

薛定谔-泊松方程组 的数值计算和分析及其应用

(申请清华大学理学博士学位论文)

培 养 单 位 : 数 学 科 学 系

学 科 : 数 学

研 究 生 : 张 勇

指 导 教 师 : 简 怀 玉 教 授

二〇一二年五月

Numerical Methods and Analysis for the Schrödinger-Poisson Equations and Their Applications

Dissertation Submitted to

Tsinghua University

in partial fulfillment of the requirement

for the degree of

Doctor of Philosophy

in

Mathematics

by

Zhang Yong

Dissertation Supervisor : Professor Jian Huaiyu

May, 2012

关于学位论文使用授权的说明

本人完全了解清华大学有关保留、使用学位论文的规定，即：

清华大学拥有在著作权法规定范围内学位论文的使用权，其中包括：（1）已获学位的研究生必须按学校规定提交学位论文，学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存研究生上交的学位论文；（2）为教学和科研目的，学校可以将公开的学位论文作为资料在图书馆、资料室等场所供校内师生阅读，或在校园网上供校内师生浏览部分内容；（3）根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》，向国家图书馆报送可以公开的学位论文。

本人保证遵守上述规定。

（保密的论文在解密后应遵守此规定）

作者签名： _____

导师签名： _____

日 期： _____

日 期： _____

摘要

本文研究了薛定谔-泊松方程组的数值方法、数值分析和应用。首先我们研究了薛定谔-泊松方程组基态和动力学的快速高精度数值方法，接着分析了两类紧致差分格式在离散 l^2 、 H^1 和 l^∞ 范数下的最优误差估计，最后研究了三维薛定谔-泊松方程组在各向异性外势下的降维分析。

第一部分，我们首先介绍了求解基态的离散归一化梯度流方法以及求解动力学的分裂谱方法和半隐差分方法。接着，我们对泊松位势提出了多种快速高精度算法，包括快速卷积算法，正弦谱方法，傅立叶谱方法和基于人工边界的差分算法，同时分析指出了傅立叶谱方法因 0 模不相容性导致的精度丢失现象。然后，我们从基态和动力学两方面对各种算法进行了比较。最后，我们应用向后欧拉正弦谱方法和时间分裂正弦谱方法研究了三维薛定谔-泊松方程组在不同参数下的基态和动力学性质。

第二部分，我们提出了守恒 Crank-Nicolson 紧致差分格式和半隐紧致差分格式，并在一定正则性假设下，证明了两种格式在离散 l^2 、 H^1 和 l^∞ 范数下的最优误差估计 $O(h^4 + \tau^2)$ ，其中 h 和 τ 分别为空间步长和时间步长。

第三部分，我们首先给出了三维薛定谔-泊松方程组在各向异性外势下的降维分析，得到了三种低维退化模型，即面绝热模型，面密度模型和线绝热模型。面密度模型合理描述了二维简并量子电子的状态，其中电子相互作用位势用 Laplace 平方根算子的逆来刻画。接着，我们给出了低维退化模型里等效位势的快速高精度算法。然后，我们从基态解和动力学两方面数值验证了降维分析的合理性和收敛阶，并比较了面密度模型与二维薛定谔-泊松方程组的异同。最后，我们研究了面密度模型在不同参数下基态和动力学性质。

关键词：薛定谔-泊松方程组；基态解；动力学；紧致差分算法；降维分析

Abstract

In this thesis, we study the numerical methods and analysis for the Schrödinger-Poisson equations together with some applications. It consists of three main parts: (1) the computation of ground state and dynamics by accurate and efficient algorithms in different dimensions; (2) the optimal error estimates of two compact finite difference discretizations; (3) the dimension reduction analysis of the three dimensional (3D) Schrödinger-Poisson equations under anisotropic potentials.

In the first part, we first introduce the normalized gradient flow method, time splitting method and semi-implicit finite difference method, and then propose different algorithms to approximate the Poisson potential, which include fast convolution method, sine pseudospectral method, Fourier pseudospectral and finite difference method based on artificial boundary condition. We point out the inconsistency at 0-mode in Fourier pseudospectral approximation which results in a significant loss of accuracy. Finally, we apply the backward Euler sine pseudospectral and time-splitting sine pseudospectral methods to study the ground state and dynamics of 3D Schrödinger-Poisson equations in different setups.

In the second part, we propose two compact finite difference methods for the Schrödinger-Poisson equations in a bounded domain and establish their optimal error estimates under proper regularity assumptions. The conservative Crank-Nicolson compact finite difference method and the semi-implicit compact finite difference method are both of order $O(h^4 + \tau^2)$ in discrete l^2 , H^1 and l^∞ norms with mesh size h and time step τ .

In the last part, we present rigorous dimension reduction analysis from the 3D Schrödinger-Poisson equations to lower dimensional reduced equations, namely the Surface Adiabatic Model (SAM), Surface Density Model (SDM) and Line Adiabatic Model (LAM). Efficient and accurate numerical schemes are proposed to approximate the effective potentials, which are combined with a backward Euler pseudospectral method and time splitting pseudospectral method to study the ground state and dynamics respectively. Extensive numerical results are reported to confirm the reduction and convergence rate in terms of ground state and dynamics. In fact, the SDM describes the behavior of the 2D quantum degenerated electron gas by utilizing the the inversion of square root of

Laplacian to describe the electron-electron interaction potential. Finally, we study the ground state and dynamics of SDM in different setups together with some applications in graphene.

Key words: Schrödinger-Poisson equations; ground state; dynamics; compact finite difference method; dimension reduction

目 录

第 1 章 引言	1
1.1 问题背景	1
1.2 研究现状	4
1.3 研究内容	5
1.3.1 快速高效数值方法及其应用	5
1.3.2 两类紧致差分格式的最优误差估计	6
1.3.3 各向异性外势下三维方程组的降维分析	6
1.4 内容的结构安排	7
第 2 章 快速高效数值方法及其应用	9
2.1 基态解和梯度流方法	9
2.1.1 梯度流方法	9
2.1.2 梯度流的谱方法离散	10
2.1.3 梯度流的差分方法离散	12
2.2 动力学计算	13
2.2.1 时间分裂谱方法	14
2.2.2 半隐差分方法	15
2.3 一维和三维泊松位势的计算	16
2.3.1 快速卷积法	17
2.3.2 正弦谱方法	19
2.3.3 傅立叶谱方法	20
2.4 二维泊松位势的计算	21
2.4.1 泊松方程的人工边界条件	21
2.4.2 二维泊松位势的数值算法	23
2.5 数值结果	24
2.5.1 基态解的数值方法比较	24
2.5.2 动力学的数值方法比较	28
2.5.3 三维方程组的数值研究	30
2.6 本章小结	31

第 3 章 两类紧致差分格式的最优误差估计	36
3.1 两类数值方法和主要结果	36
3.1.1 紧致差分方法	37
3.1.2 两类紧致差分数值方法	38
3.2 Crank-Nicolson 紧致差分格式的误差分析	40
3.3 半隐紧致差分格式的误差分析	52
3.4 数值结果分析	57
3.5 本章小结	59
第 4 章 各向异性外势下三维薛定谔-泊松方程组的降维分析	64
4.1 从三维到二维降维分析	64
4.2 从三维到一维降维分析	66
4.3 等效位势的数值方法	68
4.3.1 面绝热模型中的等效位势	68
4.3.2 面密度模型中的等效位势	70
4.3.3 线绝热模型中的等效位势	72
4.4 数值结果分析及面密度模型的应用	73
4.4.1 从三维到二维的数值结果分析	73
4.4.2 从三维到一维的数值结果分析	74
4.4.3 二维模型比较	77
4.4.4 面密度模型的应用	78
4.5 本章小结	83
第 5 章 结论	84
5.1 论文主要工作和总结	84
5.2 研究发展趋势	84
参考文献	85
致 谢	91
声 明	92
个人简历、在学期间发表的学术论文与研究成果	93

主要符号对照表

t	时间
i	虚数单位
\mathbf{x}	空间变量
\mathbb{R}^n	n 维欧式空间
\hbar	普朗克常量
Ω	区域
∇	梯度
$\Delta = \nabla \cdot \nabla$	Laplace 算子
$\psi(\mathbf{x}, t)$	波函数
$\Phi(\mathbf{x})$	泊松位势
$\phi_g(\mathbf{x})$	基态
$G_d(\mathbf{x})$	d 维空间的 Laplace 方程格林函数
GFDN	离散归一化梯度流
CNGF	连续归一化梯度流
BSFC	向后欧拉正弦谱+快速卷积方法
BESP	向后欧拉正弦谱方法
BEFP	向后欧拉傅立叶谱方法
BEFD	向后欧拉差分方法
TSSP	时间分裂正弦谱方法
TSFP	时间分裂傅立叶谱方法
SIFD	半隐差分格式
CNCFD	Crank-Nicolson 紧致差分格式
SICFD	半隐紧致差分格式
SAM	面绝热模型
SDM	面密度模型
LAM	线绝热模型

第 1 章 引言

1.1 问题背景

多粒子量子系统是由多个粒子通过相互作用形成的微观系统，它广泛存在于半导体物理、等离子物理、凝聚态物理和分子动力学等领域，对它的科学研究有重要的理论意义和应用价值。本文所研究的薛定谔-泊松方程组是对多粒子非相对论量子系统的一种单粒子波函数近似。 N 粒子非相对论量子系统的波函数 $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t)$ 满足如下线性薛定谔方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H_N \Psi := \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_{x_j} + \sum_{j=1}^N V_{\text{ext}}(x_j) + \sum_{1 \leq j < k \leq N} \frac{1}{|x_j - x_k|} \right] \Psi, \quad (1-1)$$

$$\Psi(\cdot, t = 0) = \Psi_0(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (1-2)$$

其中 H_N 为哈密顿量， Ψ 为复值函数， Ψ_0 为初始波函数， \hbar 为普朗克常量， m 为粒子质量， V_{ext} 为外场， $x_j \in \mathbb{R}^3$ 为第 j 个粒子所处的位置。

一般来讲，线性方程 (1-1) 没有解析解，并且当粒子个数 $N \geq 10$ 时，方程 (1-1) 的直接数值模拟已因现有计算能力限制而无法实现。对粒子数远多于此的实际问题，如半导体（其电子数量级在 10^3 到 10^{26} 之间），通常的做法是，利用不同的波函数近似来简化方程，通过求解简化的方程（组）来逼近原问题。若波函数满足 Hartree 近似^[1]，即 $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ 可写成 N 个规范单粒子波函数 ψ_k 的直积 $\Psi(x_1, \dots, x_N) = \prod_{k=1}^N \psi_k(x_k)$ ，利用变分方法可推导得到定态的薛定谔-泊松方程组^[2]。但 Hartree 近似仅适于全同玻色子系统，因其不满足泡利不相容原理，所以不适于全同费米子系统。针对全同费米子系统，Fock^[3]和 Slater^[4]提出了 Hartree-Fock 近似，此近似将波函数写成 N 个规范正交单粒子波函数 ψ_j 的 Slater 行列式，即

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\psi_k(x_j))_{j,k=1,\dots,N}. \quad (1-3)$$

在 Hartree-Fock 近似下，能量泛函 $E = \langle \Psi, H_N \Psi \rangle$ 的临界点对应着定态 Hartree-Fock 方程组的解，定态 Hartree-Fock 方程组是由 N 个规范正交单粒子波函数 ψ_j 组成的^[2]，

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_j + V_{\text{ext}} \psi_j + \Phi \psi_j + (V_{\text{exc}} \psi)_j = E_j \psi_j, \quad j = 1, \dots, N, \quad (1-4)$$

其中 $E_j \in \mathbb{R}$ 对应于能量泛函的 Lagrange 乘子，泊松位势 Φ 定义为

$$\Phi(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{y}, \quad \text{密度函数 } \rho(\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^N |\psi_j(\mathbf{x})|^2, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (1-5)$$

交换项 $(V_{\text{exc}}\psi)_j(\mathbf{x})$ 定义为

$$(V_{\text{exc}}\psi)_j(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\psi_j(\mathbf{y}) \overline{\psi_k(\mathbf{y})}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{y} \right\} \psi_k(\mathbf{x}), \quad j = 1, \dots, N. \quad (1-6)$$

定态 Hartree-Fock 方程组中的交换项 $(V_{\text{exc}}\psi)_j$ 依赖于所有波函数 ψ_k ，由此导致计算代价过于昂贵。Kohn-Sham^[5] 密度泛函理论 (Density Functional Theory^[6,7]) 将交换位势 (1-6) 等价为仅依赖于密度函数的等效位势，从而将 Hartree-Fock 方程组转化为非线性特征值问题，即 Kohn-Sham 方程组。Kohn-Sham 方程组可用自洽场方法迭代求解^[8]，相比 Hartree-Fock 方程组而言，它在一定程度上降低了计算复杂度。Slater 在 [9] 中给出了交换项的一个多项式近似，即 $\rho^\alpha \psi_j$ 其中 $\alpha = \frac{1}{3}$ ，此局部逼近式最先由 Dirac^[10] 在考虑 Thomas-Fermi 方程的交换能量修正时给出。我们将形如 ρ^α 的交换项近似称为 $X\alpha$ 近似。

定态和含时薛定谔-泊松方程组的严格推导分别在 [11] 和 [12] 给出。定态 Hartree-Fock 方程组的严格分析可参见 [2]，而含时的 Hartree-Fock 方程组在有界相互作用和库仑作用情形下的严格分析分别在 [13] 和 [14] 中给出。Hartree-Fock 方程组中交换势能的局部近似在定态解的研究中取得了很好的结果^[15,16]。 $X\alpha$ 近似项在定态解情形下的严格推导由 [17,18] 给出，含时情形下的严格推导目前还是公开问题。Mauser^[19] 用 $X\alpha$ 项来近似相互交换势能得到了薛定谔-泊松- $X\alpha$ 模型，也是本文所研究的基本方程，我们将其称为薛定谔-泊松方程组。

薛定谔-泊松方程组是对含时 Hartree-Fock 方程组的一种单粒子波函数局部近似，写成归一化形式为

$$i \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{1}{2} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + \beta \Phi(\mathbf{x}, t) - \alpha |\psi|^{\frac{2}{d}} \right] \psi, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad t > 0, \quad (1-7)$$

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{x}, t) = -|\psi|^2, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (1-8)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t = 0) = \psi_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (1-9)$$

其中 d 为空间维数，波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 是复值函数且满足无穷远条件 $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} |\psi(\mathbf{x}, t)| = 0$ ， $V_{\text{ext}}(\mathbf{x})$ 为外势函数， $\Phi(\mathbf{x}, t)$ 为泊松位势，通常写成卷积形式， β 和 α 分别称为泊松系数和交换系数。泊松系数 β 的正负取决于粒子间相互作用类型：相互排斥时 $\beta > 0$ ，而相互吸引时 $\beta < 0$ 。对电子而言，泊松系数 $\beta > 0$ 且交换系

数 $\alpha > 0$ 。

薛定谔-泊松方程组 (1-7) - (1-9) 可等价地写成非线性薛定谔方程

$$i \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{1}{2} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + \beta \Phi(|\psi|^2) - \alpha |\psi|^{\frac{2}{d}} \right] \psi, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad t > 0. \quad (1-10)$$

泊松位势 Φ 为 $|\psi|^2$ 与 G_d 的卷积,

$$\Phi(|\psi|^2) = G_d(\mathbf{x}) * |\psi|^2, \quad (1-11)$$

其中 $G_d(\mathbf{x})$ 代表全空间 \mathbb{R}^d 上 Laplace 算子的格林函数, 具体定义为

$$G_d(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\frac{1}{2}|\mathbf{x}|, & d = 1, \\ -\frac{1}{2\pi} \ln(|\mathbf{x}|), & d = 2, \\ \frac{1}{4\pi} |\mathbf{x}|^{-1}, & d = 3. \end{cases} \quad (1-12)$$

非线性薛定谔方程 (1-10) 存在至少两个守恒量:

质量

$$N(\psi) := \|\psi(\mathbf{x}, t)\|^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \, d\mathbf{x}, \quad (1-13)$$

能量

$$E(\psi) := \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + \left(V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{2} \Phi(|\psi|^2) \right) |\psi|^2 - \frac{\alpha d}{d+1} |\psi|^{\frac{2}{d}+2} \right] d\mathbf{x}. \quad (1-14)$$

稳态解的研究对方程 (1-10) 有重要意义。稳态解可写成变量分离的形式

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i\mu t} \phi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad t \geq 0, \quad (1-15)$$

其中 $\mu \in \mathbb{R}$ 是化学势, 函数 $\phi(\mathbf{x})$ 满足 $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} |\phi(\mathbf{x})| = 0$ 。将式 (1-15) 代入式 (1-10) 中, 得到定态薛定谔方程

$$\mu \phi(\mathbf{x}) = \left[-\frac{1}{2} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + \beta \Phi(|\phi|^2) - \alpha |\phi|^{\frac{2}{d}} \phi \right] \phi, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (1-16)$$

其中 ϕ 满足约束条件

$$\|\phi\|^2 := \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x} = 1. \quad (1-17)$$

此问题可也看成带约束条件的非线性特征值问题。

基态解定义为非凸极小问题的最小元, 即寻找 $\phi_g \in S$ 和 $\mu^g \in \mathbb{R}$ 使得

$$E^g := E(\phi_g) = \min_{\phi \in S} E(\phi), \quad \mu^g := \mu(\phi_g), \quad (1-18)$$

其中约束集为 $S := \{\phi \mid \|\phi\|^2 = 1, E(\phi) < \infty\}$, $\mu(\phi)$ 为化学能, 具体定义为

$$\begin{aligned} \mu(\phi) &:= \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) |\phi|^2 + \beta \Phi(|\phi|^2) |\phi|^2 - \alpha |\phi|^{\frac{2}{d}} |\phi|^2 \right] d\mathbf{x} \\ &= E(\phi) + \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{\beta}{2} \Phi(|\phi|^2) |\phi|^2 - \frac{\alpha}{d+1} |\phi|^{\frac{2}{d}+2} \right] d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (1-19)$$

在约束 (1-17) 下的非线性特征值问题 (1-16) 可看做非凸极小化问题 (1-18) 的欧拉-拉格朗日方程。事实上, 我们仅对 (1-18) 的正解感兴趣, 因为任意的 $\phi(\mathbf{x}) \in S$ 都满足 $E(|\phi|) \leq E(\phi)$ 。方程 (1-16) 在约束 (1-17) 下的特征函数对应着能量泛函 $E(\phi)$ 在单位球 S 上的临界点, 通常将那些能量比 E^s 大的特征函数称为激发态。

1.2 研究现状

非线性薛定谔方程得到了数学家的广泛研究^[20-22], 对薛定谔-泊松方程组动力学和基态解的研究有丰富的结果。Bokanowski 等利用 Cazenave^[21]的结果在 [23] 中给出了三维方程组在 L^2 和 H^1 空间中局部解和全局解的适定性, 二维结果由 Masaki 在 [24,25] 给出, 一维结果在 [26-28] 中给出。在稳态解的研究中, Lieb 率先在 [29] 给出了三维球对称基态解的存在唯一性, 随后 Choquard 在 [30] 给出了空间维数 $d \leq 6$ 时稳态解的存在性。一维和二维基态解的存在唯一性分别在 [31,32] 和 [33] 给出。Soler^[34]等给出了带排斥作用泊松位势的三维基态解存在性, 带吸引作用泊松位势的基态解存在性在 [23] 给出。

关于非线性薛定谔方程动力学数值计算的研究结果比较丰富, 主要的计算方法包括时间分裂谱方法^[35,36]、有限差分方法^[37-40]和有限元方法^[41,42]等。Taha 等在 [43] 中比较分析了多种数值方法, 包括基于差分方法的显式格式, 半显半隐格式, Crank-Nicolson 隐格式, 其中显式差分格式条件稳定, Crank-Nicolson 隐格式为无条件稳定守恒格式但需求解非线性方程组从而导致计算效率不高, 半显半隐格式无条件稳定且仅需求解线性方程组, 类似的差分方法比较可参考 [38]。Karakashian^[44]等提出了一个基于隐式 Runge-Kutta 格式的 Galerkin 方法并证明了数值方法的最优误差估计。Bao^[35,45,46]等给出了快速高精度的时间分裂谱方法, Lubich^[47,48]给出了时间分裂方法的误差分析。Han 和 Huang 在 [49] 中利用人工边界条件研究了二维全空间薛定谔方程, Ehrhardt 和 Zisowsky 在 [50] 等利用人工边界条件研究了一维全空间薛定谔-泊松方程组。Ringhofer^[51]等提出了薛定谔-泊松方程组的预测-修正守恒 Crank-Nicolson 差分格式, Bao^[46]等应用时间分裂傅立叶谱方法对三维薛定谔-泊松方程进行了研究。每种方法各有优劣, 本文主要使用

谱方法，其优势在于可在规则区域上以较少格点得到较高精度的数值解。

在非线性薛定谔方程基态解的计算方面，Edwards 和 Burnett^[52] 用 Runge-Kutta 方法求解了一维和三维球对称基态解。Succi^[53] 等类比动力学计算方法提出了虚拟时间演化法，Bao 和 Tang 在 [54] 中利用有限元法直接极小化带质量约束的能量泛函得到了基态解，Bao^[55-57] 等结合梯度流和单位球投影方法提出了归一化梯度流方法，并基于此构造了向后欧拉差分 and 向后欧拉谱方法，在适当初值下有效计算了基态和激发态。对薛定谔-泊松方程组基态解的数值研究结果相对较少。Tan^[58] 等在非均匀网格上用差分方法研究了一维问题的稳态解，Cheng 等在 [59,60] 中用谱元方法求解了一维和三维的稳态问题。Harrison 在 [61] 利用打靶法计算稳态解并分析了基态解的线性稳定性，但是打靶法的稳定性较差并且无法推广到高维。本文主要采用离散归一化梯度流方法结合泊松位势算法求解基态解。

1.3 研究内容

1.3.1 快速高效数值方法及其应用

我们主要关心薛定谔-泊松方程组基态解和动力学的数值求解。

在一维和三维的数值计算中，我们将向后欧拉正弦/傅立叶谱方法与泊松位势算法耦合以求解基态解，将时间分裂正弦/傅立叶谱方法与泊松位势算法耦合以求解动力学，其中泊松位势算法包括快速卷积算法，正弦谱方法和傅立叶谱方法。快速卷积算法在一维可借助快速傅立叶变换加速，三维卷积可利用快速多极算法等来加速，正弦谱方法通过求解带齐次狄利克雷 (简记为狄氏) 边界条件的泊松方程来逼近泊松位势，而傅立叶谱方法是通过求解带周期边界条件的泊松方程来逼近泊松位势。在傅立叶谱方法中，因 0 模的不相容性导致来自有限区域截断的误差为主要误差，此误差会随着计算区域的增大而减少。

由于二维泊松位势在无穷远处是发散的并且与 $\ln(|\mathbf{x}|)$ 函数同阶，因此无法在矩形区域上通过齐次化边界条件来近似求解，傅立叶方法在求解带周期边界条件泊松方程会遭遇不相容问题，而基于快速算法加速的卷积算法复杂度较高不易实现。我们参考 [49] 中的准确人工边界方法，给出了泊松位势的傅立叶变换系数在有限圆盘上所满足的人工边界条件，并提出了一个在 θ 方向为谱精度，在半径 r 方向为二阶精度的逼近算法。将此泊松位势数值算法与向后欧拉差分算法相结合，我们得到了求解基态解的 BEFD 算法；与三层隐式/蛙跳算法相结合，我们得到了求解动力学的 SIFD 算法。

我们用大量试验从数值上验证了上述结论，最后利用向后欧拉正弦谱方法和时间分裂正弦谱方法对三维薛定谔-泊松方程组在不同情形下的基态解和动力学性质进行了研究。

1.3.2 两类紧致差分格式的最优误差估计

在各种求解薛定谔-泊松方程组的数值方法中，差分方法是最简单的一种方法，紧致差分格式因其可在同样数目的差分格点上获得高阶精度的数值解而倍受关注^[62-65]，并已被成功应用于多种偏微分方程的数值模拟中，如薛定谔方程^[66]、Helmholtz 方程^[67]和 Navier-Stokes 方程^[68]等。据我们所知，此前还没有将紧致差分格式应用到薛定谔-泊松方程的工作。

我们以一维薛定谔-泊松方程组 (1-10) 的初边值问题为例介绍紧致差分格式的应用和误差分析。我们从标准中心差分出发，利用泰勒公式可得到泊松位势和二阶导数的四阶紧致差分格式，与 [66] 不同，本文的紧致格式不依赖于薛定谔方程。

我们给出守恒 Crank-Nicolson 紧致差分格式。此格式虽然满足离散质量和离散能量守恒，但是每步需耗费大量计算时间以便较为精确地求解非线性方程，从而导致算法效率不高。为提高计算效率，我们又提出一个半隐紧致差分格式。在一定的正则性假设下，我们得到了两种格式在离散 l^2 、 H^1 和 l^∞ 范数下的最优误差估计 $O(h^4 + \tau^2)$ 。误差分析的难点来自于泊松位势对密度函数的全局依赖性及其泊松位势和二阶导数的紧致差分误差分析，等价不等式的证明以及局部误差估计。

1.3.3 各向异性外势下三维方程组的降维分析

简并量子气体的维数降低现象是存在于大多数纳米器材的基本物理现象并已在物理实验和数学研究上获得了大量关注。对半导体器件中受各向异性外势影响而产生的简并量子电子气体的研究较为广泛。Polizzi^[69]等在考虑电子间库仑作用和量子输运边界条件的前提下，在稳态解的框架内对三维薛定谔-泊松方程组提出了一个拟三维的近似模型。Abdallah^[70]等从三维薛定谔-泊松方程组的奇异扰动出发，对二维电子气体提出了两种量子输运近似模型，即面密度模型和二维半绝热模型，并严格证明了上述两个近似模型是原三维问题的一阶和二阶近似。Pinaud^[71]等对二维近似模型稳态解的边值条件问题进行了研究。在一维情形中，Abdallah^[72]等通过特殊的伸缩变换避免了发散积分位势的出现，并证明了在一类

特殊初值下的极限方程为立方非线性薛定谔方程。

受 [70,73] 中降维分析的启发, 我们从三维薛定谔-泊松方程组出发, 首先将波函数投影到横向哈密顿基态解空间, 再将薛定谔方程与基态解在横向方向做内积, 得到二维面绝热模型和一维线绝热模型, 三维库仑位势退化为与伸缩常数 ε 相关的等效位势。当 ε 趋向于 0 时, 面绝热模型里等效位势的卷积核逐点趋向于 $\frac{1}{4\pi r}$, 由此可得到一个与伸缩常数 ε 无关的面密度模型, 相应的等效位势卷积核为 $\frac{1}{4\pi r}$ 。与二维情形不同, 当伸缩常数 ε 趋向于 0 时, 一维等效位势的卷积核是发散的, 因此本文仅考虑线绝热模型。

在数值模拟部分, 我们首先对退化模型的等效位势提出快速高精度算法, 再结合向后欧拉谱方法求解基态解, 结合时间分裂正弦/傅立叶谱方法求解动力学。我们从基态解和动力学两方面数值验证降维分析的合理性和收敛阶, 并数值比较面密度模型与二维薛定谔-泊松方程组的异同。

1.4 内容的结构安排

本文主要是从基态和动力学两方面研究薛定谔-泊松方程组的数值方法和分析及其应用。主要内容安排如下:

我们在引言中系统的介绍了薛定谔-泊松方程组的问题背景及研究进展。

第二章, 我们系统的研究了不同维数薛定谔-泊松方程组基态解和动力学的数值求解, 并提出了多种快速高精度算法。首先介绍了求解基态的离散归一化梯度流方法并给出了基于差分和谱方法离散的离散归一化梯度流算法, 紧接着给出了求解动力学的时间分裂谱方法和半隐差分方法。其次, 分两节介绍了求解泊松位势的数值方法。我们对一维和三维泊松位势提出了三种快速高精度算法, 包括快速卷积算法, 正弦谱方法和傅立叶谱方法, 并分析指出了傅立叶谱方法因 0 模不相容性而导致谱精度丢失现象。由于二维泊松位势无法在矩形区域类似简单求解, 我们基于人工边界方法给出了有限圆盘上的有限差分与谱精度结合的数值算法。最后, 我们比较了不同算法在求解基态和动力学的精度, 并应用向后欧拉正弦谱方法和时间分裂正弦谱方法研究了三维薛定谔-泊松方程组在不同参数下的基态解和动力学性质。

第三章, 我们给出了守恒 Crank-Nicolson 紧致差分格式和半隐紧致差分三层格式, 并在一定的正则性假设下证明了两种格式的误差函数在 l^2 , H^1 和 l^∞ 范数下的最优误差估计 $O(h^4 + \tau^2)$, 其中 h 和 τ 分别为空间步长和时间步长。

第四章, 我们给出了三维薛定谔-泊松方程组在各向异性外势下的降维分析。

首先介绍了问题来源和研究现状, 类比文章 [73,74], 我们依次给出了三维到二维的降维分析和三维到一维的降维分析, 并得到了三种低维退化模型, 即面绝热模型、面密度模型和线绝热模型。然后, 我们给出了三种退化模型里等效外势的快速高精度算法。最后, 我们从基态解和动力学两方面数值验证了降维分析的合理性和收敛阶, 同时比较了二维退化模型并研究了面密度模型在不同参数下基态和动力学性质。

最后, 在结论部分对本文工作进行了简要的总结, 同时对薛定谔泊松方程组的相关研究做了一些展望。

第2章 快速高效数值方法及其应用

本章我们主要是设计不同的快速高效算法来求解薛定谔-泊松方程组的基态和动力学并对其各种算法进行比较分析。我们将泊松位势算法与向后欧拉谱方法离散的归一化梯度流方法相结合来计算基态解，与时间分裂谱方法相结合来计算动力学。本章所提出的计算泊松位势的方法包括快速卷积法，正弦谱方法和傅立叶谱方法。卷积法在实际计算中是通过快速算法实现的，在一维用离散傅立叶变换实现，二维和三维可通过快速多极算法 (Fast Multipole Method, 简记为 FMM) 实现，因此称之为快速卷积法。我们用标准的谱方法求解方程 (1-8)，同时指出傅立叶谱方法在 0 模的不相容性导致了谱方法精度的严重丢失。

2.1 基态解和梯度流方法

在本节，我们介绍求解基态的梯度流方法并给出了基于谱方法和差分方法离散的数值算法。

2.1.1 梯度流方法

为数值求解极小化问题 (1-18)，我们根据 [55] 中求解非线性薛定谔方程稳态解的过程构造了离散归一化梯度流 (gradient flow with discrete normalization)，简记为 GFDN。选定时间步长 $\tau > 0$ 和 $t_n = n\tau$ ，其中 $n = 0, 1, \dots$ 。对无约束的能量泛函 $E(\phi)$ 应用最速下降法，然后在每个时间步 $[t_n, t_{n+1}]$ 结束时将解投影到单位球 S 以满足离散质量约束，这样就得到了离散归一化梯度流

$$\partial_t \phi(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{2} \frac{\delta E(\phi)}{\delta \phi} = \left[\frac{1}{2} \Delta - V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) - \beta \Phi(|\phi|^2) + \alpha |\phi|^{\frac{2}{d}} \right] \phi, \quad (2-1)$$

$$\phi(\mathbf{x}, t_{n+1}) := \phi(\mathbf{x}, t_{n+1}^+) = \frac{\phi(\mathbf{x}, t_{n+1}^-)}{\|\phi(\mathbf{x}, t_{n+1}^-)\|}, \quad (2-2)$$

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} |\phi(\mathbf{x}, t)| = 0, \quad \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(\mathbf{x}), \quad \text{且} \quad \|\phi_0\| = 1, \quad (2-3)$$

其中 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ ， $t_n \leq t < t_{n+1}$ ， $n \geq 0$ ， $\phi(\mathbf{x}, t_n^+) := \lim_{t \rightarrow t_n^+} \phi(\mathbf{x}, t)$ 。事实上，梯度流方程 (2-1) 也可通过将非线性薛定谔方程中的时间 t 替换为 it 得到，而这恰是虚拟时间法 [53]。

令 GFDN 中的时间步长 $\tau \rightarrow 0$ ，我们会得到如下的连续归一化梯度流 (continuous normalized gradient flow)，简记为 CNGF^[55]，

$$\partial_t \phi(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{1}{2} \Delta - V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) - \beta \Phi(|\phi|^2) + \alpha |\phi|^{\frac{2}{d}} + \frac{\mu(\phi)}{\|\phi\|^2} \right] \phi, \quad (2-4)$$

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} |\phi(\mathbf{x}, t)| = 0, \quad \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(\mathbf{x}), \quad \text{且} \quad \|\phi_0\| = 1. \quad (2-5)$$

直接计算即可验证连续归一化梯度流 CNGF 是质量守恒和能量递减的，即

$$\|\phi(\mathbf{x}, t)\|^2 \equiv \|\phi_0\|^2 = 1, \quad \frac{d}{dt} E(\phi(\mathbf{x}, t)) = -2\|\phi_t(\mathbf{x}, t)\|^2 \leq 0, \quad t \geq 0, \quad (2-6)$$

从而可知 $E(\phi(\mathbf{x}, t_2)) \leq E(\phi(\mathbf{x}, t_1))$ 对任意的 $0 \leq t_1 \leq t_2 < \infty$ 成立。

给定一个正的初始值 $\phi_0(\mathbf{x}) \geq 0$ ，我们可以通过离散归一化梯度流或连续归一化梯度流得到正的基态解 $\phi_g(\mathbf{x})$ 及其对应的化学势 μ^g 。

我们介绍方程 (2-1) - (2-3) 的离散归一化梯度流的数值离散。

2.1.2 梯度流的谱方法离散

因波函数是指数衰减的，在计算中我们通常将柯西问题 (2-1) - (2-3) 截断为有界区域上的初边值问题。通常一维的计算区域选为 $\Omega = [a, b]$ ，二维为矩形 $[a, b] \times [c, d]$ ，三维为立方体 $[a, b] \times [c, d] \times [e, f]$ 。本节我们介绍一般情形下薛定谔-泊松方程组离散归一化梯度流的向后欧拉谱方法离散，此处仅介绍一维方程的离散，高维的推广是类似的。

当 $d = 1$ 时，对任意的 $x \in [a, b]$ ， $t_n \leq t < t_{n+1}$ 和 $n \geq 0$ ，我们有

$$\partial_t \phi(x, t) = \frac{1}{2} \partial_{xx} \phi - V_{\text{ext}}(x) \phi - \beta \Phi(|\phi|^2) \phi + \alpha |\phi|^{\frac{2}{d}} \phi, \quad (2-7)$$

$$\phi(x, t_{n+1}) := \phi(x, t_{n+1}^+) = \frac{\phi(x, t_{n+1}^-)}{\|\phi(x, t_{n+1}^-)\|_{L^2(a,b)}}, \quad (2-8)$$

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x), \quad \text{且} \quad \|\phi_0\|_{L^2(a,b)}^2 := \int_a^b |\phi_0(x)|^2 dx = 1, \quad (2-9)$$

满足齐次狄氏边界条件

$$\phi(a, t) = \phi(b, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2-10)$$

或周期边界条件

$$\phi(a, t) = \phi(b, t), \quad \phi_x(a, t) = \phi_x(b, t), \quad t > 0. \quad (2-11)$$

选取空间步长 $h_x = \frac{(b-a)}{M} > 0$ ，其中 M 为正偶数，并记网格点为 $x_j = a + jh_x, j = 0, 1, \dots, M$ 。定义两个函数空间

$$Y_M^S = \text{span} \{ \sin(\mu_l(x-a)), l = 1, \dots, M-1, x \in [a, b] \}, \quad (2-12)$$

$$Y_M^F = \text{span} \{ \exp(i\lambda_l(x-a)), l = -M/2, \dots, M/2-1, x \in [a, b] \}, \quad (2-13)$$

其中

$$\mu_l = \frac{\pi l}{b-a} \quad (l = 1, \dots, M-1), \quad \lambda_l = \frac{2\pi l}{b-a} \quad (l = -M/2, \dots, M/2-1).$$

令 $P_M^S : Y_0 := \{U(x) \in C(a, b) | U(a) = U(b) = 0\} \rightarrow Y_M^S$ 和 $P_M^F : Y_p := \{U(x) \in C(a, b) | U(a) = U(b), U'(a) = U'(b)\} \rightarrow Y_M^F$ 为标准投影算子^[75]，即

$$(P_M^S(U))(x) = \sum_{l=1}^{M-1} (\widehat{U})_l^S \sin(\mu_l(x-a)), \quad x \in [a, b], \quad \forall U(x) \in Y_0, \quad (2-14)$$

$$(P_M^F(U))(x) = \sum_{l=-M/2}^{M/2-1} (\widehat{U})_l^F \exp(i\lambda_l(x-a)), \quad x \in [a, b], \quad \forall U(x) \in Y_p, \quad (2-15)$$

其中

$$(\widehat{U})_l^S = \frac{2}{b-a} \int_a^b U(x) \sin(\mu_l(x-a)) dx, \quad l = 1, \dots, M-1, \quad (2-16)$$

$$(\widehat{U})_l^F = \frac{1}{b-a} \int_a^b U(x) \exp(-i\lambda_l(x-a)) dx, \quad l = -M/2, \dots, M/2-1. \quad (2-17)$$

则对带齐次狄氏边界条件 (2-10) 的方程 (2-7) - (2-9) 来说，GFDN 的向后欧拉正弦谱方法离散为：

寻找 $\phi^{n+1}(x) \in Y_M^S$ (即 $\phi^*(x) \in Y_M^S$)，使得

$$\frac{\phi^*(x) - \phi^n(x)}{\tau} = \frac{1}{2} \partial_{xx} \phi^*(x) - P_M^S \left\{ \left[V_{\text{ext}}(x) + \beta \Phi^n(x) - \alpha |\phi^n(x)|^{\frac{2}{\alpha}} \right] \phi^*(x) \right\}, \quad (2-18)$$

$$\phi^{n+1}(x) = \frac{\phi^*(x)}{\|\phi^*(x)\|_{L^2(a,b)}}, \quad \phi^0(x) = P_M^S(\phi_0(x)), \quad x \in [a, b], \quad n \geq 0, \quad (2-19)$$

