

## 非线性薛定谔方程的高阶分裂改进光滑粒子动力学算法

蒋涛 黄金晶 陆林广 任金莲

### Numerical study of nonlinear Schrödinger equation with high-order split-step corrected smoothed particle hydrodynamics method

Jiang Tao Huang Jin-Jing Lu Lin-Guang Ren Jin-Lian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 090203 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190169

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190169>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

广义非线性薛定谔方程描述的波坍缩及其演变

Collapse and evolution of wave field based on a generalized nonlinear Schrödinger equation

物理学报. 2016, 65(4): 040201 <https://doi.org/10.7498/aps.65.040201>

聚合物充模过程的基于高阶Taylor展开的改进光滑粒子动力学模拟

Simulation of polymer filling process by an improved smoothed particle hydrodynamics method based on higher-order Taylor expansion

物理学报. 2016, 65(22): 220202 <https://doi.org/10.7498/aps.65.220202>

充模过程中熔接痕的改进光滑粒子动力学方法模拟与预测

Simulation and prediction of the weld-line in the filling process using a corrected smoothed particle hydrodynamics method

物理学报. 2015, 64(8): 080202 <https://doi.org/10.7498/aps.64.080202>

微液滴振荡过程的光滑粒子动力学方法数值模拟

Numerical simulation on oscillation of micro-drops by means of smoothed particle hydrodynamics

物理学报. 2015, 64(13): 134702 <https://doi.org/10.7498/aps.64.134702>

一种新型光滑粒子动力学固壁边界施加模型

A new boundary treatment method in smoothed particle hydrodynamics

物理学报. 2015, 64(9): 094701 <https://doi.org/10.7498/aps.64.094701>

自由上浮气泡运动特性的光滑粒子流体动力学模拟

Numerical simulation on the motion characteristics of freely rising bubbles using smoothed particle hydrodynamics method

物理学报. 2015, 64(17): 174701 <https://doi.org/10.7498/aps.64.174701>

# 非线性薛定谔方程的高阶分裂改进 光滑粒子动力学算法\*

蒋涛 黄金晶 陆林广 任金莲†

(扬州大学数学科学学院, 水利与能源动力工程学院, 扬州 225002)

(2019年1月29日收到; 2019年2月24日收到修改稿)

为提高传统光滑粒子动力学 (SPH) 方法求解高维非线性薛定谔 (nonlinear Schrödinger/Gross-Pitaevskii equation, NLS/GP) 方程的数值精度和计算效率, 本文首先基于高阶时间分裂思想将非线性薛定谔方程分解成线性导数项和非线性项, 其次拓展一阶对称 SPH 方法对复数域上线性导数部分进行显式求解, 最后引入 MPI 并行技术, 结合边界施加虚粒子方法给出一种能够准确、高效地求解高维 NLS/GP 方程的高阶分裂修正并行 SPH 方法. 数值模拟中, 首先对带有周期性和 Dirichlet 边界条件的 NLS 方程进行求解, 并与解析解做对比, 准确地得到了周期边界下孤立波的奇异性, 且对提出方法的数值精度、收敛速度和计算效率进行了分析; 随后, 运用给出的高阶分裂粒子方法对复杂二维和三维 NLS/GP 问题进行了数值预测, 并与其他数值结果进行比较, 准确地展现了非线性孤立波传播中的奇异现象和玻色-爱因斯坦凝聚态中带外旋转项的量子涡旋变化过程.

**关键词:** 非线性薛定谔方程, 光滑粒子动力学, 时间分裂, 玻色-爱因斯坦凝聚态

**PACS:** 02.60.-x, 02.70.-c, 03.65.Ge

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190169

## 1 引言

众所周知, 非线性薛定谔方程 (nonlinear Schrödinger/Gross-Pitaevskii equation, NLS/GP) 常被用来描述一些非线性物理特性, 例如: 晶体中热脉冲、非线性光学、等离子和量子动力学现象等<sup>[1-5]</sup>. NLS/GP 方程的研究涉及复杂非线性项和外部旋转导数项, 导致孤立波值随时间变化过程在许多情况下难以用理论手段<sup>[6-8]</sup>精确地得到. 已有许多数值方法被提出用于对高维 NLS/GP 方程进行模拟, 比如分裂格式有限差分法、有限元法、时间伪谱法、修正欧拉算法、蒙特卡罗法和无网格方

法等<sup>[3-14]</sup>, 然而上述方法属于网格类或是基于背景网格, 对非均匀节点布置下或高维复杂区域问题的模拟实现都较复杂<sup>[15-18]</sup>. 为此已有许多学者对完全不依赖于网格的粒子方法 (或纯无网格方法) 进行了关注, 并成功将粒子方法推广应用到实数域上偏微分方程的求解, 如光滑粒子动力学 (smoothed particle hydrodynamics, SPH) 方法<sup>[15-25]</sup>等. 然而上述纯无网格方法对非线性薛定谔方程的研究还处于起步阶段, 特别对高维复杂 GP 方程的研究在国际上尚不多见.

作为完全不依赖于网格的 SPH 粒子方法, 在高维非线性薛定谔方程上的模拟应用还处在初步研究阶段<sup>[15]</sup>, 其原因在于传统 SPH 方法的数值精

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11501495, 51779215)、中国博士后科学基金 (批准号: 2015M581869, 2015T80589)、江苏省自然科学基金 (批准号: BK20150436)、国家科技支撑计划 (批准号: 2015BAD24B02-02)、江苏高校品牌专业建设工程 (批准号: PPZY2015B109) 和江苏省大学生科技创新项目 (批准号: 201611117016Z) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: rjl20081223@126.com

度低、稳定性差 [16–19,20–22]. SPH 方法精度和稳定性的改进与高维非线性薛定谔方程的数值研究是国际上的两个热点问题. 针对 SPH 方法数值精度的提高, 已有一些改进 SPH 方法 [16–19,21–25] 被提出, 并被应用于许多领域 [16–25], 但它们仍存在一些自身缺陷, 因此当推广应用到非线性薛定谔方程的模拟时需要进一步改进. 粒子方法模拟高维 NLS/GP 方程较网格类方法的主要优势在于: 不依赖于网格可以任意布点; 便于处理复杂区域和计算空间导数; 模拟程序易于实现, 并且便于实施并行计算以提高计算效率.

基于上述分析, 本文针对含有非线性项和旋转导数项高维 NLS/GP 方程的准确、高效性粒子法模拟给出一种四阶分裂修正并行 SPH (HSS-CPSPH) 方法. 提出的 HSS-CPSPH 方法思想主要来源于: 首先, 采用分裂思想将 NLS 方程分解为线性导数项和非线性项两个微分方程; 其次, 基于 Taylor 展开拓展应用文献 [17, 21] 中修正 SPH 方法对含线性导数方程进行二阶精度显式求解; 再次, 运用四阶对称分裂格式对上述两个方程进行积分离散; 最后引入基于粒子搜索的 MPI 并行技术提高计算效率. 给出的 HSS-CPSPH 方法将兼具传统 SPH 方法和已有改进 SPH 以及分裂格式的优点, 也较已有分裂有限差分法 [6–8] 具有更好、更灵活的模拟应用性. 在数值算例模拟中, 将 HSS-CPSPH 方法的数值结果与解析解或其他数值结果进行了比较, 分析了数值精度、收敛阶和计算效率. 比较分析结果表明, 给出的 HSS-CPSPH 方法可以准确、高效地求解周期和 Dirichlet 边界条件下二维或三维 NLS/GP 方程, 并能成功地预测二分量子孤立波传播中的非线性奇异特性和带外旋转算子下量子涡旋的复杂变化过程.

## 2 非线性薛定谔/Gross-Pitaevskii 方程

量子力学中许多非线性物理现象常用 Gross-Pitaevskii (GP) 方程 [3,4,6,7] 来描述, 其高维直角坐标系下无量纲化的控制方程为

$$i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta \phi + V_d(\mathbf{x}, t) \phi + \beta_d |\phi|^2 \phi - \Omega L_z \phi, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^d, t \geq 0, \quad (1)$$

其中  $i = \sqrt{-1}$  为虚数单位;  $\Delta$  是拉普拉斯算子;  $\phi$  为待求的  $d$  维复数域上的函数 ( $d = 1, 2, 3$ );  $\mathbf{x} = x$  或  $(x, y)$  或  $(x, y, z)$ ; 无量纲实常数  $\beta_d$  常常用来描述三次非线性项  $|\phi|^2 \phi$  的相互作用强度;  $V_d$  是势函数,

$$V_d(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{2} x^2, & d = 1, \\ (x^2 + \gamma_y^2 y^2) / 2, & d = 2, \\ (x^2 + \gamma_y^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2) / 2, & d = 3, \end{cases} \quad (2)$$

$\gamma_y, \gamma_z$  是实常数;  $L_z = -i(x\partial_y - y\partial_x)$  是玻色-爱因斯坦凝聚态 (Bose-Einstein condensates, BEC) 下无量纲速度旋转项  $\Omega$  的角动量算符的  $z$  分量.

