+2^{-J(s-2)}).$$

定理4: WCS算法能保持电荷守恒

$$\mathcal{Q}^{n+1}=\|\Psi^{n+1}\|^2=\triangle x\sum_j|\psi^{n+1}|^2=\cdots=\mathcal{Q}^0, \qquad (34)$$

其中，$\triangle x$ 为空间步长。

理论分析

定理5： 若$\alpha(t) \equiv \alpha$, $\beta(t) \equiv \beta$, 以及波函数ψ是独立的，即

$$\psi(x,t) = X(x)T(t), \tag{35}$$

则WCS算法满足离散的全局能量守恒律

$$\begin{aligned} &\triangle x \sum_j \left(\alpha |(B_2 \Psi^{n+1})_j|^2 - v_j |\psi_j^{n+1}|^2 - \frac{\beta}{2} |\psi_j^{n+1}|^4 \right) \\ &= \triangle x \sum_j \left(\alpha |(B_2 \Psi^{n})_j|^2 - v_j |\psi_j^{n}|^2 - \frac{\beta}{2} |\psi_j^{n}|^4 \right). \end{aligned} \tag{36}$$

换言之

$$\mathcal{E}^{n+1} = \mathcal{E}^n = \cdots = \mathcal{E}^0. \tag{37}$$

WCS算法求解1D-NLS方程

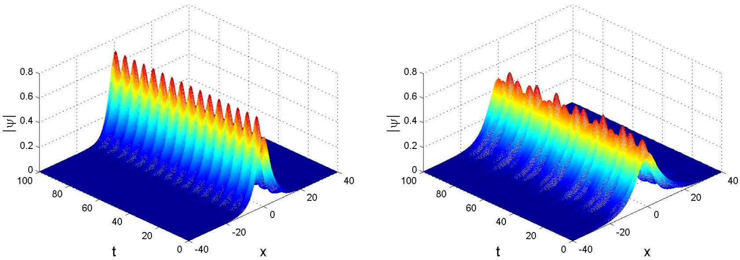

Figure: WCS算法计算周期（左边）和拟周期（右边）孤立波。

WCS算法求解GP方程

Table: 两种算法在不同时间数值误差的比较

时间	实部		虚部	
	L^∞ 误差	L^2 误差	L^∞误差	L^2 误差
WCS 算法				
5	3.599E-7	6.362E-7	1.267E-7	2.353E-7
10	4.988E-7	8.826E-7	5.836E-7	1.031E-6
15	5.620E-7	9.913E-7	9.979E-7	1.777E-6
20	1.516E-6	2.681E-6	2.394E-7	4.187E-7
25	3.838E-7	6.711E-7	1.879E-6	3.324E-6
30	1.990E-6	3.464E-6	1.318E-6	2.152E-6
FPSS 算法				
5	8.980E-6	1.590E-5	3.165E-6	5.884E-6
10	1.244E-5	2.206E-5	1.456E-5	2.577E-5
15	1.402E-5	2.478E-5	2.489E-5	4.442E-5
20	3.782E-5	6.704E-5	5.958E-6	1.046E-5
25	9.360E-6	1.677E-5	4.673E-5	8.311E-5
30	4.889E-5	8.660E-5	3.011E-5	5.347E-5

WCS算法求解2D-LS方程

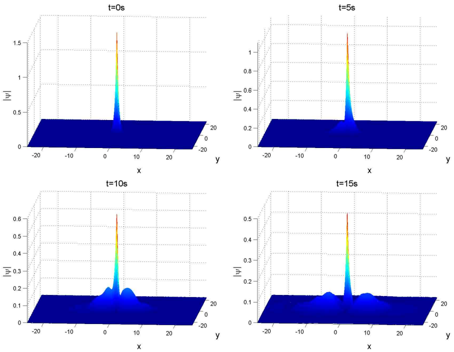

Figure: WCS算法模拟原子与激光场的相互作用。

间断型Schrödinger方程的高精度守恒算法

考虑非线性Schrödinger 方程(NLSE),或称Gross-Pitaevskii 方程(GPE)

$$i\hbar\partial_t\Phi(\mathbf{r},t)=\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r})+g|\Phi(\mathbf{r},t)|^2\Big)\Phi(\mathbf{r},t). \tag{38}$$

(1)电荷守恒

$$\mathcal{N}=\int|\Phi(\mathbf{r},t)|^2d\mathbf{r}; \tag{39}$$

(2)全局能量守恒:

$$\mathcal{E}(\Phi)=\int\Big[\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\Phi(\mathbf{r},t)|^2+V_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r})|\Phi(\mathbf{r},t)|^2+\frac{g}{2}|\Phi(\mathbf{r},t)|^4\Big]d\mathbf{r}. \tag{40}$$

修正Crank–Nicolson小波格式

对于1+1维GPE，在空间上利用小波配点方法，时间上利用修正Crank–Nicolson格式

$$i\hbar D_t\Phi^n = -\frac{\hbar^2}{2m}A_tB_2\Phi^n + V\cdot A_t\Phi^n + gA_t|\Phi^n|^2\cdot A_t\Phi^n, \qquad (41)$$