其中 $\Phi^n(x)$ 为泊松位势 (1-11) 在 t_n 时刻的值，其数值求解方法将在后面详细介绍。

方程 (2-18) 可在相空间求解，但由于积分项 (2-16) 的直接计算较为困难，在实际计算中，我们利用网格点上的数值积分来逼近，如复合梯形公式等。记 ϕ_j^n 为 $\phi(x_j, t_n)$ 的近似，向量 ϕ^n 的元素为 ϕ_j^n ， $(\Phi)_j^n$ 为 $\Phi(x_j, t_n)$ 的近似，向量 Φ^n 的元素为 $(\Phi)_j^n$ 。选取 $\phi_j^0 = \phi_0(x_j)$ ，则当 $n = 0, 1, \dots$ 时，带齐次狄氏边界方

程 (2-7) - (2-9) 的向后欧拉正弦谱方法离散为

$$\frac{\phi_j^* - \phi_j^n}{\tau} = \frac{1}{2} D_{xx}^s \phi^*|_{x_j} - \left[V_{\text{ext}}(x_j) + \beta (\Phi)_j^n - \alpha |\phi_j^n|^{\frac{2}{d}} \right] \phi_j^*, \quad j = 1, \dots, M-1, \quad (2-20)$$

$$\phi_0^* = \phi_M^* = 0, \quad \phi_j^{n+1} = \frac{\phi_j^*}{\|\phi^*\|_h}, \quad j = 1, \dots, M-1, \quad (2-21)$$

其中 D_{xx}^s 为 ∂_{xx} 的正弦谱逼近, 定义为

$$D_{xx}^s U|_{x_j} = - \sum_{l=1}^{M-1} (\mu_l)^2 (\overline{U})_l^s \sin(\mu_l(x_j - a)), \quad j = 1, 2, \dots, M-1, \quad (2-22)$$

这里 $(\overline{U})_l^s$ 为向量 $U = (U_0, U_1, \dots, U_M)^T$ ($U_0 = U_M = 0$) 的离散正弦变换系数, 具体定义为

$$(\overline{U})_l^s = \frac{2}{M} \sum_{j=1}^{M-1} U_j \sin(\mu_l(x_j - a)), \quad l = 1, \dots, M-1. \quad (2-23)$$

离散 l^2 范数定义为 $\|U\|_h^2 = h \sum_{j=0}^{M-1} |U_j|^2$ 。非线性方程 (2-20) - (2-21) 的求解可在相空间借助快速离散正弦变换迭代实现, 具体过程与 [56] 中类似, 此处略去。

对带周期边界条件 (2-11) 的方程 (2-7) - (2-9) 而言, 我们可给出一个与上述格式类似的向后欧拉傅立叶谱方法, 只需将式 (2-18) - (2-19) 中的 Y_M^S 和 P_M^S 分别替换为 Y_M^F 和 P_M^F 。类似地, 我们可以用向后欧拉傅立叶谱方法来计算基态解, 不同的是, 需要使用合适的网格并且微分算子 ∂_{xx} 需用下述傅立叶谱方法逼近, 即

$$D_{xx}^F U|_{x_j} = - \sum_{l=-M/2}^{M/2-1} (\lambda_l)^2 (\overline{U})_l^F \exp(i\lambda_l(x_j - a)), \quad j = 0, 1, \dots, M-1, \quad (2-24)$$

其中 $(\overline{U})_l^F$ 是向量 $U = (U_0, U_1, \dots, U_M)^T$ ($U_0 = U_M$) 的离散傅立叶变换系数, 具体定义为

$$(\overline{U})_l^F = \frac{1}{M} \sum_{j=0}^{M-1} U_j \exp(-i\lambda_l(x_j - a)), \quad l = -M/2, \dots, M/2-1. \quad (2-25)$$

2.1.3 梯度流的差分方法离散

如果外势 V_{ext} 是极对称函数 (二维) 或者球对称函数 (三维), 则原高维问题可退化为一维问题。退化的一维问题无法直接使用谱方法, 我们可用向后欧拉差分算法求解。本节我们以二维极对称退化到一维为例说明。从三维球对称退化的一维问题可类似处理, 也可应用谱方法求解, 具体细节参见 [76]。

假设外势 $V_{\text{ext}} = V_{\text{ext}}(\sqrt{x^2 + y^2}) = V_{\text{ext}}(r)$ 为极对称函数，则基态解 ϕ_g 和泊松位势 Φ 也都是极对称函数，此时二维问题可退化为一维问题。一维退化问题的离散归一化梯度流^[55]为

$$\partial_t \phi(r, t) = \frac{1}{2} \frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r \phi) - V_{\text{ext}}(r) \phi - \beta \Phi \phi + \alpha |\phi| \phi, \quad t_n < t < t_{n+1}, \quad (2-26)$$

$$\phi(0, t) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \phi(r, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2-27)$$

$$\phi(r, t_{n+1}) = \frac{\phi(r, t_{n+1}^-)}{\|\phi(\cdot, t_{n+1}^-)\|}, \quad 0 < r < \infty, \quad n \geq 0, \quad (2-28)$$

$$\phi(r, 0) = \phi_0(r) \geq 0, \quad 0 < r < \infty, \quad (2-29)$$

其中 $\|\phi_0\| = 1$ ，范数 $\|\cdot\|$ 定义为

$$\|\phi\|^2 = 2\pi \int_0^\infty |\phi(r)|^2 r \, dr. \quad (2-30)$$

首先将全空间问题截断有限区间 $[0, R]$ 上的初边值问题。 M 等分区间，对应格点为 $r_j = (j - 1/2)\Delta r, j = 0, 1, \dots, M + 1$ ，其中 M 为正整数 $\Delta r = R/M$ 为步长，则 $r_M = R - \frac{1}{2}\Delta r, r_{M+1} = R + \frac{1}{2}\Delta r$ 。令 $\phi_j^n, (\Phi)_j^n, (V_{\text{ext}})_j$ 分别为 $\phi(r_j, t_n), \Phi(r_j, t_n), V_{\text{ext}}(r_j)$ 的近似解，则上述方程的离散归一化梯度流的差分离散为

$$\begin{aligned} \frac{\phi_j^* - \phi_j^n}{\tau} = & \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{j+1}^* - 2\phi_j^* + \phi_{j-1}^*}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j} \frac{\phi_{j+1}^* - \phi_{j-1}^*}{2\Delta r} \right] \\ & - (V_{\text{ext}})_j \phi_j^* - \beta (\Phi)_j^n \phi_j^* + \alpha |\phi_j^n| \phi_j^*, \quad j = 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (2-31)$$

$$\phi_j^{n+1} = \frac{\phi_j^*}{\|\phi^*\|}, \quad \phi_{M+1}^* = -\phi_M^*, \quad j = 1, \dots, M, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (2-32)$$

$$\phi_j^0 = \phi_0(r_j), \quad j = 1, \dots, M, \quad (2-33)$$

其中泊松位势 $(\Phi)_j^n$ 可由 (2.4) 节中的差分方法求解，而质量 $\|\phi^*\|^2 = 2\pi \sum_{j=1}^M |\phi_j^*|^2 r_j \Delta r$ 。此算法中差分网格的选取与文章 [77,78] 相同，式 (2-31) 中 ϕ_0^* 项的系数恰好为 0，因此无需处理 $r = 0$ 的本性奇异条件^[79]。耦合 (2.4) 节的泊松位势差分算法，我们就得到了求解退化一维问题基态解的向后欧拉差分算法，简记为 BEFD。

2.2 动力学计算

本节我们将介绍计算动力学的时间分裂谱方法和半隐差分算法。

2.2.1 时间分裂谱方法

本节我们详细介绍一维带齐次狄氏边界条件方程的时间分裂谱方法离散，此算法可类似地推广到高维。

根据算子分裂理论^[80]，可将线性算子 ∂_{xx} 与非线性算子分离求解，两算子不同的线性组合可得到不同精度的分裂算法。以最简单的一阶精度分裂算法为例，我们可分两步求解方程 (1-10)，即先求解一个时间步长 τ 的自由薛定谔方程

$$i \partial_t \psi(x, t) = -\frac{1}{2} \partial_{xx} \psi(x, t), \quad \psi(a, t) = \psi(b, t) = 0, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}, \quad (2-34)$$

再求解同一时间步长的非线性方程

$$i \partial_t \psi(x, t) = [V_{\text{ext}}(x) + \beta \Phi(|\psi|^2) - \alpha |\psi|^2] \psi, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}. \quad (2-35)$$

类似于 [35,45]，自由薛定谔方程 (2-34) 可在空间方向用正弦谱方法离散，然后在谱空间里对时间方向准确求解。在任意时刻 t , $t_n \leq t \leq t_{n+1}$ ，方程 (2-35) 中的 $|\psi|$ 是不变的，泊松位势 Φ 也是不变的，因此方程 (2-35) 等价于

$$i \partial_t \psi(x, t) = [V_{\text{ext}}(x) + \beta \Phi(|\psi(x, t_n)|^2) - \alpha |\psi(x, t_n)|^2] \psi, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}. \quad (2-36)$$

此线性微分方程可解析求解，其中泊松位势 Φ 可由 (2.3) 节中的方法得到。

令 ψ_j^n 为 $\psi(x_j, t_n)$ 的数值解， ψ^n 是以 ψ_j^n 为分量的解向量， $(\Phi)^n_j$ 为 $\Phi(x_j, t_n)$ 的数值解，向量 Φ^n 以 $(\Phi)^n_j$ 为分量。选取 $\psi_j^0 = \psi_0(x_j)$ ，其中 $j = 0, \dots, M$ 。对任意的 $n = 0, 1, \dots$ ，我们利用 Strang 公式^[35,45,80]得到二阶时间分裂正弦谱方法，具体为

$$\psi_j^* = \sum_{l=1}^{M-1} \exp(-i\tau \mu_l^2/4) (\widetilde{\psi^n})_l^S \sin(\mu_l(x_j - a)), \quad (2-37)$$

$$\psi_j^{**} = \exp[-i\tau (V_{\text{ext}}(x_j) + \beta (\Phi^*)_j - \alpha |\psi_j^*|^2)] \psi_j^*, \quad (2-38)$$

$$\psi_j^{n+1} = \sum_{l=1}^{M-1} \exp(-i\tau \mu_l^2/4) (\widetilde{\psi^{**}})_l^S \sin(\mu_l(x_j - a)), \quad (2-39)$$

其中 $j = 1, \dots, M-1$ ， $(\widetilde{\psi^n})_l^S$ 是向量 ψ^n 的离散正弦变换系数。

耦合求解 $(\Phi^*)_j$ 的正弦谱方法 (2-62) (对应公式的右端项为 $|\psi_j^*|^2$)，我们就得到了计算动力学的时分裂正弦谱方法，简记为 TSSP。类似地，耦合 $(\Phi^*)_j$ 的快速卷积算法 (2-53)，我们就得到了时分裂正弦谱方法+快速卷积算法，简记为 TSFC。这些方法都是显式的，时间可逆的且无条件稳定的。实际上，我们可以证明如下稳定性引理

引理 2.1 TSFC 和 TSSP 是质量守恒的, 即

$$\|\psi^n\|_h^2 := h \sum_{j=0}^{M-1} |\psi_j^n|^2 \equiv h \sum_{j=0}^{M-1} |\psi_j^0|^2 = \|\psi^0\|_h^2, \quad n \geq 0. \quad (2-40)$$

证明: 此引理的证明与 [35,45] 类似, 具体细节在此略去。 \square

我们可以针对周期边界条件的情形类似地提出一个时间分裂傅立叶谱方法, 将其耦合一个基于傅立叶基底函数的快速卷积算法可得到时间分裂谱方法+快速卷积算法, 简记为 TSFC, 或者耦合傅立叶谱方法 (2-69) 得到时间分裂傅立叶谱方法, 简记为 TSFS。同样的, 这两个算法都是显式的, 时间可逆并且无条件稳定的。

当波函数为偶函数时, 泊松位势 $(\Phi^*)_j$ 可由式 (2-63) 或式 (2-70) 计算。因为从 t_n 到 t_{n+1} 时刻, 若位势 $(\Phi^*)_j$ 加上一实常数 c , 通过时间分裂正弦谱方法或者时间分裂傅立叶谱方法计算得到的 ψ_j^{n+1} 仅在原来的基础上乘了一个因子 $\exp(-i\tau\beta \cdot c)$, 而 $|\psi_j^{n+1}|$ 没有变化, 密度函数 $\rho_j^n = |\psi_j^n|^2$ 也没有改变。

2.2.2 半隐差分方法

一维和三维的薛定谔-泊松方程组在齐次狄氏条件或者周期边界条件下可用时间分裂谱方法近似精确求解波函数, 由于二维泊松位势在矩形区域上应用齐次狄氏条件或者周期边界条件得到的数值解误差较大, 因此不能直接使用时间分裂谱方法求解波函数。鉴于此, 我们在有限圆盘上结合 (2.4) 节中泊松位势的差分算法提出了半隐有限差分格式^[81]。

将柯西问题截断为有限圆盘 $\Omega_R = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : |\mathbf{x}| < R\}$ 上初边值问题, 其中 $R > 0$ 为正常数。波函数在边界 $\Gamma_R := \{\mathbf{x} : |\mathbf{x}| = R\}$ 上满足齐次狄氏边界条件, 泊松位势由卷积 (1-11) 给出。将计算区域离散为 (r_j, θ_l) , 其中 $r_j = (j - 1/2)\Delta r$, $\Delta r = R/M$, $j = 0, 1, \dots, M + 1$, $\theta_l = \frac{2\pi l}{N}$, $l = 0, \dots, N$ 。

将 $\psi(r, t_n), \Phi(r, \theta, t_n)$ 记为 ψ^n, Φ^n , 我们提出了三层隐式/蛙跳差分格式^[81,96], 其半离散形式为

$$i \frac{\psi^{n+1} - \psi^{n-1}}{2\tau} = -\frac{1}{2}\Delta \left[\frac{\psi^{n+1} + \psi^{n-1}}{2} \right] + V_{\text{ext}}\psi^n + \beta \Phi^n \psi^n - \alpha |\psi^n| \psi^n, \quad n \geq 1, \quad (2-41)$$

其中 $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$ 。初始值 ψ^1 由修正欧拉格式确定, 具体为

$$\psi^1 = \psi^0 - i\tau \left[-\frac{1}{2}\Delta\psi^{(1)} + V_{\text{ext}}\psi^{(1)} + \beta \Phi^{(1)}\psi^{(1)} - \alpha |\psi^{(1)}| \psi^{(1)} \right], \quad (2-42)$$

$$\psi^{(1)} = \psi^0 - i \frac{\tau}{2} \left[-\frac{1}{2} \Delta \psi^0 + V_{\text{ext}} \psi^0 + \beta \Phi^0 \psi^0 - \alpha |\psi^0| \psi^0 \right]. \quad (2-43)$$

将波函数在 θ 方向用傅立叶级数谱精度逼近为

$$\psi^n(r, \theta) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} (\widehat{\psi^n})_k(r) \exp(i k \theta), \quad (2-44)$$

其中傅立叶系数 $(\widehat{\psi^n})_k$ 定义为

$$(\widehat{\psi^n})_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi^n(r, \theta) \exp(-i k \theta) d\theta, \quad (2-45)$$

$(\widehat{\psi^n})_k$ 在 $r = R$ 处满足齐次狄氏边界。二阶项 $\Delta \psi^n$ 可用下式逼近

$$\Delta \psi^n = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{k^2}{r^2} \right] (\widehat{\psi^n})_k(r) \exp(i k \theta). \quad (2-46)$$

将式 (2-44) 和 (2-46) 代入方程 (2-41)，可知

$$i \frac{(\widehat{\psi^{n+1}})_k - (\widehat{\psi^{n-1}})_k}{2\tau} = -\frac{1}{2} \left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{k^2}{r^2} \right] \left[\frac{(\widehat{\psi^{n+1}})_k + (\widehat{\psi^{n-1}})_k}{2} \right] + (\widehat{\mathcal{Y}})_k, \quad n \geq 1, \quad (2-47)$$

其中 $k = -N/2, \dots, N/2 - 1$ ， $\mathcal{Y} = (V_{\text{ext}} \psi^n + \beta \Phi^n \psi^n - \alpha |\psi^n| \psi^n)$ 。

在 $r_j, j = 1, \dots, M$ 处用中心差分离散上式可得到关于向量 $((\widehat{\psi^{n+1}})_k(r_1), \dots, (\widehat{\psi^{n+1}})_k(r_M))^T$ 的三对角线性方程组，此方程组可用追赶法快速求解。初始值方程 (2-42) 和 (2-43) 可类似离散。波函数的数值解 $\psi_{j,l}^n$ 可由公式 (2-44) 在 (r_j, θ_l) 处的取值确定。

在计算中，式 (2-45) 的积分通常用复合梯形公式离散为

$$(\widehat{\psi^n})_k(r) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \psi^n(r, \theta_j) \exp(-i k \theta_j), \quad (2-48)$$

此式可用快速傅立叶变换以 $O(N \ln(N))$ 的计算量实现。

耦合 (2.4) 节中泊松位势在圆盘上的差分算法，我们得到了一个在 θ 方向是谱精度，半径 r 方向为二阶精度，时间方向为二阶精度的半隐三层差分格式，简记为 SIFD。

2.3 一维和三维泊松位势的计算

我们对不同维数的泊松位势提出了不同的计算方法，在本节对一维和三维泊松位势的计算分别提出了三种快速算法，即快速卷积法，正弦谱方法和傅立叶谱

方法；在下节我们将给出极坐标下二维泊松位势在谱空间上的人工边界条件，并提出基于傅立叶谱方法逼近的有限差分算法。

2.3.1 快速卷积法

我们用快速卷积算法在网格点上逼近式 (1-11)。卷积核在不同空间的形式不同，因此快速卷积算法随空间维数变化而变化。

我们从一维泊松位势卷积公式 $\Phi(x, t_n) = -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} |x-y| \rho(y, t_n) dy$ 出发，因波函数是指数衰减的，可假设其在计算区域 $[a, b]$ 外近似为 0，则相应的密度函数 $\rho(x, t_n)$ 在 $[a, b]$ 上满足齐次狄氏边界条件，泊松位势可近似为

$$\Phi(x, t_n) = -\frac{1}{2} \int_a^b |x-y| \rho(y, t_n) dy. \quad (2-49)$$

对任意的 $n \geq 0$ ，给定 $\rho^n := (\rho_0^n, \rho_1^n, \dots, \rho_M^n)^T$ 其中 $\rho_0^n = \rho_M^n = 0$ ，首先将密度函数 $\rho(x, t_n)$ 投影到 Y_M^S 空间为

$$\rho(x, t_n) = \sum_{l=1}^{M-1} (\widetilde{\rho^n})_l^S \sin(\mu_l(x-a)), \quad x \in [a, b]. \quad (2-50)$$

将式 (2-50) 代入式 (2-49)，可得到泊松位势在 x_j 处的数值逼近解 $(\Phi)_j^n$ 为

$$(\Phi)_j^n = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^{M-1} (\widetilde{\rho^n})_l^S \int_a^b |x_j - y| \sin(\mu_l(y-a)) dy, \quad j = 1, \dots, M-1. \quad (2-51)$$

上式中的积分可解析求解为

$$\begin{aligned} \int_a^b |x-y| \sin(\mu_l(y-a)) dy &= \frac{1}{\mu_l} [(1+(-1)^l)x - (a+(-1)^l)b] \\ &\quad - \frac{2}{(\mu_l)^2} \sin(\mu_l(x-a)), \quad x \in [a, b], \quad l = 1, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (2-52)$$

所以

$$\begin{aligned} (\Phi)_j^n &= \sum_{l=1}^{M-1} (\widetilde{\rho^n})_l^S \frac{a+(-1)^l b}{2\mu_l} - x_j \cdot \sum_{l=1}^{M-1} (\widetilde{\rho^n})_l^S \frac{1+(-1)^l}{2\mu_l} \\ &\quad + \sum_{l=1}^{M-1} \frac{(\widetilde{\rho^n})_l^S}{(\mu_l)^2} \sin(\mu_l(x_j-a)) := S_1 - x_j \cdot S_2 + S_3, \quad j = 1, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (2-53)$$

上面求和式中的 S_1 和 S_2 关于 j 是一致的， S_3 可以利用离散正弦变换高效求解，从而将计算量从 $O(M^2)$ 降到了 $O(M \ln(M))$ 。我们称式 (2-53) 为带齐次狄氏边界泊松方程的快速卷积算法。将方程 (2-20) - (2-21) 与快速卷积算法结合，就得到了向

后欧拉正弦谱方法+快速卷积算法，简记为 **BSFC**，可计算一维基态解。类似的，对一维带周期边界条件的波函数，我们可得到通过离散傅立叶变换加速的快速卷积算法，即

$$\int_a^b |x-y| \exp(i\lambda_l(y-a)) dy \quad (2-54)$$

$$= \begin{cases} \frac{2}{(\lambda_l)^2} [1 - \exp(i\lambda_l(x-a))] + \frac{(a+b-2x)}{i\lambda_l}, & l = -\frac{M}{2}, \dots, -1, 1, \dots, \frac{M}{2} - 1, \\ x^2 - (a+b)x + \frac{a^2+b^2}{2}, & l = 0, \end{cases} \quad (2-55)$$

与向后欧拉傅立叶谱方法结合可得到向后欧拉傅立叶谱方法+快速卷积算法，简记为 **BFFC**。

需要指出的是，上述基于谱逼近的卷积算法无法推广到高维泊松位势的计算，因为高维空间的格林函数 $G_d(\mathbf{x})$ 与正弦或傅立叶基底函数的卷积没有简单的解析表达式。二维和三维的卷积可以通过快速多极算法(简称 **FMM**)加速，它可以将计算复杂度从 $O(N^2)$ 降到 $O(N)$ ，其中 N 是目标点(也是网格点)的个数。根据波函数边界条件的不同，可选择将向后欧拉正弦谱方法或者向后欧拉傅立叶谱方法与上述快速卷积算法结合起来，得到二维和三维基态解的计算方法，即向后欧拉谱方法+快速卷积算法，记为 **BSFC**，和向后欧拉傅立叶谱方法+快速卷积算法，记为 **BFFC**。

假设计算区域 Ω 在二维为矩形 $[a, b] \times [c, d]$ ，在三维为立方体 $[a, b] \times [c, d] \times [e, f]$ ， y 轴和 z 轴网格点为 $y_p = c + p h_y$ 和 $z_q = e + q h_z$ ，其中 $p, q = 0, 1, \dots, M$ ， $h_y = \frac{d-c}{M}$ ， $h_z = \frac{f-e}{M}$ 。给定 $\phi_{jk}^n \approx \phi(x_j, y_k, t_n)$ 和 $\phi_{jkl}^n \approx \phi(x_j, y_k, z_l, t_n)$ ，首先我们用分段双线性函数(二维)和分段三线性函数(三维)对密度函数 $\rho(\mathbf{x}, t_n) := |\phi(\mathbf{x}, t_n)|^2$ 进行线性插值得到 $\rho_h^n(\mathbf{x})$ 。那么 $(\Phi)_{jk}^n \approx \Phi(x_j, y_k, t_n)$ 和 $(\Phi)_{jkl}^n \approx \Phi(x_j, y_k, z_l, t_n)$ 可通过计算下式

$$-\frac{1}{2\pi} \int_{\Omega} \ln(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|) \rho_h^n(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad \text{或} \quad \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \rho_h^n(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (2-56)$$

在目标点 (x_j, y_k) 或 (x_j, y_k, z_l) 处的取值得到。

我们利用 Greengard^[82-86]等提出的快速多极算法来实现上述卷积的高效计算。此处仅概述快速多极算法的计算过程。首先，以八等分立方体的方式递归地在三维区域上生成层级八叉树，在二维矩形区域上可类似生成层级四叉树，关于树结构及自适应树结构请参见 [83,84,87]。在快速多极算法中，首先上行遍历结点以计算多极展开系数，再下行遍历结点以计算局部展开系数，其中需要用到三种展

开系数传递算子，即多极展开系数向多极展开系数的传递算子 (\mathcal{T}_{MM})，局部展开系数向局部展开系数的传递算子 (\mathcal{T}_{LL}) 和多极展开系数向局部展开系数的传递算子 (\mathcal{T}_{ML})。最后，直接计算由临近叶子结点及自身结点在目标点处产生的位势。

本文略去快速多极算法的详细实现过程，具体细节可参见 [83–85]。最耗时的传递算子 \mathcal{T}_{ML} 可用平面波方法加速^[84,88]。为有效计算多极展开和局部展开所涉及到的积分，我们可利用球面调和函数的递推公式^[89]。式 (2-56) 中涉及的正则积分可用高斯数值积分实现。在计算中，多极展开项数和局部展开项数取 $p = 18$ 以保证六位精度。

2.3.2 正弦谱方法

我们在有界区域上用正弦谱方法求解带齐次狄氏边界条件的泊松方程，以逼近方程 (1-8) 中的泊松位势。密度函数 ρ^n 预先给定并满足如下方程：

$$\partial_{xx}\Phi(x_j, t_n) = -\rho_j^n, \quad j = 1, \dots, M-1, \quad n \geq 0, \quad (2-57)$$

$$\Phi(x_0, t_n) = (\Phi)_0^n, \quad \Phi(x_M, t_n) = (\Phi)_M^n, \quad (2-58)$$

其中 $(\Phi)_0^n$ 和 $(\Phi)_M^n$ 是两个边界值的近似值，可以通过式 (2-53) 在 $j = 0$ 和 $j = M$ 处的取值得到。正弦谱方法可以应用到如下修正的泊松方程，即

$$D_{xx}^s \Phi^*(x, t_n) \Big|_{x_j} = -\rho_j^n, \quad j = 1, \dots, M-1, \quad n \geq 0, \quad (2-59)$$

$$\Phi^*(x_0, t_n) = \Phi^*(x_M, t_n) = 0, \quad (2-60)$$

其中

$$\Phi^*(x, t) = \Phi(x, t) - \frac{(\Phi)_M^n - (\Phi)_0^n}{b-a}(x-a) - (\Phi)_0^n. \quad (2-61)$$

在相空间求解方程 (2-59) - (2-60)，可得到

$$(\Phi)_j^n = \sum_{l=1}^{M-1} \frac{\widetilde{(\rho^n)}_l^s}{(\mu_l)^2} \sin(\mu_l(x_j - a)) + \frac{(\Phi)_M^n - (\Phi)_0^n}{b-a}(x_j - a) + (\Phi)_0^n, \quad (2-62)$$

其中 $j = 1, \dots, M-1$ 。

注意到，如果外势 $V_{\text{ext}}(x)$ 及初始值是对称函数，则对应的基态解和波函数也应为对称函数，此时可选对称区域 ($a = -b$) 并将方程 (2-57) - (2-58) 中的边界条件设为 $(\Phi)_0^n = (\Phi)_M^n$ 。利用正弦谱方法求带齐次狄氏边界条件 ($(\Phi)_0^n = (\Phi)_M^n = 0$)，的泊松方程 (2-57) 所得到的解 (2-62) 恰是原方程解的一个常数平移。而外势函数

的常数平移并不影响基态解，因此当外势 $V_{\text{ext}}(x)$ 为偶函数时，我们可选取齐次边界条件，即 $(\Phi)_0^n = (\Phi)_M^n = 0$ ，相应的泊松位势可用下式逼近，

$$(\Phi)_j^n = \sum_{l=1}^{M-1} \frac{(\widetilde{\rho^n})_l^s}{(\mu_l)^2} \sin(\mu_l(x_j - a)), \quad j = 1, \dots, M-1. \quad (2-63)$$

利用波函数的指数衰减性质，从式 (1-11) 可推知二维泊松位势在无穷远处增长近似于 $C_1 \log(|\mathbf{x}|) + C_2$ [25]，因此在矩形区域上不存在类似的齐次化方法，无法设定泊松位势在有界矩形区域上满足齐次狄氏边界条件，因此正弦谱方法并不适合二维泊松位势的计算。而三维的泊松位势 $\Phi(\mathbf{x}, t)$ 满足无穷远条件 $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} |\Phi(\mathbf{x}, t)| = 0$ ，因此只要选取足够大的计算区域并设定齐次狄氏边界条件，我们可利用张量积法将式 (2-63) 直接推广到三维泊松位势的计算。

2.3.3 傅立叶谱方法

我们在有界区域用傅立叶谱方法求解带周期边界条件的泊松方程。

首先引入

$$\Phi^*(x, t) = \Phi(x, t) - \frac{(\Phi)_M^n - (\Phi)_0^n}{b-a}(x-a), \quad (2-64)$$

得到修正方程

$$\partial_{xx}\Phi^*(x_j, t_n) = -\rho_j^n, \quad j = 0, \dots, M-1, \quad n \geq 0, \quad (2-65)$$

$$\Phi^*(x_0, t_n) = \Phi^*(x_M, t_n), \quad (2-66)$$

则 Φ^* 在仅差一个常数的意义下存在且唯一。对修正方程 (2-65) - (2-66) 应用傅立叶谱方法，得到

$$D_{xx}^f \Phi^*(x, t_n)|_{x_j} = -\rho_j^n + \frac{1}{b-a}, \quad j = 0, \dots, M-1, \quad n \geq 0, \quad (2-67)$$

$$\Phi^*(x_0, t_n) = \Phi^*(x_M, t_n). \quad (2-68)$$

式 (2-67) 中 $\frac{1}{b-a}$ 项是为了保证傅立叶变换系数在 0 模的相容性，即将式 (2-65) 两边做傅立叶变换，右侧对应的 0 模系数恰为 0。 $(\Phi^n)_j$ 可通过下式确定

$$(\Phi)_j^n = \sum_{l=-M/2}^{M/2-1} (\widetilde{\Phi^*})_l^f \exp(i\lambda_l(x_j - a)) + \frac{(\Phi)_M^n - (\Phi)_0^n}{b-a}(x_j - a), \quad (2-69)$$

其中当 $l \neq 0$ 时, $(\widetilde{\Phi}^*)_l^{\mathcal{F}} = \frac{(\widetilde{\rho}^n)_l^{\mathcal{F}}}{(\mu_l)^2}$, 在 $l = 0$ 处通常取 $(\widetilde{\Phi}^*)_0^{\mathcal{F}} = 0$ 。事实上, $(\widetilde{\Phi}^*)_0^{\mathcal{F}}$ 取任意常数都不影响基态解的计算。

虽然傅立叶方法为谱精度算法, 但式 (2-67) 中的相容修正项 $(b-a)^{-1}$ 的存在将对误差起主要的影响, 也就意味着当 $b-a$ 增大时误差会减小, 这可以从数值实验中观察到。因此在计算中, 如果用傅立叶谱方法求解带周期边界条件的泊松方程, 需要在相对较大的区域上进行求解。

类似于正弦谱方法, 如果外势函数是对称的, 泊松位势在对称区域上的值 $(\Phi)_j^n$ 可由下述公式得到

$$(\Phi)_j^n = \sum_{l=-M/2}^{M/2-1} (\widetilde{\Phi}^*)_l^{\mathcal{F}} \exp(i\lambda_l(x_j - a)), \quad (2-70)$$

可利用张量积方法将一维傅立叶谱方法直接推广得到二维和三维的傅立叶谱方法, 但是相容性问题仍是存在的。此方法在一维和二维的计算误差较大以致无法应用, 而三维中不相容性的影响则没有那么严重, 这可从数值计算结果观察到。

2.4 二维泊松位势的计算

因二维波函数是指数衰减的且质量守恒, 对应的泊松位势 (1-11) 满足无穷远处增长条件为 $\Phi(\mathbf{x}) = C_1 \log(|\mathbf{x}|) + C_2$ [25], 其中 C_1 和 C_2 是依赖于质量 $N(\psi)$ 的常数。特殊地, 当波函数为极对称函数时, 泊松位势也是极对称函数且满足 $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \Phi(\mathbf{x}) + \frac{N(\psi)}{2\pi} \log(|\mathbf{x}|) = 0$ 。因此, 无法在矩形区域上通过正弦谱方法求解带齐次狄氏边界的泊松方程来逼近泊松位势, 并且因为相容性问题也无法通过傅立叶谱方法求解带周期边界的泊松方程来逼近泊松位势。基于快速多极算法 [83-86] 或者基于小波逼近的快速算法 [90] 加速的卷积算法, 由于复杂度较高而不易使用。在本节, 我们首先推导了泊松位势在傅立叶谱空间所满足的人工边界条件, 然后给出了基于傅立叶谱方法和有限差分方法离散的数值方法。

2.4.1 泊松方程的人工边界条件

因波函数是指数衰减的, 可假设波函数的支撑集是紧致的且包含在圆盘 $\Omega_R = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : |\mathbf{x}| < R\}$ 内, 即

$$\text{supp}\{\psi(\mathbf{x})\} \subset \Omega_R. \quad (2-71)$$

引入人工边界 $\Gamma_R := \{\mathbf{x} : |\mathbf{x}| = R\}$, Γ_R 将全空间分为两部分, 即有界圆盘 Ω_R 和圆盘外部 $\Omega_e = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : |\mathbf{x}| > R\}$ 。泊松位势 (1-11) 满足如下微分方程

$$\Delta\Phi(\mathbf{x}) = -\rho(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega_R, \quad (2-72)$$

$$\Delta\Phi(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega_e, \quad (2-73)$$

$$\Phi(\mathbf{x}) = C_1 \log(|\mathbf{x}|) + C_2, \quad \text{当 } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty, \quad (2-74)$$

其中 Laplace 算子 Δ 在极坐标 (r, θ) 中可表示为 $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$ 。

首先将泊松位势 Φ 和密度函数 ρ 在 θ 方向做 Fourier 展开, 得到

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (\widehat{\Phi})_k(r) \exp(ik\theta), \quad \rho(r, \theta) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (\widehat{\rho})_k(r) \exp(ik\theta), \quad r \geq 0, \quad (2-75)$$

其中

$$(\widehat{\Phi})_k(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \Phi(r, \theta) \exp(-ik\theta) d\theta, \quad (2-76)$$

$$(\widehat{\rho})_k(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho_k(r, \theta) \exp(-ik\theta) d\theta. \quad (2-77)$$

由波函数的紧致假设 (2-71) 及式 (2-77) 可知 $(\widehat{\rho})_k(r) = 0, R < r < \infty$ 。

将式 (2-75) 代入方程 (2-73) 中, 可知

$$\partial_r^2 (\widehat{\Phi})_k + \frac{1}{r} \partial_r (\widehat{\Phi})_k - \frac{k^2}{r^2} (\widehat{\Phi})_k = 0, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad R < r < \infty. \quad (2-78)$$

当 $k \neq 0$ 时, 方程 (2-78) 有两个基本解, 即 $r^{|k|}$ 和 $r^{-|k|}$, 由无穷远处条件 (2-74) 知, 方程解为 $(\widehat{\Phi})_k(r) = C r^{-|k|}$ 。计算可知, 函数 $(\widehat{\Phi})_k(r)$ 在 $r = R$ 处满足

$$\partial_r (\widehat{\Phi})_k \Big|_{r=R} = -\frac{|k|}{r} (\widehat{\Phi})_k \Big|_{r=R}. \quad (2-79)$$

当 $k = 0$ 时, 方程 (2-78) 的通解为 $(\widehat{\Phi})_0(r) = C_1 \log(r) + C_2$, 其中 C_1, C_2 为常数。 $(\widehat{\Phi})_0$ 满足无穷远处边界条件 $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} (\widehat{\Phi})_0(r) + \frac{N(\psi)}{2\pi} \log(r) = 0$, 因此 $(\widehat{\Phi})_0(r) = C_1 \log(r)$ 。计算可知 $(\widehat{\Phi})_0$ 在 $r = R$ 处满足

$$\partial_r (\widehat{\Phi})_0 \Big|_{r=R} = \frac{(\widehat{\Phi})_0}{r \ln(r)} \Big|_{r=R}. \quad (2-80)$$

将式 (2-75) 代入方程 (2-73) 中, 可知

$$\partial_r^2 (\widehat{\Phi})_k + \frac{1}{r} \partial_r (\widehat{\Phi})_k - \frac{k^2}{r^2} (\widehat{\Phi})_k = -(\widehat{\rho})_k, \quad 0 < r < R, \quad (2-81)$$

泊松位势及其一阶偏导数都是连续函数，对应的傅立叶变换系数 $(\widehat{\Phi})_k$ 及其一阶导数都是 r 的连续函数，所以 $(\widehat{\Phi})_k$ 在 $r = R$ 处满足边界条件 (2-79) - (2-80)。利用变分方法和椭圆方程极大值原理，可以证明方程组 (2-81) 在边界条件 (2-79) - (2-80) 下，存在唯一解。进一步可证明 $(\widehat{\Phi})_k$ 满足本性极点条件^[79,91,92]：

$$\partial_r(\widehat{\Phi})_0(0) = 0, \quad (\widehat{\Phi})_k(0) = 0, \quad k \neq 0. \quad (2-82)$$

至此我们得到了泊松位势的傅立叶变换系数在有界圆盘上所满足的微分方程及相应的人工边界条件，通过求解带混合边界条件 (2-79) - (2-80) 的方程组 (2-81) 可得到 $(\widehat{\Phi})_k$ 在 $0 \leq r \leq R$ 上的值，最后由公式 (2-75) 得到泊松位势在圆盘上的近似解。

2.4.2 二维泊松位势的数值算法

利用泊松位势傅立叶系数在有界区域上所满足的人工边界条件，我们给出了泊松位势的逼近算法。给定密度函数 ρ 满足上述紧致性，即 $\text{supp}\{\rho\} \subset \Omega_R$ ，通过求解 (2-81) 得到泊松位势 Φ 。

首先将傅立叶展开式 (2-75) 截断为有限项，即

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} (\widehat{\Phi})_k(r) \exp(ik\theta), \quad \rho(r, \theta) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} (\widehat{\rho})_k(r) \exp(ik\theta), \quad (2-83)$$

其中 N 为正偶数并且 $(\widehat{\Phi})_k$ 和 $(\widehat{\rho})_k$ 可用数值积分近似为

$$(\widehat{\Phi})_k(r) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \Phi(r, \theta_j) \exp(-i k \theta_j), \quad (2-84)$$

$$(\widehat{\rho})_k(r) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \rho(r, \theta_j) \exp(-i k \theta_j), \quad (2-85)$$