为封闭上述方程, 考虑如下初始条件:

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^d, \quad (3)$$

边界条件

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \phi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad t \geq 0, \quad (4)$$

或周期边界条件  $\phi(x, t) = \phi(x + l, t)$ , 其中  $l$  表示方程周期, 或  $\phi(x, y, t) = \phi(x + l_1, y, t)$ ,  $\phi(x, y, t) = \phi(x, y + l_2, t)$ , 其中  $(l_1, l_2)$  为  $(x, y)$  方向的周期.

根据文献 [6–8] 可知, 上述无穷区域边界条件 (4) 式可以近似处理为齐次 Dirichlet 边界, 周期边界条件采用两边施加几层虚粒子方式进行处理 (详见 3.3 节).

## 3 高阶分裂修正并行 SPH 方法

针对高维非线性 GP 方程的粒子方法求解, 拓展应用文献 [17, 21] 中给出的一阶修正 SPH 方法时, 随着模拟时间的延长会出现精度低和稳定性差的现象, 这是因为本文考虑的 GP 方程中存在非线性项和一阶导数项, 对模拟算法的精度和稳定性要求较高. 为此, 在时间高阶分裂法 [1,2] 和已有改进 SPH 方法 [15–18] 的基础上, 引入 MPI 并行算法, 提高高维问题模拟计算效率. 本文对二维/三维 GP 方程模拟给出一种 HSS-CPSPH 方法, 基本思想是: 首先, 采用时间分裂思想将 GP 方程分成线性导数和非线性项两个方程; 其次, 对线性导数方程拓展应用文献 [15, 17] 中的改进 SPH 方法进行离散; 再次, 引入文献 [1, 2] 中四阶分裂格式对分裂的两个方程进行交替求解; 最后, 采用基于 MPI 的并行算法来提高计算机模拟效率.

### 3.1 时间分裂法<sup>[1-3,6]</sup>

作为一种精确高效的算法, 时间分裂法在复数域非线性薛定谔方程求解中已被广泛应用, 根据文献 [6—8], GP 方程 (1) 可以重写为

$$i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = (A + B) \phi(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^d, \quad (5)$$

其中线性微分算子  $A = -\frac{1}{2}\Delta - \Omega L_z$ , 非线性算子  $B = V_d(\mathbf{x}, t) + \beta_d |\phi(\mathbf{x}, t)|^2$ . 由文献 [26] 知 (5) 式在新时刻里的近似解析形式可以写成  $\phi(\mathbf{x}, t + \tau) \approx \exp[i\tau(A + B)] \phi(\mathbf{x}, t)$ , 即:  $\phi(\mathbf{x}, t + \tau) \approx \exp(i\tau A) \cdot (\exp(i\tau B) \cdot \phi(\mathbf{x}, t))$ . 根据该近似表达式和文献 [26] 中分解理论可知, (5) 式可以分解成下面的线性问题

$$i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = A\phi \quad (6)$$

和非线性问题

$$i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = B\phi. \quad (7)$$

上述过程的成立条件和精度可见文献 [26].

本文对方程 (6) 和 (7) 的求解采用如下四阶分裂法<sup>[1,2]</sup>: 第一步求解方程 (7), 第二步用第一步得到的解作为初始条件来求解方程 (6), 第三步用第二步得到的解作为初始条件求解方程 (7), 第四步使用第三步得到的解作为初始条件求解方程 (6), 第五步用第四步得到的解作为初始条件求解方程 (7), 此时得到的解作为下一时间层的数值解.

### 3.2 高阶分裂修正 SPH 离散格式

#### 3.2.1 修正 SPH 离散格式

在传统 SPH 方法模拟中, 首先使用核函数进行积分插值, 其次在模拟区域  $\Omega$  内, 对有限个粒子赋予密度、质量、温度等物理含义, 最后用粒子离散化方式近似得到核函数的积分形式.

在任意点  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  处, 函数  $\phi(\mathbf{x})$  及其微分形式可以用核函数  $W$  和核函数的导数  $\nabla W$  表示<sup>[19]</sup>:

$$\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}', \quad (8)$$

$$\langle \nabla \phi(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}') \nabla W d\mathbf{x}' - \phi(\mathbf{x}) \int_{\Omega} \nabla W d\mathbf{x}', \quad (9)$$

其中  $h$  为光滑长度, 决定了核函数  $W$  的支持域范围,  $W$  一般要求满足正则化、对称性、紧致性和 Dirac 函数性质<sup>[19]</sup>. 本文模拟中取  $h = 0.9d_0 - 1.1d_0$

( $d_0$  为初始粒子间距), 取分段五次样条核函数<sup>[19]</sup>, 对应支持域尺寸为  $3h$ .

引入体积  $v = m/\rho$  (其中  $m, \rho$  都是实常数), 对于任意位置  $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i)$  处粒子  $i$ , 其支持域内的相邻粒子为  $j$ , 则有粒子近似公式:

$$\phi_i = \sum_j \phi_j W_{ij} v_j, \quad (10)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) = \sum_j (\phi_j - \phi_i) \nabla_i W_{ij} v_j. \quad (11)$$

$W_{ij} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h)$ ,  $\nabla_i W_{ij} = \partial W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h) / \partial \mathbf{x}_i$ , 且  $\nabla_i W_{ij}$  满足关系

$$\nabla_i W_{ij} = -\nabla_j W_{ij}. \quad (12)$$

为了提高传统 SPH 方法的精度和稳定性, 基于 Taylor 展开, 人们已经提出了一些改进 SPH 方法<sup>[15-22]</sup>. 本文拓展应用文献 [17, 21] 中具有二阶精度的一阶修正对称 SPH 方法, 该方法首先将二阶导数项分为两个一阶导数, 然后对一阶导数基于 Taylor 展开进行离散, 则 (11) 式变为

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}_i} \right) = \sum_j (\phi_j - \phi_i) \nabla_i^c \widehat{W}_{ij} v_j, \quad (13)$$

其中  $\nabla_i^c \widehat{W}_{ij} v_j$  通过求解下列方程组得到

$$A^s \begin{pmatrix} \partial \widehat{W}_{ij}^c / \partial x_i \\ \partial \widehat{W}_{ij}^c / \partial y_i \\ \partial \widehat{W}_{ij}^c / \partial z_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{ji} W_{ij} \\ y_{ji} W_{ij} \\ z_{ji} W_{ij} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

其中  $A^s = \sum_{j=1}^N \left( W_{ij} \begin{pmatrix} x_{ji} x_{ji} & y_{ji} x_{ji} & z_{ji} x_{ji} \\ x_{ji} y_{ji} & y_{ji} y_{ji} & z_{ji} y_{ji} \\ x_{ji} z_{ji} & y_{ji} z_{ji} & z_{ji} z_{ji} \end{pmatrix} v_j \right)$ ,

$N$  是粒子  $i$  支持域内相邻粒子个数,  $x_{ji} = x_j - x_i$ ,  $y_{ji} = y_j - y_i$ ,  $z_{ji} = z_j - z_i$ .

#### 3.2.2 高阶分裂修正 SPH 格式

将 3.1 节四阶分裂格式与 3.2.1 节修正 SPH 格式进行结合, 对方程 (1) 进行离散, 可得如下高阶分裂修正 SPH 离散格式

$$\phi_i^* = e^{-id_1(V_1 + \beta|\phi_i^n|^2)dt} \phi_i^n, \quad (15)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} \right)_i^{**} = \sum_j v_j \phi_{ji}^{**} \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial \mathbf{x}} \right)_i, \quad (16)$$



$$i \frac{\phi_i^{**} - \phi_i^*}{dt} = c_1 \left[ -\frac{1}{2} \left\{ \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j^{**} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{**} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial x} \right)_i \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_j^{**} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i^{**} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial y} \right)_i \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_j^{**} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i^{**} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial z} \right)_i \right\} \right. \\ \left. + i\Omega \left( x_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i^{**} - y_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{**} \right) \right], \quad (17)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{***} = \sum_j v_j \phi_{ji}^{***} \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial x} \right)_i, \quad (18)$$

$$i \frac{\phi_i^{***} - \phi_i^{**}}{dt} = c_2 \left[ -\frac{1}{2} \left\{ \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j^{***} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{***} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial x} \right)_i \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_j^{***} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i^{***} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial y} \right)_i \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_j^{***} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i^{***} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial z} \right)_i \right\} \right. \\ \left. + i\Omega \left( x_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i^{***} - y_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{***} \right) \right], \quad (19)$$