其中

$$\Phi^n = (\phi_0^n, \phi_1^n, \ldots, \phi_{N-1}^n)^{\mathrm{T}}, |\Phi^n|^2 = (|\phi_0^n|^2, |\phi_1^n|^2, \ldots, |\phi_{N-1}^n|^2)^{\mathrm{T}},$$

$$\Phi^{n+1}\cdot\Phi^n = (\phi_0^{n+1}\phi_0^n, \phi_1^{n+1}\phi_1^n, \ldots, \phi_{N-1}^{n+1}\phi_{N-1}^n)^{\mathrm{T}},$$

$$V = (v_0, v_1, \ldots, v_{N-1})^{\mathrm{T}} = (V_{\mathrm{ext}}(x_0), V_{\mathrm{ext}}(x_1), \ldots, V_{\mathrm{ext}}(x_{N-1}))^{\mathrm{T}};$$

$D_t\Phi^n = (\Phi^{n+1} - \Phi^n)/\tau$, $A_t\Phi^n = (\Phi^{n+1} + \Phi^n)/2$; $B_2 = B_1^2$.

小波分裂格式

将1+1维GPE分裂为一个线性方程

$$\mathcal{L}: \quad i\hbar\partial_t\Phi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}\Phi(x,t), \tag{42}$$

和一个非线性方程

$$\mathcal{N}: \quad i\hbar\partial_t\Phi(x,t) = V_{\mathrm{ext}}(x)\Phi(x,t) + g|\Phi(x,t)|^2\Phi(x,t). \tag{43}$$

利用标准Strang分裂，得到分裂格式：

$$\begin{aligned}
\phi_j^* &= \exp\left[-\frac{i\tau}{2\hbar}\left(v_j + g|\phi_j^n|\right)\right]\phi_j^n, \quad j = 0,1,\ldots,N-1, \\
\phi_j^{**} &= \phi_j^* + \frac{i\tau\hbar}{4m}(B_2(\Phi^{**}+\Phi^*))_j, \quad j = 0,1,\ldots,N-1, \\
\phi_j^{n+1} &= \exp\left[-\frac{i\tau}{2\hbar}\left(v_j + g|\phi_j^{**}|\right)\right]\phi_j^{**}, \quad j = 0,1,\ldots,N-1.
\end{aligned} \tag{44}$$

数值理论分析

Theorem

周期边界条件下，修正*Crank–Nicolson*小波格式具有离散电荷和能量守恒律

$$\mathcal{N}^{n+1} = \|\Phi^{n+1}\|^2 = h\sum_{l=0}^{N-1}|\phi_l^{n+1}|^2 = \mathcal{N}^n = \cdots = \mathcal{N}^0, \quad (45)$$

$$\mathcal{E}^{n+1} = \mathcal{E}^n = \cdots = \mathcal{E}^0, \quad (46)$$

其中

$$\mathcal{E}^n = \frac{\hbar^2}{2m}\|B_1\Phi^n\|^2 + \frac{g}{2}\|\Phi^n\|^4 + h\sum_{l=0}^{N-1} v_l|\phi_l^n|^2. \quad (47)$$

数值理论分析

Theorem

$\Phi(x,t) = p(x,t) + iq(x,t)$ 假设$p(x,t)$, $q(x,t) \in H^s(a,b)$, $s \geq \frac{5}{2}$, $\forall t \in [0,T]$, $p(x,t)$, $q(x,t) \in C^{4,2}_{x,t}$, $V_{ext}(x)$ 在$[a,b]$上有界. 则截断误差

$$\|R^n\| \leq O(\tau + 2^{-J(s-2)}).$$

数值理论分析

Theorem

$\Phi(x,t)=p(x,t)+iq(x,t)$ 假设$p(x,t)$, $q(x,t)\in H^s(a,b)$, $s\geq\frac{5}{2}$, $\forall t\in[0,T]$, $p(x,t)$, $q(x,t)\in C^{4,2}_{x,t}$, $V_{ext}(x)$ 在$[a,b]$上有界. 则截断误差

$$\|R^n\|\leq O(\tau+2^{-J(s-2)}).$$

Theorem

假设条件与上述一致情况下，则误差估计e^M 满足

$$\|e^M\|\leq O(\tau+2^{-J(s-2)}).$$

利用离散delta函数(Peskin, 1977),

$$\delta_h(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{4h}\left(1 + \cos\dfrac{\pi x}{2h}\right), & |x| < 2h, \\ 0, & |x| \geq 2h. \end{cases} \tag{48}$$