这里 $\theta_j = \frac{2\pi j}{N}$ ，上式求和式可用快速傅立叶变换加速。

将区间 M 等分，令格点为 $r_j = (j - 1/2)\Delta r$, $j = 0, 1, \dots, M + 1$ ，其中 M 为正整数， $\Delta r = R/M$ 为步长，则 $r_M = R - \frac{1}{2}\Delta r$, $r_{M+1} = R + \frac{1}{2}\Delta r$ 。令 $(\widehat{\rho})_{k,j}$, $(\widehat{\Phi})_{k,j}$ 分别为 $(\widehat{\rho})_k(r_j)$, $(\widehat{\Phi})_k(r_j)$ 的近似解，在 r_j 处用二阶中心差分逼近方程 (2-81)，可得到

$$\frac{(\widehat{\Phi})_{k,j+1} - 2(\widehat{\Phi})_{k,j} + (\widehat{\Phi})_{k,j-1}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_j} \frac{(\widehat{\Phi})_{k,j+1} - (\widehat{\Phi})_{k,j-1}}{2\Delta r} - \frac{k^2}{r_j^2} (\widehat{\Phi})_{k,j} = -(\widehat{\rho})_{k,j}, \quad (2-86)$$

其中 $j = 1, 2, \dots, M$, $k = -N/2, \dots, N/2 - 1$ 。混合边界条件 (2-80) 和 (2-79) 分别

离散为

$$\frac{(\widehat{\Phi})_{0,M+1} - (\widehat{\Phi})_{0,M}}{\Delta r} = \frac{(\widehat{\Phi})_{0,M+1} + (\widehat{\Phi})_{0,M}}{2R \ln(R)}, \quad (2-87)$$

$$\frac{(\widehat{\Phi})_{k,M+1} - (\widehat{\Phi})_{k,M}}{\Delta r} = -\frac{(\widehat{\Phi})_{k,M+1} + (\widehat{\Phi})_{k,M}}{2} \frac{|k|}{R}, \quad k \neq 0. \quad (2-88)$$

将上述两式代入方程 (2-86) 可以消去 $(\widehat{\Phi})_{k,M+1}$ ，从而得到关于 $((\widehat{\Phi})_{k,1}, \dots, (\widehat{\Phi})_{k,M})^T$ 的 N 个三对角线性方程组，利用追赶法可以在 $O(NM)$ 的计算量内精确求解。至此我们得到了 $(\widehat{\Phi})_{k,j}$ ，将其代入式 (2-83) 可得到泊松位势在 (r_j, θ_l) 处的数值解为

$$\Phi(r_j, \theta_l) \approx \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} (\widehat{\Phi})_{k,j} \exp(i k \theta_l). \quad (2-89)$$

需要指出的是，求解泊松位势所涉及的三对角矩阵是不变的，仅需要生成一次。一次泊松位势的计算量为 $O(NM + MN \ln(N))$ ，主要包括线性方程组求解和两次快速傅立叶变换。由于人工边界条件的使用，我们在足够细密的网格上得到的泊松位势是近似准确的，并且与解析解没有常数偏差，这与齐次狄氏边界条件或周期边界条件下求得的泊松位势是有区别的，所以利用此算法可近似准确求解相互作用势能 $E_{\text{int}} = \int_{\mathbb{R}^2} \Phi \rho \, d\mathbf{x}$ 等与泊松位势相关的量。

当密度函数 ρ 是极对称函数时，泊松位势也是极对称函数，此时上述算法可简化为在有界区间 $[0, R]$ 上求解方程

$$\begin{cases} \partial_r^2 \Phi + \frac{1}{r} \partial_r \Phi = -\rho, & 0 < r < R, \\ \partial_r \Phi|_{r=R} = \frac{\Phi}{r \ln(r)}|_{r=R}. \end{cases} \quad (2-90)$$

此方程可用同样的差分方法数值求解。

注记： 我们也可用有限元方法^[91,92]或者高阶紧致差分方法^[93]来求解方程 (2-79)。极坐标下的谱方法^[94,95]因边界条件 (2-80) 和 (2-79) 的限制而无法直接应用。◇

2.5 数值结果

我们在本节将比较分析薛定谔-泊松方程组的基态解和动力学的数值结果。

2.5.1 基态解的数值方法比较

为反映不同泊松位势算法对求基态解的影响，我们对薛定谔-泊松方程组的基态解进行了比较。

表 2.1 例 (2.1) 中, BSFC、BESP 和 BEFP 在 $\Omega = [-16, 16]$ 上取不同 h 时的基态解误差 $\|\phi_g - \phi_{g,h}\|_\infty$ 。

	$h = 1$	$h = 1/2$	$h = 1/4$	$h = 1/8$	$h = 1/16$
BSFC	7.644E-03	4.076E-06	1.400E-12	<E-12	<E-12
BESP	7.644E-03	4.076E-06	1.400E-12	<E-12	<E-12
BEFP	5.725E-03	1.074E-02	1.074E-02	1.074E-02	1.074E-02

表 2.2 例 (2.1) 中, BEFP 在 $\Omega = [-a, a]$ 上取 $h = 1/16$ 时的基态解误差 $\|\phi_g - \phi_{g,h}\|_\infty$ 。

	$a = 8$	$a = 16$	$a = 32$	$a = 64$	$a = 128$
BEFP	2.297E-02	1.078E-02	5.235E-03	2.581E-03	1.281E-03

表 2.3 例 (2.2) 中 BEFD 取不同步长 Δr 时基态解误差 $\|\phi_g - \phi_g^{\Delta r}\|_\infty$ 。

	$\Delta r = 1/4$	$\Delta r = 1/8$	$\Delta r = 1/16$	$\Delta r = 1/32$
$\beta = -1$	2.306E-04	5.755E-05	1.436E-05	3.563E-06
$\beta = -5$	2.601E-03	6.455E-04	1.614E-04	4.012E-05
$\beta = -10$	7.413E-03	1.827E-03	4.546E-04	1.130E-04
$\beta = -50$	9.300E-02	2.082E-02	5.105E-03	1.264E-03

表 2.4 例 (2.2) 中 $\beta = -5$ 时, BESP 和 BEFP 在 $[-16, 16]^2$ 上取步长 h 时的基态解误差 $\|\phi_g^h(x, 0) - \phi_g\|_\infty$ 。

	$h = 1$	$h = 1/2$	$h = 1/4$	$h = 1/8$	$h = 1/16$
BESP	1.668E-05	3.665E-06	4.168E-06	4.303E-06	4.337E-06
BEFP	1.228E-03	2.257E-03	2.568E-03	2.650E-03	2.671E-03

表 2.5 例 (2.2) 中 $\beta = -5$, BESP 和 BEFP 在 $\Omega = [-A, A]^2$ 上取 $h = 1/16$ 时的基态解误差 $\|\phi_g^A(x, 0) - \phi_g\|_\infty$ 。

	$A = 12$	$A = 14$	$A = 16$	$A = 18$	$A = 20$
BESP	1.102E-05	5.415E-06	4.337E-06	4.336E-06	4.336E-06
BEFP	4.825E-03	3.510E-03	2.671E-03	2.101E-03	1.697E-03

例 2.1 一维无外势薛定谔-泊松方程组的基态解, 对应参数为 $d = 1, V_{\text{ext}} = 0, \beta = -3 < 0$ 和 $\alpha = 0$ 。初始值选为 $\phi_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$, $x \in \mathbb{R}$, 时间步长 $\tau = 0.005$ 。

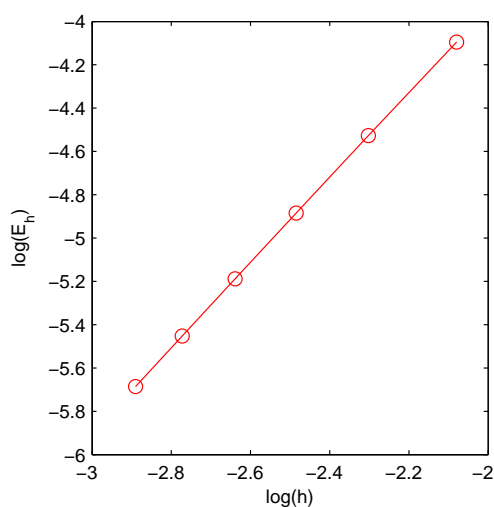


图 2.1 例 (2.3) 中 BSFC 方法在 $[-4, 4]^3$ 上基态解误差 $\|\phi_g - \phi_{g,h}\|_\infty$ 与空间步长 h 的 $\log - \log$ 图。

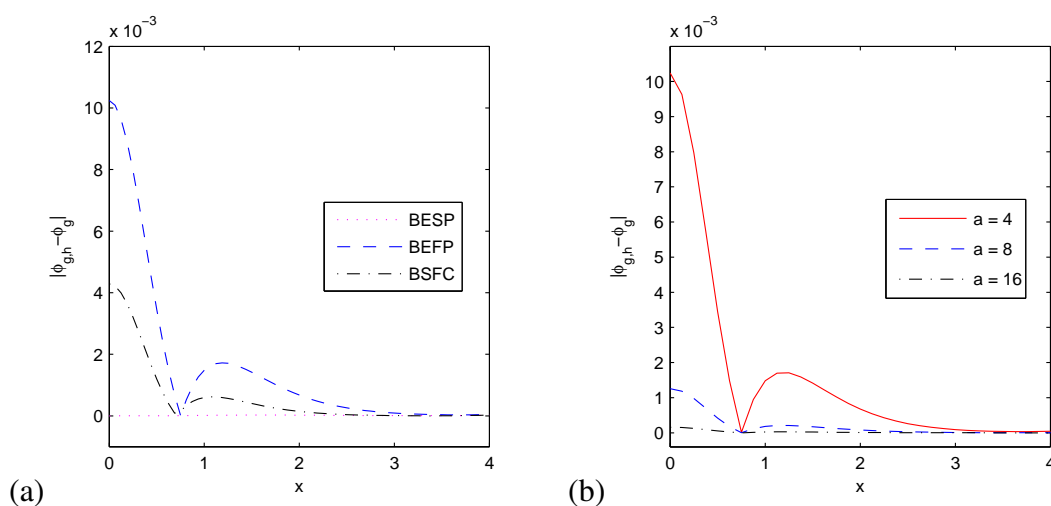


图 2.2 例 (2.3) 中基态解的误差分析。(a) 在三维均匀离散 $h = 1/16$ 的区域 $[-4, 4]^3$ 上, BSFC、BESP 和 BEFP 在 x 轴上的误差 $|\phi_g - \phi_{g,h}|$; (b) 在三维均匀离散 $h = 1/8$ 的不同计算区域 $[-a, a]^3$ 上, BEFP 在 x 轴上的误差 $|\phi_g - \phi_{g,h}|$ 。

令 ϕ_g 为 BSFC 用步长 $h = 1/128$ 得到的“准确”基态解, $\phi_{g,h}$ 为步长 h 时的数值解。表 (2.1) 和表 (2.2) 分别列出了 BSFC、BESP 和 BEFP 在 $[-16, 16]$ 上取步长 h 时的数值解误差 $\|\phi_g - \phi_{g,h}\|_\infty$ 以及 BEFP 在不同区间取 $h = 1/16$ 时的误差 $\|\phi_g - \phi_{g,h}\|_\infty$ 。

例 2.2 二维无外势薛定谔-泊松方程组的基态解, 对应参数为 $d = 2$, $V_{\text{ext}} = 0$, $\beta < 0$ 和 $\alpha = 0$ 。初始值选为 $\phi_0 = \sqrt{\pi/2} e^{-x^2-y^2}$, $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, 时间步长 $\tau = 0.01$ 。令 ϕ_g 为 BEFD 在 $[0, 32]$ 上取步长 $h = 1/1024$ 时的近似“准确”基态解。

表 (2.3) 列出了 BEFD 方法在不同泊松系数 $\beta < 0$ 下取不同步长 Δr 时数值解 $\phi_g^{\Delta r}$ 的误差 $\|\phi_g - \phi_g^{\Delta r}\|_\infty$ 。表 (2.4) 和表 (2.5) 比较了 $\beta = -5$ 时在矩形区域上, **BESP** (泊松位势强制满足齐次狄氏边界) 和 **BEFP** (泊松位势满足周期边界) 在 $[-16, 16]^2$ 上取步长 h 时基态解 ϕ_g^h 在 x 轴上的误差 $\|\phi_g^h(x, 0) - \phi_g\|_\infty$ 以及取相同步长 $h = 1/16$ 和不同区域 $[-A, A]^2$ 时基态解 ϕ_g^A 在 x 轴上的误差 $\|\phi_g^A(x, 0) - \phi_g\|_\infty$ 。

例 2.3 三维无外势薛定谔-泊松方程组的基态解, 对应参数为 $d = 3$, $V_{\text{ext}} = 0$, $\beta = -75 < 0$ 和 $\alpha = 0$ 。初始值选为 $\phi_0 = \frac{1}{(6\pi)^{3/4}} e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{12}}$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$, 时间步长 $\tau = 0.01$ 。此时的基态解是球对称函数, 我们用 Crank-Nicolson 差分法求解等价的一维退化方程的离散归一化梯度流方程 (2-1) - (2-3), 其中 ϕ 和 Φ 分别满足齐次狄氏条件和 Robin 边界条件。“准确”解 $\phi_g(r)$ 是在球 $0 \leq r \leq 8$ 上用非常精细的网格 $\Delta r = 1/1024$ 得到的。图 (2.1) 描述了 BSFC 的精度及其近似二阶收敛速度, 其中式 (1-11) 用快速多极算法加速。图 (2.2) 描述 BSFC, **BESP** 和 **BEFP** 在均匀离散 ($h = 1/16$) 的区域 $[-4, 4]^3$ 上所得基态解在 x 轴的误差 $|\phi_g - \phi_{g,h}|$ 以及 **BEFP** 方法在均匀离散 $h = 1/8$ 的不同计算区域 $[-a, a]^3$ 所得基态解在 x 轴方向上的误差 $|\phi_g - \phi_{g,h}|$ 。

从表 (2.1)-表 (2.5), 图 (2.1) -图 (2.2) 可得到如下结论:

(一) 一维 **BESP** 和 **BSFC** 方法具有谱精度, 二维的 **BEFD** 和三维 **BSFC** 方法具有二阶精度。

(二) **BEFP** 方法中的误差主要来源于有限计算区域的截断, 从而降低了算法精度。从表 (2.1) 和表 (2.5) 可看出, **BEFP** 在固定区域上的误差 $\|\phi_g - \phi_{g,h}\|_\infty$ 并未随空间步长 h 的减小而减小, 而是趋向于一固定值。同样可以观察到, **BEFP** 的误差随着区域的增大而减少。

(三) 二维计算中 **BESP** 算法将泊松位势边界条件强制齐次化, 这与二维泊松位势在无穷远处近似 $C_1 \ln(|\mathbf{x}|) + C_2$ 增长相矛盾, 所以当空间步长变小时, 基态解误差稳定地趋向一个较大的值并且此数值并未随着计算区域的变大而减少。综合考虑, 基于泊松方程人工边界方法的 **BEFD** 算法是计算二维基态解的合适算法。

(四) 从计算精度和效率来看, 三维 **BEFP** 要比 **BSFC** 更优秀。比较图 (2.2) 中 (a) 和 (b) 子图, 可以看出在同样数目计算格点上, **BEFP** 精度更高些。综合考虑, **BESP** 方法是求解三维基态解的首选方法。

表 2.6 例 (2.4) 中, TSFC、TSSP 和 TSFP 在 $[-16, 16]$ 上取不同步长 h 计算 $T = 1.0$ 时刻的密度函数误差 $\|\rho - \rho_h\|_\infty$ 。

	$h = 1$	$h = 1/2$	$h = 1/4$	$h = 1/8$	$h = 1/16$
TSFC	5.017E-02	1.531E-02	1.120E-05	1.412E-12	<E-12
TSSP	5.017E-02	1.531E-02	1.120E-05	1.396E-12	<E-12
TSFP	5.412E-02	3.968E-02	2.345E-02	2.345E-02	2.345E-02

表 2.7 例 (2.4) 中, BEFP 在不同区间 $[-a, a]$ 上取 $h = 1/32$ 计算 $T = 1.0$ 时刻的密度函数误差 $\|\rho - \rho_h\|_\infty$ 。

	$a = 8$	$a = 16$	$a = 32$	$a = 64$	$a = 128$
TSFP	6.207E-02	2.345E-02	1.107E-02	5.395E-03	2.654E-03

表 2.8 例 (2.5) 中, SIFD 在 θ 方向的误差 $\|\psi^{(\Delta r, \Delta \theta, \tau)} - \psi\|_\infty$ 。

	$\Delta \theta = \pi/8$	$\Delta \theta = \pi/16$	$\Delta \theta = \pi/32$	$\Delta \theta = \pi/64$
$\beta = -5$	1.451E-02	1.314E-05	3.916E-12	5.624E-14
$\beta = 5$	1.367E-02	3.793E-05	2.899E-11	5.550E-14

表 2.9 例 (2.5) 中, SIFD 在 θ 方向的误差 $\|\Phi^{(\Delta r, \Delta \theta, \tau)} - \Phi\|_\infty$ 。

	$\Delta \theta = \pi/8$	$\Delta \theta = \pi/16$	$\Delta \theta = \pi/32$	$\Delta \theta = \pi/64$
$\beta = -5$	4.063E-03	3.047E-07	1.036E-13	1.310E-14
$\beta = 5$	1.671E-03	8.054E-07	9.770E-14	1.055E-14

表 2.10 例 (2.5) 中, SIFD 在 r 方向的误差 $\|\psi^{(\Delta r, \Delta \theta, \tau)} - \psi\|_\infty$ 。

	$\Delta r = 1/4$	$\Delta r = 1/8$	$\Delta r = 1/16$	$\Delta r = 1/32$
$\beta = -5$	1.024E-02	2.480E-03	6.108E-04	1.491E-04
$\beta = 5$	1.243E-02	3.058E-03	7.491E-04	1.778E-04

2.5.2 动力学的数值方法比较

本节中我们计算了薛定谔-泊松方程组的动力学并比较分析了数值结果。

例 2.4 一维无外势的薛定谔-泊松方程组在 $T = 1.0$ 时刻的动力学计算, 对应参数为 $d = 1$, $V_{\text{ext}} = 0$, $\beta < 0$ 和 $\alpha = 0$ 。初始值为 $\psi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}$, $x \in \mathbb{R}$ 。在

表 2.11 例 (2.5) 中, SIFD 在 r 方向的误差 $\|\Phi^{(\Delta r, \Delta \theta, \tau)} - \Phi\|_\infty$ 。

	$\Delta r = 1/4$	$\Delta r = 1/8$	$\Delta r = 1/16$	$\Delta r = 1/32$
$\beta = -5$	3.558E-03	8.805E-04	2.180E-04	5.377E-05
$\beta = 5$	2.638E-03	6.537E-04	1.625E-04	3.981E-05

表 2.12 例 (2.5) 中, SIFD 在 t 方向的误差 $\|\psi^{(\Delta r, \Delta \theta, \tau)} - \psi\|_\infty$ 。

	$\tau = 1/128$	$\tau = 1/256$	$\tau = 1/512$	$\tau = 1/1024$
$\beta = -5$	9.600E-05	2.398E-05	5.983E-06	1.484E-06
$\beta = 5$	1.729E-04	4.340E-05	1.086E-05	2.696E-06

表 2.13 例 (2.5) 中, SIFD 在 t 方向的误差 $\|\Phi^{(\Delta r, \Delta \theta, \tau)} - \Phi\|_\infty$ 。

	$\tau = 1/128$	$\tau = 1/256$	$\tau = 1/512$	$\tau = 1/1024$
$\beta = -5$	2.807E-05	7.024E-06	1.754E-06	4.352E-07
$\beta = 5$	5.486E-05	1.369E-05	3.411E-06	8.457E-07

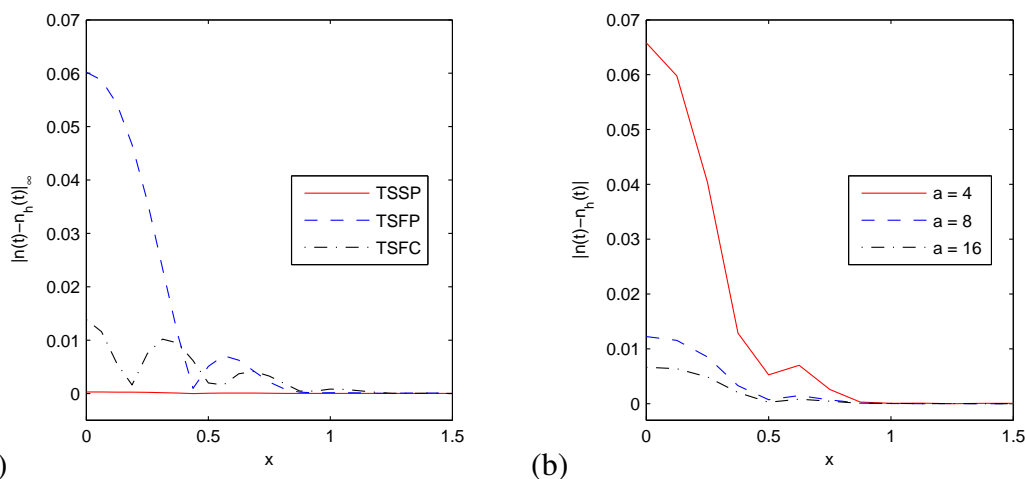


图 2.3 例 (2.6) 中密度函数误差。(a) 在三维均匀离散 $h = 1/16$ 的区域 $[-4, 4]^3$ 上, TSFC、TSSP 和 TSFP 方法在 x 轴上的误差 $|\rho - \rho_h|$; (b) 在三维均匀离散 $h = 1/8$ 的不同计算区域 $[-a, a]^3$ 上, TSFP 方法在 x 轴上的误差 $|\rho - \rho_h|$ 。

此我们关心算法在空间方向的精度, 因此选取足够小的时间步长 $\tau = 0.0001$ 使得来自于时间方向离散的误差可以忽略不计。波函数 ψ 和密度函数 $\rho = |\psi|^2$ 的准确解是用 TSFC 方法在 $[-64, 64]$ 上以非常精细的空间步长 $h = 1/32$ 计算得到的。 $\rho_h = |\psi_h|^2$ 为空间步长 h 下时数值解。表 (2.6) 和表 (2.7) 列出了 TSFC、

TSSP 和 TSFP 方法在区间 $[-16, 16]$ 上以步长 h 计算 $T = 1.0$ 时刻的密度函数误差 $\|\rho - \rho_h\|_\infty$ 及 TSFP 方法在不同区域 Ω 上取固定步长 $h = 1/32$ 时的密度函数误差。

例 2.5 二维无外势的薛定谔-泊松方程组在 $T = 0.5$ 时刻的动力学计算，对应参数为 $d = 2$ ， $V_{\text{ext}} = 0$ ， $\beta = \pm 5$ 和 $\alpha = 0$ 。计算区域取 Ω_R 和初始值取为 $\psi_0 = e^{-(x^2+(y-2)^2)}$ 。波函数 ψ 和泊松位势 Φ 的“准确解”是 SIFD 格式在 $R = 16$ 时用非常小的步长，即 $\Delta r = 1/128, \Delta\theta = \pi/128, \tau = 0.0001$ 计算得到的，记 $\psi^{(\Delta r, \Delta\theta, \tau)}, \Phi^{(\Delta r, \Delta\theta, \tau)}$ 为 SIFD 格式在 $R = 16$ 时用 $(\Delta r, \Delta\theta, \tau)$ 得到的波函数和泊松位势数值解。

首先考察 SIFD 在 θ 方向的谱精度，此时我们选取足够小的 $\Delta r = 1/128$ 和 $\tau = 0.0001$ 以使得来自 r 方向和时间方向的数值误差充分小以致可以忽略。接着考察半径 r 方向的精度，此时选取充分小的 $\Delta\theta = \pi/128$ 和 $\tau = 0.0001$ 。最后考察在时间 t 方向的精度，此时选取充分小的 $\Delta r = 1/128$ 和 $\Delta\theta = \pi/128$ 。

表 (2.8)-表 (2.13) 列出了 SIFD 在 θ 方向，半径 r 方向和时间方向波函数和泊松位势的数值误差。从表 (2.8) -表 (2.13) 中可看出，SIFD 计算波函数和泊松位势时，在 θ 方向具有谱精度，在半径 r 和时间 t 方向具有二阶精度。

例 2.6 三维无外势的薛定谔-泊松方程组在 $T = 1.0$ 时刻的动力学计算，对应参数为 $d = 3$ ， $V_{\text{ext}} = 0$ ， $\beta = -200 < 0$ 和 $\alpha = 0$ 。初始值为 $\psi_0 = (\pi/2)^{-\frac{3}{4}} e^{-(x^2+y^2+z^2)}$ 。基准解是利用 Crank-Nicolson 有限差分方法求解退化的一维模型得到的，具体的， $\psi(r, t)$ 是在球 $0 \leq r \leq 8$ 上用非常精细的网格 $\Delta r = 1/1024$ 和时间步长 $\tau = 0.00001$ 得到的。TSFC、TSSP、TSFP 取同样的时间步长 $\tau = 0.001$ 。图 (2.3) 为 TSFC、TSSP 和 TSFP 在三维均匀离散 ($h = 1/16$) 的区域 $[-4, 4]^3$ 上所得的密度函数在 x 轴上的误差 $|\rho - \rho_h|$ 以及 TSFP 方法在三维均匀离散 $h = 1/8$ 的不同计算区域 $[-a, a]^3$ 上所得密度函数在 x 轴上的误差 $|\rho - \rho_h|$ 。

从表 (2.6)- (2.13)，图 (2.3) 和大量实际计算结果中可得到与基态求解类似的结论。TSSP 是三维薛定谔-泊松方程组动力学的首选方法。

2.5.3 三维方程组的数值研究

在本节，我们利用 BESP 和 TSSP 研究了三维薛定谔-泊松方程组在不同参数下的基态解和动力学。

例 2.7 不同参数下三维薛定谔-泊松方程组的基态解研究。

情形 I: 外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + 4z^2)$ 和泊松系数 $\beta = 1$ 及不同交换系数 α 。

表 (2.14) 列出了此时基态解对应的各种量。从中可以看出, 对固定的泊松系数 β , 当 α 增大时, 总能量 E^g 、化学能 μ^g 、外势能 E_{pot}^g 、交换能 E_{exc}^g 和凝聚宽度 σ_x^g , σ_z^g 都减少, 而动能 E_{kin}^g 、相互作用能 E_{int}^g 和中心密度 $\rho^g(0)$ 是增大的。

情形 II: 外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + 4z^2)$ 和交换系数 $\alpha = 0$ 及不同泊松系数 β 。

表 (2.15) 列出了此时基态解对应的各种量, 从中可以看出, 当泊松系数 β 从负数逐渐增大到正数时, 总能量 E^g 、化学能 μ^g 、外势能 E_{pot}^g 和相互作用能 E_{int}^g 是增加的, 而动能 E_{kin}^g 和中心密度 $\rho^g(0)$ 是减少的。

情形 III: 不同外势下的基态解。图 (2.4) 为不同外势下基态解的曲面图 $|\phi_g(x, 0, z)|^2$ 和等值面 $|\phi_g| = 0.01$, 对应参数 $\beta = 100$, $\alpha = 1$ 。其中外势分别对应为 (i) 调和势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$; (ii) 双势阱 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + 4e^{-\frac{1}{2}z^2}$; (iii) 光晶格势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2) + 20[\sin(\pi x)^2 + \sin(\pi y)^2 + \sin(\pi z)^2]$ 。

例 2.8 三维薛定谔-泊松方程组在不同情形下的动力学。

初始值 $\psi_0(\mathbf{x})$ 取为参数 $\beta = 1$, $\alpha = 5$, $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + 4z^2)$ 时三维薛定谔-泊松方程组的数值基态解。首先, 在初始时刻将交换系数从 $\alpha = 5$ 变到 $\alpha = 10$, 其他参数保持不变。图 (2.5) 描述了总能量 $E(t)$ 、动能 $E_{\text{kin}}(t)$ 、外势能 $E_{\text{pot}}(t)$ 、相互作用能 $E_{\text{int}}(t)$ 、化学能 $\mu(t)$ 、凝聚宽度 $\sigma_x(t)$, $\sigma_z(t)$ 和中心密度 $\rho_0(t) := |\psi(0, 0, 0, t)|^2$ 的变化过程, 同时还有不同时刻密度函数等值面 $\rho(\mathbf{x}, t) := |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 0.01$ 的变化图。接着, 图 (2.6) 描述了类似的过程, 只是在初始时刻将外势从 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + 4z^2)$ 突然变化为 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + 36z^2)$, 同时其他参数保持不变。

从图 (2.5) 和图 (2.6) 中可观察到动能、外势能、相互作用能、交换能、化学能、凝聚宽度和中心密度都是周期变化的, 系统总能量在数值上也是守恒的。

2.6 本章小结

我们在本章系统研究了求解一维、二维和三维的薛定谔-泊松方程组基态解和动力学的快速高精度数值算法。

在一维和三维计算中, 我们将向后欧拉正弦/傅立叶谱方法与不同的泊松位势算法耦合以求解基态解, 将时间分裂正弦/傅立叶谱方法与泊松位势算法耦合以求

表 2.14 例 (2.7) 中在泊松系数 $\beta = 1$ 和外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + 4z^2)$ 下, 不同交换系数 α 所对应基态解的各种数量。

α	E_{kin}^g	E_{pot}^g	E_{int}^g	E_{exc}^g	E^g	μ^g	σ_x^g	σ_z^g	$\rho_g(0)$
0.1	0.999	1.001	0.031	-0.031	2.000	2.021	0.501	0.250	0.503
0.5	1.031	0.970	0.032	-0.157	1.876	1.855	0.481	0.245	0.519
1	1.074	0.932	0.032	-0.321	1.717	1.642	0.455	0.238	0.540
5	1.619	0.635	0.038	-2.013	0.279	-0.355	0.272	0.182	0.786
10	3.154	0.348	0.057	-5.677	-2.118	-3.953	0.128	0.110	1.357

表 2.15 例 (2.7) 中在外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$ 和交换系数 $\alpha = 0$ 下, 不同泊松系数 β 所对应基态解的各种数量。

β	E_{kin}^g	E_{pot}^g	E_{int}^g	E_{exc}^g	E^g	μ^g	$\rho_g(0)$
-50	1.516	0.377	-1.845	0.000	0.048	-1.797	0.780
-10	0.839	0.671	-0.293	0.000	1.217	0.923	0.471
-5	0.792	0.710	-0.142	0.000	1.361	1.219	0.446
0	0.750	0.750	0.000	0.000	1.500	1.500	0.424
5	0.713	0.790	0.111	0.000	1.613	1.724	0.404
10	0.679	0.829	0.258	0.000	1.766	2.023	0.385
50	0.502	1.137	1.054	0.000	2.694	3.748	0.280

解动力学, 其中泊松位势算法包括快速卷积算法, 正弦谱方法和傅立叶谱方法。快速卷积算法在一维借助快速傅立叶变换加速, 三维卷积可利用快速多极算法加速, 而正弦谱方法可求解带齐次狄氏边界条件的泊松方程, 傅立叶谱方法可用来求解带周期边界条件的泊松方程。在傅立叶谱方法中, 0 模的不相容性导致有限区域截断所引起的误差为主要误差, 并且此误差会随着计算区域的增大而减少。

二维泊松位势无法在矩形区域上通过求解齐次狄氏边界条件或者周期边界条件的泊松方程来逼近, 而基于快速算法加速的卷积算法由于计算复杂度较高而不易实现。本章我们给出了泊松位势在有限圆盘上的人工边界条件, 并提出了一个在 θ 方向为傅立叶谱方法, 在 r 方向用有限差分离散的泊松位势算法。我们将泊松位势算法与向后欧拉差分算法结合得到了求解基态解的 BEFD 算法, 与三层隐式/蛙跳算法结合得到了求解动力学的 SIFD 算法。

详细的数值结果验证了上述结论。最后利用向后欧拉正弦谱方法和时间分裂正弦谱方法对三维薛定谔-泊松方程组在不同情形下的基态解和动力学性质进行了研究。

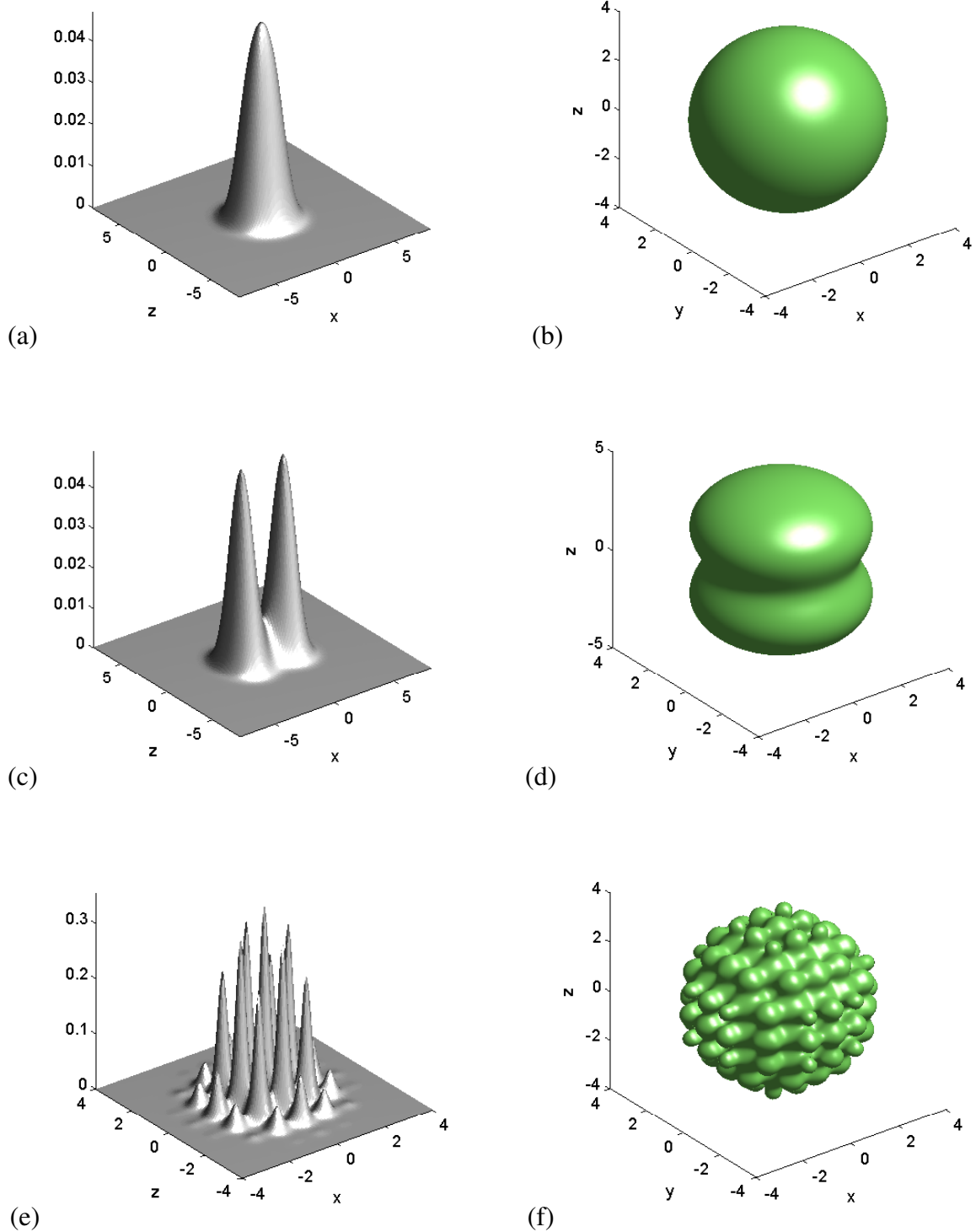


图 2.4 例 (2.7) 中三维薛定谔-泊松方程组在 $\beta = 100$, $\alpha = 1$ 及调和势 (a,b) , 双阱势 (c,d) 和光晶格势 (e,f) 下的密度函数曲面图 $|\phi_g(x, 0, z)|^2$ (左侧) 和等值面 $|\phi_g(x, y, z)| = 0.01$ (右侧)。