$$\phi_i^{****} = e^{-id_2(V_1 + \beta|\phi_i^{***}|^2)dt} \phi_i^{***}, \quad (20)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{*****} = \sum_j v_j \phi_{ji}^{*****} \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial x} \right)_i, \quad (21)$$

$$i \frac{\phi_i^{*****} - \phi_i^{****}}{dt} = c_3 \left[ -\frac{1}{2} \left\{ \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j^{*****} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{*****} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial x} \right)_i \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_j^{*****} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i^{*****} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial y} \right)_i \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_j^{*****} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i^{*****} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial z} \right)_i \right\} \right. \\ \left. + i\Omega \left( x_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i^{*****} - y_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{*****} \right) \right], \quad (22)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{*****} = \sum_j v_j \phi_{ji}^{*****} \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial x} \right)_i, \quad (23)$$

$$i \frac{\phi_i^{*****} - \phi_i^{****}}{dt} = c_4 \left[ -\frac{1}{2} \left\{ \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j^{*****} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{*****} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial x} \right)_i \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_j^{*****} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i^{*****} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial y} \right)_i \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_j v_j \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_j^{*****} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_i^{*****} \right) \left( \frac{\partial \widehat{W}_{ij}^c}{\partial z} \right)_i \right\} \right. \\ \left. + i\Omega \left( x_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i^{*****} - y_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^{*****} \right) \right], \quad (24)$$

$$\phi_i^{n+1} = e^{-id_3(V_1 + \beta|\phi_i^{*****}|^2)dt} \phi_i^{*****}, \quad (25)$$

其中  $i = 0, 1, 2, \dots, M$ ;  $n = 0, 1, \dots$ ;  $M$  是区间内所有粒子总数,  $n$  是时间层,  $dt$  是时间步长,

$$\phi_{ji}^{**} = \phi_j^{**} - \phi_i^{**}, \quad \phi_{ji}^{***} = \phi_j^{***} - \phi_i^{***}, \\ \phi_{ji}^{****} = \phi_j^{****} - \phi_i^{****}, \quad \phi_{ji}^{*****} = \phi_j^{*****} - \phi_i^{*****},$$

四阶分裂格式参数

$$c_1 = c_4 = \frac{1}{2 \times (2 - 2^{1/3})}, \quad c_2 = c_3 = \frac{1 - 2^{1/3}}{2 \times (2 - 2^{1/3})}, \\ d_1 = d_3 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \quad d_2 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}} [2].$$

上述离散格式被称为高阶分裂修正 SPH 方法, 结合 3.4 节 MPI 并行计算技术将本文提出的方法称为“HSS-CPSPH”, 其中对线性导数方程 (6) 的时间离散采用二阶龙格-库塔显格式, 根据文献 [16—19] 中的稳定性限制条件, 时间步长取  $dt \leq 0.1d_0^2$ . 本文方法与文献 [15] 中给出的 SS-ICPSPH 方法主要的不同之处在于: 对线性导数方程的离散本文采用二阶龙格-库塔显格式, 后者采用隐格式; 本文采用四阶分裂格式, 后者采用二阶分裂格式, 使得本文方法精度较文献 [15] 中的方法精度高 (见第 4 节); 文献 [15] 运用提出的方法仅对带 Dirichlet 边界的 GP 方程进行模拟研究, 本文运用给出的方法对带周期边界和 Dirichlet 边界的非线性薛定谔问题都进行了模拟分析, 并且准确预测了周期边界下孤立波传播中出现的奇异现象 (见 5.1 节).

### 3.3 边界条件处理

运用上述提出的方法对高维 GP 方程进行模

拟时, 初边值条件的准确处理对数值模拟的精度和稳定性至关重要. 对初始条件可以准确离散施加, 边界条件 (4) 式可以近似处理为 Dirichlet 边界. 以二维区域情况为例, 周期性边界条件处理如下:

$$(x, y) \in [X_a, X_b] \times [Y_a, Y_b], \quad 0 \leq t \leq T,$$

其中  $X_a, X_b, Y_a, Y_b$  分别为  $x, y$  方向区域的最小和最大值. 将区域沿  $(x, y)$  方向分别均分成  $J$  和  $K$  整数份, 令空间步长  $h_1 = (X_b - X_a)/J, h_2 = (Y_b - Y_a)/K$ ,  $x_j = X_a + jh_1, 0 \leq j \leq J - 1, y_k = Y_a + kh_2, 0 \leq k \leq K - 1$ . 为防止粒子方法处理周期边界的粒子缺失问题, 在区间外侧各扩充 4 个点 (大于等于  $3h$ ), 可以得到

$$\begin{aligned} x_{-1} &= X_a - h_1, \quad x_{-2} = X_a - 2h_1, \\ x_{-3} &= X_a - 3h_1, \quad x_{-4} = X_a - 4h_1, \\ x_{J+1} &= X_a + (J+1)h_1, \quad x_{J+2} = X_a + (J+2)h_1, \\ x_{J+3} &= X_a + (J+3)h_1, \quad x_{J+4} = X_a + (J+4)h_1, \\ y_{-1} &= Y_a - h_2, \quad y_{-2} = Y_a - 2h_2, \\ y_{-3} &= Y_a - 3h_2, \quad y_{-4} = Y_a - 4h_2, \\ y_{J+1} &= Y_a + (J+1)h_2, \quad y_{J+2} = Y_a + (J+2)h_2, \\ y_{J+3} &= Y_a + (J+3)h_2, \quad y_{J+4} = Y_a + (J+4)h_2, \end{aligned}$$

则具有  $(l_1, l_2)$  周期边界条件的方程满足如下条件:

$$\begin{aligned} \phi_{-4,k} &= \phi_{J-4,k}, \quad \phi_{-3,k} = \phi_{J-3,k}, \\ \phi_{-2,k} &= \phi_{J-2,k}, \quad \phi_{-1,k} = \phi_{J-1,k}, \\ \phi_{J,k} &= \phi_{0,k}, \quad \phi_{J+1,k} = \phi_{1,k}, \\ \phi_{J+2,k} &= \phi_{2,k}, \quad \phi_{J+3,k} = \phi_{3,k}, \quad \phi_{J+4,k} = \phi_{4,k}, \\ k &= -4, -3, \dots, K+4; \\ \phi_{j,-4} &= \phi_{j,K-4}, \quad \phi_{j,-3} = \phi_{j,K-3}, \\ \phi_{j,-2} &= \phi_{j,K-2}, \quad \phi_{j,-1} = \phi_{j,K-1}, \\ \phi_{j,K} &= \phi_{j,0}, \quad \phi_{j,K+1} = \phi_{j,1}, \\ \phi_{j,K+2} &= \phi_{j,2}, \quad \phi_{j,K+3} = \phi_{j,3}, \\ \phi_{j,K+4} &= \phi_{j,4}, \quad j = -4, -3, \dots, J+4. \end{aligned}$$

本文在第 4 和第 5 节通过算例模拟验证了上述边界处理的准确性和有效性.

### 3.4 粒子搜索并行

SPH 粒子方法模拟中, 相邻粒子搜索和高维问题下需要几十万至上百万粒子物理量更新计算, 会使得计算机模拟中占较大计算内存和较长 CPU 计算时间, 因此运用提出方法对高维 GP 进行模拟时提高计算效率是必要的. 根据模拟中粒子位置不变的特点, 引入文献 [17, 21] 中基于 MPI

粒子搜索并行技术. 即基于 MPI 并行算法, 首先对每个粒子支持域内的相邻粒子进行标记, 标记后对所有粒子进行物理量赋值, 主要是质量和密度, 为了提高计算效率, 在并行计算中, 不同节点间会进行密度通信. 在计算过程中节点间进行空间上的一阶导数项通信以及最后计算函数值的更新. 本文的并行计算是将所有粒子进行编号, 再根据 CPU 数量将粒子平均分配, 进行同时计算. 每个粒子与之相互作用的相邻粒子支持域范围通过下列核函数确定,

$$\begin{aligned} W_{ij} &= W(r_{ij}, h) \\ &= w_0 \begin{cases} (3-q)^5 - 6(2-q)^5 + 15(1-q)^5, & 0 \leq q < 1, \\ (3-q)^5 - 6(2-q)^5, & 1 \leq q < 2, \\ (3-q)^5, & 2 \leq q < 3, \\ 0, & q \geq 3, \end{cases} \end{aligned} \quad (26)$$

其中  $q = r_{ij}/h, r_{ij} = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ , 系数  $w_0$  为  $120/h$  (一维),  $7/(478\pi h^2)$  (二维),  $3/(359\pi h^3)$  (三维). 本文中的支持域范围是以  $3h$  为半径的圆或球.