$\delta_h(x)$ 满足以下性质:

$$\sum_i h\delta_h(x - ih) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta_h(x) dx = 1, \tag{49}$$

$$\delta_h(x) = \delta_h(-x). \tag{50}$$

$$\lim_{h\to 0} \sum_i h\delta_h(x - ih) f_i = f(x), \tag{51}$$

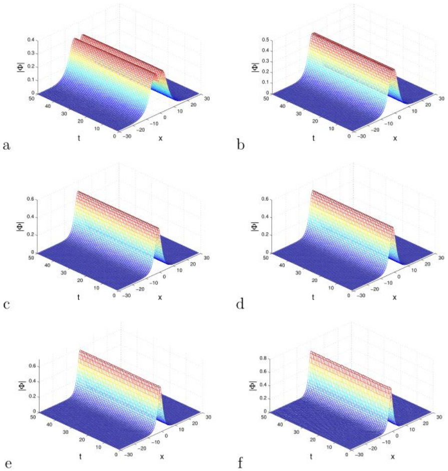

Figure 1: Perturbations of soliton solutions by CNWM with $\lambda = 0.2$ (a), $\lambda = 0.1$ (b), $\lambda = 0.01$ (c), $\lambda = 0$ (d), $\lambda = -0.1$ (e) and $\lambda = -0.2$ (f).

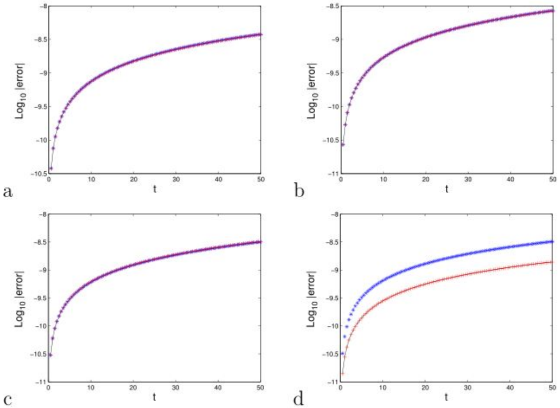

Figure 2: The errors in discrete charge with $\lambda = 0.2$ (a), $\lambda = 0.1$ (b), $\lambda = 0.01$ (c) and $\lambda = 0$ (d): Solid line: CNWM; Blue $*$ symbols: TSWM; Red $+$ symbols: CNWM-ORI.

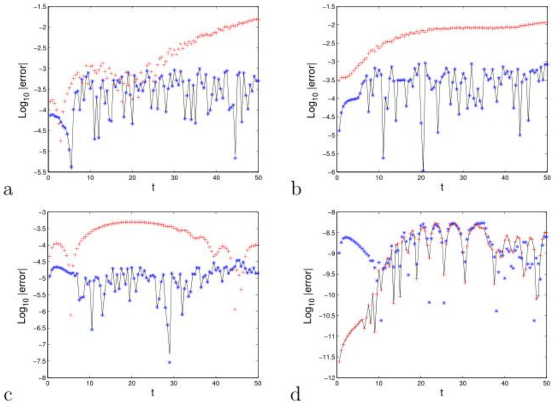

Figure 3: The errors in discrete energy with $\lambda = 0.2$ (a), $\lambda = 0.1$ (b), $\lambda = 0.01$ (c) and $\lambda = 0$ (d): Solid line: CNWM; Blue $*$ symbols: TSWM; Red $+$ symbols: CNWM-ORI.

二维非线性Schrödinger方程的守恒算法

考虑二维非线性Schrödinger（2D-NLS）方程

$$i\psi_t + \psi_{xx} + \psi_{yy} + \beta|\psi|^2\psi = 0, \quad i = \sqrt{-1}, \tag{52}$$

令$\psi(x,y,t) = p(x,y,t) + iq(x,y,t)$，再引入辅助变量后，可以得到方程(52)的等价形式，即一个常微分方程组

$$\begin{aligned}
-p_t &= b + d + \beta(p^2 + q^2)q, \\
q_t &= a + c + \beta(p^2 + q^2)p, \\
u_x &= a, \quad p_x = u, \\
g_x &= b, \quad q_x = g, \\
v_y &= c, \quad p_y = v, \\
w_y &= d, \quad q_y = w.
\end{aligned} \tag{53}$$

2D-NLS方程的局部守恒律

定理6： 2D-NLS系统(53)满足局部能量守恒律（LECL）

$$\partial_t E + \partial_x F_1 + \partial_y F_2 = 0, \tag{54}$$

其中，能量密度$E = \frac{\beta}{4}(p^2+q^2)^2 - \frac{1}{2}(u^2+g^2+v^2+w^2)$, 能量通量$F_1 = up_t + gq_t$, $F_2 = vp_t + wq_t$.

定理7： 2D-NLS系统(53) 满足局部动量守恒律（LMCL）

$$\partial_t I + \partial_x G_1 + \partial_y G_2 = 0, \tag{55}$$

其中，动量密度$I = \frac{1}{2}(pg - qu)$, 动量通量$G_1 = \frac{\beta}{4}(p^2+q^2)^2 + \frac{1}{2}(u^2+g^2) + \frac{1}{2}(qp_t - pq_t) - \frac{1}{2}(p_y^2+q_y^2)$, $G_2 = gw + uv$.