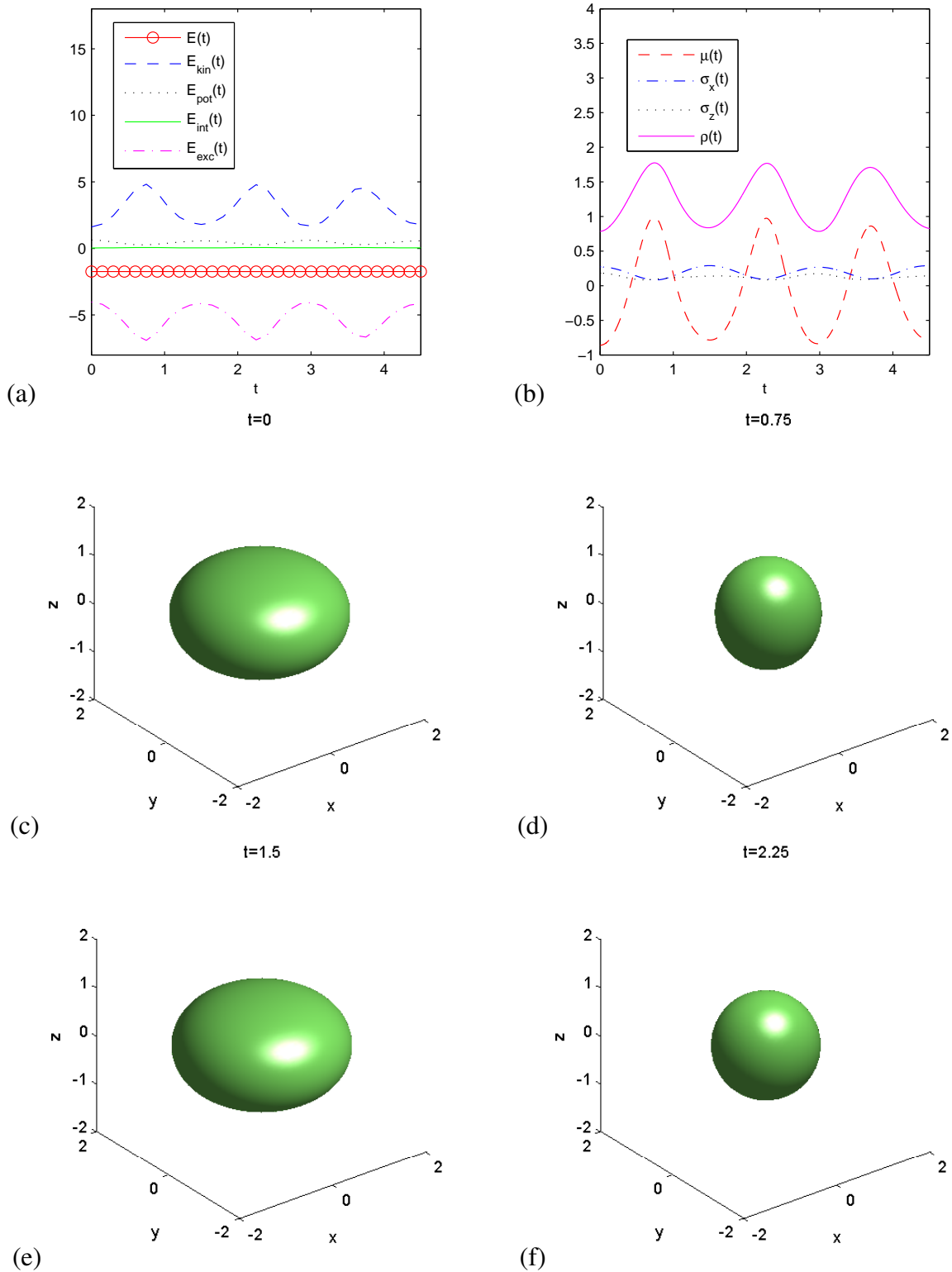


图 2.5 例 (2.8) 中三维薛定谔-泊松方程组将初始时刻的泊松系数从 $\beta = 5$ 变到 $\beta = 10$ 后各种量演化过程及密度函数在不同时刻的等值面 $\rho(\mathbf{x}, t) := |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 0.01$ 。

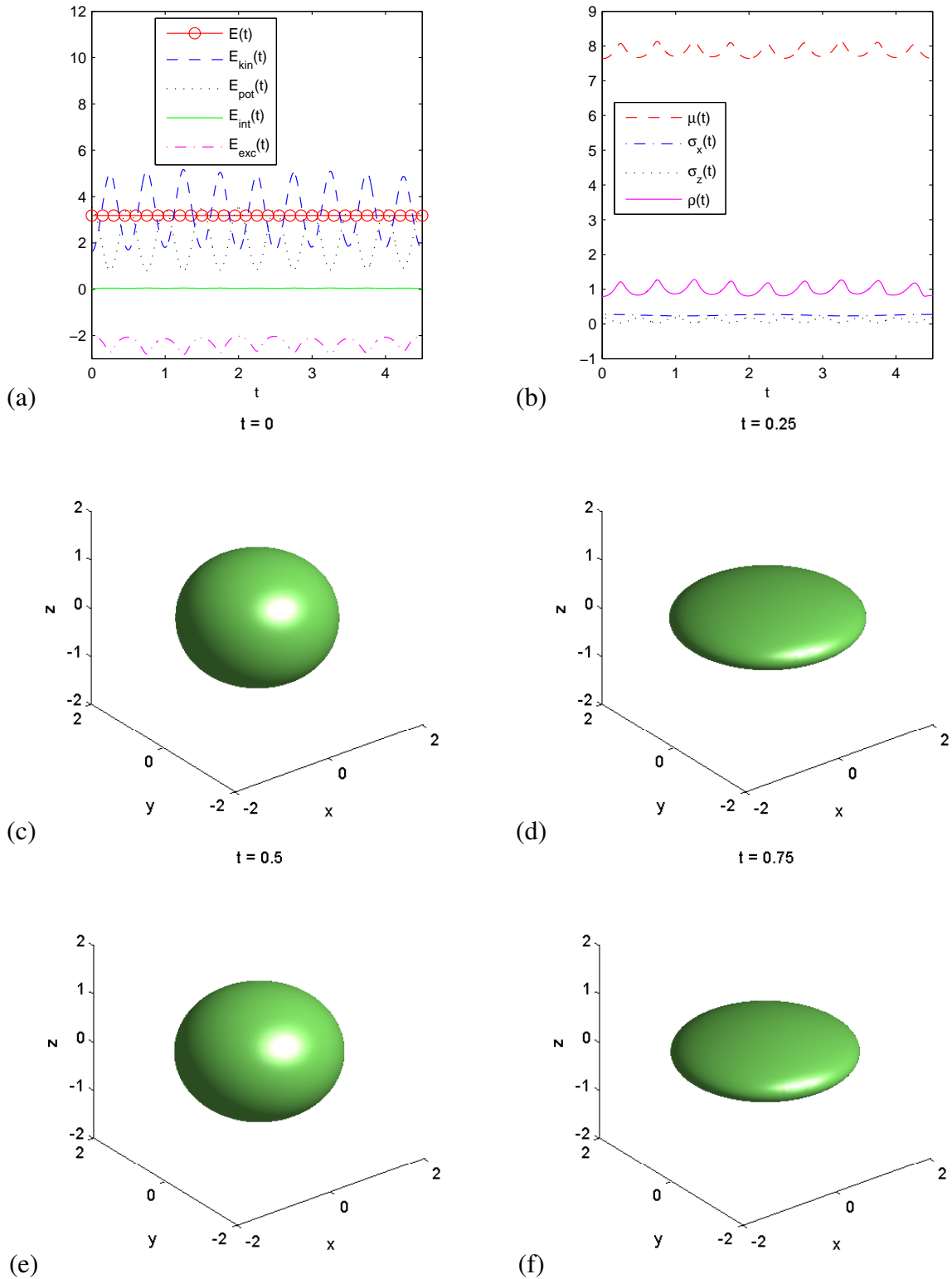


图 2.6 例 (2.8) 中三维薛定谔-泊松方程组将初始时刻的外势从 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + 4z^2)$ 变到 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + 36z^2)$ 后各种量演化过程及密度函数在不同时刻的等值面 $\rho(\mathbf{x}, t) := |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 0.01$ 。

第3章 两类紧致差分格式的最优误差估计

在上一章中，我们系统地研究了不同维数薛定谔-泊松方程组基态解和动力学的快速高精度数值计算，本章我们主要考虑紧致差分格式在薛定谔-泊松方程组的初边值问题中的应用，并给出了相应的最优误差估计。

利用偏微分性质和待定系数法可得到紧致差分格式^[62]。与标准差分格式相比，紧致格式可利用较少格点达到较高精度；与谱方法相比，紧致格式具有差分格式对复杂区域及边界条件的灵活性，因此紧致差分格式得到了深入的研究^[63-65]，并成功应用于薛定谔方程^[66]、Helmholtz方程^[67]和 Navier-Stokes 方程^[68]等。据我们所知，目前还没有将紧致差分格式应用到薛定谔-泊松方程的工作。

我们首先提出了 Crank-Nicolson 紧致差分格式。此格式虽然满足离散质量和离散能量守恒，但是每步需耗费大量计算时间以便较为精确地求解非线性方程，从而导致算法效率不高。为提高计算效率，我们又提出一个半隐紧致差分格式。在一定的正则性假设下，我们分析并证明了两种格式的最优误差估计，即定理 3.1 (Crank-Nicolson 紧致差分格式) 和定理 3.2 (半隐紧致差分格式)。第二节，我们首先应用能量方法估计出 l^2 误差，再利用反不等式推导出 l^∞ 先验上界估计，进而得到最优误差估计。第三节，我们利用数学归纳法和能量方法得到隐式紧致差分格式的最优误差估计。第四节，我们用大量的数值试验验证了最优误差估计。本章我们总是用 C 表示与网格尺寸 h 和时间步长 τ 无关的常数。

本章证明思路借鉴了 Bao 和 Cai 在 [96] 中对带有旋转项的非线性薛定谔方程差分算法的误差分析，主要结果和方法是其在薛定谔-泊松方程上的推广。创新点和难点在于泊松位势对密度函数的全局依赖性和相应的局部误差估计及等价不等式估计。

3.1 两类数值方法和主要结果

为简单起见，本章我们介绍一维情形，在二维和三维的推广是类似的。波函数 ψ 是指数衰减的，在计算中通常将全空间问题截断为有界区域上的初边值问题，

$$i \partial_t \psi(x, t) = \left[-\frac{1}{2} \partial_x^2 + V_{\text{ext}}(x) + \beta \Phi(x, t) \right] \psi(x, t), \quad x \in (a, b), \quad (3-1)$$

$$-\partial_x^2 \Phi(x, t) = |\psi(x, t)|^2, \quad x \in (a, b), \quad (3-2)$$

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x), \quad x \in [a, b]. \quad (3-3)$$

我们考虑带齐次狄氏边界的初边值问题，即波函数和泊松位势都满足齐次狄氏边界条件，

$$\psi(a, t) = \psi(b, t) = 0, \quad \Phi(a, t) = \Phi(b, t) = 0. \quad (3-4)$$

首先将计算区间 $\Omega = [a, b]$ 等距离散为 $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, M-1, M$ ，其中 $h = \frac{b-a}{M}$ ， M 是正整数。定义函数空间 X_M 为

$$X_M = \{u = (u_j)_{j \in \mathcal{T}_M^0} \mid u_0 = u_M = 0\} \subset \mathbb{C}^{M+1}, \quad (3-5)$$

其中指标集 $\mathcal{T}_M^0 = \{j \mid j = 0, 1, \dots, M-1, M\}$ 。令时间步长为 τ ，时间 $t_n = n\tau$, $n = 0, 1, \dots$ ， ψ_j^n 为 $\psi(x_j, t_n)$ 的近似值及 $\psi^n \in X_M$ 是 t_n 时刻的数值解，向量 V 的第 j 个元素 V_j 为 $V_{\text{ext}}(x_j)$ 的近似值。为方便起见，我们列出常用的有限差分算子

$$\delta_x^+ u_j^n = \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h}, \quad \delta_x^- u_j^n = \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h}, \quad \delta_x u_j^n = \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h}, \quad (3-6)$$

$$\delta_t^+ u_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau}, \quad \delta_t^- u_j^n = \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\tau}, \quad \delta_t u_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\tau}, \quad (3-7)$$

$$\mu_t u_j^n = \frac{u_j^n + u_j^{n+1}}{2}, \quad \delta_x^2 u_j^n = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}. \quad (3-8)$$

3.1.1 紧致差分方法

以一维带齐次狄氏边界条件的泊松方程 (3-9) 为例介绍泊松方程的紧致差分方法。

$$\begin{cases} \partial_x^2 \phi(x) = f(x), & x \in (a, b) \\ \phi(a) = \phi(b) = 0. \end{cases} \quad (3-9)$$

利用泰勒公式可知， $\partial_x^2 \phi(x_j)$ 的中心差分 $\delta_x^2 \phi(x_j)$ 可写成

$$\begin{aligned} \delta_x^2 \phi(x_j) &= \frac{\phi(x_{j+1}) - 2\phi(x_j) + \phi(x_{j-1}))}{h^2} \\ &= (\partial_x^2 \phi)(x_j) + \frac{h^2}{12} (\partial_x^4 \phi)(x_j) + O(h^4) \\ &= f(x_j) + \frac{h^2}{12} (\partial_x^2 (\partial_x^2 \phi))(x_j) + O(h^4) \\ &= f(x_j) + \frac{h^2}{12} (\partial_x^2 f)(x_j) + O(h^4) \end{aligned}$$

$$= f(x_j) + \frac{h^2}{12}(\delta_x^2 f)(x_j) + O(h^4). \quad (3-10)$$

令 $\phi_h, f_h \in X_M$ 为 ϕ 和 f 的数值近似解, 令 $A_h = (a_{ij})_{(M-1) \times (M-1)}$, $\Delta_h = B_h^{-1} A_h$ 分别为二阶微分算子 ∂_x^2 的中心差分和四阶紧致差分的离散矩阵, 其中矩阵 $B_h = \mathbb{I} + \frac{h^2}{12} A_h$, A_h 为三对角矩阵, 其主对角元素为 $-2h^{-2}$, 次对角元素为 h^{-2} 。

定义算子 $I_h : \mathbb{C}^{M+1} \rightarrow \mathbb{C}^{M-1}$ 为恒等算子, 即

$$(I_h u) = (u_1, \dots, u_{M-1})^T \in \mathbb{C}^{M-1}, \quad \forall u = (u_0, \dots, u_M)^T \in \mathbb{C}^{M+1}. \quad (3-11)$$

由此可构造泊松位势 ϕ 和二阶微分 $\partial_x^2 \phi$ 的紧致差分逼近, 即 ϕ_h 和 f_h ,

$$I_h f_h = \Delta_h (I_h \phi_h), \quad I_h \phi_h = \Delta_h^{-1} (I_h f_h). \quad (3-12)$$

3.1.2 两类紧致差分数值方法

基于四阶紧致差分格式, 对方程 (3-1) - (3-3) 提出了守恒的 Crank-Nicolson 紧致差分格式 (Crank-Nicolson compact finite difference scheme), 简记为 **CNCFD**,

$$i\delta_t^+ \psi_j^n = -\frac{1}{2}(\Delta_h I_h \mu_t \psi^n)_j + V_j \mu_t \psi_j^n + \beta \mu_t \Phi_j^n \mu_t \psi_j^n, \quad j \in \mathcal{T}_M, n \geq 0, \quad (3-13)$$

$$-\Delta_h I_h \Phi^n = I_h (|\psi^n|^2), \quad -\Delta_h I_h \Phi^{n+1} = I_h (|\psi^{n+1}|^2), \quad (3-14)$$

其中指标集 $\mathcal{T}_M = \{j \mid j = 1, 2, \dots, M-1\}$ 。

边界条件 (3-4) 离散为

$$\psi_0^n = \psi_M^n = 0, \quad \Phi_0^n = \Phi_M^n = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (3-15)$$

初始条件 (3-3) 离散为

$$\psi_j^0 = \psi_0(x_j), \quad j \in \mathcal{T}_M^0. \quad (3-16)$$

我们应用迭代方法求解非线性方程 (3-13), 即给定 $\psi^n \in X_M$, 求解其线性化方程 (3-17) 直到迭代解 $\psi^{*,s}$ 以充分小的精度收敛到 ψ^{n+1} , 即

$$i \frac{\psi_j^{*,s+1} - \psi_j^n}{\tau} = -\frac{1}{4} [\Delta_h I_h (\psi^{*,s+1} + \psi^n)]_j + \left[V_j + \beta \frac{\Phi_j^{*,s} + \Phi_j^n}{2} \right] \frac{\psi_j^{*,s+1} + \psi_j^n}{2}. \quad (3-17)$$

CNCFD 格式虽能保持离散质量和离散能量守恒, 但每步求解非线性方程需要耗费大量计算时间, 于是我们又提出了一个三层半隐紧致差分格式 (semi-

implicit compact finite difference scheme), 简记为 **SICFD**,

$$i\delta_t\psi_j^n = -\frac{1}{2}\left[\Delta_h I_h\left(\frac{\psi_j^{n+1} + \psi_j^{n-1}}{2}\right)\right] + V_j\frac{\psi_j^{n+1} + \psi_j^{n-1}}{2} + \beta\Phi_j^n\psi_j^n, \quad n \geq 1, \quad (3-18)$$

其中泊松位势, 边界条件和初始值条件的确定与 CNCFD 格式相同。三层格式中 t_1 时刻的初值 ψ_j^1 可以用二阶精度的算法确定, 如二阶修正欧拉格式,

$$\psi_j^1 = \psi_j^0 - i\tau\left[-\frac{1}{2}(\Delta_h I_h \psi^{(1)})_j + V_j\psi_j^{(1)} + \beta\Phi_j^{(1)}\psi_j^{(1)}\right], \quad j \in \mathcal{T}_M, \quad (3-19)$$

$$\psi_j^{(1)} = \psi_j^0 - i\frac{\tau}{2}\left[-\frac{1}{2}(\Delta_h I_h \psi^0)_j + V_j\psi_j^0 + \beta\Phi_j^0\psi_j^0\right], \quad j \in \mathcal{T}_M, \quad (3-20)$$

其中泊松位势 $\Phi^{(1)}$ 和 Φ^0 由式 (3-14) 确定。

上述格式使用均匀差分网格, 因此方程 (3-13) 和 (3-18) 都可以通过离散正弦变换来加速 (DST), 它可以将线性方程组的计算量从直接求解的 $O(M^3)$ 降到 $O(M \log(M))$ 。离散正弦变换加速法在高维均匀网格上的推广是类似可行的。

在介绍定理之前, 我们首先介绍一下本章常用的记号。

向量 $u, v \in X_M, w \in \mathbb{C}^{M-1}$,

$$\|u\|_{l^2}^2 = h \sum_{k=1}^{M-1} |u_k|^2, \quad \|\delta_x^+ u\|_{l^2}^2 = h \sum_{k=0}^{M-1} |\delta_x^+ u_k|^2, \quad \|u\|_{l^\infty} = \max_{j \in \mathcal{T}_M^0} |u_j|, \quad (3-21)$$

$$(\delta_x^+ u, \delta_x^+ v) = h \sum_{k=0}^{M-1} (\delta_x^+ u_k)(\delta_x^+ \bar{v}_k), \quad \langle u, w \rangle = \overline{\langle w, u \rangle} = h \sum_{k=1}^{M-1} u_k \bar{w}_k, \quad (3-22)$$

$$E_h(u) = \frac{1}{2}\langle -\Delta_h I_h u, u \rangle + \frac{\beta}{2}\langle \Delta_h^{-1} I_h |u|^2, |u|^2 \rangle + \langle V u, u \rangle, \quad (3-23)$$

$$\mathcal{E}(u) = \frac{1}{2}\langle -\Delta_h I_h u, u \rangle + \langle V u, u \rangle, \quad (3-24)$$

其中 \bar{u}_k 代表 u_k 的共轭。

对方程作如下假设:

$$(A): \quad \psi \in C^0([0, T]; W^{7,\infty}(\Omega) \cap H_0^2(\Omega)) \cap C^1([0, T]; W^{4,\infty}(\Omega)) \\ \cap C^2([0, T]; W^{3,\infty}(\Omega)) \cap C^4([0, T]; L^\infty(\Omega)),$$

$$\text{其中 } 0 \leq T \leq T_{\max} \text{ 而 } T_{\max} \text{ 为解的最大存在时间}^{[26,28]}; \quad (3-25)$$

$$(B): \quad \text{外势 } V_{\text{ext}}(x) \text{ 光滑。} \quad (3-26)$$

记 $M_1 = \max_{0 \leq t \leq T} \|\psi\|_{L^\infty}$ 并定义误差函数 $e^n \in X_M$ 为

$$e_j^n = \psi(x_j, t_n) - \psi_j^n, \quad j \in \mathcal{T}_M^0, \quad n = 0, 1, \dots \quad (3-27)$$

定理 3.1 假设 (A), (B) 成立, 则存在正常数 $h_0 > 0$, $\tau_0 > 0$, 使得当空间步长与时间步长满足 $0 < h < h_0$, $0 < \tau < \tau_0$ 及 $\tau \leq h$ 时, 应用 CNCFD 求方程 (3-1) - (3-3) 的误差函数满足如下估计

$$\|e^n\|_{L^2} + \|\delta_x^+ e^n\|_{L^2} \leq C(h^4 + \tau^2), \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}, \quad (3-28)$$

其中常数 C 仅依赖于区域 Ω 与空间步长 h 和时间步长 τ 无关。

定理 3.2 假设 (A), (B) 成立, 则存在正常数 $h_0 > 0$, $\tau_0 > 0$, 使得当空间步长与时间步长满足 $0 < h < h_0$, $0 < \tau < \tau_0$ 及 $\tau \leq h$ 时, 应用 SICFD 求方程 (3-1) - (3-3) 的误差函数满足如下估计

$$\|e^n\|_{L^2} + \|\delta_x^+ e^n\|_{L^2} \leq C(h^4 + \tau^2), \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}, \quad (3-29)$$

其中常数 C 仅依赖于区域 Ω 与空间步长 h 和时间步长 τ 无关。

注记: 在高维中, 如果波函数和泊松位势都满足齐次狄氏边界条件, 对波函数的二阶导数和泊松位势的高阶紧致差分逼近也是可行的, 可参考 [62,64,65]。因此本章的紧致差分格式可以类似推广到高维的初边值问题, 相应的误差分析也可在本章证明框架内得到, 其中所涉及的重要不等式都有高维版本。用来得到 l^∞ 先验上界的反不等式及极大值原理^[97]在高维都是成立的。 \diamond

3.2 Crank-Nicolson 紧致差分格式的误差分析

在守恒 Crank-Nicolson 紧致差分格式的误差分析中, 我们首先利用能量方法和反不等式得到误差函数在离散 l^∞ 范数下的先验上界估计, 再应用能量方法证明定理 3.1。

首先我们介绍几个有用的不等式。

引理 3.3 设 $u, v \in X_M$, 则 u, v 满足

$$\langle u, \delta_x^2 v \rangle = -(\delta_x^+ u, \delta_x^+ v) = \langle \delta_x^2 u, v \rangle, \quad \langle A_h I_h u, v \rangle = \langle u, \delta_x^2 v \rangle, \quad (3-30)$$

$$\|u\|_{l^\infty} \leq \sqrt{b-a} \|\delta_x^+ u\|_{L^2}, \quad \|u^2\|_{l^\infty} \leq \sqrt{2} \|u\|_{L^2} \|\delta_x^+ u\|_{L^2}, \quad (3-31)$$

$$\langle -\Delta_h^{-1} I_h |u^2|, |u^2| \rangle \leq \varepsilon \|\delta_x^+ u\|_{L^2}^2 + C_\varepsilon \|u\|_{L^2}^6, \quad (3-32)$$

其中 ε 为任意小的正常数。

证明: 式 (3-30) 可通过分部求和证明:

$$\begin{aligned}
 \langle u, \delta_x^2 v \rangle &= h \sum_{k=1}^{M-1} u_k \frac{\overline{v_{k+1}} - 2\overline{v_k} + \overline{v_{k-1}}}{h^2} \\
 &= -h \sum_{k=0}^{M-1} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{h} \right) \left(\frac{\overline{v_{k+1}} - \overline{v_k}}{h} \right) \\
 &= -(\delta_x^+ u, \delta_x^+ v) = \langle \delta_x^2 u, v \rangle.
 \end{aligned} \tag{3-33}$$

用同样的方法可证明 $\langle A_h I_h u, v \rangle = \langle \delta_x^2 u, v \rangle$ 。

任意的 $u \in X_M$ 满足

$$\begin{aligned}
 |u_j| &= \left| \sum_{k=1}^j (u_k - u_{k-1}) \right| = \left| \sum_{k=1}^j \delta_x^+ u_{k-1} \sqrt{h} \sqrt{h} \right| \\
 &\leq \left(h \sum_{k=1}^j |\delta_x^+ u_{k-1}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} (h j)^{\frac{1}{2}} \leq \sqrt{b-a} \|\delta_x^+ u\|_{l^2}.
 \end{aligned} \tag{3-34}$$

对 $|u_j|$ 在 $j \in \mathcal{T}_M^0$ 上取最大值, 可得 $\|u\|_{l^\infty} \leq \sqrt{b-a} \|\delta_x^+ u\|_{l^2}$ 。

类似地,

$$u_j^2 = \sum_{k=1}^j u_k^2 - u_{k-1}^2 = \sum_{k=1}^j \left(\frac{u_k - u_{k-1}}{h} \sqrt{h} \right) \left((u_k + u_{k-1}) \sqrt{h} \right), \tag{3-35}$$

等式两边取绝对值,

$$\begin{aligned}
 |u_j^2| &\leq \left(h \sum_{k=1}^j |\delta_x^+ u_{k-1}|^2 \right)^{1/2} \left(h \sum_{k=1}^j |u_k + u_{k-1}|^2 \right)^{1/2} \\
 &\leq \sqrt{2} \|u\|_{l^2} \|\delta_x^+ u\|_{l^2}.
 \end{aligned} \tag{3-36}$$

对 $|u_j^2|$ 在 $j \in \mathcal{T}_M^0$ 上取最大值, 可证 $\|u^2\|_{l^\infty} \leq \sqrt{2} \|u\|_{l^2} \|\delta_x^+ u\|_{l^2}$ 。

不等式 $\langle -\Delta_h^{-1} I_h |u^2|, |u^2| \rangle \leq \varepsilon \|\delta_x^+ u\|_{l^2}^2 + C_\varepsilon \|u\|_{l^2}^6$ 在估计位势能量时是有用的, 此处 Δ_h^{-1} 是对泊松逆算子的逼近。

$$\begin{aligned}
 |\langle -\Delta_h^{-1} I_h |u^2|, |u^2| \rangle| &= \left| \sum_{k=1}^{M-1} (-\Delta_h^{-1} I_h |u^2|)_k |u_k|^2 h \right| \\
 &\leq \|u\|_{l^2}^2 \|\Delta_h^{-1} I_h |u^2|\|_{l^\infty} \leq C \|u\|_{l^2}^2 \| |u^2| \|_{l^\infty} \\
 &\leq C \|u\|_{l^2}^3 \|\delta_x^+ u\|_{l^2} \leq \varepsilon \|\delta_x^+ u\|_{l^2}^2 + C_\varepsilon \|u\|_{l^2}^6,
 \end{aligned} \tag{3-37}$$

此处我们在 $\|\Delta_h^{-1} I_h |u^2|\|_{l^\infty}$ 估计中应用了椭圆方程的离散极大值原理^[97], 同时在最后一个估计中应用了 Young 不等式。□

为分析误差函数的离散 H^1 范数, 我们需要对相关矩阵做细致深入的分析。下述引理列出了矩阵 $A_h, B_h, \Delta_h \in \mathbb{R}^{M-1 \times M-1}$ 的性质。

引理 3.4 (相关矩阵性质) 任意向量 $u, v \in X_M$ 和矩阵 A_h, B_h, Δ_h 满足

$$\|A_h^{-1} I_h u\|_{l^\infty} \leq C \|u\|_{l^\infty}, \quad \|A_h^{-1} I_h u\|_{l^2} \leq \frac{(b-a)^2}{\pi^2} \|u\|_{l^2}, \quad (3-38)$$

$$\|B_h I_h u\|_{l^\infty} \leq \|u\|_{l^\infty}, \quad \|B_h^{-1} I_h u\|_{l^\infty} \leq \frac{3}{2} \|u\|_{l^\infty}, \quad (3-39)$$

$$\|B_h I_h u\|_{l^2} \leq \|u\|_{l^2}, \quad \|B_h^{-1} I_h u\|_{l^2} \leq \frac{3}{2} \|u\|_{l^2}, \quad (3-40)$$

$$\langle -A_h I_h u, u \rangle \leq \langle -\Delta_h I_h u, u \rangle \leq \frac{3}{2} \langle -A_h I_h u, u \rangle, \quad (3-41)$$

其中常数 C 仅依赖区域 Ω 与 h 及 u 无关。

证明: 利用椭圆方程的离散极大值原理^[97]可证明 $\|A_h^{-1} I_h u\|_{l^\infty} \leq C \|u\|_{l^\infty}$, 其中常数 C 仅依赖于区域 Ω 与 h 及 u 无关。通过反证法可证明 $\|B_h^{-1} I_h u\|_{l^\infty} \leq \frac{3}{2} \|u\|_{l^\infty}$ 。仔细考察矩阵 B_h 的元素, 可证明 $\|B_h\|_{l^\infty} = \max_{1 \leq i \leq M-1} \sum_{j=1}^{M-1} |(B_h)_{ij}| \leq 1$, 即 $\|B_h I_h u\|_{l^\infty} \leq \|u\|_{l^\infty}$ 。

注意到 $-A_h, B_h$ 是可交换正定对称矩阵, 因此有共同的特征向量。矩阵 $-A_h$ 的 j 个特征值 $\lambda_j(-A_h) = \frac{2}{h^2}(1 - \cos(\frac{\pi j}{M}))$, $j = 1, 2, \dots, M-1$, 矩阵 B_h 的第 j 个特征值 $\lambda_j(B_h) = 1 - \frac{1}{6}(1 - \cos(\frac{\pi j}{M})) \in (\frac{2}{3}, 1)$, 因此 $\lambda_j(-A_h^{-1}) = \frac{h^2}{2} \frac{1}{1 - \cos(\frac{\pi j}{M})}$, 即 $\|A_h^{-1}\|_{l^2} = \max_{1 \leq j \leq M-1} |\lambda_j(-A_h^{-1})| \leq \frac{(b-a)^2}{\pi^2}$, 则 $\|A_h^{-1} I_h u\|_{l^2} \leq \frac{(b-a)^2}{\pi^2} \|u\|_{l^2}$ 成立。类似可证 $\|B_h\|_{l^2} = \max_{1 \leq j \leq M-1} |\lambda_j(B_h)| \leq 1$, $\|B_h^{-1}\|_{l^2} = \max_{1 \leq j \leq M-1} |\lambda_j(B_h^{-1})| \leq \frac{3}{2}$, 即 $\|B_h I_h u\|_{l^2} \leq \|u\|_{l^2}$, $\|B_h^{-1} I_h u\|_{l^2} \leq \frac{3}{2} \|u\|_{l^2}$ 。

不等式 (3-41) 描述了离散动能两种不同定义之间的等价性。注意到 $\langle -A_h I_h u, u \rangle = \|\sqrt{-A_h} I_h u\|_{l^2}^2$, $\langle -\Delta_h I_h u, u \rangle = \|\sqrt{-\Delta_h} I_h u\|_{l^2}^2$, 并记 $S = \sqrt{-A_h}$, $T = \sqrt{-\Delta_h}$, 则矩阵 S, T 可交换。由矩阵范数性质可知

$$\begin{aligned} \|\sqrt{-A_h} I_h u\|_{l^2} &= \|S I_h u\|_{l^2} = \|T(T^{-1}S)I_h u\|_{l^2} \\ &\leq \|T\|_{l^2} \|(T^{-1}S)I_h u\|_{l^2} \leq \|T\|_{l^2} \|\sqrt{-\Delta_h} I_h u\|_{l^2}, \end{aligned} \quad (3-42)$$

$$\begin{aligned} \|\sqrt{-\Delta_h} I_h u\|_{l^2} &= \|(T^{-1}S)I_h u\|_{l^2} \leq \|T^{-1}\|_{l^2} \|S I_h u\|_{l^2} \\ &\leq \|T^{-1}\|_{l^2} \|\sqrt{-A_h} I_h u\|_{l^2}. \end{aligned} \quad (3-43)$$

从此可知

$$\langle -A_h I_h u, u \rangle = \|\sqrt{-A_h I_h} u\|_2^2 \leq \|T\|_2^2 \langle -\Delta_h I_h u, u \rangle, \quad (3-44)$$

$$\langle -\Delta_h I_h u, u \rangle = \|\sqrt{-\Delta_h I_h} u\|_2^2 \leq \|T^{-1}\|_2^2 \langle -A_h I_h u, u \rangle. \quad (3-45)$$

由 $\|B_h\|_2$ 有界可推知 $\|T^{-1}\|_2^2 = \|B_h^{-1}\|_2 \leq \frac{3}{2}$, $\|T\|_2^2 \leq 1$ 。至此完成等价性不等式的证明。 \square

下述引理为泊松方程四阶紧致差分格式的误差分析。

引理 3.5 (紧致差分格式的误差分析) 令 $f_{\text{ext}} = (f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_M))^T$, $\phi_{\text{ext}} = (\phi(x_0), \phi(x_1), \dots, \phi(x_M))^T$ 为泊松方程 (3-9) 的精确解, $f_h = (f_0, f_1, \dots, f_M)^T$, $\phi_h = (\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_M)^T$ 为四阶紧致差分格式得到的数值解。

假设 $\phi(x) \in C^6([a, b])$, $f(x) \in C^4([a, b])$, 若已知 $f(x)$, 则 $\|\phi_h - \phi_{\text{ext}}\|_{l^\infty} = O(h^4, \partial_x^4 f)$ 。反之, 若已知泊松位势 $\phi(x)$, 则 $\|f_h - f_{\text{ext}}\|_{l^\infty} = O(h^4, \partial_x^6 \phi)$ 。

证明: 证明主要是基于带积分余项的泰勒公式和椭圆方程的离散极大值原理。首先, 若 $\phi(x) \in C^6([a, b])$, $f(x) \in C^4([a, b])$, 利用带积分余项的泰勒公式可知

$$\begin{aligned} \delta_x^2 \phi(x_j) &= (\partial_x^2 \phi)(x_j) + \frac{h^2}{12} (\partial_x^4 \phi)(x_j) + \mathcal{R}_j^I \\ &= f(x_j) + \frac{h^2}{12} (\partial_x^2 f)(x_j) + \mathcal{R}_j^I \\ &= f(x_j) + \frac{h^2}{12} \delta_x^2 f_j + \mathcal{R}_j^I + \mathcal{R}_j^{\text{II}}, \end{aligned} \quad (3-46)$$

其中

$$\mathcal{R}_j^I = \frac{1}{5!h^2} \int_0^h (h-s)^5 [\phi^{(6)}(x_j+s) + \phi^{(6)}(x_j-s)] ds, \quad (3-47)$$

$$\mathcal{R}_j^{\text{II}} = -\frac{1}{72} \int_0^h (h-s)^3 [f^{(4)}(x_j+s) + f^{(4)}(x_j-s)] ds. \quad (3-48)$$

应用紧格式 $-\Delta_h I_h \phi_h = I_h f_{\text{ext}}$ 来逼近式 (3-9) 中的泊松位势, 则误差满足 $A_h I_h (\phi_{\text{ext}} - \phi_h) = \mathcal{R}^I + \mathcal{R}^{\text{II}}$ 。利用极大值原理可知

$$\|\phi_h - \phi_{\text{ext}}\|_{l^\infty} \leq C \|\mathcal{R}^I + \mathcal{R}^{\text{II}}\|_{l^\infty} \leq C h^4 \|\partial_x^4 f\|_{L^\infty}, \quad (3-49)$$

其中 $\mathcal{R}^I, \mathcal{R}^{\text{II}} \in \mathbb{C}^{M-1}$, 常数 C 仅依赖于区域 Ω 与 h 和 τ 无关。

同样的, $\phi(x)$ 的二阶导数 $f(x)$ 可用 $I_h f_h = \Delta_h I_h \phi_{\text{ext}}$ 逼近, 相应误差满足 $B_h I_h (f_h - f_{\text{ext}}) = (\mathcal{R}^I + \mathcal{R}^{\text{II}})$ 。利用不等式 (3-39) 可知

$$\|f_h - f_{\text{ext}}\|_{l^\infty} \leq \frac{3}{2} \|\mathcal{R}^I + \mathcal{R}^{\text{II}}\|_{l^\infty} \leq C h^4 \|\partial_x^6 \phi\|_{L^\infty}. \quad (3-50)$$

□

注记: 注意到对 $f_{\text{ext}}, \phi_{\text{ext}}$ 的逼近误差是整体依赖于 $\phi(x)$ 和 $f(x)$ 的, 这和局部非线性薛定谔方程有着本质的不同, 也是误差估计的主要困难。◇

引理 3.6 (质量能量守恒) 应用 CNCFD 格式求解初边值问题 (3-13), (3-15) 和 (3-16), 则对任意时间步长 $\tau > 0$, 空间步长 $h > 0$ 和初始值 ψ_0 , 离散质量和离散能量守恒, 具体地,

$$\|\psi^n\|_{\rho^2} = \|\psi^0\|_{\rho^2}, \quad E_h(\psi^n) = E_h(\psi^0). \quad (3-51)$$

证明: 我们可以用与 [37] 中类似的方法证明定理, 此处略去。□

引理 3.7 (差分方程解的存在唯一性) 假设 (A), (B) 成立, 则对任意的 ψ^n , 差分方程 (3-13) 总存在解 $\psi^{n+1} \in X_M$, 并且存在常数 $\tau_0 > 0$, 使得当 $0 < \tau < \tau_0$ 时, 方程的解是唯一的。

证明: 此定理的证明与文章 [96] 中的方法类似。将方程 (3-13) 改写为

$$\psi^{n+1/2} = \psi^n + i \frac{\tau}{2} F^n(\psi^{n+1/2}), \quad n = 0, 1, \dots, \quad (3-52)$$

其中非线性算子 $F^n : X_M \rightarrow X_M$ 定义为

$$(F^n(u))_j = -\frac{1}{2}(A_h I_h u)_j + V_j u_j + \beta \left[-A_h^{-1} I_h \left(\frac{|\psi^n|^2 + |2u - \psi^n|^2}{2} \right) \right]_j u_j. \quad (3-53)$$

定义映射 $G^n : X_M \rightarrow X_M$ 为

$$G^n(u) = u - \psi^n - i \frac{\tau}{2} F^n(u), \quad u \in X_M. \quad (3-54)$$

此映射是连续的并满足

$$\operatorname{Re}\langle G^n(u), u \rangle = \|u\|_{\rho^2}^2 - \operatorname{Re}\langle \psi^n, u \rangle \geq \|u\|_{\rho^2} (\|u\|_{\rho^2} - \|\psi^n\|_{\rho^2}), \quad u \in X_M, \quad (3-55)$$

由此可知

$$\lim_{\|u\|_{\rho^2} \rightarrow \infty} \frac{|\langle G^n(u), u \rangle|}{\|u\|_{\rho^2}} = \infty. \quad (3-56)$$

根据 [98] 中的定理知, G^n 是满射, 也就是说, 存在 $u_0 \in X_M$ 满足 $G^n(u_0) = 0$ 。

接下来我们用能量方法来证明解的唯一性。假设对任意给定的 ψ^n , 方程 (3-13) 存在两个不同的解 $u, v \in X_M$ 。令 $w = u - v \in X_M$, 则 w 满足如下方程

$$i \frac{w_j}{\tau} = -\frac{1}{2} \frac{(\Delta_h I_h w)_j}{2} + \frac{V_j w_j}{2} + \beta \chi_j, \quad j \in \mathcal{T}_M, \quad (3-57)$$