## 4 HSS-CSPH 方法的精度和收敛性分析

本节通过对具有解析解带不同边界条件的非线性薛定谔方程进行模拟, 对提出的 HSS-CSPH 方法的精度、收敛阶以及计算效率进行分析. 分别对二维带周期边值、一维二分量带周期边值和二维带第一类边值的问题进行数值模拟, 并与解析解做比较, 分析所提方法的准确性和高效性, 与已有 SS-ICSPH 方法 [10] 做对比证明本文所提方法具有较高精度和较快的收敛速度.

为分析方法的数值精度和收敛速度, 定义如下最大误差范数和收敛阶:

$$e_m = \|\phi_{\text{exact}} - \phi_{\text{numerical}}\|_{\infty}, \quad (27)$$

$$or_{\alpha} \approx \frac{\log(e_m(d_{02})/e_m(d_{01}))}{\log(d_{02}/d_{01})}, \quad (28)$$

其中  $d_{01}$  和  $d_{02}$  代表了两种不同的粒子初始间距.

### 4.1 二维带周期边界下孤立波传播

考虑方形区域  $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$  上带周期边界的非线性薛定谔方程 [3]

$$iu_t + \Delta u + \beta|u|^2 u = 0,$$

对应解析解为

$$u(x, y, t) = A \exp[i(k_1 x + k_2 y - \omega t)],$$

其中  $\omega = k_1^2 + k_2^2 - \beta|A|^2$ , 系数  $A = 1$ ,  $k_1 = k_2$  为常数,  $\beta = -2$ . 数值模拟中初始条件可以从解析解中获得, 对应的周期长度为  $(2\pi, 2\pi)$  且

$$\begin{aligned} u(x, y, t) &= u(x + 2\pi, y, t), \\ u(x, y, t) &= u(x, y + 2\pi, t), \\ (x, y) &\in R \times R, 0 < t \leq T, T = 1. \end{aligned}$$

该算例模拟中,  $k_1 = k_2 = 1$  时采用  $129 \times 129$  个均匀分布粒子, 时间步长为  $dt = 10^{-4}$  (见图 1);  $k_1 = k_2 = 4$  时采用  $h = \pi/32$  个均匀分布粒子, 时间步长为  $dt = 10^{-4}$  (见图 2). 图 1 和图 2 分别展示了  $k_1$  和  $k_2$  取不同系数时由 HSS-CPSPH 方法获得的  $u(x, \pi)$  的实部曲线图, 并将其与解析解及 SS-ICPSPH 结果进行对比, 可以看出, HSS-CPSPH 结果与解析解相符合, 但随着时间的延长, 两种数值结果产生较小的偏差, 这与文献 [3] 中分裂有限

差分法得到数值模拟结论类似.

为体现提出的 HSS-CPSPH 方法求解周期性问题的精度和收敛速度, 表 1 和表 2 分别列出了模拟较短时间内数值结果的误差和收敛阶, 由表 1 和表 2 可以看出: 1)  $e_m$  随着粒子数的增加而减小, HSS-CPSPH 方法得到的误差较 SS-ICPSPH 方法的小; 2) HSS-CPSPH 方法较 SS-ICPSPH 方法具有更快的收敛速度. 为进一步体现粒子方法在粒子分布非均匀情况下数值模拟的精度, 表 3 列出了粒子分布均匀和两种非均匀情况下 (见文献 [15]) 两

表 1  $k_1 = k_2 = 1, h = \pi/64$  时几个不同时刻里两种方法的误差  $e_m$

Table 1. Error  $e_m$  obtained using two different methods at different time ( $k_1 = k_2 = 1, h = \pi/64$ ).

时间 $t$	SS-ICPSPH	HSS-CPSPH
0.5	$1.697 \times 10^{-3}$	$1.696 \times 10^{-3}$
1	$3.616 \times 10^{-3}$	$2.494 \times 10^{-3}$
2	$7.347 \times 10^{-3}$	$4.857 \times 10^{-3}$

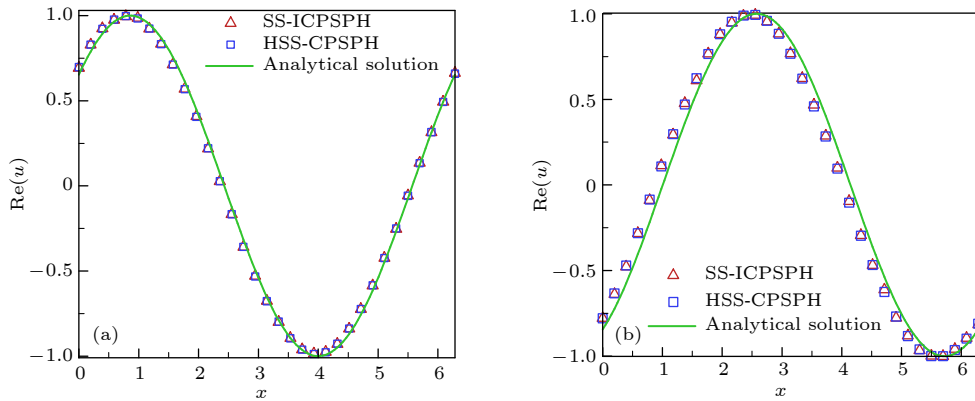


图 1  $k_1 = k_2 = 1, h = \pi/64$  时不同时刻  $u(x, \pi)$  的实部沿  $x$  轴的变化 (a)  $t = 1$ ; (b)  $t = 3$

Fig. 1. Curve of the  $\text{Re}(u(x, \pi))$  along  $x$ -axis at different time with  $k_1 = k_2 = 1, h = \pi/64$ : (a)  $t = 1$ ; (b)  $t = 3$ .

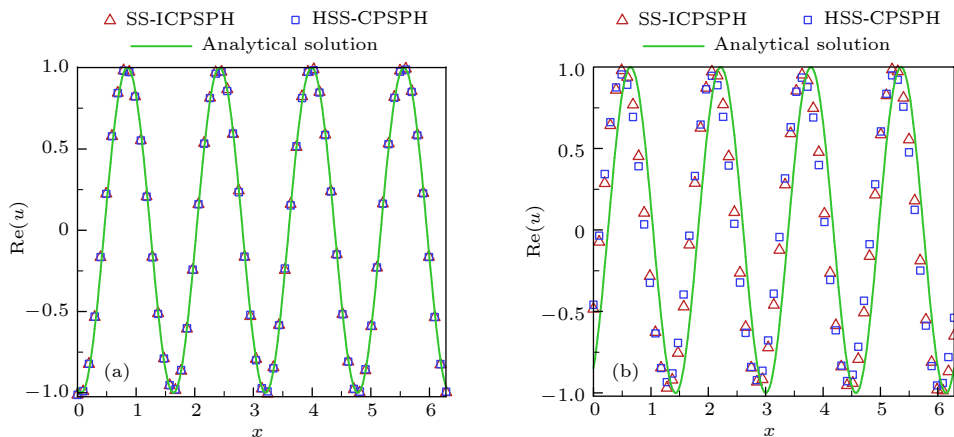


图 2  $k_1 = k_2 = 4, h = \pi/128$  时不同时刻  $u(x, \pi)$  的实部沿  $x$  轴的变化 (a)  $t = 0.1$ ; (b)  $t = 1$

Fig. 2. Curve of the  $\text{Re}(u(x, \pi))$  along  $x$ -axis at different time with  $k_1 = k_2 = 4, h = \pi/128$ : (a)  $t = 0.1$ ; (b)  $t = 1$ .

表 2  $k_1 = k_2 = 1$ , 时间  $t = 1$  时, 两种方法在不同粒子间距下的误差和收敛阶

Table 2. Error  $e_m$  and convergent order  $or_\alpha$  obtained using two different methods at  $t = 1$  and different particle distance ( $k_1 = k_2 = 1$ ).

	$h = \pi/32$		$h = \pi/64$		$h = \pi/128$	
	$e_m$	$or_\alpha$	$e_m$	$or_\alpha$	$e_m$	$or_\alpha$
SS-ICSPH	$1.381 \times 10^{-2}$	—	$3.616 \times 10^{-3}$	1.933	$9.0412 \times 10^{-4}$	2.00
HSS-CSPH	$1.381 \times 10^{-2}$	—	$2.494 \times 10^{-3}$	2.47	$4.498 \times 10^{-4}$	2.47

表 3  $k_1 = k_2 = 1, h = \pi/64$  时, 粒子分布均匀或不均匀方式下, 两种方法的误差  $e_m$

Table 3. Error  $e_m$  obtained using different methods at different distribution ( $k_1 = k_2 = 1, h = \pi/64$ ).