2D-NLS方程的能量守恒（LEC）算法

利用中点格式在时空方向分别对方程(53)进行离散，可得到如下格式

$$
\begin{aligned}
-D_tA_xA_yp_{k,l}^n &= A_tA_xA_yb_{k,l}^n + A_tA_xA_yd_{k,l}^n + \beta A_t(|A_xA_y\psi_{k,l}^n|^2)\cdot A_tA_xA_yq_{k,l}^n,\\
D_tA_xA_yq_{k,l}^n &= A_tA_xA_ya_{k,l}^n + A_tA_xA_yc_{k,l}^n + \beta A_t(|A_xA_y\psi_{k,l}^n|^2)\cdot A_tA_xA_yp_{k,l}^n,\\
A_yD_xu_{k,l}^n &= A_xA_ya_{k,l}^n, \quad A_yD_xp_{k,l}^n = A_xA_yu_{k,l}^n,\\
A_yD_xg_{k,l}^n &= A_xA_yb_{k,l}^n, \quad A_yD_xq_{k,l}^n = A_xA_yg_{k,l}^n,\\
A_xD_yv_{k,l}^n &= A_xA_yc_{k,l}^n, \quad A_xD_yp_{k,l}^n = A_xA_yv_{k,l}^n,\\
A_xD_yw_{k,l}^n &= A_xA_yd_{k,l}^n, \quad A_xD_yq_{k,l}^n = A_xA_yw_{k,l}^n.
\end{aligned}
\tag{56}
$$

消去辅助变量

$$
iD_tA_x^2A_y^2\psi_{k,l}^n + A_tA_y^2D_x^2\psi_{k,l}^n + A_tA_x^2D_y^2\psi_{k,l}^n + A_xA_y(\beta A_t|A_xA_y\psi_{k,l}^n|^2\cdot A_tA_xA_y\psi_{k,l}^n) = 0. \tag{57}
$$

LEC算法的守恒性质

定理8： 格式(57) 满足离散局部能量守恒律

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{k,l}^{n} =&D_t[\frac{\beta}{4}|A_xA_y\psi_{k,l}^{n}|^4-\frac{1}{2}(|D_xA_y\psi_{k,l}^{n}|^2+|D_yA_x\psi_{k,l}^{n}|^2)]\\&+D_x(A_tA_yu_{k,l}^{n}\cdot D_tA_yp_{k,l}^{n}+A_tA_yg_{k,l}^{n}\cdot D_tA_yq_{k,l}^{n})\\&+D_y(A_tA_xv_{k,l}^{n}\cdot D_tA_xp_{k,l}^{n}+A_tA_xw_{k,l}^{n}\cdot D_tA_xq_{k,l}^{n})=0.\end{aligned} \tag{58}$$

定理9： 在周期边界条件下，格式(57)满足离散全局能量守恒律

$$\begin{aligned}&\triangle x\triangle y\sum_{k,l}\left[\frac{\beta}{4}|A_xA_y\psi_{k,l}^{n+1}|^4-\frac{1}{2}(|D_xA_y\psi_{k,l}^{n+1}|^2+|D_yA_x\psi_{k,l}^{n+1}|^2)\right]\\=&\triangle x\triangle y\sum_{k,l}\left[\frac{\beta}{4}|A_xA_y\psi_{k,l}^{n}|^4-\frac{1}{2}(|D_xA_y\psi_{k,l}^{n}|^2+|D_yA_x\psi_{k,l}^{n}|^2)\right].\end{aligned} \tag{59}$$

换言之

$$\mathcal{E}^{n+1}=\mathcal{E}^{n}=\cdots=\mathcal{E}^{0}. \tag{60}$$

定理10： 在周期边界条件下，格式(57)保持电荷守恒

$$\mathcal{Q}^{n+1}=\|A_xA_y\Psi^{n+1}\|^2=\triangle x\triangle y\sum_{k,l}|A_xA_y\psi_{k,l}^{n+1}|^2=\cdots=\mathcal{Q}^{0}. \tag{61}$$

2D-NLS方程的动量守恒（LMC）算法

利用中点格式在时空方向分别对方程(53)进行离散，可得到如下格式

$$
\begin{aligned}
-D_tA_xA_yp_{k,l}^n &= A_tA_xA_yb_{k,l}^n + A_tA_xA_yd_{k,l}^n + \beta A_x(|A_tA_y\psi_{k,l}^n|^2)\cdot A_tA_xA_yq_{k,l}^n,\\
D_tA_xA_yq_{k,l}^n &= A_tA_xA_ya_{k,l}^n + A_tA_xA_yc_{k,l}^n + \beta A_x(|A_tA_y\psi_{k,l}^n|^2)\cdot A_tA_xA_yp_{k,l}^n,\\
A_yD_xu_{k,l}^n &= A_xA_ya_{k,l}^n, \quad A_yD_xp_{k,l}^n = A_xA_yu_{k,l}^n,\\
A_yD_xg_{k,l}^n &= A_xA_yb_{k,l}^n, \quad A_yD_xq_{k,l}^n = A_xA_yg_{k,l}^n,\\
A_xD_yv_{k,l}^n &= A_xA_yc_{k,l}^n, \quad A_xD_yp_{k,l}^n = A_xA_yv_{k,l}^n,\\
A_xD_yw_{k,l}^n &= A_xA_yd_{k,l}^n, \quad A_xD_yq_{k,l}^n = A_xA_yw_{k,l}^n,
\end{aligned} \tag{62}
$$