其中

$$\begin{aligned} \chi_j &= \frac{1}{4} \left[-\Delta_h^{-1} I_h(|u|^2 + |\psi^n|^2) \right]_j (u_j + \psi_j^n) \\ &\quad - \frac{1}{4} \left[-\Delta_h^{-1} I_h(|v|^2 + |\psi^n|^2) \right]_j (v_j + \psi_j^n). \end{aligned} \quad (3-58)$$

将式 (3-57) 两侧同乘 $\bar{w}_j h$ ，对 $j \in \mathcal{T}_M$ 求和后取虚部，得到

$$\begin{aligned} \frac{\|w\|_2^2}{\tau} &= \left| \frac{\beta}{4} h \sum_{j=1}^{M-1} \left(\Delta_h^{-1} I_h(|u|^2 + |\psi^n|^2) \right)_j |w_j|^2 + \left(\Delta_h^{-1} I_h(|u|^2 - |v|^2) \right)_j (v_j + \psi_j^n) \bar{w}_j \right| \\ &\leq C \|w\|_2^2 (\|u\|_{l^\infty}^2 + \|\psi^n\|_{l^\infty}^2) + C (\|v\|_{l^\infty} + \|\psi^n\|_{l^\infty}) \|w\|_2 \|\Delta_h^{-1} I_h(|u|^2 - |v|^2)\|_2 \\ &\leq C (\|u\|_{l^\infty}^2 + \|v\|_{l^\infty}^2 + \|\psi^n\|_{l^\infty}^2) (\|w\|_2^2 + \| |u|^2 - |v|^2 \|_2^2). \end{aligned} \quad (3-59)$$

已知 CNCFD 格式保持质量和能量守恒，再利用式 (3-31) 和式 (3-32) 中，可知

$$\begin{aligned} E_h(u) &= \langle -\Delta_h I_h u, u \rangle + \frac{\beta}{2} \langle \Delta_h^{-1} I_h |u|^2, |u|^2 \rangle + h \sum_{k=1}^{M-1} V_k u_k \bar{u}_k \\ &\geq \|\delta_x^+ u\|_2^2 - |\beta| \varepsilon \|\delta_x^+ u\|_2^2 - C_\varepsilon \|u\|_2^6 - C \|u\|_2^2, \end{aligned} \quad (3-60)$$

因此有

$$\|\delta_x^+ u\|_2^2 \leq E_h(\psi^0) + C_\varepsilon \|\psi^0\|_2^6 + C \|\psi^0\|_2^2. \quad (3-61)$$

简单计算可知

$$\| |u|^2 - |v|^2 \|_2^2 = h \sum_{j=1}^{M-1} \left[u_j (\bar{u}_j - \bar{v}_j) + (u_j - v_j) \bar{v}_j \right]^2 \leq C (\|u\|_{l^\infty}^2 + \|v\|_{l^\infty}^2) \|w\|_2^2. \quad (3-62)$$

将上述不等式叠加起来，可得到

$$\begin{aligned} \|w\|_2^2 &\leq C \tau \|w\|_2^2 (\|u\|_{l^\infty}^2 + \|v\|_{l^\infty}^2 + \|\psi^n\|_{l^\infty}^2 + 1)^2, \\ &\leq C \tau \|w\|_2^2 (\|\delta_x^+ u\|_2^2 + \|\delta_x^+ v\|_2^2 + \|\delta_x^+ \psi^n\|_2^2 + C_0)^2, \\ &\leq C \tau \|w\|_2^2 (E_h(\psi^0) + C_\varepsilon \|\psi^0\|_2^6 + C_0)^2, \end{aligned} \quad (3-63)$$

其中常数 C_0 和 h 与 ψ 无关。因此存在 τ_0 使得对任意的 $0 \leq \tau \leq \tau_0$ ， $|C \tau (E_h(\psi^0) + C_\varepsilon \|\psi^0\|_2^6 + C_0)^2| \leq \frac{1}{2}$ 成立，这意味着

$$\|w\|_2^2 = \|u - v\|_2^2 = 0 \quad \implies \quad u = v, \quad (3-64)$$

至此完成引理 (3-13) 解的唯一性证明。 \square

令 η^n 表示 CNCFD 格式的局部截断误差, 具体定义为

$$\begin{aligned} \eta_j^n := & i \delta_t^+ \psi(x_j, t_n) + \frac{1}{2} [\Delta_h I_h \mu_t \psi(\cdot, t_n)]_j - V_{\text{ext}}(x_j) \mu_t \psi(x_j, t_n) \\ & - \beta \left[-\Delta_h^{-1} I_h \mu_t |\psi(\cdot, t_n)|^2 \right]_j \mu_t \psi(x_j, t_n), \quad j \in \mathcal{T}_M, \quad n \geq 0, \end{aligned} \quad (3-65)$$

其中 $\psi(\cdot, t_n) = (\psi(x_0, t_n), \psi(x_1, t_n), \dots, \psi(x_M, t_n))^T \in X_M$ 。

引理 3.8 (局部截断误差) 假设 (A), (B) 成立, 则 CNCFD 格式的局部截断误差满足

$$\|\eta^n\|_{l^\infty} = O(h^4 + \tau^2), \quad \|\eta^n\|_{l^2} = O(h^4 + \tau^2), \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}, \quad (3-66)$$

$$\|\delta_x^+ \eta^n\|_{l^2} = O(h^4 + \tau^2), \quad \|\delta_x^+ \eta^n\|_{l^\infty} = O(h^4 + \tau^2), \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}. \quad (3-67)$$

证明: 利用带积分余项的泰勒公式可知下式成立:

$$\delta_t^+ \psi(x_j, t_n) = (\partial_t \psi)(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathcal{Q}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi), \quad (3-68)$$

$$V_{\text{ext}}(x_j) \mu_t \psi(x_j, t_n) = V_{\text{ext}}(x_j) \psi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + V_{\text{ext}}(x_j) \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi), \quad (3-69)$$

$$\Delta_h I_h \mu_t \psi(x_j, t_n) = (\partial_x^2 \psi)(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\partial_x^2 \psi) + [B_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\psi)]_j, \quad (3-70)$$

其中符号 $\mathcal{Q}_j^{n+\frac{1}{2}}, \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}, \mathcal{R}_j^n$ 定义为

$$\mathcal{Q}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi(x, t)) = \frac{1}{4\tau} \int_0^\tau (\tau-s)^2 [\partial_t^3 \psi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}+s) + \partial_t^3 \psi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}-s)] ds, \quad (3-71)$$

$$\mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi(x, t)) = \int_0^\tau (\tau-s) [\partial_t^2 \psi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}+s) + \partial_t^2 \psi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}-s)] ds, \quad (3-72)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_j^n(\psi(x, t)) = & \frac{1}{5! h^2} \int_0^h (h-s)^5 [\partial_x^6 \psi(x_j+s, t_n) + \partial_x^6 \psi(x_j-s, t_n)] ds \\ & - \frac{1}{72} \int_0^h (h-s)^3 [\partial_x^6 \psi(x_j+s, t_n) + \partial_x^6 \psi(x_j-s, t_n)] ds. \end{aligned} \quad (3-73)$$

令 $\Phi(\cdot, t_n) = (\Phi(x_0, t_n), \Phi(x_1, t_n), \dots, \Phi(x_M, t_n))^T \in X_M$, 则

$$\left[-\Delta_h^{-1} I_h \mu_t |\psi(\cdot, t_n)|^2 \right]_j = \Phi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\Phi) - [A_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\Phi)]_j, \quad (3-74)$$

因此有

$$\begin{aligned} & \left[-\Delta_h^{-1} I_h \mu_t |\psi(\cdot, t_n)|^2 \right]_j \mu_t \psi(x_j, t_n) \\ = & [\Phi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\Phi) - (A_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\Phi))_j] \mu_t \psi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi). \end{aligned} \quad (3-75)$$

利用椭圆方程离散极值原理可知

$$\|\Phi\|_{L^\infty} \leq C\|\psi\|_{L^\infty}, \quad \|\partial_t^2 \Phi\|_{L^\infty} \leq C\|\partial_t^2 |\psi|^2\|_{L^\infty}, \quad (3-76)$$

因此

$$\begin{aligned} & \left| \left[-A_h^{-1} I_h \mu_t |\psi(\cdot, t_n)|^2 \right]_j \mu_t \psi(x_j, t_n) - (\Phi \psi)(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) \right| \\ &= \left| \Phi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi) + \left[\psi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi) \right] \left[\mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\Phi) - (A_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\Phi))_j \right] \right| \\ &\leq h^4 (\|\partial_x^6 \Phi\|_{L^\infty} \|\psi\|_{L^\infty}) + \tau^2 (\|\psi\|_{L^\infty}^2 \|\partial_t^2 \psi\|_{L^\infty} + \|\psi\|_{L^\infty} \|\partial_t^2 \Phi\|_{L^\infty}) + O(h^4 \tau^2 + \tau^4) \\ &\leq h^4 (\|\partial_x^4 |\psi|^2\|_{L^\infty} \|\psi\|_{L^\infty}) + \tau^2 (\|\psi\|_{L^\infty}^2 \|\partial_t^2 \psi\|_{L^\infty} + \|\psi\|_{L^\infty} \|\partial_t^2 |\psi|^2\|_{L^\infty}) + O(h^4 \tau^2 + \tau^4). \end{aligned} \quad (3-77)$$

至此可将局部截断误差 η_j^n 写成积分形式为

$$\begin{aligned} \eta_j^n &= i \mathcal{Q}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi) + \frac{1}{2} \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\partial_x^2 \psi) + \frac{1}{2} [B_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\psi)]_j - [V_{\text{ext}}(x_j) + \beta \Phi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}})] \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi) \\ &\quad - \beta [\psi(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi)] [\mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\Phi) - [A_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\Phi)]_j]. \end{aligned} \quad (3-78)$$

可推知

$$\begin{aligned} |\eta_j^n| &\leq C \tau^2 (\|\partial_t^2 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_x^3 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_t^2 \partial_x^2 \psi\|_{L^\infty} + \|\psi\|_{L^\infty}^2 \|\partial_t^2 \psi\|_{L^\infty} + \|\psi\|_{L^\infty} \|\partial_t^2 |\psi|^2\|_{L^\infty}) \\ &\quad + C h^4 (\|\partial_x^6 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_x^4 |\psi|^2\|_{L^\infty} \|\psi\|_{L^\infty}) + O(h^4 \tau^2 + \tau^4), \end{aligned} \quad (3-79)$$

从而得到 $\|\eta^n\|_{l^\infty} = O(h^4 + \tau^2)$ 和 $\|\eta^n\|_{l^2} = O(h^4 + \tau^2)$ 。

接下来估计 $\delta_x^+ \eta_j^n$ ，其中局部非线性项的处理可参考文章 [96]，此处我们仅估计非局部项，如 $(B_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\psi))_j$ 和 $(A_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\Phi))_j$ 。下面我们以 $\delta_x^+ (B_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\psi))_j$ 的估计为例，其他全局项可类似处理。

注意到 $B_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\psi) \in X_M$ 并令

$$\mathcal{R}^n(\psi) = (\mathcal{R}_1^n(\psi), \dots, \mathcal{R}_{M-1}^n(\psi))^T, \quad \mathcal{R}_x^n(\psi) = (\delta_x^+ \mathcal{R}_1^n(\psi), \dots, \delta_x^+ \mathcal{R}_{M-2}^n(\psi))^T, \quad (3-80)$$

$$g_j = [B_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\psi)]_j, \quad \mathcal{G} = (g_1, \dots, g_{M-1})^T, \quad \mathcal{G}_x = (\delta_x^+ g_1, \dots, \delta_x^+ g_{M-2})^T. \quad (3-81)$$

上述方程可改写为

$$\mathcal{G}_x = B_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}_x^n + B_h^{-1} \mathbf{b}, \quad (3-82)$$

其中 $\mathbf{b} = \frac{1}{12} (\delta_x^+ g_0, 0, \dots, 0, \delta_x^+ g_{M-1})_{M-2}^T$ 。方程 (3-82) 两侧取 l^2 范数，则

$$\sum_{j=1}^{M-2} |\delta_x^+ g_j|^2 h \leq C \sum_{j=1}^{M-2} (|\delta_x^+ \mathcal{R}_j^n|^2 + |\delta_x^+ \mathcal{R}_j^{n+1}|^2) h + (|\delta_x^+ g_0|^2 + |\delta_x^+ g_{M-1}|^2) h, \quad (3-83)$$

$\delta_x^+ g_0$ 项可用下式估计:

$$\begin{aligned} |\delta_x^+ g_0| &= \left| \frac{g_1 - g_0}{h} \right| = \left| \frac{g_1}{h} \right| = \left| \frac{[B_h^{-1} \mu_t \mathcal{R}^n(\psi)]_1}{h} \right| = \left| \frac{\sum_{j=1}^{M-1} (B_h^{-1})_{1,j} \mu_t \mathcal{R}_j^n(\psi)}{h} \right| \\ &\leq C \sum_{j=1}^{M-1} d_j \frac{\mu_t \mathcal{R}_j^n(\psi)}{h} \leq C \sum_{j=1}^{M-1} \frac{12}{(4+2\sqrt{6})^j} \frac{\mu_t \mathcal{R}_j^n(\psi)}{h} \leq Ch^4 \|\partial_x^7 \psi\|_{L^\infty}, \end{aligned} \quad (3-84)$$

其中 $d_j = (B_h^{-1})_{1,j}$ 并且满足 $|d_j| \leq \frac{12}{(4+2\sqrt{6})^j}$, $j = 1, 2, \dots, M-1$ 。类似地, 可证明 $|\delta_x^+ g_{M-1}| \leq Ch^4 \|\partial_x^7 \psi\|_{L^\infty}$, 因此有 $\|\delta_x^+ g\|_{l^2} \leq Ch^4 \|\partial_x^7 \psi\|_{L^\infty}$ 。

方程 (3-82) 两边取最大模范数后, 再利用不等式 (3-39), 可得知 $\|\delta_x^+ g\|_{l^\infty} \leq Ch^4 \|\partial_x^7 \psi\|_{L^\infty}$, 进而可证

$$\|\delta_x^+ \eta^n\|_{l^2} = O(h^4 + \tau^2), \quad \|\delta_x^+ \eta^n\|_{l^\infty} = O(h^4 + \tau^2), \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}. \quad (3-85)$$

□

定理 3.9 (误差的 l^2 估计) 假设 (A), (B) 成立, 则存在常数 h_0 和 τ_0 使得, 对任意的 $0 < h < h_0$ 和 $0 < \tau < \tau_0$ 且 $\tau \leq h$, 误差函数满足

$$\|e^n\|_{l^2} \leq C(\tau^2 + h^4), \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}, \quad (3-86)$$

其中常数 C 不依赖于 h 和 τ 。

证明: 选取一个光滑函数 $\alpha \in C^\infty([0, \infty))$, 其定义为

$$\alpha(\rho) = \begin{cases} 1, & 0 \leq \rho \leq 1, \\ \in [0, 1], & 1 \leq \rho \leq 2, \\ 0, & \rho \geq 2. \end{cases} \quad (3-87)$$

定义截断函数 $F_{M_0}(\rho)$ 为

$$F_{M_0}(\rho) = \alpha\left(\frac{\rho}{M_0}\right) \rho, \quad 0 \leq \rho \leq \infty, \quad M_0 = 2(1 + M_1^2) \geq 0, \quad (3-88)$$

使得 $F_{M_0}(\rho)$ 满足如下 Lipschitz 条件

$$|F_{M_0}(\rho_1) - F_{M_0}(\rho_2)| \leq C|\sqrt{\rho_1} - \sqrt{\rho_2}|, \quad 0 \leq \rho_1, \rho_2 \leq \infty. \quad (3-89)$$

引入关于 $\phi \in X_M$ 的辅助格式为

$$i\delta_t^+ \phi_j^n = -\frac{1}{2} [\Delta_h I_h \mu_t \phi^n]_j + V_j \mu_t \phi_j^n + \beta \mu_t \left[-\Delta_h^{-1} I_h F_{M_0}(|\phi^n|^2) \right]_j \mu_t \phi_j^n, \quad (3-90)$$

其初值设为 $\phi^0 = \psi^0$ 。此格式中, ϕ_j^n 可看成是 $\psi(x_j, t_n)$ 的另一种逼近。定义“辅助误差”函数为 $\widetilde{e}^n \in X_M$ 为

$$\widetilde{e}_j^n = \psi(x_j, t_n) - \phi_j^n, \quad j \in \mathcal{T}_M^0, \quad n \geq 0. \quad (3-91)$$

对应的截断误差 $\widetilde{\eta}^n$ 定义为

$$\begin{aligned} \widetilde{\eta}_j^n &= i\delta_t^+ \psi(x_j, t_n) + \frac{1}{2} [\Delta_h I_h \mu_t \psi(\cdot, t_n)]_j - V_{\text{ext}}(x_j) \mu_t \psi(x_j, t_n) \\ &\quad - \beta \mu_t \left[-\Delta_h^{-1} I_h F_{M_0}(|\psi(\cdot, t_n)|^2) \right]_j \mu_t \psi(x_j, t_n). \end{aligned} \quad (3-92)$$

类似地可证明局部截断误差满足 $\|\widetilde{\eta}^n\|_{l^\infty} = O(h^4 + \tau^2)$, $0 \leq n < \frac{T}{\tau}$ 。用式 (3-90) 减去式 (3-92), 得到

$$i\delta_t^+ \widetilde{e}_j^n = -\frac{1}{2} [\Delta_h I_h \mu_t \widetilde{e}^n]_j + V_j \mu_t \widetilde{e}_j^n + \widetilde{\xi}_j^n + \widetilde{\eta}_j^n, \quad (3-93)$$

其中

$$\begin{aligned} \widetilde{\xi}_j^n &= \beta \mu_t \left[-\Delta_h^{-1} I_h F_{M_0}(|\psi(\cdot, t_n)|^2) \right]_j \mu_t \psi(x_j, t_n) \\ &\quad - \beta \mu_t \left[-\Delta_h^{-1} I_h F_{M_0}(|\phi^n|^2) \right]_j \mu_t \phi_j^n. \end{aligned} \quad (3-94)$$

令 $\Phi_j^n = \left[-\Delta_h^{-1} I_h F_{M_0}(|\phi^n|^2) \right]_j$ 和 $\widetilde{\Phi}_j^n = \left[-\Delta_h^{-1} I_h F_{M_0}(|\psi(\cdot, t_n)|^2) \right]_j$, 则有

$$\begin{aligned} \left| \text{Im} \langle \widetilde{\xi}_j^n, \widetilde{e}_j^n + \widetilde{e}_j^{n+1} \rangle \right| &= |\beta| \left| \text{Im} \langle \mu_t (\widetilde{\Phi}_j^n - \Phi_j^n) \mu_t \psi(x_j, t_n) - \mu_t \Phi_j^n \mu_t \widetilde{e}_j^n, 2\mu_t \widetilde{e}_j^n \rangle \right| \\ &= |\beta| \left| \text{Im} \langle \mu_t (\widetilde{\Phi}_j^n - \Phi_j^n) \mu_t \psi(x_j, t_n), 2\mu_t \widetilde{e}_j^n \rangle \right|. \end{aligned} \quad (3-95)$$

记 $v, w \in \mathbb{C}^{M-1}$, 其中

$$v_j = F_{M_0}(|\psi(x_j, t_n)|^2) - F_{M_0}(|\phi_j^n|^2), \quad w_j = \widetilde{e}_j^n + \widetilde{e}_j^{n+1}, \quad j = 1, 2, \dots, M-1. \quad (3-96)$$

利用 F_{M_0} 的 Lipschitz 条件可知

$$|v_j| \leq C \left| |\psi(x_j, t_n)| - |\phi_j^n| \right| \leq C |\psi(x_j, t_n) - \phi_j^n| = C |\widetilde{e}_j^n|, \quad j = 1, 2, \dots, M-1. \quad (3-97)$$

再用柯西-许瓦兹不等式可知

$$\begin{aligned} \left| \text{Im} \langle \mu_t (\widetilde{\Phi}_j^n - \Phi_j^n) \mu_t \psi(x_j, t_n), 2\mu_t \widetilde{e}_j^n \rangle \right| &\leq C \rho(A_h^{-1}) \sum_{j=1}^{M-1} (|v_j|^2 + |w_j|^2) h \\ &\leq C (\|\widetilde{e}^n\|_{l^2}^2 + \|\widetilde{e}^{n+1}\|_{l^2}^2), \end{aligned} \quad (3-98)$$

和

$$\left| \langle \widetilde{\eta}_j^n, \mu_t \widetilde{e}_j^n \rangle \right| \leq C \|\widetilde{\eta}^n\|_{l^2} \|\mu_t \widetilde{e}^n\|_{l^2} \leq C (\|\widetilde{\eta}^n\|_{l^2}^2 + \|\mu_t \widetilde{e}^n\|_{l^2}^2)$$

$$\leq C(\|\widetilde{\eta}^n\|_{l^\infty}^2 + \|\widetilde{e}^n\|_{l^2}^2 + \|\widetilde{e}^{n+1}\|_{l^2}^2). \quad (3-99)$$

将式 (3-93) 两侧同乘 $2h\mu_t \widetilde{e}_j^n$ ，对 $j \in \mathcal{T}_M$ 求和后取虚部，可得

$$\|\widetilde{e}^{n+1}\|_{l^2}^2 - \|\widetilde{e}^n\|_{l^2}^2 \leq C\tau(\|\widetilde{\eta}^n\|_{l^\infty}^2 + \|\widetilde{e}^{n+1}\|_{l^2}^2 + \|\widetilde{e}^n\|_{l^2}^2), \quad 0 \leq n < \frac{T}{\tau} \quad (3-100)$$

对上式应用离散的 Gronwall 不等式^[66]，可知

$$\|\widetilde{e}^n\|_{l^2} \leq C(h^4 + \tau^2), \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}, \quad (3-101)$$

和

$$\|\widetilde{e}^n\|_{l^\infty} \leq \|\widetilde{e}^n\|_{l^2} h^{-1/2} \leq C(h^{7/2} + \frac{\tau^2}{\sqrt{h}}) \leq Ch, \quad \tau \leq h. \quad (3-102)$$

因此有

$$|\phi_j^n| \leq |\psi(x_j, t_n)| + |\widetilde{e}_j^n| \leq \frac{\sqrt{M_0}}{2} + Ch \leq \sqrt{M_0}, \quad (3-103)$$

从而 $F_{M_0}(|\phi_j^n|^2) = |\phi_j^n|^2$ ，并且

$$\phi_j^n = \psi_j^n, \quad e_j^n = \widetilde{e}_j^n, \quad j = 1, 2, \dots, M-1, \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}. \quad (3-104)$$

□

注记：事实上，网格比限制，即 $\tau \leq h$ ，是可去掉的。利用不等式 (3-61) 和一维 Sobolev 不等式 (3-31) 及 CNCFD 格式的离散质量与离散能量守恒性质，我们可推出 $\|\psi^n\|_{l^\infty} \leq C(E_h(\psi^0) + \|\psi^0\|_{l^2})$ ，从而得到误差函数 l^∞ 范数的一致先验上界估计。再用能量方法可得到误差的 l^2 和 H^1 范数估计，类似分析可见 [40]。

需要指出的是，上述 l^∞ 范数的一致先验上界估计依赖于 一维离散 Sobolev 不等式，而高维 Sobolev 不等式无法用来估计 l^∞ 范数。本章的分析框架借鉴于 [96]，通过辅助函数和反不等式克服了对 Sobolev 不等式的依赖，因此可以推广到高维。

◇

接下来我们证明定理 3.1。

证明：(定理 3.1 的证明) 方程 (3-93) 的局部截断误差退化为

$$i \delta_t^+ e_j^n = -\frac{1}{2} [\Delta_h I_h \mu_t e^n]_j + V_j \mu_t e_j^n + \xi_j^n + \eta_j^n, \quad (3-105)$$

其中

$$\xi_j^n = \beta [-\Delta_h^{-1} I_h \mu_t |\psi(\cdot, t_n)|^2]_j \mu_t \psi(x_j, t_n) - \beta [-\Delta_h^{-1} I_h \mu_t |\psi^n|^2]_j \mu_t \phi_j^n, \quad (3-106)$$

满足

$$\|\delta_x^+ \xi^n\|_{\rho} \leq C((h^4 + \tau^2)^2 + \|e^n\|_{\rho} + \|e^{n+1}\|_{\rho} + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho} + \|\delta_x^+ e^{n+1}\|_{\rho}). \quad (3-107)$$

式 (3-105) 可改写成

$$e_j^{n+1} - e_j^n = -i\tau(\mathcal{L}_j^n + \xi_j^n + \eta_j^n), \quad (3-108)$$

其中 \mathcal{L}_j^n 定义为

$$\mathcal{L}_j^n = -\frac{1}{2} [A_h I_h \mu_t e^n]_j + V_j \mu_t e_j^n, \quad j = 1, 2, \dots, M-1, \quad n \geq 0. \quad (3-109)$$

方程 (3-105) 两边同乘 $2h \overline{e_j^{n+1} - e_j^n}$, 在对 $j \in \mathcal{T}_M$ 求和后取实部可得

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(e^{n+1}) - \mathcal{E}(e^n) &= -2 \operatorname{Re} \langle \xi^n + \eta^n, e^{n+1} - e^n \rangle \\ &= -2 \operatorname{Re} \langle \xi^n + \eta^n, -i\tau(\mathcal{L}^n + \xi^n + \eta^n) \rangle \\ &= 2\tau \operatorname{Im} \langle \xi^n + \eta^n, \mathcal{L}^n \rangle. \end{aligned} \quad (3-110)$$

利用柯西-许瓦兹不等式和等价动能不等式 (3-41) 可知

$$\begin{aligned} |\langle \eta^n, \mathcal{L}^n \rangle| &\leq \left| \langle \eta^n, -\frac{1}{2} A_h I_h \mu_t e^n \rangle \right| + |\langle \eta^n, V \mu_t e^n \rangle| \\ &\leq C \left(\left| \langle (-\Delta_h)^{\frac{1}{2}} I_h \eta^n, (-\Delta_h)^{\frac{1}{2}} I_h \mu_t e^n \rangle \right| + \|e^n\|_{\rho}^2 + \|e^{n+1}\|_{\rho}^2 + (h^4 + \tau^2)^2 \right) \\ &\leq C \left(\|(-A_h)^{\frac{1}{2}} I_h \eta^n\|_{\rho}^2 + \|(-A_h)^{\frac{1}{2}} I_h \mu_t e^n\|_{\rho}^2 + (h^4 + \tau^2)^2 \right) \\ &\leq C \left(\|\delta_x^+ \eta^n\|_{\rho}^2 + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho}^2 + \|e^{n+1}\|_{\rho}^2 + (h^4 + \tau^2)^2 \right) \\ &\leq C \left((h^4 + \tau^2)^2 + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho}^2 + \|\delta_x^+ e^{n+1}\|_{\rho}^2 \right). \end{aligned} \quad (3-111)$$

类似地,

$$\begin{aligned} |\langle \xi^n, \mathcal{L}^n \rangle| &\leq \left| \langle \xi^n, -\frac{1}{2} A_h I_h \mu_t e^n \rangle \right| + |\langle \xi^n, V \mu_t e^n \rangle| \\ &\leq C \left(\|\delta_x^+ \xi^n\|_{\rho}^2 + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho}^2 + \|\delta_x^+ e^{n+1}\|_{\rho}^2 + \|e^n\|_{\rho}^2 + \|e^{n+1}\|_{\rho}^2 \right) \\ &\leq C \left((h^4 + \tau^2)^2 + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho}^2 + \|\delta_x^+ e^{n+1}\|_{\rho}^2 + \|e^n\|_{\rho}^2 + \|e^{n+1}\|_{\rho}^2 \right), \end{aligned} \quad (3-112)$$

其中最后不等式因式 (3-107) 而成立。至此我们可推出

$$|\operatorname{Im} \langle \xi^n + \eta^n, \mathcal{L}^n \rangle| \leq C(h^4 + \tau^2)^2 + \mathcal{E}(e^{n+1}) + \mathcal{E}(e^n), \quad (3-113)$$

综合上述不等式, 可知

$$\mathcal{E}(e^{n+1}) - \mathcal{E}(e^n) \leq C\tau \left[(h^4 + \tau^2)^2 + \mathcal{E}(e^{n+1}) + \mathcal{E}(e^n) \right]. \quad (3-114)$$

最后利用 Gronwall 不等式可以证明, 存在 $\tau_0 > 0$, 对任意的 $0 < \tau \leq \tau_0$ 有

$$\mathcal{E}(e^n) \leq C (h^4 + \tau^2)^2, \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau}. \quad (3-115)$$

连同定理 3.9 我们就完成了定理 3.1 的证明。□

注记: 定理 3.1 对带局部非线性项 $|\psi|^{\frac{2}{d}}$ 的薛定谔-泊松方程组仍然成立。对局部非线性项的处理请参见 [96]。◇

3.3 半隐紧致差分格式的误差分析

本小节中, 我们将证明 SICFD 格式 (3-18) - (3-20) 的误差函数在离散 l^2 和 H^1 范数下的最优误差估计。

首先, 我们给出 SICFD 格式解的存在唯一性引理。

引理 3.10 (SICFD 格式解的存在唯一性) 假设 (A), (B) 成立, 则对任意初值 $\psi^0 \in X_M$, SICFD 格式在 $n \geq 1$ 时, 存在唯一解 $\psi^n \in X_M$ 。

证明: 引理在 $n = 1$ 时自然成立。我们首先证明差分方程 (3-18) 解的唯一性。给定 $\psi^n, \psi^{n-1} \in X_M$, 假设存在两个不同的解 $u, v \in X_M$, 即

$$i \frac{u_j - \psi_j^{n-1}}{2\tau} = -\frac{1}{2} \left[\Delta_h I_h \left(\frac{u + \psi^{n-1}}{2} \right) \right]_j + V_j \frac{u_j + \psi_j^{n-1}}{2} + \beta \Phi_j^n \psi_j^n, \quad (3-116)$$

$$i \frac{v_j - \psi_j^{n-1}}{2\tau} = -\frac{1}{2} \left[\Delta_h I_h \left(\frac{v + \psi^{n-1}}{2} \right) \right]_j + V_j \frac{v_j + \psi_j^{n-1}}{2} + \beta \Phi_j^n \psi_j^n. \quad (3-117)$$

设 $w = u - v$, 用式 (3-116) 减去 (3-117), 可得

$$i \frac{w_j}{\tau} = -\frac{1}{2} [\Delta_h I_h w]_j + V_j w_j. \quad (3-118)$$

将式 (3-118) 两侧同乘 $\bar{\omega}_j h$ 后再关于 $j \in \mathcal{T}_M$ 求和取虚部, 可得知 $\|w\|_{l^2} = 0$, 即 $u = v$, 唯一性证毕。

我们用类似于 CNCFD 中的方法证明可解性。方程 (3-18) 可写成

$$i \psi_j^{n+1} + \frac{\tau}{2} [\Delta_h I_h \psi^{n+1}]_j - \tau V_j \psi_j^{n+1} + \chi_j = 0, \quad (3-119)$$

其中

$$\chi_j = -i \psi_j^{n-1} + \frac{\tau}{2} [\Delta_h I_h \psi^{n-1}]_j - \tau V_j \psi_j^{n-1} - 2\beta\tau \Phi_j^n \psi_j^n. \quad (3-120)$$

定义映射 $G: u \in X_M \rightarrow G(u) \in X_M$ 为

$$G(u) = i u_j + \frac{\tau}{2} [\Delta_h I_h u]_j - \tau V_j u_j + \chi_j. \quad (3-121)$$

可知 G 是定义在 X_M 空间上的连续映射且满足

$$|\operatorname{Im} \langle G(u), u \rangle| = \|u\|_p^2 + |\operatorname{Im} \langle \chi, u \rangle| \geq \|u\|_p^2 - \|\chi\|_p \|u\|_p, \quad (3-122)$$

从而可知

$$\lim_{\|u\|_2 \rightarrow \infty} \frac{|\langle G^n(u), u \rangle|}{\|u\|_2} = \infty. \quad (3-123)$$

类似的, 可知 G^n 是满射, 即存在 $u_0 \in X_M$ 满足 $G^n(u_0) = 0$. \square

定义局部截断误差 η^n 为

$$\begin{aligned} \eta_j^n = & i \delta_t \psi(x_j, t_n) + \frac{1}{2} \left[\Delta_h I_h \left(\frac{\psi(\cdot, t_{n+1}) + \psi(\cdot, t_{n-1})}{2} \right) \right]_j - V_{\text{ext}}(x_j) \frac{\psi(x_j, t_{n+1}) + \psi(x_j, t_{n-1})}{2} \\ & - \beta [-\Delta_h^{-1} I_h |\psi(\cdot, t_n)|^2]_j \psi(x_j, t_n), \quad n > 1. \end{aligned} \quad (3-124)$$

当 $n = 0$ 时

$$\eta_j^0 = i \delta_t^+ \psi(x_j, 0) - \left[-\frac{1}{2} (\Delta_h I_h \psi^{(1)})_j + V_{\text{ext}}(x_j) \psi_j^{(1)} + \beta \Phi_j^{(1)} \psi_j^{(1)} \right], \quad (3-125)$$

其中

$$\psi_j^{(1)} = \psi_0(x_j) - i \frac{\tau}{2} \left[-\frac{1}{2} (\Delta_h I_h \psi(\cdot, 0))_j + V_{\text{ext}}(x_j) \psi_0(x_j) + \beta \Phi_j^0 \psi_0(x_j) \right]. \quad (3-126)$$

我们有如下截断误差估计:

引理 3.11 (局部截断误差) 假设 (A) 和 (B) 成立, 局部截断误差 η^n 满足

$$\|\eta^n\|_{l^\infty} \leq C(h^4 + \tau^2), \quad 0 \leq n \leq \frac{T}{\tau} - 1, \quad (3-127)$$

$$\|\delta_x^+ \eta^0\|_{l^\infty} \leq C(h^3 + \tau), \quad \forall \tau \leq Ch, \quad (3-128)$$

$$\|\delta_x^+ \eta^n\|_{l^\infty} \leq C(h^4 + \tau^2), \quad 1 \leq n \leq \frac{T}{\tau} - 1. \quad (3-129)$$

证明: 当 $n = 0$ 时, 我们有

$$\psi_j^{(1)} = \psi(x_j, \tau/2) + i \frac{\tau}{2} \eta_j^{(1)}, \quad j \in \mathcal{T}_M, \quad (3-130)$$

其中截断误差 $\eta_j^{(1)}$ 满足

$$\begin{aligned} \eta_j^{(1)} &= i \frac{\psi(x_j, \tau/2) - \psi_0(x_j)}{\tau/2} + \frac{1}{2} [\Delta_h \psi_0]_j - V_j \psi_0(x_j) - \beta \Phi_j^0 \psi_0(x_j) \\ &= \frac{2i}{\tau} \int_0^{\tau} (\tau - s) \partial_t^2 \psi(x_j, s) ds + [B_h^{-1} I_h \mathcal{R}^0(\psi)]_j - \beta [A_h^{-1} I_h \mathcal{R}^0(\Phi)]_j \psi_0(x_j), \end{aligned} \quad (3-131)$$

则可推出 $\|\eta^{(1)}\|_{l^\infty} = O(h^4 + \tau)$ 。而 η_j^0 满足

$$\begin{aligned}\eta_j^0 &= i \frac{\psi(x_j, \tau) - \psi_0(x_j)}{\tau} + \frac{1}{2} \left[\Delta_h I_h \psi^{(1)} \right]_j - V_{\text{ext}}(x_j) \psi_j^{(1)} - \beta \Phi_j^{(1)} \psi_j^{(1)} \\ &= \mathcal{Q}_j^{\frac{1}{2}}(\psi) + \frac{i\tau}{4} \left[\Delta_h I_h \eta^{(1)} \right]_j + \frac{1}{2} \left[B_h^{-1} I_h \mathcal{R}^{\frac{1}{2}}(\psi) \right]_j - \frac{i\tau}{2} V_{\text{ext}}(x_j) \eta_j^{(1)} \\ &\quad - \frac{i\tau}{2} \beta \Phi_j^{(1)} \eta_j^{(1)} + \beta \psi(x_j, \tau/2) (\Phi(x_j, \tau/2) - \Phi_j^{(1)}). \end{aligned} \quad (3-132)$$

类似于 CNCFD 的证明, 可知当 $\tau \leq Ch$ 时, $\|\eta^0\|_{l^\infty} \leq C(h^4 + \tau^2)$ 且

$$|\delta_x^+ \eta_j^0| \leq C \frac{\|\eta_j^0\|_{l^\infty}}{h} \leq C(h^3 + \tau), \quad j = 0, 1, \dots, M. \quad (3-133)$$

至此证明了 $n = 0$ 时的情形。

当 $n > 1$ 时, 利用带余项的泰勒公式, 可知

$$\begin{aligned}\eta_j^n &= \mathcal{Q}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi) + \frac{1}{2} \left[B_h^{-1} I_h \frac{\mathcal{R}^{n+1}(\psi) + \mathcal{R}^{n-1}(\psi)}{2} \right]_j + \frac{1}{2} \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\partial_x^2 \psi) \\ &\quad - V_{\text{ext}}(x_j) \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi) - \beta \left[A_h^{-1} I_h \mathcal{R}^n(\Phi) \right]_j \psi(x_j, t_n). \end{aligned} \quad (3-134)$$

因此有

$$|\eta_j^n| \leq Ch^4 (\|\partial_x^6 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_x^4 \psi\|_{L^\infty} \|\psi\|_{L^\infty}) + C\tau^2 (\|\partial_t^2 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_t^3 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_t^2 \partial_x^2 \psi\|_{L^\infty}), \quad (3-135)$$