	均匀分布粒子		非均匀分布情形1		非均匀分布情形2	
	$t = 0.1$	$t = 1$	$t = 0.1$	$t = 1$	$t = 0.1$	$t = 1$
	SS-ICSPH	$2.776 \times 10^{-4}$	$3.616 \times 10^{-3}$	$2.944 \times 10^{-4}$	$3.818 \times 10^{-3}$	$3.116 \times 10^{-4}$
HSS-CSPH	$2.774 \times 10^{-4}$	$2.494 \times 10^{-3}$	$2.886 \times 10^{-4}$	$2.527 \times 10^{-3}$	$2.967 \times 10^{-4}$	$2.578 \times 10^{-3}$

个不同时刻的最大误差  $e_m$ . 由表 3 可知, 粒子方法在粒子分布均匀和分布非均匀情况下得到的数值结果误差都比较接近, 表明了该方法易推广应用到非规则区域问题的模拟, 且保持较好的精度.

#### 4.2 一维二分量带周期边界下孤立波传播

为进一步展示本文提出的 HSS-CSPH 方法能够准确捕捉多分量多孤立波传播中的尖角现象, 本小节考虑区间  $[-20, 80]$  上一维二分量带周期边界两种初始条件下的非线性薛定谔方程<sup>[14]</sup>

$$\begin{cases} iu_t + i\alpha u_x + \frac{1}{2}u_{xx} + (|u|^2 + \beta|v|^2)u = 0, \\ iv_t - i\alpha v_x + \frac{1}{2}v_{xx} + (|v|^2 + \beta|u|^2)v = 0. \end{cases}$$

初始条件 1 为

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= \sqrt{\frac{2\alpha}{1+\beta}} \operatorname{sech}(\sqrt{2\alpha}(x-x_0)) \\ &\quad \times \exp\{i[(c-\alpha)(x-x_0)]\}, \\ v(x, 0) &= \sqrt{\frac{2\alpha}{1+\beta}} \operatorname{sech}(\sqrt{2\alpha}(x-x_0)) \\ &\quad \times \exp\{i[(c-\alpha)(x-x_0)]\}, \end{aligned}$$

其中参数  $\alpha = 0.5, \beta = 2/3, c = 1, a = 1, x_0 = 0$ .

具有三个孤子波传播的初始条件 2 为

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= \sum_{j=1}^3 \sqrt{\frac{2a_j}{1+\beta}} \operatorname{sech}(\sqrt{2a_j}(x-x_j)) \\ &\quad \times \exp\{i[(c_j-\alpha)(x-x_j)]\}, \\ v(x, 0) &= \sum_{j=1}^3 \sqrt{\frac{2a_j}{1+\beta}} \operatorname{sech}(\sqrt{2a_j}(x-x_j)) \\ &\quad \times \exp\{i[(c_j-\alpha)(x-x_j)]\}, \end{aligned}$$

其中  $\alpha = 0.5, \beta = 2/3, c_1 = 1, c_2 = 0.1, c_3 = -1, a_1 = 1, a_2 = 0.72, a_3 = 0.36, x_1 = 0, x_2 = 25, x_3 = 50$ .

周期边界条件  $u(x, t) = u(x + 100, t)$ , 上述两种初始条件下对应的解析解可参见文献 [14].

图 3 和图 4 给出了两种不同初始条件下几个时刻里分量  $u$  的不同数值结果. 观察图 3 和图 4 可知, HSS-CSPH 结果与解析解相符合, 即使在较长模拟时间里; 提出的 HSS-CSPH 方法能准确捕捉到孤立子传播中奇异现象; HSS-CSPH 方法可以准确得到一定时间里孤立子波的传播过程.

#### 4.3 二维第一类边界下孤立波传播

为验证提出的 HSS-CSPH 方法求解带第一类边界非线性薛定谔问题的准确性, 以及进一步体现它与文献 [15] 给出的粒子方法相比具有的优点. 本小节考虑区域  $[0, 2\pi]^2$  内的二维非线性薛定谔方程<sup>[8]</sup>

$$\begin{aligned} i\frac{\partial u}{\partial t} &= -\frac{1}{2}(u_{xx} + u_{yy}) + V(x, y)u + |u|^2u, \\ (x, y) &\in [0, 2\pi]^2, \end{aligned}$$

初值条件为  $u_0(x, y) = \sin x \sin y$ , 第一类边界条件可以通过方程解析解得到, 其中  $V(x, y) = 1 - \sin^2 x \sin^2 y$ . 对应方程解析解为  $u_{\text{exact}}(x, y, t) = \sin x \sin y \exp(-i2t)$ .

表 4 和表 5 列出了两种粒子方法模拟上述方程的误差和收敛速度. 通过表 4 和表 5 可知, 在模拟第一类边界 NLS 方程时, 本文提出的 HSS-CSPH 方法较文献 [15] 中的粒子方法具有较小误差和较快收敛速度. 此外, 为了体现本文算法通过



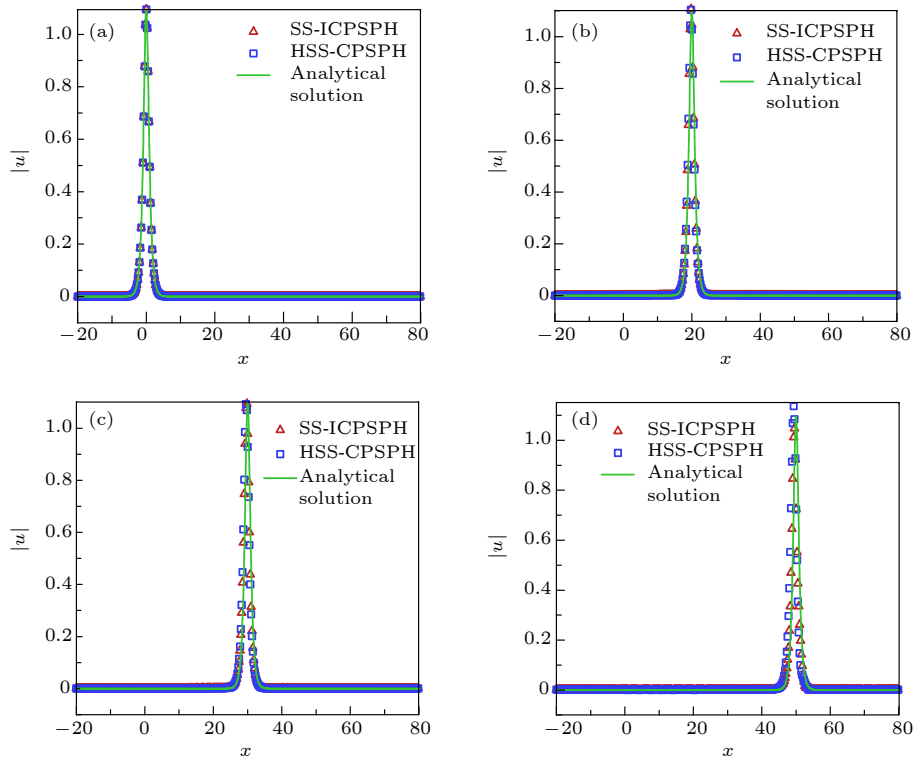


图 3 初始条件 1 下, 在 4 个不同时刻孤立波函数  $|u|$  的传播过程 (a)  $t = 0$ ; (b)  $t = 20$ ; (c)  $t = 30$ ; (d)  $t = 50$

Fig. 3. Solitary wave propagation process of  $|u|$  at different time with the initial condition 1: (a)  $t = 0$ ; (b)  $t = 20$ ; (c)  $t = 30$ ; (d)  $t = 50$ .