消去辅助变量

$$
iD_tA_x^2A_y^2\psi_{k,l}^n + A_tA_y^2D_x^2\psi_{k,l}^n + A_tA_x^2D_y^2\psi_{k,l}^n + A_xA_y(\beta A_x|A_tA_y\psi_{k,l}^n|^2\cdot A_tA_xA_y\psi_{k,l}^n) = 0. \tag{63}
$$

LMC算法的守恒性质

定理11： 格式满足离散的局部动量守恒律

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{k,l}^n =& D_t[\frac{1}{2}(A_xA_yp_{k,l}^n\cdot D_xA_yq_{k,l}^n-A_xA_yq_{k,l}^n\cdot D_xA_yp_{k,l}^n)]+D_x\Big(\frac{\beta}{4}|A_tA_y\psi_{k,l}^n|^4\\ &+\frac{1}{2}[(A_tA_yg_{k,l}^n)^2+(A_tA_yu_{k,l}^n)^2]+\frac{1}{2}(A_tA_yq_{k,l}^n\cdot D_tA_yp_{k,l}^n-A_tA_yp_{k,l}^n\\ &\cdot D_tA_yq_{k,l}^n)-\frac{1}{2}[(A_tD_yq_{k,l}^n)^2+(A_tD_yp_{k,l}^n)^2]\Big)+D_y(A_tA_xw_{k,l}^n\cdot D_xA_tq_{k,l}^n\\ &+A_tA_xv_{k,l}^n\cdot D_xA_tp_{k,l}^n)=0.\end{aligned} \tag{64}$$

定理12： 在周期边界条件下，格式满足离散全局动量守恒律

$$\begin{aligned}&\triangle x\triangle y\sum_{k,l}\Big[\frac{1}{2}(A_xA_yp_{k,l}^{n+1}\cdot D_xA_yq_{k,l}^{n+1}-A_xA_yq_{k,l}^{n+1}\cdot D_xA_yp_{k,l}^{n+1})\Big]\\ =&\triangle x\triangle y\sum_{k,l}\Big[\frac{1}{2}(A_xA_yp_{k,l}^{n}\cdot D_xA_yq_{k,l}^{n}-A_xA_yq_{k,l}^{n}\cdot D_xA_yp_{k,l}^{n})\Big].\end{aligned} \tag{65}$$

换言之

$$\mathcal{M}^{n+1}=\mathcal{M}^n=\cdots=\mathcal{M}^0. \tag{66}$$

定理13： 在周期边界条件下，格式保持电荷守恒

$$\mathcal{Q}^{n+1}=\|A_xA_y\Psi^{n+1}\|^2=\triangle x\triangle y\sum_{k,l}|A_xA_y\psi_{k,l}^{n+1}|^2=\cdots=\mathcal{Q}^0. \tag{67}$$

LEC、LMC算法精度比较

2D-NLS方程(52)具有平面波解: $\psi(x,y,t)=A\exp(i(c_1x+c_2y-\omega t))$.

Table: 三种算法在不同时间数值误差的比较。

时间	实部		虚部	
	L^∞ 误差	L^2 误差	L^∞误差	L^2 误差
LEC算法				
2	2.011E-04	1.420E-04	2.011E-04	1.420E-04
4	4.031E-04	2.841E-04	4.034E-04	2.841E-04
6	6.140E-04	4.262E-04	6.135E-04	4.262E-04
8	8.949E-04	5.699E-04	8.785E-04	5.699E-04
10	1.773E-03	7.813E-04	1.612E-03	7.813E-04
LMC算法				
2	8.033E-04	5.679E-04	8.034E-04	5.679E-04
4	1.607E-03	1.135E-03	1.608E-03	1.135E-03
6	2.421E-03	1.703E-03	2.420E-03	1.703E-03
8	3.300E-03	2.272E-03	3.285E-03	2.272E-03
10	4.712E-03	2.858E-03	4.515E-03	2.858E-03