从而可推出 $\|\eta^n\|_{l^\infty} \leq C(h^4 + \tau^2)$, $1 \leq n \leq \frac{T}{\tau} - 1$ 。类似的,

$$\begin{aligned}\delta_x^+ \eta_j^n &= \delta_x^+ \mathcal{Q}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi) + \frac{1}{2} \delta_x^+ \left[B_h^{-1} I_h \frac{\mathcal{R}^{n+1}(\psi) + \mathcal{R}^{n-1}(\psi)}{2} \right]_j + \frac{1}{2} \delta_x^+ \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\partial_x^2 \psi) \\ &\quad + \delta_x^+ (V_{\text{ext}}(x_j) \mathcal{P}_j^{n+\frac{1}{2}}(\psi)) - \beta \delta_x^+ \left(\left[A_h^{-1} I_h \mathcal{R}^n(\Phi) \right]_j \psi(x_j, t_n) \right), \end{aligned} \quad (3-136)$$

从上式可推出

$$\begin{aligned}|\delta_x^+ \eta_j^n| &\leq Ch^4 (\|\partial_x^7 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_x^5 \psi\|_{L^\infty} \|\psi\|_{L^\infty} + \|\partial_x^4 \psi\|_{L^\infty} \|\partial_x \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_x^3 \psi\|_{L^\infty} \|\partial_x^2 \psi\|_{L^\infty}) \\ &\quad + C\tau^2 (\|\partial_x \partial_t^2 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_x \partial_t^3 \psi\|_{L^\infty} + \|\partial_t^2 \partial_x^3 \psi\|_{L^\infty}), \quad 1 \leq n \leq \frac{T}{\tau} - 1, \end{aligned} \quad (3-137)$$

其中非线性项 $A_h^{-1} I_h \mathcal{R}^n(\Phi)$ 和 $B_h^{-1} I_h (\mathcal{R}^{n+1}(\psi) + \mathcal{R}^{n-1}(\psi))$ 可用类似方式处理, 至此证毕。 \square

定理 3.12 (误差的 l^2 范数估计) 假设 (A) 和 (B) 成立, 则存在常数 $h_0 > 0$ 和 $\tau_0 > 0$, 使得对任意的 $0 < h < h_0$ 和 $0 < \tau < \tau_0$ 且 $\tau \leq h$, 下式成立:

$$\|e^n\|_{l^2} \leq C(h^4 + \tau^2), \quad \|\psi^n\|_{l^\infty} \leq 1 + M_1, \quad 1 \leq n \leq \frac{T}{\tau}. \quad (3-138)$$

证明: 若 $\|e^n\|_{\rho^2} \leq C(h^4 + \tau^2)$ 已知, 从 $e_j^n = \psi(x_j, t_n) - \psi_j^n$ 出发可推知

$$\|\psi^n\|_{L^\infty} \leq \|\psi(\cdot, t_n)\|_{L^\infty} + \|e^n\|_{L^\infty} \leq M_1 + h^{-\frac{1}{2}}\|e^n\|_{\rho^2} \quad (3-139)$$

$$\leq M_1 + C(h^{\frac{7}{2}} + h^{\frac{3}{2}}) \leq M_1 + 1, \quad (3-140)$$

其中 h 和 τ 足够小。因此我们只需要证明 $\|e^n\|_{\rho^2} \leq C(h^4 + \tau^2)$ 成立即可, 为此我们采用数学归纳法证明。初始误差自然满足 $\|e^1\|_{\rho^2} \leq C(h^4 + \tau^2)$, 现在先假设估计 (3-138) 式在 $0 \leq n \leq m-1 \leq \frac{T}{\tau} - 1$ 时成立, 需要证明估计式在 $n = m$ 时仍然成立。从式 (3-18) 中减去式 (3-124), 得到

$$i \delta_t^+ e_j^n = \mathcal{L}_j^n + \xi_j^n + \eta_j^n, \quad (3-141)$$

其中

$$\mathcal{L}_j^n = -\frac{1}{2} \left[\Delta_h I_h \frac{e^{n+1} + e^{n-1}}{2} \right]_j + V_j \frac{e_j^{n+1} + e_j^{n-1}}{2}, \quad (3-142)$$

$$\xi_j^n = \beta \left[-\Delta_h^{-1} I_h |\psi(\cdot, t_n)|^2 \right]_j \psi(x_j, t_n) - \beta \left[-\Delta_h^{-1} I_h |\psi^n|^2 \right]_j \psi_j^n. \quad (3-143)$$

利用不等式 (3-38) 和式 (3-107), 可知

$$\|\xi^n\|_{\rho^2}^2 \leq C\|e^n\|_{\rho^2}^2, \quad 1 \leq n \leq m-1, \quad (3-144)$$

$$\|\delta_x^+ \xi^n\|_{\rho^2}^2 \leq C \left((h^4 + \tau^2)^2 + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho^2}^2 + \|e^n\|_{\rho^2}^2 \right), \quad 1 \leq n \leq m-1. \quad (3-145)$$

在式 (3-141) 两侧同乘 $h \overline{e_j^{n+1} + e_j^{n-1}}$, 对 j 求和后取虚部, 再利用柯西-许瓦兹不等式, 可得

$$\begin{aligned} \|e^{n+1}\|_{\rho^2}^2 - \|e^{n-1}\|_{\rho^2}^2 &= 2\tau \operatorname{Im} \langle \xi^n + \eta^n, e^{n+1} + e^{n-1} \rangle \\ &\leq 2\tau \left[\|e^{n+1}\|_{\rho^2}^2 + \|e^{n-1}\|_{\rho^2}^2 + \|\xi\|_{\rho^2}^2 + \|\eta^n\|_{\rho^2}^2 \right] \\ &\leq C\tau(h^4 + \tau^2)^2 + 2\tau(\|e^{n+1}\|_{\rho^2}^2 + \|e^{n-1}\|_{\rho^2}^2) + C\tau\|e^n\|_{\rho^2}^2. \end{aligned} \quad (3-146)$$

注意到 $e^0 = 0$ 和 $\|e^1\|_{\rho^2}^2 \leq C(h^4 + \tau^2)^2$, 则当 $\tau \leq \frac{1}{4}$ 时, 将上述不等式从 $n = 1$ 加到 $n = m-1$, 则有

$$\frac{1}{2}(\|e^m\|_{\rho^2}^2 + \|e^{m-1}\|_{\rho^2}^2) \leq C(m-1)\tau(h^4 + \tau^2)^2 + \|e^1\|_{\rho^2}^2 + (C\tau + 4\tau) \sum_{k=1}^{m-1} \|e^k\|_{\rho^2}^2, \quad (3-147)$$

从而可知

$$\|e^m\|_{\rho^2}^2 \leq 2C(T+1)(h^4 + \tau^2)^2 + 2(C\tau + 4\tau) \sum_{k=1}^{m-1} \|e^k\|_{\rho^2}^2. \quad (3-148)$$

对式 (3-148) 应用离散 Gronwall 不等式, 可知

$$\begin{aligned}\|e^m\|_{\rho^2}^2 &\leq 2C(T+1)(h^4 + \tau^2)^2 e^{2(C\tau+4\tau)m} \\ &\leq 2C(T+1)e^{2(C+4)T}(h^4 + \tau^2)^2.\end{aligned}\quad (3-149)$$

至此证毕。 \square

接下来我们继续完成定理 3.2 的证明。

证明: (定理 3.2 的证明) 如前所述, $e^0 = 0$, 从而定理 (3.2) 在 $n = 0$ 时自然成立。因为

$$|\delta_x^+ e_j^1| = |\delta_x^+(\psi(x_j, \tau) - \psi_j^1)| = | -i\tau\delta_x^+ \eta_j^0 | \leq C\tau(h^3 + \tau) \leq C(h^4 + \tau^2), \quad (3-150)$$

所以定理 3.2 在 $n = 1$ 时也成立。将式 (3-141) 改写为

$$e_j^{n+1} - e_j^{n-1} = -2i\tau(\mathcal{L}_j^n + \xi_j^n + \eta_j^n). \quad (3-151)$$

在式(3-141) 两侧同乘 $2h\overline{e_j^{n+1} - e_j^{n-1}}$, 对 $j \in \mathcal{T}_M$ 加和后取实部, 可推出

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(e^{n+1}) - \mathcal{E}(e^{n-1}) &= -2 \operatorname{Re} \langle \xi^n + \eta^n, e^{n+1} - e^{n-1} \rangle \\ &= -2 \operatorname{Re} \langle \xi^n + \eta^n, -2i\tau(\mathcal{L}^n + \xi^n + \eta^n) \rangle \\ &= 4\tau \operatorname{Im} \langle \xi^n + \eta^n, \mathcal{L}^n \rangle.\end{aligned}\quad (3-152)$$

利用柯西-许瓦兹不等式动能等价不等式, 可推知

$$|\langle \xi^n, \mathcal{L}^n \rangle| \leq C((h^4 + \tau^2)^2 + \|\delta_x^+ e^{n-1}\|_{\rho^2}^2 + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho^2}^2 + \|\delta_x^+ e^{n+1}\|_{\rho^2}^2), \quad (3-153)$$

$$|\langle \eta^n, \mathcal{L}^n \rangle| \leq C((h^4 + \tau^2)^2 + \|\delta_x^+ e^{n-1}\|_{\rho^2}^2 + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho^2}^2 + \|\delta_x^+ e^{n+1}\|_{\rho^2}^2), \quad (3-154)$$

对任意的 $1 \leq n \leq \frac{T}{\tau} - 1$ 都成立。由此得到

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(e^{n+1}) - \mathcal{E}(e^{n-1}) &\leq C\tau(h^4 + \tau^2)^2 + \tau \left[\|\delta_x^+ e^{n-1}\|_{\rho^2}^2 + \|\delta_x^+ e^n\|_{\rho^2}^2 + \|\delta_x^+ e^{n+1}\|_{\rho^2}^2 \right] \\ &\leq C\tau(h^4 + \tau^2)^2 + \tau \left[\mathcal{E}(e^{n-1}) + \mathcal{E}(e^n) + \mathcal{E}(e^{n+1}) \right].\end{aligned}\quad (3-155)$$

将上述不等式从 $n = 1$ 加到 $n = m - 1 \leq \frac{T}{\tau} - 1$, 则当 $\tau \leq \frac{1}{4}$ 且 $\tau \leq h$ 时, 有

$$\frac{1}{2}(\mathcal{E}(e^m) - \mathcal{E}(e^{m-1})) \leq C(T+1)(h^4 + \tau^2)^2 + C\tau \sum_{k=1}^{m-1} \mathcal{E}(e^k), \quad 1 \leq m \leq \frac{T}{\tau}. \quad (3-156)$$

对上式应用离散 Gronwall 不等式, 可推出

$$\frac{1}{2}\|\delta_x^+ e^m\|_{\rho^2}^2 \leq \mathcal{E}(e^m) \leq C(T+1)e^{CT}(h^4 + \tau^2)^2. \quad (3-157)$$

至此定理 3.2 证毕。 \square

引理 3.13 (误差的 l^∞ 范数估计) 假设 (A) 和 (B) 成立, 则 SICFD 格式误差函数的 l^∞ 范数阶数为 $O(h^4 + \tau^2)$ 。

证明: 从 $\|\delta_x^+ e^n\|_{l^2} = O(h^4 + \tau^2)$ 出发, 利用式 (3-31) 可直接证明误差的 l^∞ 范数阶数为 $O(h^4 + \tau^2)$ 。□

注记: 定理 3.2 对带局部非线性项的薛定谔-泊松方程组仍然成立。对局部非线性项的处理请参见 [96]。与式 (3-13) 相比, SICFD 格式不需要每步求解非线性方程从而使用相对较少的计算资源, 适合推广到高维。◇

3.4 数值结果分析

在本节, 我们用大量的实验结果验证了对两类紧致差分格式的最优误差估计结果。本节所涉及的数值算例是在对称区域和外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 或者 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 上得到的。我们用非常精细的空间步长 $h = 2^{-8}$ 和时间步长 $\tau = 2^{-16}$ 在区间 $[-16, 16]$ 上得到了 $T = 0.5$ 时刻的数值近似精确解, 记为 ψ_e , 设 $\psi_{h,\tau}$ 为在空间步长 h 和时间步长 τ 时的数值解。误差函数用 $e_{h,\tau} = \psi_e - \psi_{h,\tau}$ 表示。初始值统一取为 $\psi_0(x) = e^{-x^2/2}\pi^{-1/4}$ 。

我们首先验证两种算法在时间方向的二阶收敛性。在区间 $[-16, 16]$ 上用精细的空间步长 $h = 1/256$ 及不同时间步长 τ 计算得到数值解。算法在时间方向的收敛阶数定义为 $\log_2(\|e_{h,\tau}\|/\|e_{h,\frac{\tau}{2}}\|)$ 。表 (3.1) - 表 (3.4) 为 CNCFD 格式在 $\beta = \pm 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 和 $V_{\text{ext}}(x) = x^2/2$ 时误差函数的 l^2 , H^1 和 l^∞ 范数及在相应范数下的二阶收敛性。表 (3.5) - 表 (3.8) 为 SICFD 格式对应误差的 l^2 , H^1 和 l^∞ 范数及在相应范数下的收敛阶。

紧接着, 我们通过选取合适的空间步长 h 与时间步长 τ 来说明算法对空间步长 h 的四阶收敛性, 收敛阶定义为 $\log_2(\|e_{h,\tau}\|/\|e_{\frac{h}{2},\tau}\|)$ 。表 (3.9) - 表 (3.12) 展示了 CNCFD 格式在 $\beta = \pm 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 和 $V_{\text{ext}}(x) = x^2/2$ 时误差函数的 l^2 , H^1 和 l^∞ 范数及在相应范数下的四阶收敛性; 表 (3.13) - 表 (3.16) 为 SICFD 格式的误差和收敛阶数。

图 (3.17) 列出了在 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = x^2/2$ 时, 两种格式在不同空间网格和时间步长下求解 $T = 1.0$ 时刻的波函数所消耗的计算时间, 数值计算是在 Intel CPU(型号 i3-530) 上用 Linux (核版本号 3.0.0-16) 系统中的 MATLAB (版本号 7.8.0.347 (R2009a)) 实现的。

基于上述数值结果, 我们可以得出如下结论:

(一) 表 (3.3) - 表 (3.15) 验证了 CNCFD 和 SICFD 格式在 l^2 , H^1 和 l^∞ 离散范

表 3.1 泊松系数 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 下 CNCFD 格式的时间方向误差分析。

	$\tau = 2^{-8}$	$\tau = 2^{-9}$	$\tau = 2^{-10}$	$\tau = 2^{-11}$
$\ e\ _2$	3.720E-03	9.305E-04	2.326E-04	5.811E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001
$\ \delta_x^+ e\ _2$	4.752E-03	1.189E-03	2.972E-04	7.426E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001
$\ e\ _\infty$	2.447E-03	6.119E-04	1.530E-04	3.821E-05
收敛阶		2.000	2.000	2.001

表 3.2 泊松系数 $\beta = -5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 下 CNCFD 格式的时间方向误差分析。

	$\tau = 2^{-8}$	$\tau = 2^{-9}$	$\tau = 2^{-10}$	$\tau = 2^{-11}$
$\ e\ _2$	3.633E-03	9.088E-04	2.272E-04	5.676E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001
$\ \delta_x^+ e\ _2$	3.131E-03	7.833E-04	1.958E-04	4.892E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001
$\ e\ _\infty$	3.024E-03	7.565E-04	1.891E-04	4.724E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001

表 3.3 泊松系数 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 下 CNCFD 格式的时间方向误差分析。

	$\tau = 2^{-8}$	$\tau = 2^{-9}$	$\tau = 2^{-10}$	$\tau = 2^{-11}$
$\ e\ _2$	3.907E-03	9.774E-04	2.443E-04	6.104E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001
$\ \delta_x^+ e\ _2$	3.857E-03	9.650E-04	2.412E-04	6.0268e-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001
$\ e\ _\infty$	2.650E-03	6.627E-04	1.657E-04	4.138E-05
收敛阶		2.000	2.000	2.001

数下的收敛阶为 $O(h^4 + \tau^2)$ 。

(二) 虽然 CNCFD 格式在理论上保持离散质量和能量守恒，但需要非常精确地求解非线性方程才能保持离散质量和离散能量守恒。

(三) 表 (3.17) 表明在同样的条件下 SICFD 格式的计算效率要比 CNCFD 格式高。本章中涉及到的线性方程组的求解都可以通过离散正弦变化来加速，从而使计算时间近似线性依赖于空间网格个数。离散正弦变化加速的线性方程求解方法可以推广到高维的均匀网格上。

表 3.4 泊松系数 $\beta = -5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 下 CNCFD 格式的时间方向误差分析。

	$\tau = 2^{-8}$	$\tau = 2^{-9}$	$\tau = 2^{-10}$	$\tau = 2^{-11}$
$\ e\ _p$	3.564E-03	8.914E-04	2.228E-04	5.567E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001
$\ \delta_x^+ e\ _p$	3.618E-03	9.050E-04	2.2623E-04	5.653E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001
$\ e\ _\infty$	3.177E-03	7.946E-04	1.987E-04	4.963E-05
收敛阶		1.999	2.000	2.001

表 3.5 泊松系数 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 下 SICFD 格式的时间方向误差分析。

	$\tau = 2^{-8}$	$\tau = 2^{-9}$	$\tau = 2^{-10}$	$\tau = 2^{-11}$
$\ e\ _p$	6.522E-03	1.629E-03	4.069E-04	1.014E-04
收敛阶		2.001	2.001	2.004
$\ \delta_x^+ e\ _p$	7.098E-03	1.771E-03	4.423E-04	1.102E-04
收敛阶		2.003	2.002	2.005
$\ e\ _\infty$	4.455E-03	1.113E-03	2.780E-04	6.931E-05
收敛阶		2.001	2.001	2.004

表 3.6 泊松系数 $\beta = -5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 下 SICFD 格式的时间方向误差分析。

	$\tau = 2^{-8}$	$\tau = 2^{-9}$	$\tau = 2^{-10}$	$\tau = 2^{-11}$
$\ e\ _p$	7.930E-03	1.977E-03	4.935E-04	1.230E-04
收敛阶		2.004	2.002	2.005
$\ \delta_x^+ e\ _p$	7.382E-03	1.840E-03	4.593E-04	1.145E-04
收敛阶		2.004	2.002	2.005
$\ e\ _\infty$	6.889E-03	1.717E-03	4.287E-04	1.069E-04
收敛阶		2.004	2.002	2.005

3.5 本章小结

本章我们对薛定谔-泊松方程组提出了两类紧致差分格式，即守恒 Crank-Nicolson 紧致差分格式和半隐紧致差分格式，并在一定正则性假设下得到了误差函数在离散 l^2 、 H^1 和 l^∞ 范数下的最优估计。我们首先利用椭圆方程的离散极值原理和矩阵分析得到了紧致差分格式在求解泊松位势和二阶导数时的误差估计。在 CNCFD 格式误差分析中，首先利用 Lipschitz 连续函数逼近非线性

表 3.7 泊松系数 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 下 SICFD 格式的时间方向误差分析。

	$\tau = 2^{-8}$	$\tau = 2^{-9}$	$\tau = 2^{-10}$	$\tau = 2^{-11}$
$\ e\ _2$	6.780E-03	1.698E-03	4.243E-04	1.060E-04
收敛阶		2.002	2.001	2.001
$\ \delta_x^+ e\ _2$	6.127E-03	1.529E-03	3.820E-04	9.542E-05
收敛阶		2.003	2.001	2.001
$\ e\ _\infty$	4.840E-03	1.209E-03	3.021E-04	7.548E-05
收敛阶		2.001	2.000	2.001

表 3.8 泊松系数 $\beta = -5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 下 SICFD 格式的时间方向误差分析。

	$\tau = 2^{-8}$	$\tau = 2^{-9}$	$\tau = 2^{-10}$	$\tau = 2^{-11}$
$\ e\ _2$	8.206E-03	2.045E-03	5.104E-04	1.272E-04
收敛阶		2.005	2.002	2.005
$\ \delta_x^+ e\ _2$	8.872E-03	2.210E-03	5.517E-04	1.375E-04
收敛阶		2.005	2.002	2.005
$\ e\ _\infty$	7.535E-03	1.878E-03	4.687E-04	1.168E-04
收敛阶		2.005	2.002	2.005

表 3.9 泊松系数 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 下 CNCFD 格式的空间方向误差分析。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
$\ e\ _2$	3.465E-02	2.171E-03	1.352E-04	7.964E-06
收敛阶		3.996	4.005	4.086
$\ \delta_x^+ e\ _2$	4.074E-02	2.558E-03	1.593E-04	9.380E-06
收敛阶		3.994	4.005	4.086
$\ e\ _\infty$	2.235E-02	1.399E-03	8.716E-05	5.132E-06
收敛阶		3.997	4.005	4.086

项从而得到误差的 l^2 范数估计，再利用反不等式得到 l^∞ 范数的一致先验上界估计； SICFD 格式误差估计是利用数学归纳法和能量方法完成的。在计算中，CNCFD 保持离散质量和离散能量守恒，但需要在每步求解非线性方程从而消耗大量计算资源； SICFD 格式较好的保持质量和能量守恒并且无需求解非线性方程，其中的线性方程组可利用离散正弦变换，从而可将计算量降到 $O(M \log(M))$ 。此两种紧致格式都可以推广到高维的薛定谔-泊松方程组和带 Slater 交换项的薛定

表 3.10 泊松系数 $\beta = -5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 下 CNCFD 格式的空间方向误差分析。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
$\ e\ _2$	3.444E-02	2.159E-03	1.345E-04	7.919E-06
收敛阶		3.996	4.005	4.086
$\ \delta_x^+ e\ _2$	2.965E-02	1.859E-03	1.158E-04	6.820E-06
收敛阶		3.995	4.005	4.086
$\ e\ _\infty$	2.849E-02	1.786E-03	1.113E-04	6.552E-06
收敛阶		3.995	4.005	4.086

表 3.11 泊松系数 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 下 CNCFD 格式的空间方向误差分析。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
$\ e\ _2$	3.558E-02	2.230E-03	1.389E-04	8.178E-06
收敛阶		3.996	4.005	4.086
$\ \delta_x^+ e\ _2$	3.234E-02	2.029E-03	1.264E-04	7.440E-06
收敛阶		3.995	4.005	4.086
$\ e\ _\infty$	2.382E-02	1.492E-03	9.292E-05	5.471E-06
收敛阶		3.997	4.005	4.086

表 3.12 泊松系数 $\beta = -5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 下 CNCFD 格式的空间方向误差分析。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
$\ e\ _2$	3.410E-02	2.138E-03	1.332E-04	7.840E-06
收敛阶		3.996	4.005	4.086
$\ \delta_x^+ e\ _2$	3.547E-02	2.226E-03	1.386E-04	8.163E-06
收敛阶		3.995	4.005	4.086
$\ e\ _\infty$	3.019E-02	1.893E-03	1.179E-04	6.945E-06
收敛阶		3.995	4.005	4.086

谓-泊松方程组，相应的误差分析可在本章提出的框架内得到。

表 3.13 泊松系数 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 下 SICFD 格式的空间方向误差分析。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
$\ e\ _2$	6.682E-02	4.108E-03	2.551E-04	1.499E-05
收敛阶		4.024	4.010	4.089
$\ \delta_x^+ e\ _2$	7.388E-02	4.532E-03	2.814E-04	1.653E-05
收敛阶		4.027	4.010	4.089
$\ e\ _\infty$	4.371E-02	2.688E-03	1.669E-04	9.806E-06
收敛阶		4.023	4.009	4.089

表 3.14 泊松系数 $\beta = -5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = 0$ 下 SICFD 格式的空间方向误差分析。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
$\ e\ _2$	7.328E-02	4.501E-03	2.796E-04	1.643E-05
收敛阶		4.025	4.009	4.089
$\ \delta_x^+ e\ _2$	1.657E-01	4.023E-03	2.498E-04	1.468E-05
收敛阶		4.029	4.009	4.089
$\ e\ _\infty$	6.209E-02	3.810E-03	2.366E-04	1.391E-05
收敛阶		4.027	4.009	4.089

表 3.15 泊松系数 $\beta = 5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 下 SICFD 格式的空间方向误差分析。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
$\ e\ _2$	6.817E-02	4.189E-03	2.601E-04	1.528E-05
收敛阶		4.024	4.010	4.089
$\ \delta_x^+ e\ _2$	5.991E-02	3.674E-03	2.281E-04	1.340E-05
收敛阶		4.027	4.010	4.089
$\ e\ _\infty$	4.663E-02	2.867E-03	1.780E-04	1.046E-05
收敛阶		4.024	4.009	4.089

表 3.16 泊松系数 $\beta = -5$ 及外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 下 SICFD 格式的空间方向误差分析。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
$\ e\ _2$	7.453E-02	4.578E-03	2.843E-04	1.671E-05
收敛阶		4.025	4.009	4.089
$\ \delta_x^+ e\ _2$	8.045E-02	4.930E-03	3.062E-04	1.799E-05
收敛阶		4.028	4.010	4.089
$\ e\ _\infty$	6.706E-02	4.115E-03	2.556E-04	1.502E-05
收敛阶		4.027	4.010	4.089

表 3.17 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{x^2}{2}$ 及 $\beta = 5$ 下 CNCFD 和 SICFD 格式求 $T = 1.0$ 的解所耗计算时间(秒)。

	$h = 1/16$ $\tau = 2^{-8}$	$h = 1/32$ $\tau = 2^{-10}$	$h = 1/64$ $\tau = 2^{-12}$	$h = 1/128$ $\tau = 2^{-14}$
CNCFD	3.837	15.039	83.029	577.870
SICFD	1.289	6.140	37.554	284.854

第 4 章 各向异性外势下三维薛定谔-泊松方程组的降维分析

上一章，我们研究了紧致差分格式在薛定谔-泊松方程初边值问题中的应用，本章我们主要考虑处于各向异性外势下的三维薛定谔-泊松方程组的降维分析。

本章我们仅研究无局部交换项的薛定谔-泊松方程组，即

$$i \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{1}{2} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + \beta \Phi(\mathbf{x}, t) \right] \psi(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0, \quad (4-1)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t = 0) = \psi_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (4-2)$$

其中波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 为复值函数， $V_{\text{ext}}(\mathbf{x}, t)$ 为各向异性的外势函数，如雪茄状和盘状外势， $\Phi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} * |\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ 为泊松位势。

在给出三维到二维和一维的降维分析后，我们从基态解和动力学两方面数值验证了分析的合理性，并数值观察到低维模型的基态解和动力学到三维基态解和动力学的收敛阶。三维方程组基态解和动力学的计算分别采用第二章中的向后欧拉正弦谱方法和时间时间分裂谱方法，低维退化方程组基态解和动力学计算分别采用离散归一化梯度流的向后欧拉谱方法^[55,56]和时间分裂谱方法^[35,45]。低维退化模型里等效位势的计算是基态解和动力学计算的关键部分，原则上我们可利用微分方程^[46,76,99]或积分方程^[90,100]来求解等效位势。

我们从三维薛定谔-泊松方程组出发，首先得到二维面绝热模型、面密度模型和一维线绝热模型，三维泊松位势退化为与伸缩常数 ε 相关或者不相关的等效位势。接着，我们给出了三种退化模型等效外势的计算方法，最后从基态解和动力学两方面数值验证了三维到二维和一维降维分析的合理性，并给出了低维退化模型对三维模型的收敛阶。

4.1 从三维到二维降维分析

考虑一个处于形如 $V_{\text{ext}}(x, y, z) = V_{2D}(x, y) + \frac{1}{\varepsilon^2} V_z(\frac{z}{\varepsilon})$ 的盘状外势中的三维薛定谔-泊松方程组，由于 z 轴方向的外势很大，此时电子将被束缚在 xy 平面上运动。三维哈密顿量 $H = -\frac{1}{2} \Delta + V_{\text{ext}}$ 可分解为 $H = H_z^\varepsilon + H_\perp^S$ ，其中 z 轴方向哈密顿量 $H_z^\varepsilon = -\frac{1}{2} \partial_z^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} V_z(\frac{z}{\varepsilon})$ ， xy 平面的哈密顿量 $H_\perp^S = -\frac{1}{2} \Delta_{xy} + V_{2D}(x, y)$ 。

利用谱分解理论可知，椭圆算子 H_z^1 的规范特征函数 $\{\chi_k(z)\}_{k \geq 0}$ 组成 $L^2(\mathbb{R})$ 空间的一组完备正交基，对应的特征值 $\{\mu_k\}_{k \geq 0}$ 非负。 $\{(\chi_k^\varepsilon, \mu_k^\varepsilon)\}_{k=0}^\infty$ 是 H_z^ε 对应的规范

正交特征函数和特征值，具体定义为，

$$\mu_k^\varepsilon = \frac{\mu_k}{\varepsilon^2}, \quad \chi_k^\varepsilon(z) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \chi_k\left(\frac{z}{\varepsilon}\right). \quad (4-3)$$

当 $V_z(z) = \frac{z^2}{2}$ 时，特征值为 $\mu_k = k + \frac{1}{2}$, $k = 0, 1, \dots$ ，相应的规范特征函数是高斯函数与埃尔米特多项式的乘积。最小特征值为 $\mu_0 = \frac{1}{2}$ ，对应的规范特征函数为 $\chi_0 = \pi^{-1/4} e^{-z^2/2}$ 。

对非线性相对较弱的薛定谔-泊松方程组来说，如 [70] 中证明和 [101] 中注明的那样，我们不必将波函数在所有特征函数空间展开，其在基态 (最小特征值所对应的特征函数) 空间的投影就可很好地逼近方程组 (4-1) - (4-2)。

首先将波函数投影到基态解空间，在经过相位调制后， ψ 可用下式逼近

$$\psi^\varepsilon(x, y, z, t) \approx \psi_{2D}^\varepsilon(x, y, t) \chi_0^\varepsilon(z) e^{-i\mu_0^\varepsilon t}. \quad (4-4)$$

将上式右端项代替式 (4-1) 的 ψ ，得到

$$i \partial_t \psi_{2D}^\varepsilon \chi_0^\varepsilon = \left(-\frac{1}{2} \Delta \psi_{2D}^\varepsilon + V_{2D} \psi_{2D}^\varepsilon + \beta \Phi^\varepsilon \psi_{2D}^\varepsilon \right) \chi_0^\varepsilon. \quad (4-5)$$

将式 (4-5) 两侧同乘 $\chi_0^\varepsilon(z)$ 并对变量 z 在 \mathbb{R} 上积分，上式退化为

$$i \partial_t \psi_{2D}^\varepsilon = -\frac{1}{2} \Delta \psi_{2D}^\varepsilon + V_{2D} \psi_{2D}^\varepsilon + \beta \varphi_{2D}^\varepsilon \psi_{2D}^\varepsilon, \quad (4-6)$$

其中

$$\varphi_{2D}^\varepsilon(x, y) = \int_{\mathbb{R}} \Phi^\varepsilon(x, y, z) |\chi_0^\varepsilon(z)|^2 dz. \quad (4-7)$$

将初始值投影到基态空间得到等效初始值为

$$\psi_{2D}^\varepsilon(x, y, 0) = \int_{\mathbb{R}} \psi_0^\varepsilon(x, y, z) \chi_0^\varepsilon(z) dz. \quad (4-8)$$

至此我们得到了由式 (4-6)，式 (4-7) 和式 (4-8) 组成的面绝热模型 (Surface Adiabatic Model)，简记为 SAM，此模型最初是由 Abdallah N.B. 在 [101] 中提出。

当伸缩系数 ε 趋向于 0 时，密度函数 $n^\varepsilon(x, y, z, t) = |\psi^\varepsilon(x, y, z, t)|^2$ 在 z 轴方向逼近于狄拉克函数，即 $n^\varepsilon \approx n_s(x, y) \delta(z)$ ，其中 $n_s(x, y)$ 为面密度。将此式代入泊松位势 $\Phi^\varepsilon(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} * n^\varepsilon$ 中，可知二维等效位势 φ_{2D}^ε 满足

$$\varphi_{2D}^\varepsilon(\mathbf{x}) \approx \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} * n_s |\chi_0^\varepsilon(z)|^2 dz = \frac{1}{2} \frac{1}{2\pi|\mathbf{x}|} * n_s = \varphi_{2D}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2. \quad (4-9)$$

等效位势 $\varphi_{2D} = \frac{1}{2} \frac{1}{2\pi|x|} * |\psi_{2D}|^2$ 满足如下伪微分方程, 也称 Laplace 平方根方程,

$$(-\Delta)^{1/2} \varphi_{2D}(x, y, t) = \frac{1}{2} |\psi_{2D}(x, y, t)|^2. \quad (4-10)$$

至此我们可得到二维面密度模型 (Surface Density Model), 简记为 SDM,

$$\begin{cases} i \partial_t \psi_{2D} = -\frac{1}{2} \Delta \psi_{2D} + V_{2D} \psi_{2D} + \beta \varphi_{2D} \psi_{2D}, \\ \psi_{2D}(x, y, 0) = \psi_{2D}^0(x, y), \end{cases} \quad (4-11)$$

其中 ψ_{2D}^0 为初值函数, 等效位势 φ_{2D} 由式 (4-10) 确定。

式 (4-7) 中的等效位势 φ_{2D}^ε 也可写成卷积形式

$$\begin{aligned} \varphi_{2D}^\varepsilon(x, y) &= \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} \chi_0^\varepsilon(z)^2 dz \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi_{2D}^\varepsilon(x', y')|^2 \chi_0^\varepsilon(z')^2}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} dx' dy' dz' \\ &= \frac{1}{2} (U_{2D}^\varepsilon * |\psi_{2D}^\varepsilon|^2)(x, y), \end{aligned} \quad (4-12)$$

其中

$$U_{2D}^\varepsilon(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{\chi_0^\varepsilon(z)^2 \chi_0^\varepsilon(z')^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z-z')^2}} dz dz' = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{\chi_0(z)^2 \chi_0(z')^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + \varepsilon^2 (z-z')^2}} dz dz'. \quad (4-13)$$

应用控制收敛定理可以证明, 当 ε 趋向于 0 时, $U_{2D}^\varepsilon(r)$ 逐点逼近于 $U_{2D}(r) = 1/(2\pi r)$, 进而有 $\varphi_{2D}^\varepsilon \rightarrow \varphi_{2D}$, $\varepsilon \rightarrow 0+$ 成立。当 $V_z(z) = \frac{z^2}{2}$ 时, 最小特征值 μ_0^ε 及其对应的规范特征向量 $\chi_0^\varepsilon(z)$ 为

$$\mu_0^\varepsilon = \frac{1}{2} \varepsilon^{-2}, \quad \chi_0^\varepsilon(z) = e^{-\frac{z^2}{2\varepsilon^2}} (\pi \varepsilon^2)^{-\frac{1}{4}}. \quad (4-14)$$

将上式代入式 (4-13), 变量替换后, 可将 U_{2D}^ε 简化为

$$U_{2D}^\varepsilon(r) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-\frac{w^2}{2}}}{\sqrt{r^2 + \varepsilon^2 w^2}} dw, \quad (4-15)$$

其中 $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ 。

4.2 从三维到一维降维分析

本节我们考虑形如 $V_{\text{ext}}(x, y, z) = \frac{1}{\varepsilon^2} V_c(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{y}{\varepsilon}) + V_{1D}(z)$ 的雪茄状外势的情形。由于 x 和 y 方向的外势相对很大, 电子将被束缚在 z 轴上移动。类似于上节推导过程, 三维哈密顿量 H 可分解为 $H = H_S^\varepsilon + H_\perp^z$, 其中 $H_S^\varepsilon = -\frac{1}{2} \Delta_{xy} + \frac{1}{\varepsilon^2} V_c(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{y}{\varepsilon})$, $H_\perp^z = -\frac{1}{2} \partial_z^2 + V_{1D}$ 。

利用谱分解理论可知, 椭圆算子 H_s^1 的规范特征函数 $\{\eta_k(x, y)\}_{k \geq 0}$ 组成 $L^2(\mathbb{R}^2)$ 空间的一组完备正交基, 对应的特征值 $\{v_k\}_{k \geq 0}$ 非负。 $\{(\eta_k^\varepsilon, v_k^\varepsilon)\}_{k=0}^\infty$ 是 H_s^ε 对应的规范正交特征函数和特征值, 具体定义为,

$$v_k^\varepsilon = 2 \frac{v_k}{\varepsilon^2}, \quad \eta_k^\varepsilon(x, y) = \frac{1}{\varepsilon} \eta_k\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{y}{\varepsilon}\right). \quad (4-16)$$

将波函数投影到基态空间, 在经过相位调制后, ψ 可用下式逼近

$$\psi^\varepsilon(x, y, z, t) \approx \psi_{1D}^\varepsilon(z, t) \eta_0^\varepsilon(x, y) e^{-i v_0^\varepsilon t}. \quad (4-17)$$

将上式右端项代替式 (4-1) 的 ψ , 可得

$$i \partial_t \psi_{1D}^\varepsilon \eta_0^\varepsilon = \left(-\frac{1}{2} \Delta \psi_{1D}^\varepsilon + V_{1D} \psi_{1D}^\varepsilon + \beta \Phi^\varepsilon \psi_{1D}^\varepsilon \right) \eta_0^\varepsilon. \quad (4-18)$$

将式 (4-18) 两侧同乘 $\eta_0^\varepsilon(x, y)$ 并对变量 (x, y) 在 \mathbb{R}^2 上积分, 式 (4-18) 可退化为

$$i \partial_t \psi_{1D}^\varepsilon = -\frac{1}{2} \partial_z^2 \psi_{1D}^\varepsilon + V_{1D} \psi_{1D}^\varepsilon + \beta \varphi_{1D}^\varepsilon \psi_{1D}^\varepsilon, \quad (4-19)$$

其中

$$\varphi_{1D}^\varepsilon(z) = \int_{\mathbb{R}^2} \Phi^\varepsilon(x, y, z) |\eta_0^\varepsilon(x, y)|^2 dx dy. \quad (4-20)$$

将初始值投影到基态解空间得到等效初始值为

$$\psi_{1D}^\varepsilon(x, y, 0) = \int_{\mathbb{R}^2} \psi_0^\varepsilon(x, y, z) \eta_0^\varepsilon(x, y) dx dy. \quad (4-21)$$

至此我们得到了由式 (4-19), 式 (4-20) 和式 (4-21) 组成的线绝热模型 (Line Adiabatic Model), 简记为 LAM。

一维等效位势 φ_{1D}^ε 可写成卷积形式为

$$\begin{aligned} \varphi_{1D}^\varepsilon(z) &= \int_{\mathbb{R}^2} |\eta_0^\varepsilon(x, y)|^2 dx dy \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{4\pi} \frac{|\psi_{1D}^\varepsilon(z')|^2 |\eta_0^\varepsilon(x', y')|^2}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} dx' dy' dz' \\ &= (U_{1D}^\varepsilon * |\psi_{1D}^\varepsilon|^2)(z), \end{aligned} \quad (4-22)$$