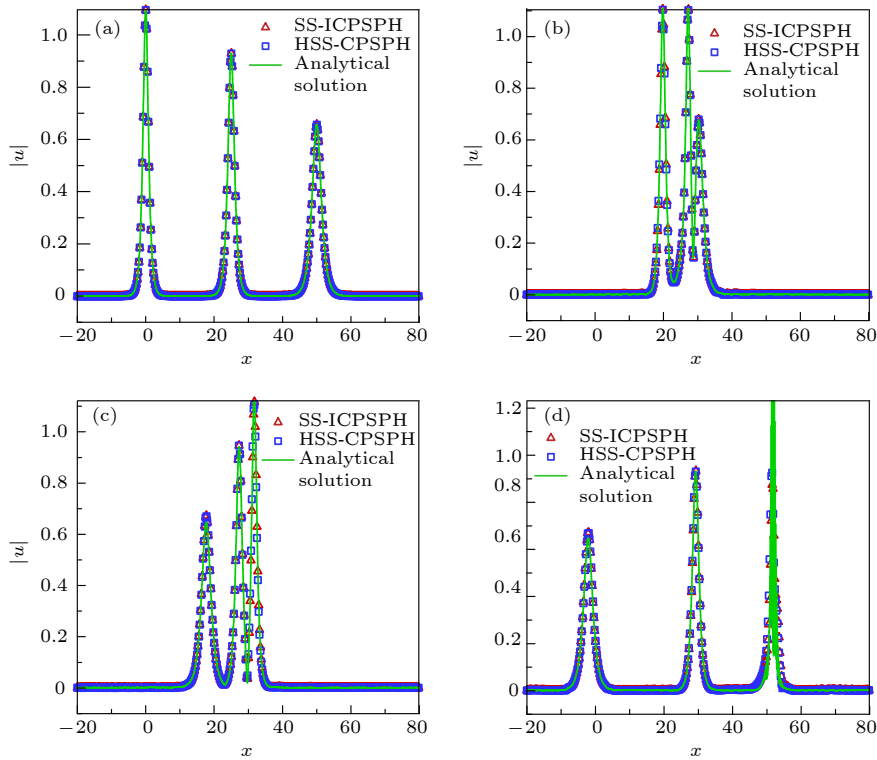


图 4 初始条件 2 下, 在 4 个不同时刻三孤立子波函数  $|u|$  的传播过程 (a)  $t = 0$ ; (b)  $t = 20$ ; (c)  $t = 30$ ; (d)  $t = 50$

Fig. 4. Solitary wave propagation process of  $|u|$  at different time with initial condition 2: (a)  $t = 0$ ; (b)  $t = 20$ ; (c)  $t = 30$ ; (d)  $t = 50$ .

表 4  $h = \pi/64$  时, 三个不同时刻两种方法的最大误差  $e_m$

Table 4. Error  $e_m$  obtained using two different methods at three times ( $h = \pi/64$ ).

时间 $t$	SS-ICPSPH	HSS-CPSPH
0.5	$9.131 \times 10^{-4}$	$4.512 \times 10^{-4}$
1	$1.828 \times 10^{-3}$	$8.135 \times 10^{-4}$
2	$3.658 \times 10^{-3}$	$1.623 \times 10^{-3}$

并行提高计算效率的必要性, 模拟过程中基于 MPI 并行算法, 采用了多个 CPU 进行计算机模拟, 取粒子数为 66049 ( $257^2$ ), 时间步长为  $dt = 5 \times 10^{-5}$ . 通过实际计算模拟知, 用一个 CPU 串行计算时, 运行第 1 步的时间约为 49.89 s, 之后 100 步平均每步约 1.5 s; 当采用 4 个 CPU 时, 运行第 1 步的时间约为 12.0586 s, 之后 100 步平均

表 5  $t = 1$  时不同空间步长情况下两种粒子方法的误差和收敛阶  
Table 5. Error and order of convergence by different methods at  $t = 1$  and different  $h$ .

	$h = \pi/32$		$h = \pi/64$		$h = \pi/128$	
	$e_m$	$or_\alpha$	$e_m$	$or_\alpha$	$e_m$	$or_\alpha$
SS-ICPSPH	$7.553 \times 10^{-3}$	—	$1.828 \times 10^{-3}$	2.046	$4.316 \times 10^{-4}$	2.082
HSS-CPSPH	$4.534 \times 10^{-3}$	—	$8.135 \times 10^{-4}$	2.476	$1.379 \times 10^{-4}$	2.560

## 5 GP 方程数值模拟

为了更好地体现提出的基于分裂格式的粒子方法模拟 NLS/GP 问题的高效、准确性, 本节选取了一个二维周期性无解析解 NLS 问题和两个 BEC 下带外旋转项的 GP 问题, 分别预测了周期边界下孤立子传播的奇异特性和 BEC 下量子化涡旋变化过程, 并将模拟结果与其他数值方法<sup>[8,15]</sup> 计算结果做对比. 模拟中, 也通过三维算例的计算机模拟展示了采用基于 MPI 并行算法提高计算效率的必要性.

### 5.1 二维周期边界无解析解 NLS 方程

考虑区间  $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$  上的非线性薛定谔方程<sup>[3]</sup>

$$iu_t + \Delta u + \beta|u|^2 u = 0,$$

初值条件为  $u(x, y, 0) = (1 + \sin x)(2 + \sin y)$ , 参数  $\beta = 1$ , 周期边界长度为  $(2\pi, 2\pi)$ .

上述 NLS 方程是带初始和周期边界下孤立子传播中出现奇异特性的典型问题, 目前该方程无解析解, 常被用来验证提出算法模拟带周期边界下孤

每步约 0.25 s. 可以看出, 运行第 1 步时 4 个 CPU 的计算时间基本上是 1 个 CPU 的计算时间的 1/4, 计算步数增加后, 4 个 CPU 平均每步的计算时间略小于 1 个 CPU 平均每步计算时间的 1/4. 这与理想的 1/4 有一定偏差, 可能原因有下面几点: 1) 同一节点上不同 CPU 之间通讯消耗时间非常小; 2) 此处为二维模拟区域粒子数不是很多的情况; 3) 得到的计算时间有舍入误差. 当模拟粒子数增大 (如 5.2 节三维区域模拟中涉及几百万及以上粒子), CPU 个数增加到在不同节点上时, 会使得平均每步的计算时间增加, 不同节点上通讯消耗时间延长, 此时经实际模拟得到的结论会与实际计算理论相符合, 即随着 CPU 数量增加, 计算效率的提高倍数要明显小于 CPU 增加的倍数 (详见 5.2 节并行计算效率分析).

立子传播过程的可靠性 (见文献 [3]). 图 5 给出了初始时刻和  $t = 0.108$  时刻三种数值方法的模拟结果. 从图 5 可知, 在  $t = 0.108$  时出现明显的孤立子波奇异特性, 三种数值结果相符合, 进一步表明本文提出的粒子方法捕捉孤立子波传播中奇异现象是可靠的.

### 5.2 三维 Gross-Pitaevskii 方程

考虑三维 BEC 下带旋转项的 Gross-Pitaevskii 方程<sup>[15]</sup>

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2}(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) + V(x, y, z)u + \beta|u|^2 u - \Omega L_z u, (x, y, z) \in [-10, 10]^3,$$

初始条件为

$$u(x, y, z, 0) = \frac{(\gamma_x \gamma_y \gamma_z)^{1/4}}{2\pi^{3/4}} e^{-(\gamma_x x^2 + \gamma_y y^2 + \gamma_z z^2)/2}.$$

其中,  $V(x, y, z, t) = (\gamma_x x^2 + \gamma_y y^2 + \gamma_z z^2)/2$ , 参数  $\Omega = 0.75$ ,  $(\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z, \beta) = (1.2, 0.8, 2, 50)$ .

为表明 HSS-CPSPH 方法模拟三维 GP 问题的可靠性和展示 BEC 下不同截面上波函数值随时间的变化过程, 图 6 给出了沿  $y$  轴方向上两种不同数值曲线, 图 7 给出了由 HSS-CPSPH 方法得到

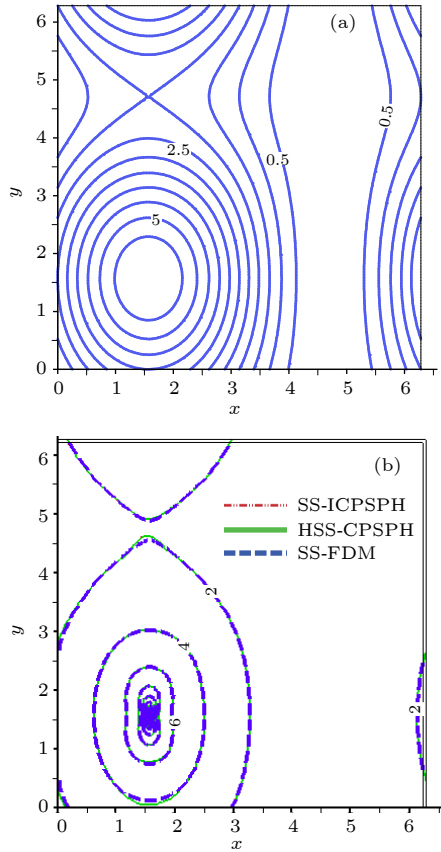


图 5 在两个不同时刻不同数值方法得到的  $|u|$  等值线图 (a)  $t = 0$ ; (b)  $t = 0.108$   
 Fig. 5. Contours of  $|u|$  obtained using different methods at two different times: (a)  $t = 0$ ; (b)  $t = 0.108$ .