LEC算法和LMC算法离散总电荷误差的比较

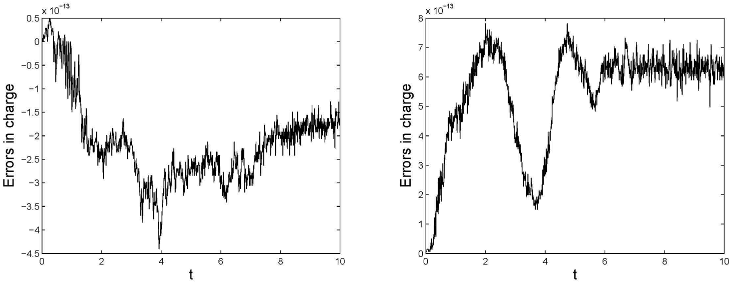

Figure: LEC算法（左边）和LMC算法（右边）离散总电荷误差的比较。

LEC算法和MSP算法离散局部和全局能量误差的比较

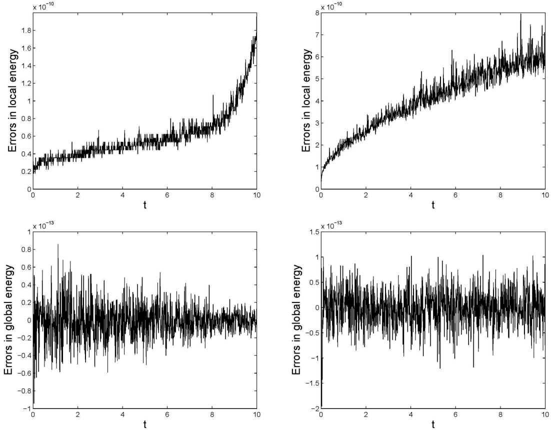

Figure: LEC算法（左边）和MSP算法（右边）离散局部和全局能量误差的比较。

LMC算法和MSP算法离散局部和全局动量误差的比较

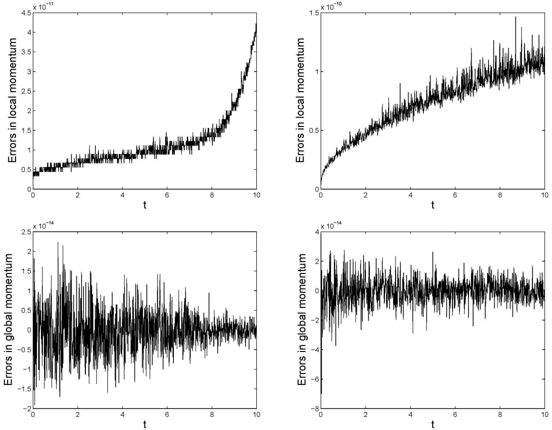

Figure: LMC算法（左边）和MSP算法（右边）离散局部和全局动量误差的比较。

初值条件：$\psi(x, y, 0) = \exp(-(x^2 + y^2)/2)$

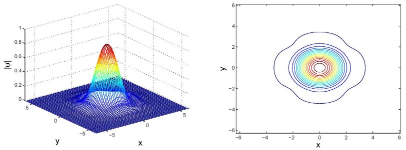

Figure: LEC算法模拟在$t = 100$时的孤立波解。

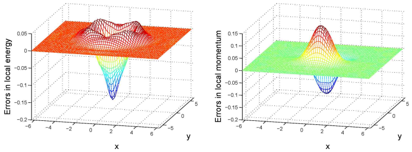

Figure: $t = 100$时LEC算法局部能量残差（左边）和LMC算法局部动量残差（右边）。

多变量耦合非线性Schrödinger方程的守恒算法

具有N_c个变量的CNLS方程

$$i\frac{\partial\psi_m}{\partial t} + \alpha_m\frac{\partial^2\psi_m}{\partial x^2} + (\sum_{j=1}^{N_c}\sigma_{mj}|\psi_j|^2)\psi_m = 0, \quad m = 1, 2, \ldots, N_c, \tag{68}$$

其中，ψ_m为第m个变量的复振幅，$i=\sqrt{-1}$, x和t分别为空间和时间变量。参数α_m 为色散系数，σ_{mm}为Landau常数，$\sigma_{mj}(j\neq m)$为波波相互作用系数，它描述波包的交叉调制，它们均为实数。

若考虑$N_c=3$的情形，此系统满足电荷守恒律

$$\mathcal{Q}_m(t) = \int_{\mathbb{R}}|\psi_m|^2dx = \mathcal{Q}_m(0), \quad m = 1, 2, 3,$$

和能量守恒律

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(t) = \int_{\mathbb{R}}\Big[&\frac{\sigma}{4}(|\psi_1|^4 + |\psi_2|^4 + |\psi_3|^4 + 2|\psi_1|^2|\psi_2|^2) + \frac{e}{2}|\psi_2|^2(|\psi_1|^2 + |\psi_3|^2)\\ &- \frac{\alpha_1}{2}\Big|\frac{\partial}{\partial x}\psi_1\Big|^2 - \frac{\alpha_2}{2}\Big|\frac{\partial}{\partial x}\psi_2\Big|^2 - \frac{\alpha_3}{2}\Big|\frac{\partial}{\partial x}\psi_3\Big|^2\Big]dx = \mathcal{E}(0).\end{aligned}$$

多变量CNLS方程的守恒方法

分别在空间方向利用高阶紧致差分方法、Fourier拟谱方法以及小波配点方法进行离散，在时间方向利用中点格式进行离散后得到格式

$$iD_t\Psi_m^n + \alpha_m A_t D_1^2\Psi_m^n + A_t\left(\sum_{j=1}^{N_c}\sigma_{mj}|\Psi_j^n|^2\right)\cdot A_t\Psi_m^n = 0, \quad m = 1, 2, \ldots, N_c, \tag{69}$$