其中卷积核 U_{1D}^ε 定义为

$$U_{1D}^\varepsilon(z) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^4} \frac{|\eta_0^\varepsilon(x, y)|^2 |\eta_0^\varepsilon(x', y')|^2}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + z^2}} dx dy dx' dy'. \quad (4-23)$$

特殊地, 当 $V_c(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$ 时, 对应的最小特征值 v_0^ε 和规范特征向量 η_0^ε 为

$$v_0^\varepsilon = \varepsilon^{-2}, \quad \eta_0^\varepsilon(x, y) = (\pi \varepsilon^2)^{-1/2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2\varepsilon^2}}. \quad (4-24)$$

将其代入式 (4-23)，利用变量替换，可将 φ_{1D}^ε 简化为

$$\varphi_{1D}^\varepsilon(z) = \int_{\mathbb{R}} |\psi_{1D}^\varepsilon(z')|^2 U_{1D}^\varepsilon(z-z') dz', \quad (4-25)$$

其中

$$U_{1D}^\varepsilon(z) = \frac{1}{8\pi\varepsilon^2} \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{x}{2\varepsilon^2}}}{\sqrt{x+z^2}} dx. \quad (4-26)$$

4.3 等效位势的数值方法

在本节中，我们介绍求解基态解和动力学的数值方法。与第二章类似，我们将等效位势的快速高精度算法与离散归一化梯度流的向后欧拉谱方法结合来计算基态解，与时间分裂谱方法结合计算动力学。

4.3.1 面绝热模型中的等效位势

由波函数的近似式 (4-4)，可知三维的泊松位势 Φ^ε 近似满足如下微分方程

$$-\Delta \Phi^\varepsilon(x, y, z, t) = |\psi_{2D}^\varepsilon(x, y, t)|^2 |\chi_0^\varepsilon(z)|^2. \quad (4-27)$$

式 (4-7) 中的等效位势 φ_{2D}^ε 是泊松位势 Φ^ε 与基态 χ_0^ε 在 z 方向的内积。

在计算中，通常将二维全空间问题截断为有界区域 $\Omega = [a, b] \times [c, d]$ 上的初边值问题，可令等效位势 ψ_{2D}^ε 满足周期边界条件。此处选取对称区域，即 $b = -a, d = -c$ 。首先，在 x 和 y 方向上均匀离散，令 $h_x = \frac{b-a}{N_x}, h_y = \frac{d-c}{N_y}$ ，网格点 (x_m, y_n) ， $x_m = a + mh_x, y_n = c + nh_y, m = 0, 1, \dots, N_x, n = 0, 1, \dots, N_y$ 。定义函数空间

$$T_{2D}^{\mathcal{F}} = \left\{ e^{i\mu_k^x(x-a)} e^{i\mu_l^y(y-c)}, k = -\left(\frac{N_x}{2} - 1\right), \dots, \frac{N_x}{2}, l = -\left(\frac{N_y}{2} - 1\right), \dots, \frac{N_y}{2} \right\}, \quad (4-28)$$

$$C_{2D}^{\text{per}}(\Omega) = \{\psi(x, y) \in C(\Omega), \psi(a, y) = \psi(b, y), \psi(x, c) = \psi(x, d)\}, \quad (4-29)$$

其中

$$\mu_k^x = \frac{2\pi k}{b-a}, k = -\left(\frac{N_x}{2} - 1\right), \dots, \frac{N_x}{2}, \quad \mu_l^y = \frac{2\pi l}{d-c}, l = -\left(\frac{N_y}{2} - 1\right), \dots, \frac{N_y}{2}. \quad (4-30)$$

令 $P_{2D}^{\mathcal{F}} : C_{2D}^{\text{per}}(\Omega) \rightarrow T_{2D}^{\mathcal{F}}$ 为标准的投影算子^[75]，即

$$(P_{2D}^{\mathcal{F}}(\psi))(x, y) = \sum_{(k,l) \in \Lambda} \widehat{\psi}_{kl}^{\mathcal{F}} \omega_k(x) \omega_l(y), \quad (x, y) \in \Omega, \quad (4-31)$$

其中

$$\widehat{(\psi)}_{kl}^{\mathcal{F}} = \frac{1}{(b-a)(d-c)} \int_a^b \int_c^d \psi(x, y) \overline{\omega_k(x)} \overline{\omega_l(y)} dx dy, \quad (4-32)$$

函数 $\omega_k(x) = e^{i\mu_k^x(x-a)}$, $\omega_l(y) = e^{i\mu_l^y(y-c)}$, 指标集 $\Lambda = \{(k, l) \mid k = 0, \pm 1, \dots, \pm(\frac{N_x}{2} - 1), \frac{N_x}{2}, l = 0, \pm 1, \dots, \pm(\frac{N_y}{2} - 1), \frac{N_y}{2}\}$ 。式 (4-32) 中的积分可以用复合梯形公式数值积分逼近, 具体细节参见 [35,56,75,99]。

为计算等效位势, 首先将 $\Phi^\varepsilon(\cdot, z)$ 投影到空间 $T_{2D}^{\mathcal{F}}$ 为

$$P_{2D}^{\mathcal{F}}(\Phi^\varepsilon) = \sum_{(k, l) \in \Lambda} \widehat{(\Phi^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}}(z) \omega_k(x) \omega_l(y), \quad (4-33)$$

其中系数 $\widehat{(\Phi^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}}(z)$ 满足

$$(|\mu_k^x|^2 + |\mu_l^y|^2) \widehat{(\Phi^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}} - ((\widehat{(\Phi^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}}))_z'' = (\widehat{(\psi_{2D}^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}}) |\chi_0^\varepsilon|^2. \quad (4-34)$$

对上式在 z 方向做傅立叶变换, 得到

$$\mathcal{F}_z((\widehat{(\Phi^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}}))(\xi) = \frac{(\widehat{(\psi_{2D}^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}}) \mathcal{F}_z(|\chi_0^\varepsilon|^2)}{|\mu_k^x|^2 + |\mu_l^y|^2 + |\xi|^2}, \quad (4-35)$$

其中 $F_z(f)(\xi) = (1/\sqrt{2\pi}) \int_{\mathbb{R}} f(z) e^{i\xi z} dz$ 代表函数 $f \in L^2(\mathbb{R})$ 的傅立叶变换。

根据 Parseval 恒等式, 等效位势 φ_{2D}^ε 可写成

$$\varphi_{2D}^\varepsilon(x, y) \approx \sum_{(k, l) \in \Lambda} (\widehat{(\psi_{2D}^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}}) \omega_k(x) \omega_l(y) \int_{\mathbb{R}} \frac{|\mathcal{F}_z(|\chi_0^\varepsilon|^2)|^2}{|\mu_k^x|^2 + |\mu_l^y|^2 + |\xi|^2} d\xi. \quad (4-36)$$

对横向调和外势来说, 上述方程可简化为

$$\varphi_{2D}^\varepsilon(x, y) \approx \sum_{(k, l) \in \Lambda} (\widehat{(\psi_{2D}^\varepsilon)}_{kl}^{\mathcal{F}}) \omega_k(x) \omega_l(y) \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-\frac{\varepsilon^2 \rho^2}{2}}}{|\mu_k^x|^2 + |\mu_l^y|^2 + |\rho|^2} d\rho. \quad (4-37)$$

式 (4-37) 中的积分在 $|\mu_k^x|^2 + |\mu_l^y|^2 = 0$ 处是发散的, 因而会出现与 [99] 中类似的不相容性现象, 为此我们对密度函数引入修正项 $\frac{I_\Omega}{|\Omega|}$ 使得修正密度函数的离散傅里叶变换的 0 模为 0。修正项所产生的位势可通过 $U_{2D}^\varepsilon * \frac{I_\Omega}{|\Omega|}$ 直接计算得到。式 (4-37) 中的积分可用 Gauss-Kronrod 数值积分逼近, 修正位势可解析求解, 其公式较为复杂故此省略。

在横向调和外势下的等效位势 φ_{2D}^ε 可用下式逼近

$$\varphi_{2D}^\varepsilon(x_m, y_n) \approx \sum_{(k, l) \in \Lambda} (\widehat{(\psi)_{Crt}^2})_{kl}^{\mathcal{F}} I_{kl}^{\mathcal{F}} \omega_k(x_m) \omega_l(y_n) + \frac{1}{2} \left(U_{2D}^\varepsilon * \frac{I_\Omega}{|\Omega|} \right)(x_m, y_n), \quad (4-38)$$

其中 $|\psi|_{C^{r_1}}^2(x, y) = |\psi_{2D}^\varepsilon|^2(x, y) - \frac{I_\Omega}{|\Omega|}(x, y)$, $I_{kl}^{\mathcal{F}} = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-\varepsilon^2 \rho^2/2}}{|\mu_k^x|^2 + |\mu_l^y|^2 + |\rho|^2} d\rho$ 。

等效位势 ψ_{2D}^ε 在无穷远处增长阶为 $1/r$, 因此也可以将其投影到空间 T_{2D}^S 。将泊松位势 Φ^ε 在 $\Omega \times \mathbb{R}$ 上用正弦谱方法逼近, 即将 $\Phi^\varepsilon(\cdot, z)$ 投影到空间 T_{2D}^S 中为

$$P_{2D}^S(\Phi^\varepsilon) = \sum_{k=1}^{N_x-1} \sum_{l=1}^{N_y-1} (\widetilde{\Phi^\varepsilon})_{kl}^S(z) \sin(\nu_k^x(x-a)) \sin(\nu_l^y(y-c)), \quad (4-39)$$

其中 P_{2D}^S , T_{2D}^S , $(\widetilde{\Phi^\varepsilon})_{kl}^S(z)$ 在下节定义并满足

$$(|\nu_k^x|^2 + |\nu_l^y|^2)(\widetilde{\Phi^\varepsilon})_{kl}^S - ((\widetilde{\Phi^\varepsilon})_{kl}^S)''_z = (|\psi_{2D}^\varepsilon|^2)_{kl}^S |\chi_0^\varepsilon|^2. \quad (4-40)$$

类似地, 可以得到等效位势的另一种逼近方式, 即

$$\varphi_{2D}^\varepsilon(x_m, y_n) \approx \sum_{k=1}^{N_x-1} \sum_{l=1}^{N_y-1} (|\psi_{2D}^\varepsilon|^2)_{kl}^S I_{kl}^S \sin(\nu_k^x(x_m-a)) \sin(\nu_l^y(y_n-c)), \quad (4-41)$$

其中 $I_{kl}^S = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-\frac{\varepsilon^2 \rho^2}{2}}}{|\nu_k^x|^2 + |\nu_l^y|^2 + |\rho|^2} d\rho$ 。

注记: 如果考虑到相容性问题, 正弦谱方法要比傅立叶方法更合适些, 但考虑到等效位势 ψ_{2D}^ε 在无穷远处的增长阶为 $1/r$, 因此使用正弦谱方法时, 我们需要选取相对较大些的计算区域。两种算法具有谱精度并且都能有效的逼近等效位势。

◇

4.3.2 面密度模型中的等效位势

等效位势 φ_{2D} 除卷积定义 (4-9) 外, 还可以利用傅立叶变换等价的写成

$$\varphi_{2D}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\xi \cdot \mathbf{x}} \frac{\mathcal{F}_{\mathbf{x}}(|\psi_{2D}|^2)(\xi)}{|\xi|} d\xi, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2, \quad (4-42)$$

其中 $\mathcal{F}_{\mathbf{x}}(|\psi_{2D}|^2)(\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-i\xi \cdot \mathbf{x}} |\psi_{2D}|^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ 。在式 (4-42) 中, $e^{i\xi \cdot \mathbf{x}}$ 可看做 Laplace 平方根算子 $\sqrt{-\Delta}$ 的特征函数, 对应特征值为 $|\xi| = \sqrt{|\xi|^2}$ 。类似地, 如果 $\{\lambda_j, \kappa_j(\mathbf{x})\}$ 是 Laplace 算子的特征值和特征函数, 则 Laplace 平方根算子 $\sqrt{-\Delta}$ 将函数 ϕ 映到 ψ , 即

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \kappa_j(\mathbf{x}) \mapsto \psi(\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{\frac{1}{2}} c_j \kappa_j(\mathbf{x}). \quad (4-43)$$

所以当 $\psi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \kappa_j(\mathbf{x})$ 时, $\phi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{-1/2} c_j \kappa_j(\mathbf{x})$ 。关于 Laplace 平方根算子更多内容, 请参考 [100,102]。

位势 φ_{2D} 在无穷远处趋向于 0 的速度比 $1/r$ 要快, 所以可通过求解带齐次狄氏边界条件的伪微分方程 (4-10) 来逼近 φ_{2D} 。在计算中, 将二维全空间问题截断为有限计算区域 $\Omega = [a, b] \times [c, d]$ 上的初边值问题。首先, 在 x 和 y 方向上均匀离散, 令 $h_x = \frac{b-a}{N_x}, h_y = \frac{d-c}{N_y}$, 网格点 (x_m, y_n) , $x_m = a + mh_x, y_n = c + nh_y, m = 0, 1, \dots, N_x, n = 0, 1, \dots, N_y$ 。定义函数空间

$$T_{2D}^S = \text{span} \left\{ \sin(v_k^x(x-a)) \sin(v_l^y(y-c)), k = 1, \dots, N_x - 1, l = 1, \dots, N_y - 1 \right\}, \quad (4-44)$$

$$C_{2D}^{\text{dric}}(\Omega) = \{\psi(x, y) \in C(\Omega), \psi(a, y) = \psi(b, y) = \psi(x, c) = \psi(x, d) = 0\}, \quad (4-45)$$

其中

$$v_k^x = \frac{\pi k}{b-a}, k = 1, 2, \dots, N_x - 1, \quad v_l^y = \frac{\pi l}{d-c}, l = 1, 2, \dots, N_y - 1. \quad (4-46)$$

令 $P_{2D}^S : C_{2D}^{\text{dric}} \rightarrow T_{2D}^S$ 为标准的投影算子^[75]:

$$(P_{2D}^S(\psi))(x, y) = \sum_{k=1}^{N_x-1} \sum_{l=1}^{N_y-1} (\widetilde{\psi})_{kl}^S \sin(v_k^x(x-a)) \sin(v_l^y(y-c)), \quad (x, y) \in \Omega, \quad (4-47)$$

其中

$$(\widetilde{\psi})_{kl}^S = \frac{4}{(b-a)(d-c)} \int_a^b \int_c^d \psi(x, y) \sin(v_k^x(x-a)) \sin(v_l^y(y-c)) dx dy. \quad (4-48)$$

等效位势 φ_{2D} 可被 $P_{2D}^S(\varphi_{2D})$ 逼近为

$$P_{2D}^S(\varphi_{2D}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_x-1} \sum_{l=1}^{N_y-1} \frac{(|\widetilde{\psi}_{2D}|^2)_{kl}^S}{\sqrt{|v_k^x|^2 + |v_l^y|^2}} \sin(v_k^x(x-a)) \sin(v_l^y(y-c)). \quad (4-49)$$

至此可知, $\varphi_{2D}(x_m, y_n)$ 可用式 $P_{2D}^S(\varphi_{2D})(x_m, y_n)$ 逼近为

$$\varphi_{2D}(x_m, y_n) \approx \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_x-1} \sum_{l=1}^{N_y-1} \frac{(|\widetilde{\psi}_{2D}|^2)_{kl}^S}{\sqrt{|v_k^x|^2 + |v_l^y|^2}} \sin(v_k^x(x_m - a)) \sin(v_l^y(y_n - c)), \quad (4-50)$$

其中的积分式 $(|\widetilde{\psi}_{2D}|^2)_{kl}^S$ 可用复合梯形公式来逼近并用离散正弦变换加速, 从而将计算量降至 $O(N^2 \log(N))$, $N = \max\{N_x, N_y\}$ 。

注记: 如果考虑因 z 轴方向强外势影响而被限制在 xy 平面上电子的运动, 则电子相互作用而产生的库仑势是由 Laplace 平方根算子的逆而不是二维泊松方程来描述的。电子将相互作用仍为 $\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|}$, 这和二维泊松方程基本解 $-\frac{1}{2\pi} \log(r)$ 是完全不同的。 \diamond

4.3.3 线绝热模型中的等效位势

我们对一维等效位势 φ_{1D}^ε 提出如下快速高精度的算法。首先将一维全空间问题，即 LAM，截断为有限区域上的初边值问题，其中波函数 ψ_{1D}^ε 满足周期边界条件。已知等效位势 φ_{1D}^ε 是 U_{1D}^ε 与密度函数 $n_{1D}^\varepsilon(z) = |\psi_{1D}^\varepsilon(z)|^2$ 的卷积。为计算 $\varphi_{1D}^\varepsilon(z)$ ，需要密度函数 $n_{1D}^\varepsilon(z)$ 为全空间定义函数，因密度函数是指数衰减的，因此可通过 n_{1D}^ε 在 $\mathbb{R} \setminus [a, b]$ 上的零延拓实现，其中 $[a, b]$ 为一维计算区域。

将区间 $[a, b]$ 等距离散为 $a = z_0 < z_1 < \cdots < z_{N_z-1} < z_{N_z} = b$ ，其中 $z_l = a + lh_z$ ， $h_z = \frac{b-a}{N_z}$ ， $l = 0, 1, \dots, N_z$ 。定义函数空间

$$T_{1D}^{\mathcal{F}} = \text{span} \left\{ e^{i\mu_k^z(z-a)}, z \in [a, b], k = -\left(\frac{N_z}{2} - 1\right), \dots, \frac{N_z}{2} \right\}, \quad (4-51)$$

$$C_{1D}^{\text{per}}(\Omega) = \{\psi(z) \in C([a, b]), \psi(a) = \psi(b)\}, \quad (4-52)$$

其中 $\mu_k^z = \frac{2\pi k}{b-a}$ ， $k = -(N_z/2 - 1), \dots, N_z/2$ 。

令 $P_{1D}^{\mathcal{F}} : C_{1D}^{\text{per}}(\Omega) \rightarrow T_{1D}^{\mathcal{F}}$ 为标准的投影算子^[75]，即

$$(P_{1D}^{\mathcal{F}}(\psi))(z) = \sum_{k=-(N_z/2-1)}^{N_z/2} (\widehat{\psi})_k^{\mathcal{F}} e^{i\mu_k^z(z-a)}, \quad z \in [a, b], \quad (4-53)$$

其中

$$(\widehat{\psi})_k^{\mathcal{F}} = \frac{1}{b-a} \int_a^b \psi(z) e^{-i\mu_k^z(z-a)} dz. \quad (4-54)$$

在区间 $[a, b]$ 上用 $P_{1D}^{\mathcal{F}}(n_{1D}^\varepsilon)$ 谱精度地逼近密度函数 n_{1D}^ε ，然后将 $P_{1D}^{\mathcal{F}}(n_{1D}^\varepsilon)$ 在 $[a, b]$ 外进行零延拓得到全局定义的函数 $n_{glb}^\varepsilon(z)$ ，其具体定义为

$$n_{glb}^\varepsilon(z) = \begin{cases} P_{1D}^{\mathcal{F}}(n_{1D}^\varepsilon)(z), & z \in [a, b], \\ 0, & z \in \mathbb{R} \setminus [a, b]. \end{cases} \quad (4-55)$$

则等效位势 $\varphi_{1D}^\varepsilon(z_l)$ 可用下式逼近

$$\begin{aligned} \varphi_{1D}^\varepsilon(z_l) &= (U_{1D}^\varepsilon * n_{1D}^\varepsilon)(z_l) \approx (U_{1D}^\varepsilon * n_{glb}^\varepsilon)(z_l) \\ &= \sum_{k=-(N_z/2-1)}^{N_z/2} (\widehat{n_{1D}^\varepsilon})_k^{\mathcal{F}} \left[U_{1D}^\varepsilon * (e^{i\mu_k^z(z-a)} \mathbf{I}_{[a,b]}) \right](z_l) \\ &:= \sum_{k=-(N_z/2-1)}^{N_z/2} (\widehat{n_{1D}^\varepsilon})_k^{\mathcal{F}} I^k(z_l), \end{aligned} \quad (4-56)$$

其中 $I^k(z_l)$ 为

$$I^k(z_l) = \int_a^b U_{1D}^\varepsilon(z_l - y) e^{i\mu_k^\varepsilon(y-a)} dy. \quad (4-57)$$

$(\widehat{n_{1D}^\varepsilon})_k^{\mathcal{F}}$ 中的积分可用复合梯形公式谱精度逼近。

为简单起见, 我们选取对称区域, 即 $b = -a$ 。卷积核 U_{1D}^ε 是对称函数, 相应的, $I^k(z_l)$ 也具有对称性, 即 $I^k(-z_l) = I^{-k}(z_l) = \overline{I^k(z_l)}$ 。因此仅需计算 $I^k(z_l), k = 0, \pm 1, \dots, \pm(N_z/2 - 1), N_z/2, l = 0, 1, \dots, N_z$ 的部分数值。 $I^k(z_l)$ 中的积分可用复合梯形公式离散并用快速傅立叶变换加速以提升计算效率。

4.4 数值结果分析及面密度模型的应用

基于本章已经提出的快速高精度的等效位势算法, 再结合离散归一化梯度流和时间分裂方法, 我们对三维的薛定谔-泊松方程组和低维退化模型进行了数值研究, 并从基态解和动力学两方面进行了比较分析, 在数值上验证了低维模型对三维薛定谔-泊松方程组的逼近性质及相应的收敛阶。最后应用面密度模型研究了蜂窝状位势下的单层石墨性质, 得到一些有意义的结果。

4.4.1 从三维到二维的数值结果分析

为使记号简单, 本节我们将薛定谔-泊松方程组 (也称为 Schrödinger Poisson Systems) 简记为 SPS。

例 4.1 盘状外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2} [x^2 + y^2 + (\frac{z}{\varepsilon})^2]$ 下三维 SPS 的基态解与二维 SAM 和 SDM 在 $V_{2D} = \frac{1}{2} (x^2 + y^2)$ 下基态解的误差分析。计算中, 二维和三维计算区域分别为 $[-8, 8]^2$ 和 $[-8, 8]^3$ 。记 ϕ_g^{SAM} 、 ϕ_g^{SDM} 、 ϕ_{SP}^g 和 ϕ_g^ε 分别为 SAM、SDM、二维 SPS 和三维 SPS 的基态解。二维模型基态解的初始值取 $\phi_0 = \sqrt{2/\pi} e^{-(x^2+y^2)}$, 三维 SPS 基态解的初始值取 $\phi_g^{SAM}(x, y) \chi_0^\varepsilon(z)$ 。

表 (4.1) 和表 (4.4) 中的基态解误差 $\|\phi_g^\varepsilon - \phi_g^{SAM} \chi_0^\varepsilon\|_{L^2}$ 和 $\|\sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} |\phi_g^\varepsilon|^2 dx dy} - \chi_0^\varepsilon\|_{L^2}$ 随着 ε 减小而减小。表 (4.2) 和表 (4.3) 中的误差 $\|\sqrt{\int_{\mathbb{R}} |\phi_g^\varepsilon|^2 dz} - \phi_g^{SDM}\|_{L^2}$ 和 $\|\sqrt{\int_{\mathbb{R}} |\phi_g^\varepsilon|^2 dz} - \phi_g^{SP}\|_{L^2}$ 随着 ε 减小而减小。本章所有表格中的收敛阶均定义为误差函数关于变量的 ε 的收敛阶数。

表 4.1 例 (4.1) 中不同 β 及 ε 下的误差 $\|\phi_g^\varepsilon - \phi_g^{SAM} \chi_0^\varepsilon\|_{L^2}$ 。

ε	1	1/2	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	1.81E-02	3.80E-03	8.16E-04	8.81E-05	1.21E-05	1.64E-06
收敛阶		2.25	2.22	3.21	2.86	2.88
$\beta = -5$	2.01E-02	4.24E-03	9.98E-04	1.11E-04	1.57E-05	2.17E-06
收敛阶		2.25	2.09	3.17	2.82	2.86

例 4.2 盘状外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2} [x^2 + y^2 + (\frac{z}{\varepsilon})^2]$ 或 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2} (\frac{z}{\varepsilon})^2$ 下, 三维 SPS 在 $T = 1.0$ 时刻的密度函数与二维退化模型在外势 $V_{2D} = \frac{1}{2} (x^2 + y^2)$ 或 $V_{2D} = 0$ 下同一时刻密度函数的误差分析。

计算中, 二维和三维计算区域分别选取为 $[-16, 16]^2$ 和 $[-8, 8]^3$, 初值分别取为 $\psi_{2D}^0 = e^{-(x^2+y^2)/2}$ 和 $\psi_{2D}^0 \chi_0^\varepsilon$ 。SAM、SDM、二维 SPS 和三维 SPS 在 $T = 1.0$ 时刻的波函数分别记为 ψ_{2D}^ε 、 ψ_{2D}^{SDM} 、 ψ_{2D}^{SP} 和 ψ_{3D}^ε 。

表 (4.5) 和 (4.6) 表中的密度函数误差 $\|\int_{\mathbb{R}} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^\varepsilon|^2\|_{L^2}$ 随着 ε 的减小而减小。表 (4.7) - 表 (4.10) 描述了在外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2} [x^2 + y^2 + (\frac{z}{\varepsilon})^2]$ 或 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2} (\frac{z}{\varepsilon})^2$ 下, 不同参数 β 和 ε 所对应的 $T = 1.0$ 时刻密度函数的误差 $\|\int_{\mathbb{R}} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^{SDM}|^2\|_{L^1}$ 和 $\|\int_{\mathbb{R}} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^{SP}|^2\|_{L^1}$ 。

从表 (4.1) - 表 (4.10) 可得到如下结论:

(一) 在盘状外势下, 二维外势下 SAM 和 SDM 的基态解和动力学均收敛到三维 SPS 的基态解和动力学。二维 SAM 到三维 SPS 的收敛阶大致等于 3, 而 SDM 的收敛阶大致等于 1。

(二) 当 z 轴方向的外势逐渐变强时, 三维 SPS 基态解在 z 方向的平均值函数趋近于谐振子的基态解 χ_0^ε 。

(三) 在盘状外势下, 三维的 SPS 并不趋向于二维的 SPS, 其对应的极限方程为 SDM。

注记: 三维 SPS 基态解到 SAM 和 SDM 基态解的收敛阶仅是数值观察结果, 严格的理论证明有待进一步研究。◇

4.4.2 从三维到一维的数值结果分析

例 4.3 雪茄状外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2} [(\frac{y}{\varepsilon})^2 + (\frac{x}{\varepsilon})^2 + z^2]$ 下三维 SPS 的基态解与一维 LAM 在外势 $V_{1D} = \frac{1}{2} z^2$ 下基态解的误差分析。一维 LAM 基态解初始值取 $\phi_0 =$

表 4.2 例 (4.1) 中不同 β 及 ε 下的误差 $\|\sqrt{\int_{\mathbb{R}} |\phi_g^\varepsilon|^2 dz} - \phi_g^{SDM}\|_{L^2}$ 。

ε	1/2	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	2.39E-02	1.45E-02	7.85E-03	4.23E-03	2.25E-03
收敛阶		0.72	0.89	0.89	0.91
$\beta = -5$	2.76E-02	1.75E-02	1.05E-02	5.74E-03	3.06E-03
收敛阶		0.66	0.74	0.87	0.91

表 4.3 例 (4.1) 中不同 β 及 ε 下的误差 $\|\sqrt{\int_{\mathbb{R}} |\phi_g^\varepsilon|^2 dz} - \phi_g^{SP}\|_{L^2}$ 。

ε	1/2	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	6.49E-02	5.57E-02	4.91E-02	4.56E-02	4.37E-02
$\beta = -5$	5.86E-02	4.85E-02	4.16E-02	3.70E-02	3.43E-02

表 4.4 例 (4.1) 中不同 β 及 ε 下的误差 $\|\sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} |\phi_g^\varepsilon|^2 dx dy} - \chi_0^\varepsilon\|_{L^2}$ 。

ε	1	1/2	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	1.79E-02	3.53E-03	5.71E-04	7.85E-05	1.06E-05	1.35E-06
收敛阶		2.34	2.63	2.86	2.89	2.97
$\beta = -5$	1.99E-02	3.94E-03	6.78E-04	9.88E-05	1.37E-05	1.81E-06
收敛阶		2.34	2.54	2.78	2.85	2.92

表 4.5 例 (4.2) 中外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2} \left[x^2 + y^2 + \left(\frac{z}{\varepsilon^2}\right)^2 \right]$ 时, 不同 β 和 ε 所对应的误差 $\|\int_{\mathbb{R}} |\psi_{2D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^\varepsilon|^2\|_{L^1}$ 。

ε	1	1/2	1/4	1/8
$\beta = 5$	1.34E-02	5.67E-03	6.91E-04	8.92E-05
收敛阶		1.48	3.07	2.98
$\beta = -5$	2.07E-02	8.19E-03	1.44E-03	1.39E-04
收敛阶		1.38	2.37	3.25

$\sqrt{2/\pi} e^{-(x^2+y^2)}$, 计算区域为 $[-16, 16]$ 。记一维 LAM 的基态解为 ϕ_g^{LAM} 。表 (4.11) 描述了基态解误差 $\|\phi_g^\varepsilon(x, y, z) - \phi_g^{LAM}(z) \eta_0^\varepsilon(x, y)\|_{L^2}$ 随着 ε 的减小而减小。

例 4.4 雪茄状外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{y}{\varepsilon^2}\right)^2 + \left(\frac{x}{\varepsilon^2}\right)^2 + z^2 \right]$ 下, 三维 SPS 在 $T = 1.0$ 时刻密度函数与一维 LAM 在外势 $V_{1D} = \frac{1}{2} z^2$ 下同一时刻密度函数的误差分析。一

表 4.6 例 (4.2) 中外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(\frac{z}{\varepsilon})^2$ 时, 不同 β 和 ε 所对应的误差 $\|\int_{\mathbb{R}} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^\varepsilon|^2\|_{L^1}$ 。

ε	1	1/2	1/4	1/8
$\beta = 5$	9.11E-03	4.66E-03	5.56E-04	7.66E-05
收敛阶		0.97	3.07	2.87
$\beta = -5$	1.38E-02	6.47E-03	9.62E-04	7.95E-05
收敛阶		1.09	2.75	3.60

表 4.7 例 (4.2) 中外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}[x^2 + y^2 + (\frac{z}{\varepsilon})^2]$ 时, 不同 β 和 ε 所对应的误差 $\|\int_{\mathbb{R}} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^{SDM}|\|_{L^1}$ 。

ε	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	2.63E-01	1.45E-01	7.60E-02	3.90E-02
收敛阶		0.86	0.93	0.96
$\beta = -5$	5.30E-01	3.17E-01	1.77E-01	9.36E-02
收敛阶		0.74	0.85	0.91

表 4.8 例 (4.2) 中外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}[x^2 + y^2 + (\frac{z}{\varepsilon})^2]$ 时, 不同 β 和 ε 所对应的误差 $\|\int_{\mathbb{R}} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^{SP}|\|_{L^1}$ 。

ε	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	7.12E-2	5.72E-2	1.21E-1	1.58E-1
$\beta = -5$	1.16	9.48E-1	8.07E-1	7.24E-1

表 4.9 例 (4.2) 中外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(\frac{z}{\varepsilon})^2$ 时, 不同 β 和 ε 所对应的误差 $\|\int_{\mathbb{R}} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^{SDM}|\|_{L^1}$ 。

ε	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	2.20E-01	1.21E-01	6.35E-02	3.25E-02
收敛阶		0.86	0.93	0.96
$\beta = -5$	4.11E-01	2.43E-01	1.33E-01	6.99E-02
收敛阶		0.76	0.87	0.93

维 LAM 和三维 SPS 的初始值分别为 $\psi_{1D}^0 = e^{-z^2/2}$ 和 $\psi_{1D}^0(z) \eta_0^\varepsilon(x, y)$, 计算区域分别为 $[-16, 16]$ 和 $[-8, 8]^3$ 。记 LAM 的波函数在 $T = 1.0$ 时刻波函数为 ψ_{1D}^ε , 三维 SPS 波函数记为 ψ_{3D}^ε 。表 (4.12) 中密度函数误差 $\|\int_{\mathbb{R}^2} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dx dy - |\psi_{1D}^\varepsilon|^2\|_{L^2}$ 随着 ε 的减小而减小。

表 4.10 例 (4.2) 中外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(\frac{z}{\varepsilon})^2$ 时, 不同 β 和 ε 所对应的误差 $\|\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dz - |\psi_{2D}^{SP}|^2\|_{L^1}$ 。

ε	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	8.49E-01	7.54E-01	6.99E-01	6.69E-01
$\beta = -5$	1.20	1.03	9.26E-01	8.63E-01

表 4.11 例 (4.3) 中不同 β 和 ε 参数下的误差 $\|\phi_g^\varepsilon(x, y, z) - \phi_g^{LAM}(z)\eta_0^\varepsilon(x, y)\|_{L^2}$ 。

ε	$1/\sqrt{5}$	$1/\sqrt{10}$	$1/\sqrt{20}$	$1/\sqrt{40}$
$\beta = 5$	6.66E-03	3.49E-03	1.79E-03	8.97E-04
收敛阶		1.86	1.93	1.99
$\beta = -5$	7.36E-03	4.04E-03	2.19E-03	1.18E-03
收敛阶		1.73	1.77	1.78

表 4.12 例 (4.4) 中不同 β 和 ε 下的误差 $\|\int_{\mathbb{R}^2} |\psi_{3D}^\varepsilon|^2 dx dy - |\psi_{1D}^\varepsilon|^2\|_{L^2}$ 。

ε	$1/\sqrt{4}$	$1/\sqrt{8}$	$1/\sqrt{16}$
$\beta = 5$	2.04E-03	1.27E-03	6.89E-04
$\beta = -5$	2.52E-03	1.71E-03	1.19E-03

从图 (4.11) -图 (4.12) 以及相关计算中, 可知三维 SPS 在雪茄状外势下的基态解和动力学都收敛到一维 LAM 在对应外势下的基态解和动力学。

4.4.3 二维模型的比较

如前所述, 低维退化方程到三维 SPS 的收敛性已经在数值得到了验证, 同时也注意到当 ε 趋向于 0 时, SAM 中等效位势的卷积核是逐点收敛到 SDM 等效位势的卷积核 $\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|}$, 因此可预测随着 ε 趋向于 0, SAM 是趋向于 SDM 的。接下来, 我们从基态解和动力学两方面数值验证上述观察。

例 4.5 在调和外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$ 及不同系数 β 下, SAM、SDM 和二维 SPS 的基态解。基态解的初始猜测值取 $\phi_0 = \sqrt{2/\pi} e^{-(x^2+y^2)}$ 。SAM、SDM 和二维 SPS 的基态解分别记为 ϕ_g^ε 、 ϕ_g^{SDM} 和 ϕ_g^{SP} , 并记误差函数为 $e_g^\varepsilon = \phi_g^\varepsilon - \phi_g^{SDM}$ 。表 (4.13) 列出了 SAM 基态解到 SDM 基态解的误差及其收敛阶数。图 (4.1) 为在不同参数 β 下 SDM 和二维 SPS 基态解在 x 轴的截线。图 (4.2) 为在 $\beta = 50$ 和各向异性

表 4.13 例 (4.5) 中不同 β 和 ε 下的误差 $\|e_g^\varepsilon\|_{l^2}$ 。

ε	1	1/2	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	3.37E-02	2.28E-02	1.38E-02	7.66E-03	4.01E-03	2.01E-03
收敛阶		0.56	0.73	0.85	0.93	1.00
$\beta = -5$	4.01E-02	2.85E-02	1.80E-02	1.04E-02	5.68E-03	2.95E-03
收敛阶		0.50	0.66	0.79	0.88	0.95

表 4.14 例 (4.6) 中不同 β 和 ε 下的误差 $\|e_n^\varepsilon\|_{l^1}$ 。

ε	1	1/2	1/4	1/8	1/16	1/32
$\beta = 5$	5.50E-01	3.67E-01	2.19E-01	1.21E-01	6.35E-02	3.25E-02
收敛阶		0.58	0.75	0.86	0.92	0.97
$\beta = -5$	8.74E-01	6.36E-01	4.12E-01	2.42E-01	1.33E-01	6.99E-02
收敛阶		0.46	0.63	0.77	0.87	0.93

调和外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + 4y^2)$ 及双阱势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + 4y^2) + 8e^{-y^2}$ 下, SDM 和二维 SPS 基态解在 x 轴的截线。

例 4.6 在调和外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$ 及不同参数 β 下, SAM、SDM 和二维 SPS 在固定时刻的动力学数值计算。初始值取为 $\psi_{2d}^0 = e^{-(x^2+y^2)/2}$ 。SAM、SDM 和二维 SPS 在 $T = 1.0$ 的密度函数分别用 n^ε 、 n^{SDM} 、 n^{SP} 表示, 记 $e_n^\varepsilon = n^\varepsilon - n^{\text{SDM}}$ 。表 (4.14) 描述了 SAM 波函数到 SDM 波函数的收敛性及收敛阶。

从表 (4.13) - (4.14), 图 (4.1) - (4.2) 以及相关计算结果中, 可知 SAM 在基态解和动力学上是收敛到 SDM 的并且收敛阶接近于 1。在相互排斥作用 $\beta > 0$ 情形下, 二维 SPS 的排斥作用比 SDM 的排斥作用要强; 在相互吸引作用 $\beta < 0$ 情形下, 二维 SPS 的吸引作用比 SDM 的吸引作用要弱。

4.4.4 面密度模型的应用

本节对 SDM 在不同情形下的基态解和动力学进行了研究。

例 4.7 SDM 在不同条件下的基态解。

情形 I: 固定外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + 4y^2)$ 。表 (4.15) 列出了不同系数 β 下基态解所应的各种量, 其中凝聚宽度 σ_x^g, σ_y^g 分别定义为 $\sigma_x^g = \int_{\mathbb{R}^2} x^2 \phi_g^2 dx dy, \sigma_y^g = \int_{\mathbb{R}^2} y^2 \phi_g^2 dx dy$, 密度函数为 $\rho_g = |\phi_g|^2$ 。