的 3 个不同时刻沿  $u(0, y, z)$  和  $u(x, y, 0)$  两个截面上波函数变化等值线. 图 6 中本文方法得到的变化

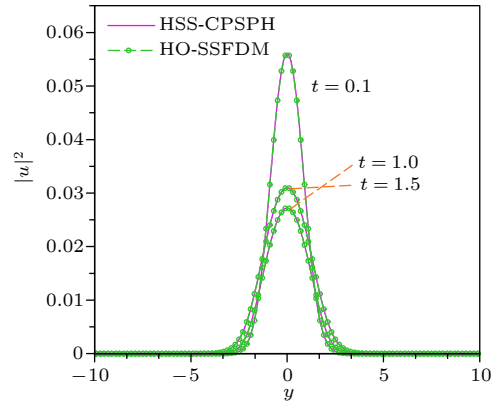


图 6 不同时刻  $|u|^2$  沿  $y$  轴 ( $x = 0, z = 0$ ) 变化曲线  
 Fig. 6. Curve of  $|u|^2$  along  $y$ -axis ( $x = 0, z = 0$ ) at different time.

曲线与 HO-SSFDM 方法 [15] 结果一致, 体现了 HSS-CPSPH 方法模拟预测三维 GP 问题是有效的; 波函数的峰值随时间演化出现先变小后变大的趋势, 但波峰值的总体变化趋势是慢慢变小. 通过观察图 7 可知, 不同截面上随时间演化波函数值的分布是不同的、复杂的, 且等值线峰值随时间延长逐渐变小.

为进一步体现运用本文粒子方法模拟高维 GP 问题时引入 MPI 并行算法以减少 CPU 消耗时间的必要性, 对固定粒子数和增加粒子数两种情况采用不同 CPU 个数的计算效率进行了分析 (见表 6 和表 7). 本文并行计算机采用 Red Hat

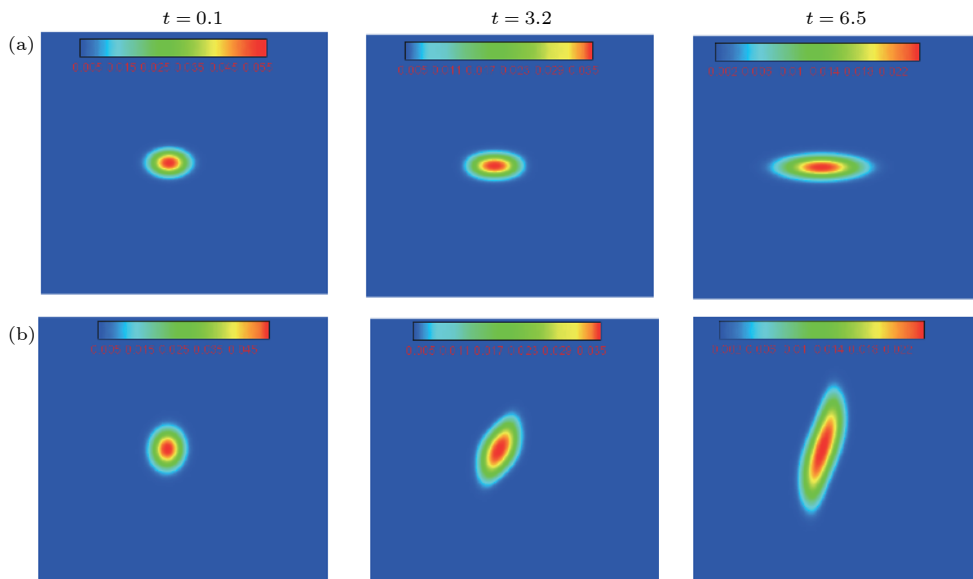


图 7 在 3 个不同时刻  $|u|^2$  在不同截面上的等值线 (a)  $(0, y, z)$  截面; (b)  $(x, y, 0)$  截面  
 Fig. 7. Contour of  $|u|^2$  along different profile at different time: (a)  $(0, y, z)$ ; (b)  $(x, y, 0)$ .

Enterprise Linux 5.8 × 86\_64 操作系统, MPI 类型为 Intel MPI Toolkits 4.0.3, 总共有 17 个 IBM BladeCenter HS22 计算节点, 每个节点包括 12 个两路六核 CPU, CPU 型号为 Intel Xeon 6C X5650, 主频为 2.67 GHz. 表 6 列出了固定粒子数  $161^3$  (约四百多万) 增加 CPU 个数情况下运行不同步数时所消耗的 CPU 时间, 表 7 列出了不同粒子数下不同 CPU 情况下, 运行到 1000 步时平均每步所消耗的 CPU 时间. 为了更加直观地看出并行计算对计算效率的提高, 此处定义相对加速比  $S$  为单节点上并行算法的运行时间/ $N$  个节点上并行算法的运行时间 (每个节点上 12 个 CPU). 选用表 6 中 12, 24, 36, 72 个 CPU 在计算到 1000 步时的时间作为研究对象, 分别对应着 1, 2, 3, 6 个节点.

由表 6 和表 7 可以看到, 随着 CPU 个数的增加, 计算效率提高很快, 但计算效率提高的比值是低于 CPU 个数增加的比值, 这是因为 CPU 个数增加后不同 CPU 上得到结果相互通讯的时间也将增加. 从加速比值上可以明显看出, 在开始使用 1, 2, 3 个节点时, 计算效率的提升是十分明显的, 但略低于 CPU 增加的比值, 这是由于不同节点之间

表 6 粒子数为  $161^3$  时, 不同 CPU 个数下运行到不同步数所需时间 (单位: s)

Table 6. Consumed CPU time (unit: s) of different calculated time step with particle number  $161^3$  at different CPUs.

CPU数量	步数			相对加速比S
	$num = 1$	$num = 10$	$num = 1000$	
2	97805.9	107508	1174728	—
12	16716.9	18516.7	215526.7	—
24	8388.87	9404.37	120284.37	1.792
36	5603.29	6344.98	87524.98	2.462
72	2948.83	3189.24	48564.28	4.438

表 7 在不同粒子数下不同 CPU 个数下, 运行到 1000 步时平均每步所消耗时间 (单位: s)

Table 7. The average consumed CPU time (unit: s) of calculated time step 1000 with different particle number and different CPUs.

粒子数	CPU数量				
	2	12	24	36	72
$121^3$	449.55	82.926	45.962	35.000	19.585
$161^3$	1076.922	198.810	111.90	81.922	47.363
$181^3$	1558.445	292.711	164.838	120.886	65.437
$201^3$	2190.921	425.688	235.775	179.856	96.836

通讯消耗一定的时间导致的, 但是当节点数继续增加到 6 个节点时, 通讯消耗时间也随之增加, 使得计算效率增加减缓, 明显低于 CPU 增加的比值, 这与计算机相关计算理论也较为符合; 计算机模拟中运行第一步消耗 CPU 时间比后续运行的平均步消耗 CPU 时间要长, 且随粒子数增加这个消耗 CPU 时间的比值要变大, 这是因在计算物理量循环更新前需要标定每个粒子的相邻粒子, 此标定时间随粒子数增加而增加; 在 CPU 个数不变的情况下, 随着粒子数增加平均每个计算步消耗 CPU 时间也将变长, 且该变长时间比值与粒子数增加比值是呈非线性的. 由于本文采用的并行计算主要是通过增加 CPU 个数来提高计算效率, 不同 CPU 数下的数值近似算法不变, 使得多个 CPU 下的计算结果与单个 CPU 的计算结果是一致的, 通过不同 CPU 下的实际模拟结果对比发现亦是如此, 从而表明多 CPU 下的求解质量是可靠的.

通过上述模拟分析得知, 本文基于 MPI 并行计算给出的 HSS-CPSPH 方法模拟三维 GP 问题是高效、可靠的.