其中，若选用高阶紧致差分方法$D_1 = D_1^{\mathcal{HOC}}$进行离散，记格式(69)为保能量高阶紧致方法（EPHOCM）。类似地，当利用$D_1 = D_1^{\mathcal{FP}}$和$D_1 = D_1^{\mathcal{WC}}$时，分别记为保能量Fourier拟谱方法（EPFPM）和保能量小波配点方法（EPWCM）。

离散守恒律

定理14： 在周期边界条件下，格式(69)保持总电荷守恒

$$\mathcal{Q}_m^{n+1} = \|\Psi_m^{n+1}\|^2 = \Delta x \sum_{l=0}^{N-1} |\psi_{m_l}^{n+1}|^2 = \mathcal{Q}_m^n = \cdots = \mathcal{Q}_m^0, \quad m = 1, 2, \ldots, N_c. \qquad (70)$$

注： 离散格式(69) 对任意的常数N_c和σ_{mj}均满足电荷守恒律(70). 更进一步，它同样满足电荷守恒形式$\sum_{m=1}^{N_c} \|\Psi_m^{n+1}\|^2 = \sum_{m=1}^{N_c} \|\Psi_m^n\|^2$, 即$\mathcal{Q}^{n+1} = \mathcal{Q}^n$.

定理15： 周期边界条件下，$N_c = 3$时，格式(69)满足离散能量守恒律

$$\mathcal{E}^{n+1} = \mathcal{E}^n = \cdots = \mathcal{E}^0, \qquad (71)$$

其中

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^n =& \frac{\sigma}{4}(\|\Psi_1^n\|^4 + \|\Psi_2^n\|^4 + \|\Psi_3^n\|^4 + 2\Delta x \sum_{l=0}^{N-1} |\psi_{1_l}^n|^2 |\psi_{3_l}^n|^2) \\ &+ \frac{e}{2}(\Delta x \sum_{l=0}^{N-1} |\psi_{1_l}^n|^2 |\psi_{2_l}^n|^2 + \Delta x \sum_{l=0}^{N-1} |\psi_{2_l}^n|^2 |\psi_{3_l}^n|^2) \\ &- \frac{\alpha_1}{2}\|D_1\Psi_1^n\|^2 - \frac{\alpha_2}{2}\|D_1\Psi_2^n\|^2 - \frac{\alpha_3}{2}\|D_1\Psi_3^n\|^2.\end{aligned} \qquad (72)$$

多变量CNLS方程的守恒方法

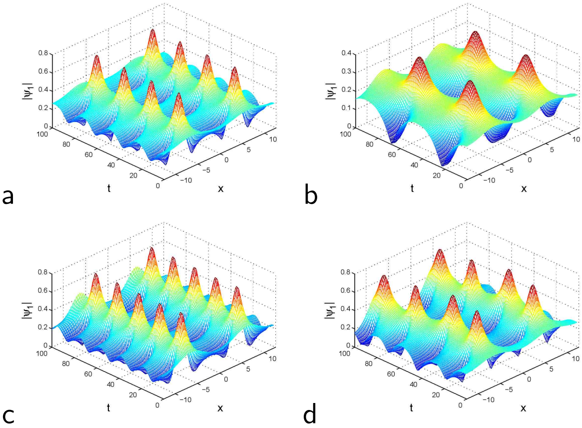

Figure: EPFPM 模拟不稳定波解Ψ_1.

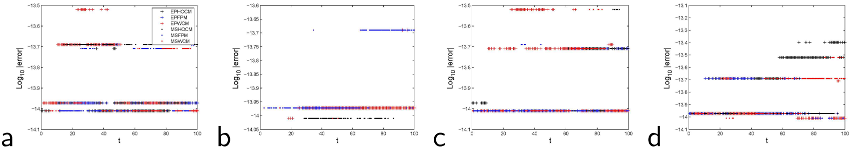

Figure: 离散总电荷误差的比较。

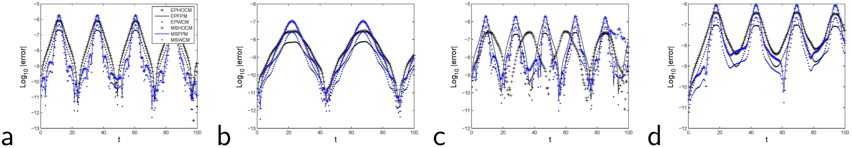

Figure: 离散能量误差的比较。

总结

- 小波配点格式不仅精度高、计算量少，而且具有较好的奇异捕捉能力和不变量的保持特性。

总结

- 小波配点格式不仅精度高、计算量少，而且具有较好的奇异捕捉能力和不变量的保持特性。
- 针对强非线性、强耦合、间断的问题，利用相应的解耦和分裂策略，把一些复杂问题分裂成若干简单问题进行求解，显著降低了计算复杂度，计算效率明显提高。

总结

- 小波配点格式不仅精度高、计算量少，而且具有较好的奇异捕捉能力和不变量的保持特性。
- 针对强非线性、强耦合、间断的问题，利用相应的解耦和分裂策略，把一些复杂问题分裂成若干简单问题进行求解，显著降低了计算复杂度，计算效率明显提高。
- 针对一系列问题提供了若干构造保结构算法的框架，能够直接地构造相应的保结构离散格式，以适应复杂系统自身的要求。

下一步工作

- 边界条件的推广

下一步工作

- 边界条件的推广
- 基于小波自适应的保结构算法

下一步工作

- 边界条件的推广
- 基于小波自适应的保结构算法
- 自适应网格或非结构网格的保结构算法

下一步工作

- 边界条件的推广
- 基于小波自适应的保结构算法
- 自适应网格或非结构网格的保结构算法
- 并行框架下的实现

参考文献

1 Xu Qian, Songhe Song, Yaming Chen. A semi-explicit multi-symplectic splitting scheme for a 3-coupled nonlinear Schroodinger equation. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(4): 1255-1264.