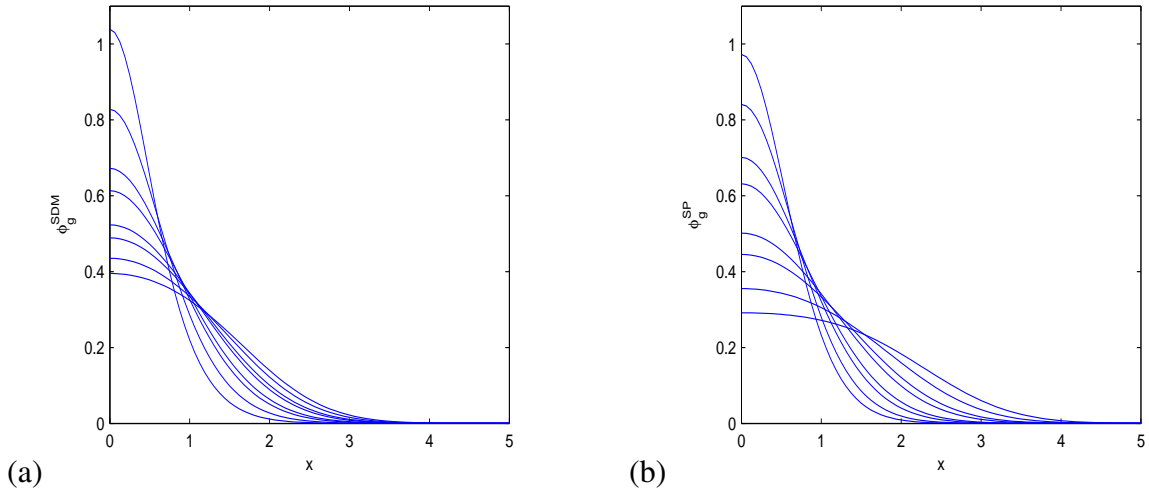


图 4.1 在外势 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$ 及不同参数 $\beta = -30, -20, -10, -5, 5, 10, 20, 30$ (对应的峰值依次减少)下, SDM (左) 和二维 SPS (右) 基态解在 x 轴的截线。

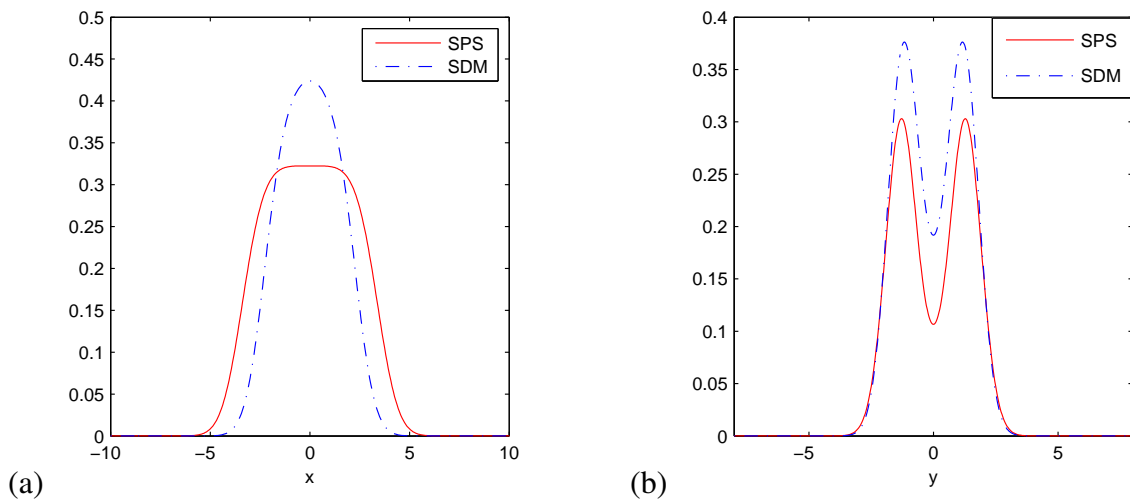
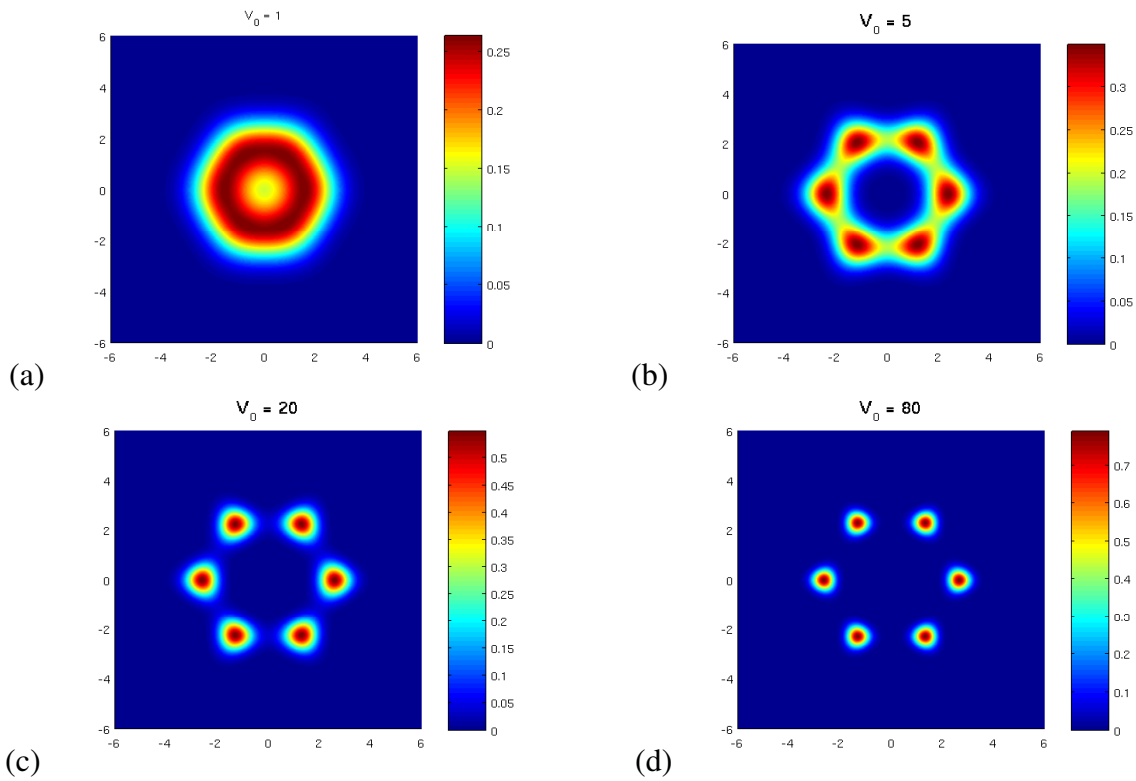


图 4.2 在 $\beta = 50$ 和不同外势 (a) $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + 4y^2)$ 及 (b) $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + 4y^2) + 8e^{-y^2}$ 下的基态解在 x 轴的截线。

表 4.15 在 $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}(x^2 + 4y^2)$ 及不同 β 下, SDM 基态解所对应的各种量。

β	E^s	E_{kin}^s	E_{pot}^s	E_{int}^s	σ_x^s	σ_y^s	$\rho_g(0)$
-50	-2.989	3.554	0.181	-6.723	0.075	0.071	1.619
-10	0.874	0.942	0.604	-0.672	0.353	0.214	0.784
-5	1.198	0.834	0.676	-0.312	0.423	0.233	0.723
5	1.783	0.684	0.824	0.274	0.582	0.266	0.627
10	2.050	0.634	0.896	0.520	0.668	0.281	0.589
50	3.830	0.442	1.432	1.956	1.356	0.377	0.424


 图 4.3 不同 V_0 时 SDM 基态解的等值线图。

情形 II: 蜂窝状外势^[103]: $V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}|\mathbf{x}|^2 + V_0(\cos(\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{x}) + \cos(\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{x}) + \cos((\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{x}))$ 其中 $\mathbf{b}_1 = \frac{\pi}{4}(\sqrt{3}, 1)$, $\mathbf{b}_2 = \frac{\pi}{4}(-\sqrt{3}, 1)$, $\mathbf{x} = (x, y)$, V_0 为可调参数。表 (4.3) 画出了 $\beta = 5$ 时不同参数 V_0 下的基态解等值线图。

例 4.8 SDM 的动力学研究。初始值取为 $\psi_0 = e^{-(x^2+y^2)/2}$ 。晶格势为 $V_{\text{ext}} = 10(\sin(\pi x)^2 + \sin(\pi y)^2)$, 蜂窝势为 $V_{\text{ext}} = 10(\cos(\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{x}) + \cos(\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{x}) + \cos((\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{x}))$ 其中 $\mathbf{b}_1 = \frac{\pi}{4}(\sqrt{3}, 1)$, $\mathbf{b}_2 = \frac{\pi}{4}(-\sqrt{3}, 1)$ 。图 (4.4) 和图 (4.5) 分别为晶格势和蜂窝势下 SDM 在不同时刻密度函数等值线图。

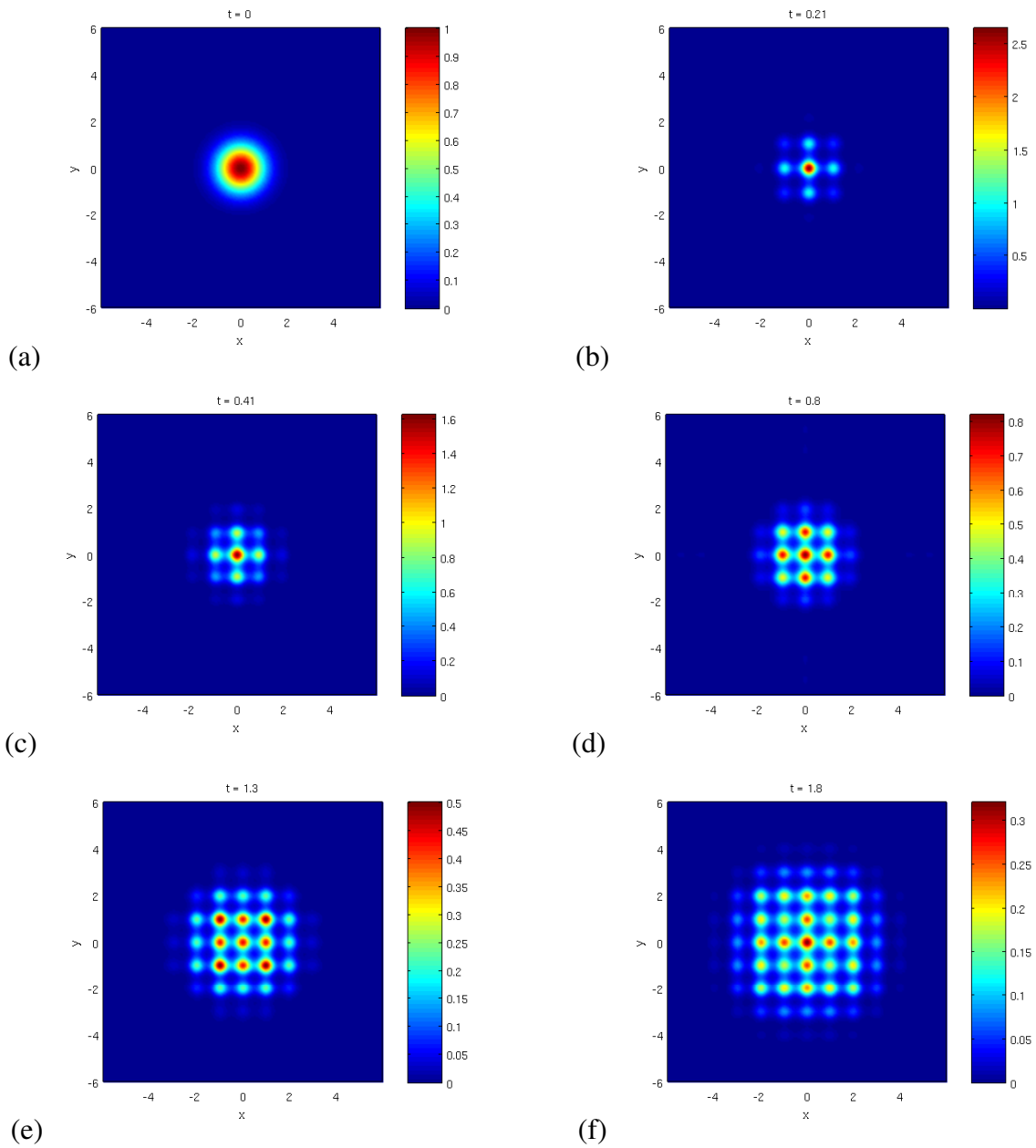


图 4.4 晶格势下 SDM 不同时刻密度函数的等值线图。

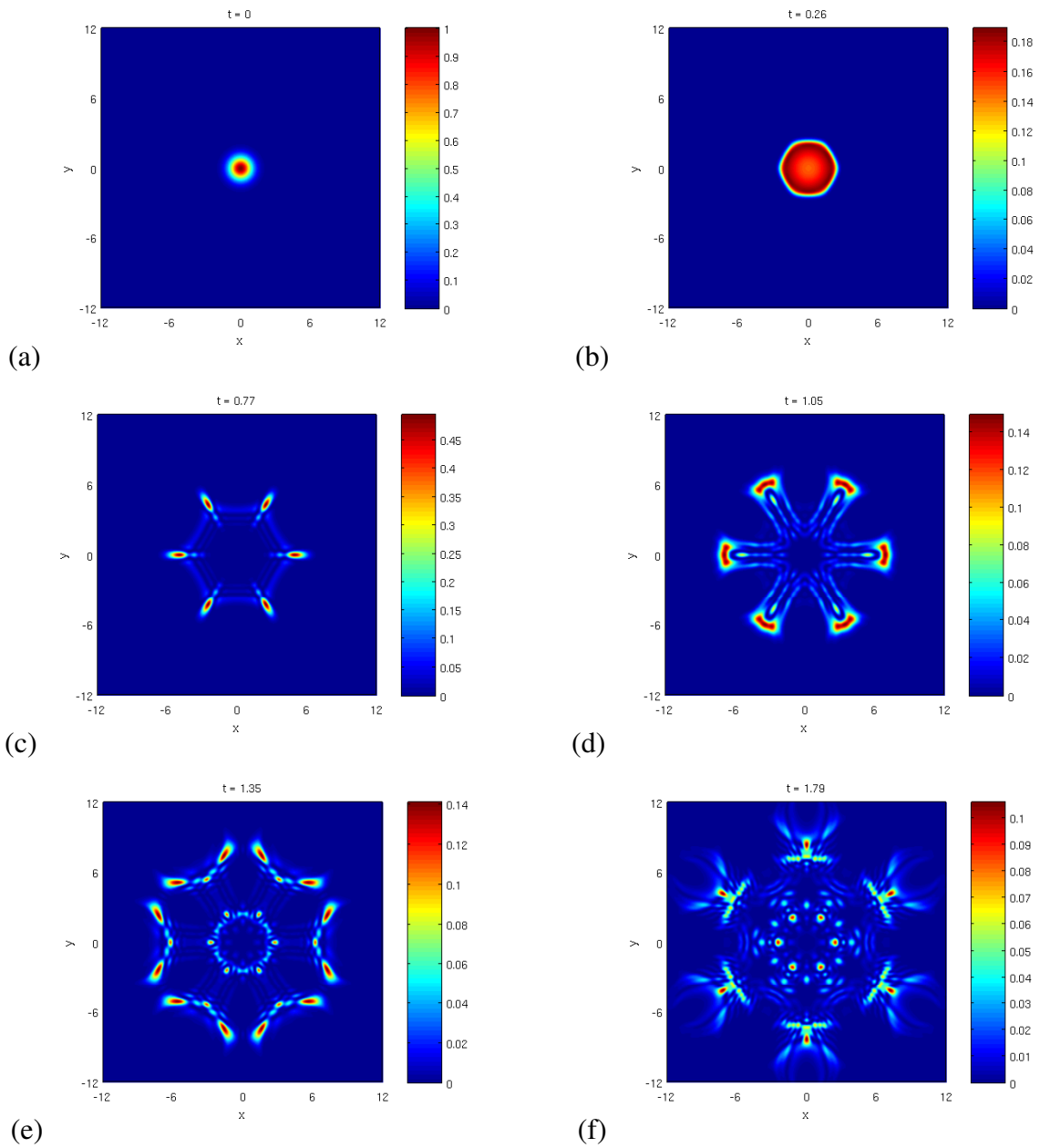


图 4.5 蜂窝势下 SDM 在不同时刻的密度函数等值线图。

4.5 本章小结

本章我们给出了三维薛定谔-泊松方程组在各向异性外势下的降维分析，得到二维面绝热模型，二维面密度模型和一维线绝热模型，并指出了二维面密度模型是描述二维束缚电子的合适模型，其中束缚电子的相互作用位势用 Laplace 平方根算子逆来描述。接着，我们给出了低维退化模型里等效外势的快速高精度算法，结合向后欧拉谱方法计算基态解，结合时间分裂谱方法计算动力学。最后，从基态解和动力学两方面数值验证了降维分析的合理性和收敛阶数，同时从数值上分析比较了面密度模型与二维薛定谔-泊松方程的区别。最后研究了二维面密度模型在不同参数下基态和动力学性质。

第 5 章 结论

5.1 论文主要工作和总结

本文主要做了三方面的工作。

第一，我们系统研究了薛定谔-泊松方程组基态和动力学的快速高精度数值算法，并指出了傅立叶谱方法在求解泊松方程时因 0 模不相容性所导致的精度丢失现象。二维泊松位势无法在矩形区域有效求解，我们基于人工边界方法，提出了有限圆盘上的有限差分与傅立叶谱方法相结合的逼近算法。我们对各种算法从基态和动力学两方面进行了比较分析，最后应用向后欧拉正弦谱方法和时间分裂谱方法研究了三维薛定谔-泊松方程组的基态和动力学性质。

第二，我们提出了守恒 Crank-Nicolson 紧致差分格式和半隐紧致差分格式，并在一定正则性假设下，证明了两种格式在 l^2 、 H^1 和 l^∞ 范数下的最优误差估计 $O(h^4 + \tau^2)$ ，其中 h 和 τ 分别为空间步长和时间步长。

第三，我们研究了三维薛定谔-泊松方程组在各向异性外势下的降维分析，并给出了低维退化模型里等效位势的快速高精度算法。我们将等效位势算法与梯度流方法和时间分裂谱方法相结合分别计算了不同模型的基态解和动力学，并数值验证了降维的合理性及低维退化模型对原三维薛定谔-泊松方程组的收敛阶。

5.2 研究发展趋势

薛定谔-泊松方程组在半导体、量子化学和纳米材料等领域都有广泛应用，所涉及的问题复杂多样，其中严格的数学分析和快速高精度的数值模拟都是必需。针对本文涉及的课题，三维薛定谔-泊松方程组在柱对称外势和球对称外势下的数值研究仍是有意义的，在磁外势下三维薛定谔-泊松方程组的降维分析也是值得研究的。

参考文献

- [1] Hartree D. The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part I. Theory and methods. Proc. Camb. Phil. Soc. 1928,24:89-312.
- [2] Lions P.L. Solution of Hartree-Fock equations for Coulomb systems. Comm. Math. Phys. 1987,109:33-97.
- [3] Fock V. Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. Z. Phys. 1930,61:126-148.
- [4] Slater J.C. Note on Hartree's method. Phys. Rev. 1930,35:210-211.
- [5] Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Phys. Rev. A 1965,140:4743-4754.
- [6] Dreizler R.M., Gross E.K.U. Density Functional Theory. Berlin: Springer, 1990.
- [7] Parr R.G., Yang Weitao. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford: Clarendon Press, 1994.
- [8] Dai Xiaoying, Gong Xingao, Yang Zhang, et al. Finite volume discretizations for eigenvalue problems with applications to electronic structure calculations. Multiscale Model. Simul. 2011,9(1):208-240.
- [9] Slater J.C. A simplification of the Hartree-Fock method. Phys. Rev. 1951,81:385-390.
- [10] Dirac P.A.M. Note on exchange phenomena in the Thomas-Fermi atom. Proc. Cambridge Philos. Soc. 1931,26:376-385.
- [11] Angelescu N., Pulvirenti M., Teta A. Derivation and classical limit of a mean field equation for a quantum Coulomb system: Maxwell-Boltzmann statistics. J. Stat. Phys. 1994,74(1/2).
- [12] Bardos C., Erdős L., Golse F., Mauser N.J., et al. Derivation of the Schrödinger-Poisson equation from the quantum N -particle Coulomb problem. C. R. Math. Acad. Sci. Paris 2002,334(6):515-520.
- [13] Bardos C., Golse F., Mauser N.J. Mean field dynamics of fermions and the time-dependent Hartree-Fock equation. J. d. Mathématiques Pures et Appl. 2003,82:665-683.
- [14] Bardos C., Gottlieb A., Golse F., et al. Derivation of the time-dependent Hartree-Fock equation: the Coulomb interaction case. manuscript.
- [15] Lieb E.H. Thomas-Fermi and related theories of atoms and molecules. Rev. Mod. Phys. 1981,55:603-641.
- [16] Lieb E.H., Simon B. The Thomas-Fermi theory of atoms, molecules, and solids. Adv. Math. 1977,23:22-116.
- [17] Bokanowski O., Grébert B., Mauser N.J. Local density approximation for the energy of a periodic Coulomb model. Math. Models Methods Appl. Sci. 2003,13(8):1185-1217.
- [18] Bokanowski O., Mauser N.J. Local approximation for the Hartree-Fock exchange potential: a deformation approach. Math. Models Methods Appl. Sci. 1999,9(6): 941-961.

-
- [19] Mauser N.J. The Schrödinger-Poisson- X^α equation. *Appl. Math. Lett.* 2001,14:759-763.
- [20] Bourgain J. Global solutions of nonlinear Schrödinger equations. Providence: AMS, 1999.
- [21] Cazenave T. Semilinear Schrödinger equations. Providence: AMS, 2003.
- [22] Sulem C., Sulem P.-L. The nonlinear Schrödinger equation: self-focusing and wave collapse. New York: Springer, 1999.
- [23] Bokanowski O., López J.L., Soler J. On a exchange interaction model for quantum transport: The Schrödinger-Poisson-Slater system. *Math. Model Methods Appl. Sci.* 2003,12(10):1397-1412.
- [24] Masaki S. Local Existence and WKB approximation of solutions to Schrödinger-Poisson system in the two-dimensional whole space. *Comm. Partial Differential Equations.* 2010,35:2253-2278.
- [25] Masaki S. Energy solution to Schrödinger-Poisson system in the two-dimensional whole space. manuscript.
- [26] Steinrück H. The one-dimensional Wigner-Poisson problem and its relation to the Schrödinger-Poisson problem. *SIAM J. Math. Anal.* 1991,22:957-972.
- [27] De Leo M., Rial D. Well posedness and smoothing effect of Schrödinger-Poisson equation. *J. Math. Phys.* 2007,48:093509.
- [28] Stimming H.P. The IVP for the Schrödinger-Poisson- X^α equation in one dimension. *Math. Models Methods Appl. Sci.* 2005,15:1169-1180.
- [29] Lieb E.H. Existence and uniqueness of the minimizing of Choquards' nonlinear equation. *Stud. Appl. Math.*, (1976/77),57:93-105.
- [30] Choquard P., Stubbe J., Vuffray M. Stationary solutions of the Schrödinger-Newton Model-An ODE approach. *Differential Integral Equations* 2008,21:665-679.
- [31] Choquard P., Stubbe J. The one-dimensional Schrödinger-Newton equations. *Lett. Math. Phys.* 2007,81:177-184.
- [32] De Leo M. On the existence of ground states for nonlinear Schrödinger-Poisson equation. *Nonlinear Anal.* 2010,73:979-986.
- [33] Stubbe J. Bound states of two-dimensional Schrödinger-Newton equations. arXiv:0807.4059.
- [34] Sánchez Ó., Soler J. Long-time dynamics of the Schrödinger-Poisson-Slater systems. *J. Stat. Phys.* 2004,114:179-204.
- [35] Bao Weizhu, Jin Shi, Markowich P.A. Time-splitting spectral approximations for the Schrödinger equation in the semiclassical regime. *J. Comput. Phys.* 2002,175:487-524.
- [36] Dion C.M., Cancés E. Spectral method for the time-dependent Gross-Pitaevskii equation with a harmonic trap. *Phys. Rev. E* 2003,67:046706.
- [37] Chang Qianshun, Guo Boling, Jiang Hong. Finite difference method for generalized Zakharov equation. *Math. Comp.* 1995,64:537-553.
- [38] Chang Qianshun, Jia Erhui, Sun W. Difference schemes for solving the generalized nonlinear Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.* 1999,148:397-415.

-
- [39] Galssey R.T. Convergence of an energy-preserving scheme for the Zakharov equations in one space dimension. *Math. Comp.* 1992,97:83-102.
- [40] Wang Tingchun. Maximum norm error bound of a linearized difference scheme for a coupled nonlinear Schrödinger equations. *J. Comput. Appl. Math.* 2011,235:4237-4250.
- [41] Soba A. A finite element method solver for time-dependent and stationary Schrödinger equations with a generic potential. *Commun. Comput. Phys.* 2009,5:914-927.
- [42] Sanz-Serna J.M. Methods for the numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation. *Math. Comp.* 1984,43:21-27.
- [43] Taha T.R., Ablowitz M.J. Analytical and numerical aspects of certain nonlinear evolution equations. II. Numerical, nonlinear Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.* 1984,55:203-230.
- [44] Karakashian O., Akrivis G.D., Dougalis V.A. On optimal order error estimates for the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM J. Numer. Anal.* 1993,30:377-400.
- [45] Bao Weizhu, Jin Shi, Markowich P.A. Numerical studies of time-splitting spectral discretizations of nonlinear Schrödinger equations in the semiclassical regime. *SIAM J. Sci. Comput.* 2003,25:27-64.
- [46] Bao Weizhu, Mauser N.J., Stimming H.P. Effective one particle quantum dynamics of electrons: A numerical study of the Schrödinger-Poisson- $X\alpha$ model. *Commun. Math. Sci.* 2003,1:809-831.
- [47] Lubich C. On splitting methods for Schrödinger-Poisson and cubic nonlinear Schrödinger equations. *Math. Comp.* 2008,77:2141-2153.
- [48] Gauckler L., Lubich C. Splitting integrators for nonlinear Schrödinger equations over long times. *Found. Comput. Math.* 2010,10:275-302.
- [49] Han Houde, Huang Zhongyi. Exact artificial boundary conditions for the Schrödinger equation in \mathbb{R}^2 . *Commun. Math. Sci.* 2004,2:79-94.
- [50] Ehrhardt M., Zisowsky A. Fast calculation of energy and mass preserving solutions of Schrödinger-Poisson systems on unbounded domains. *J. Comput. Appl. Math.* 2006,187:1-28.
- [51] Ringhofer C., Soler J. Discrete Schrödinger-Poisson systems preserving energy and mass. *Appl. Math. Lett.* 2000,13:27-32.
- [52] Edwards M., Burnett K. Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation for small samples of trapped neutral atoms. *Phys. Rev. A* 1995,51:1382-1386.
- [53] Chiofalo M.L., Succi S., Tosi M.P. Ground state of trapped interacting Bose-Einstein condensates by an explicit imaginary-time algorithm. *Phys. Rev. E* 2000,62:7438-7444.
- [54] Bao Weizhu, Tang Weijun. Ground-state solution of Bose-Einstein condensate by directly minimizing the energy functional. *J. Comput. Phys.* 2003,187:230-254.
- [55] Bao Weizhu, Du Qiang. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow. *SIAM J. Sci. Comput.* 2004,25:1674-1697.
- [56] Bao Weizhu, Chern I-L., Lim F.Y. Efficient and spectrally accurate numerical methods for computing ground and first excited states in Bose-Einstein condensates. *J. Comput. Phys.* 2006,219:836-854.

- [57] Bao Weizhu, Cai Yongyong, Wang Hanquan. Efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates. *J. Comput. Phys.* 2010,229:7874-7892.
- [58] Tan I.H., Snider G.L., Chang L.D., et al. A self-consistent solution of Schrödinger-Poisson equations using a nonuniform mesh. *J. Appl. Phys.* 1990,68:4071-4076.
- [59] Cheng Candong, Liu Qinghuo, Lee Joon-Ho, et al. Spectral element method for the Schrödinger-Poisson system. *J. Comput. Electron.* 2004,3:417-421.
- [60] Cheng Candong, Lee Joon-Ho, Massoud H.Z., et al. 3-D self-consistent Schrödinger-Poisson solver: the spectral element method. *J. Comput. Electron.* 2008,7:337-341.
- [61] Harrison R., Moroz I.M., Tod K.P. A numerical study of Schrödinger-Newton equations. *Nonlinearity.* 2003,16:101-122.
- [62] Zhang Jun. Multigrid method and fourth-order compact scheme for 2D Poisson equation with unequal mesh-size discretization. *J. Comput. Phys.* 2002,179:170-179.
- [63] Shukla R.K., Zhong Xiaolin. Derivation of high-order compact finite difference schemes for non-uniform grid using polynomial interpolation. *J. Comput. Phys.* 2005,204:404-429.
- [64] Wang Jie, Zhong Weijun, Zhang Jun. A general meshsize fourth-order compact difference discretization scheme for 3D Poisson equation. *Appl. Math. Comput.* 2006,183:804-812.
- [65] Wang Yin, Zhang Jun. Sixth order compact scheme combined with multigrid method and extrapolation technique for 2D poisson equation. *J. Comput. Phys.* 2009,228:137-146.
- [66] Xie Shusen, Li Guangxing, Yi Sucheol. Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 2009,198:1052-1060.
- [67] Sutmann C. Compact finite difference schemes of sixth order for the Helmholtz equation. *J. Comput. Appl. Math.* 2007,203:15-31.
- [68] Shukla R.K., Tatineni M., Zhong Xiaolin. Very high-order compact finite difference schemes on non-uniform grids for incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.* 2007,224:1064-1094.
- [69] Polizzi E., Abdallah N.B. Self-consistent three-dimensional models for quantum ballistic transport in open systems. *Phys. Rev. A* 2002,66:245301.
- [70] Abdallah N.B., Méhats F., Pinaud O. Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement. *SIAM J. Math. Anal.* 2005,36:986-1013.
- [71] Pinaud O. Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement: The stationary case. *J. Math. Phys.* 2004,45:2029-2050.
- [72] Abdallah N.B., Castella F., Delebecque-Fendt F., et al. The strongly confined Schrödinger-Poisson system for the transport of electrons in a nanowire. *SIAM J. Appl. Math.* 2009,69:1162-1173.
- [73] Cai Yongyong, Senkranz M., Lei Zhen, et al. Mean-field regime of trapped dipolar Bose-Einstein condensates in one and two dimensions. *Phys. Rev. A* 2010,82:043623.

-
- [74] Bao Weizhu, Ge Yunyi, D. Jacksch, et al. Convergence rate of dimension reduction in Bose-Einstein condensates. *Comput. Phys. Commun.* 2007,177(11):832-850.
- [75] Shen Jie, Tang Tao. *Spectral and High-Order Methods with Applications*. Beijing: Science Press, 2006.
- [76] Dong Xuanchun. A short note on simplified pseudospectral methods for computing ground state and dynamics of spherically symmetric Schrödinger-Poisson-Slater system. *J. Comput. Phys.* 2011,230:7917-7922.
- [77] Lai M.-C., Wang W.-C. Fast direct solvers for Poisson equation on 2D polar and spherical geometries. *Numer. Methods Partial Differential Equations*. 2002,18:56-68.
- [78] Lai M.-C., Lin W.-W., Wang W. A fast spectral/difference method without pole conditions for Poisson-type equations in cylindrical and spherical geometries. *IMA J. Numer. Anal.* 2002,22:537-548.
- [79] Shen Jie. Efficient spectral-Galerkin methods III: Polar and cylindrical geometries. *SIAM J. Sci. Comput.* 1997,18(6):1583-1604.
- [80] Strang G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.* 1968,5:505-517.
- [81] Zhang Yong. Optimal error estimates of compact finite difference discretizations for the Schrödinger-Poisson system. preprint.
- [82] Yarvin N., Rokhlin V. An improved fast multipole algorithm for potential fields on the line. *SIAM J. Numer. Anal.* 1999,36:629-666.
- [83] Ethridge F., Greengard L. A new fast-multipole accelerated Poisson solver in two dimensions. *SIAM J. Sci. Comput.* 2001,23(3):741-760.
- [84] Cheng H., Greengard L., Rokhlin V. A fast adaptive multipole algorithm in three dimensions. *J. Comput. Phys.* 1999,155:468-498.
- [85] Greengard L., Rokhlin V. A new version of the fast multipole method for the Laplace equation in three dimensions. *Acta Numerica*. 1997,6:229-269.
- [86] Zhao Degang, Huang Jingfang, Xiang Yang. A new version fast multipole method for evaluating the stress field of dislocation ensembles. *Model. Simul. Sci. Eng. Technol.* 2010,18(4):45006-45022.
- [87] Greengard L., Rokhlin V. A fast algorithm for particle simulations. *J. Comput. Phys.* 1987,73:325-348.
- [88] Hrycak T., Rokhlin V. An improved fast multipole algorithm for potential fields. *SIAM J. Sci. Comput.* 1998,19:1804-1826.
- [89] Yoshida K.I. *Applications of fast multipole method to boundary integral equation method[D]*. Japan: Kyoto University, 2001.
- [90] Genovese L., Deutsch T., Neelov A., et al. Efficient solution of Poisson equation with free boundary conditions. *J. Comput. Chem.* 2006,125:074105.
- [91] Bao Weizhu, Du Qiang, Zhang Yanzhi. Dynamics of rotating Bose-Einstein condensates and its efficient and accurate numerical computation. *SIAM J. Appl. Math.* 2006,66(3):758-786.

-
- [92] Bao Weizhu, Tang Qinglin. Numerical study of quantized vortex interaction in Ginzburg-Landau equation on bounded domains. preprint.
- [93] Lai M.-C. A simple compact fourth-order Poisson solver on polar geometry. *J. Comput. Phys.* 2002,182:337-345.
- [94] Chen Heli, Su Yuhong, Shizgal B.D. A direct spectral collocation Poisson solver in polar and cylindrical coordinates. *J. Comput. Phys.* 2000,160:453-469.
- [95] Fornberg B. A pseudospectral approach for polar and spherical geometries. *SIAM J. Sci. Comput.* 1995,16(5):1071-1081.
- [96] Bao Weizhu, Cai Yongyong. Optimal error estimate of finite difference methods for the Gross-Pitavskii equation with angular momentum rotation. *Math. Comp.*, to appear.
- [97] Larsson S., Thomée V. *Partial differential equations with numerical methods*. New York: Springer, 2009.
- [98] Landes R. On Galerkin's method in the existence theory of quasilinear elliptic equations. *J. Funct. Anal.* 1980,39:123-148.
- [99] Zhang Yong, Dong Xuanchun. On the computation of ground state and dynamics of Schrödinger-Poisson-Slater system. *J. Comput. Phys.* 2011,230:2660-2676.
- [100] Gimbutas Z., Greengard L., Minion M. Coulomb interactions on planar structures: inverting the square root of the Laplacian. *SIAM J. Sci. Comput.* 2001,22:2093-2108.
- [101] Abdallah N.B., Méhats F., Schmeiser C., et al. The nonlinear Schrödinger equation with a strongly anisotropic harmonic potential. *SIAM J. Math. Anal.* 2005,37:189-199.
- [102] Cabré X., Tan Jिंगgang. Positive solutions of nonlinear problems involving the square root of the Laplacian. *Adv. Math.* 2010,224:2052-2093.
- [103] Chen Zhu, Wu Biao. Bose-Einstein condensate in a honeycomb optical lattice: fingerprint of superfluidity at the dirac point. *Phys. Rev. Lett.* 2011,107(6):065301.

致 谢

衷心感谢我的两位导师包维柱教授和简怀玉教授五年来对我悉心细致的指导和无私关怀，他们为我的成长倾注了大量心血。

简老师渊博的学识，严谨认真的科研态度和刻苦勤奋的工作精神，启蒙了我的学术理想，积极乐观的生活态度让我深受影响并备受鼓舞。在师从包老师学习计算的四年时光中，包老师给了我极其耐心细致的指导，宝贵的建议和慷慨无私的资助，无论是在新加坡留学还是回清华学习，包老师的鼓励与支持是我进步的巨大动力。从两位恩师身上学到了很多为人处事的道理，这将是受用一生的宝贵财富。

感谢我的合作者董选春，Norbert Mauser 教授，特别感谢刘小林和董选春阅读了本文的初稿，并提出了许多宝贵建议。感谢黄京芳教授在快速多极算法上对我耐心细致的指导并给予许多宝贵建议。感谢曾嵘教授、庄池杰师兄和李志钊同学在防雷数值模拟中对我的支持和帮助。感谢我的师姐、师兄、师弟和朋友们在生活和学习上的关心和帮助！

深深感谢养育我多年的父母，他们含辛茹苦，给予我无私伟大和深沉浓厚的爱。感谢我的姐姐、弟弟，是他们为家庭的付出让我能安心专心完成我的博士学术生涯。

声 明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

签 名：_____ 日 期：_____

个人简历、在学期间发表的学术论文与研究成果

个人简历

1984年8月13日出生于河北省定州市。

2003年9月考入天津大学理学院数学与应用数学专业，

2007年7月本科毕业并获得理学学士学位。

2007年9月免试进入清华大学数学科学系攻读博士学位至今。

2009年9月到2010年9月在新加坡国立大学数学系联合培养一年。

目前已正式发表的论文

- [1] Zhang Yong, Dong Xuanchun. On the computation of ground state and dynamics of Schrödinger-Poisson-Slater system. *J. Comput. Phys.*, 2011,230(7):2660-2676. (SCI)

目前已正式接收的论文

- [1] Zhang Yong. Optimal error estimates of compact finite difference discretizations for the Schrödinger-Poisson system. *Commun. Comput. Phys.*(SCI)