参考文献

1 Xu Qian, Songhe Song, Yaming Chen. A semi-explicit multi-symplectic splitting scheme for a 3-coupled nonlinear Schroodinger equation. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(4): 1255-1264.

2 Xu Qian, Yaming Chen, Songhe Song. Novel conservative methods for Schrodinger equations with variable coefficients over long time, *Communications in Computational Physics*, 2014, 15(3): 692-711.

参考文献

1. Xu Qian, Songhe Song, Yaming Chen. A semi-explicit multi-symplectic splitting scheme for a 3-coupled nonlinear Schroodinger equation. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(4): 1255-1264.
2. Xu Qian, Yaming Chen, Songhe Song. Novel conservative methods for Schrodinger equations with variable coefficients over long time, *Communications in Computational Physics*, 2014, 15(3): 692-711.
3. Xu Qian, Hao Fu, Songhe Song, Conservative modified Crank – Nicolson and time-splitting wavelet methods for modeling Bose – Einstein condensates in delta potentials, *Applied Mathematics and Computation*, (2017) 307 1 – 16.

参考文献

1. Xu Qian, Songhe Song, Yaming Chen. A semi-explicit multi-symplectic splitting scheme for a 3-coupled nonlinear Schroodinger equation. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(4): 1255-1264.
2. Xu Qian, Yaming Chen, Songhe Song. Novel conservative methods for Schrodinger equations with variable coefficients over long time, *Communications in Computational Physics*, 2014, 15(3): 692-711.
3. Xu Qian, Hao Fu, Songhe Song, Conservative modified Crank – Nicolson and time-splitting wavelet methods for modeling Bose – Einstein condensates in delta potentials, *Applied Mathematics and Computation*, (2017) 307 1 – 16.
4. Xu Qian, Hao Fu, Songhe Song. Structure-preserving wavelet algorithms for the nonlinear Dirac model, *Adv. Appl. Math. Mech.*, 2017, 9(4) 964-989.

参考文献

1. Xu Qian, Songhe Song, Yaming Chen. A semi-explicit multi-symplectic splitting scheme for a 3-coupled nonlinear Schroodinger equation. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(4): 1255-1264.
2. Xu Qian, Yaming Chen, Songhe Song. Novel conservative methods for Schrodinger equations with variable coefficients over long time, *Communications in Computational Physics*, 2014, 15(3): 692-711.
3. Xu Qian, Hao Fu, Songhe Song, Conservative modified Crank – Nicolson and time-splitting wavelet methods for modeling Bose – Einstein condensates in delta potentials, *Applied Mathematics and Computation*, (2017) 307 1 – 16.
4. Xu Qian, Hao Fu, Songhe Song. Structure-preserving wavelet algorithms for the nonlinear Dirac model, *Adv. Appl. Math. Mech.*, 2017, 9(4) 964-989.
5. Xu Qian, Songhe Song, Weibin Li. A simple framework of conservative algorithms for the coupled nonlinear Schrodinger equations with multiply components. *Communications in Theoretical Physics*, 2014, 61(6): 703-709.

参考文献

1. Xu Qian, Songhe Song, Yaming Chen. A semi-explicit multi-symplectic splitting scheme for a 3-coupled nonlinear Schroodinger equation. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(4): 1255-1264.
2. Xu Qian, Yaming Chen, Songhe Song. Novel conservative methods for Schrodinger equations with variable coefficients over long time, *Communications in Computational Physics*, 2014, 15(3): 692-711.
3. Xu Qian, Hao Fu, Songhe Song, Conservative modified Crank – Nicolson and time-splitting wavelet methods for modeling Bose – Einstein condensates in delta potentials, *Applied Mathematics and Computation*, (2017) 307 1 – 16.
4. Xu Qian, Hao Fu, Songhe Song. Structure-preserving wavelet algorithms for the nonlinear Dirac model, *Adv. Appl. Math. Mech.*, 2017, 9(4) 964-989.
5. Xu Qian, Songhe Song, Weibin Li. A simple framework of conservative algorithms for the coupled nonlinear Schrodinger equations with multiply components. *Communications in Theoretical Physics*, 2014, 61(6): 703-709.
6. 钱旭, 宋松和. 二维非线性Schrodinger方程的两类局部守恒算法. 中国科学:数学, 2018, 48(2): 345 – 360.

谢谢!