### 5.3 二维二分量 Gross-Pitaevskii 方程

为进一步展示提出的 HSS-CPSPH 方法预测 BEC 下量子涡旋随时间演化过程的可靠性, 本小节考虑区间  $[-8, 8]^2$  上二维二分量 BEC 下带旋转项的 Gross-Pitaevskii 方程<sup>[8]</sup>

$$\begin{cases} i \frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} + \sigma (|u_1|^2 + \varsigma |u_2|^2) u_1 \\ \quad + w_1(x, y) u_1 + i\Theta \left( y \frac{\partial u_1}{\partial x} - x \frac{\partial u_1}{\partial y} \right) = 0, \\ i \frac{\partial u_2}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_2}{\partial y^2} + \sigma (|u_2|^2 + \varsigma |u_1|^2) u_2 \\ \quad + w_2(x, y) u_2 + i\Theta \left( y \frac{\partial u_2}{\partial x} - x \frac{\partial u_2}{\partial y} \right) = 0. \end{cases}$$

初边值条件为

$$\begin{cases} u_1(x, y, 0) = \frac{x + iy}{\sqrt{\pi}} \exp \left[ -\frac{(x^2 + y^2)}{2} \right], \quad \text{on } \Omega, \\ u_2(x, y, 0) = \frac{x + iy}{\sqrt{\pi}} \exp \left[ -\frac{(x^2 + y^2)}{2} \right], \quad \text{on } \Omega, \\ u_1(x, y, t) = 0, \quad \text{on } \partial\Omega \times [0, T], \\ u_2(x, y, t) = 0, \quad \text{on } \partial\Omega \times [0, T], \end{cases}$$

其中,  $w_i(x, y) = 1.5x^2 + 0.5y^2$ ,  $i = 1, 2$ ,  $\Theta = 0.7$ ,



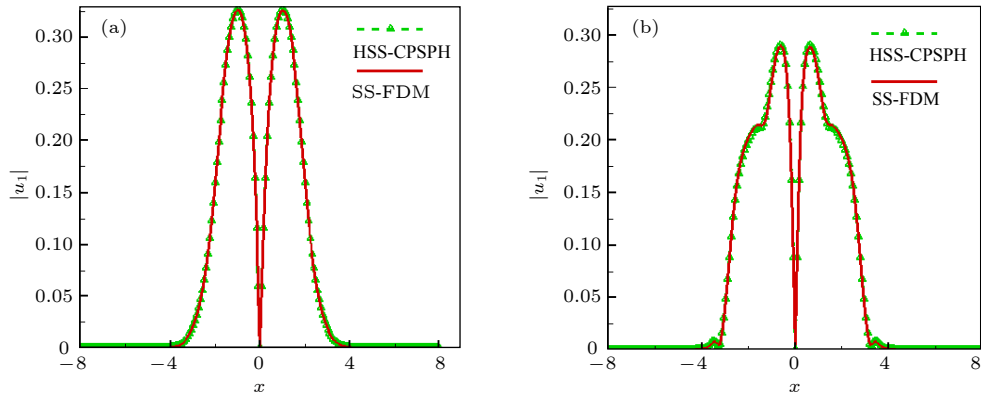


图 8 两个不同时刻下  $|u_1|$  沿  $x$  轴 ( $y = 0.5$ ) 的变化 (a)  $t = 0.05$ ; (b)  $t = 0.25$

Fig. 8. Curve of  $|u_1|$  along  $x$ -axis ( $y = 0.5$ ) at two different time: (a)  $t = 0.05$ ; (b)  $t = 0.25$ .

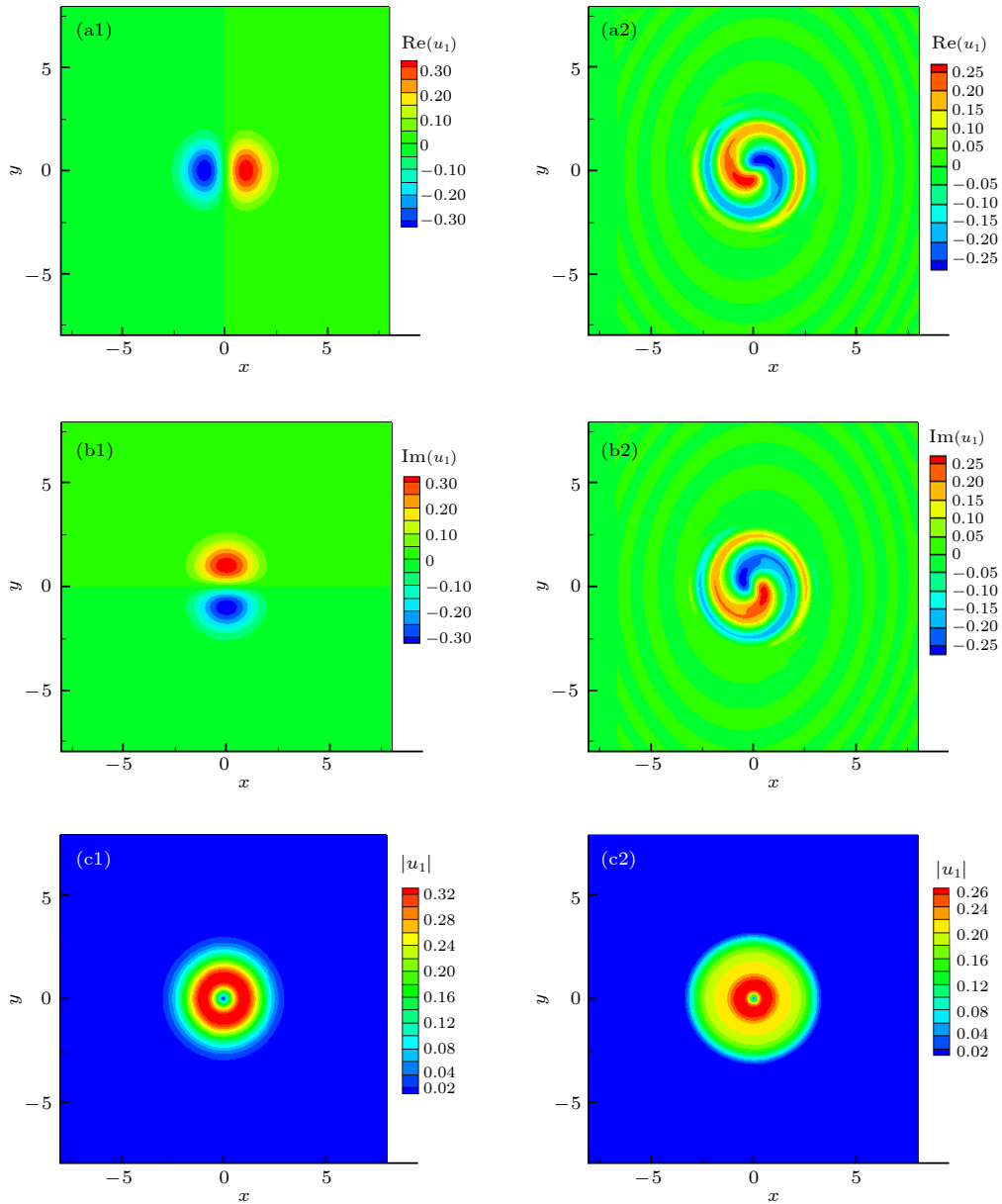


图 9 两个不同时刻下  $t = 0$  (第一列) 和  $t = 0.25$  (第二列) 三个物理量等值线变化 (a1), (a2)  $\text{Re}(u_1)$ ; (b1), (b2)  $\text{Im}(u_1)$ ; (c1), (c2)  $|u_1|$

Fig. 9. Contours of three physical quantities at two different times  $t = 0$  (the first row) and  $t = 0.25$  (the second row): (a1), (a2)  $\text{Re}(u_1)$ ; (b1), (b2)  $\text{Im}(u_1)$ ; (c1), (c2)  $|u_1|$ .

$\sigma = -100$ ,  $\zeta = 0.8$ .

图 8 给出了两个时刻两种不同数值方法得到的波函数沿  $x$  轴 ( $y = 0.5$ ) 的变化, 图 9 给出了由 HSS-CPSPH 方法得到的两个时刻 3 个物理量 (第一分量  $u_1$  的实部、虚部和模) 等值线. 由图 8 和图 9 知, HSS-CPSPH 结果与 SS-FDM 结果<sup>[7]</sup> 相符, 表明本文粒子法模拟二分量 GP 问题是可靠的; HSS-CPSPH 方法能够准确预测出具有二分量 BEC 下带旋转项量子涡旋随时间的变化过程, 进一步展示了所提方法高效、准确预测 GP 问题的能力.

## 6 结 论

本文为提高 SPH 方法模拟含孤立波非线性问题的数值精度和稳定性, 将四阶精度时间分裂格式与修正 SPH 方法相结合, 并引入基于粒子搜索的 MPI 并行计算技术, 给出一种能够高效准确地模拟高维 NLS/GP 方程的 HSS-CPSPH 方法. 数值模拟中, 考虑了粒子分布均匀和非均匀情况下带有两种不同边界条件的二维和三维 NLS/GP 方程, 并与解析解或其他数值结果做对比, 分析了所提方法的数值精度、收敛阶及数值预测的可靠性. 所有数值算例表明:

1) 提出的 HSS-CPSPH 方法求解高维非线性薛定谔方程较已有粒子方法具有较高精度和较快收敛速度, 且较网格类方法具有更好、更灵活的应用性;

2) 无论在粒子分布均匀还是非均匀情况下, HSS-CPSPH 方法模拟 NLS 方程都具有较高的数值精度;

3) 给出的 HSS-CPSPH 方法成功地预测了周期边界下二维 NLS 方程描述的孤立波传播中的奇异特性, 准确地展示了 BEC 下带外旋转项三维单分量和二维二分量 GP 方程中量子涡旋随时间演化过程.

值得注意的是, 目前未见文献将四阶分裂格式与修正 SPH 方法耦合, 并引入 MPI 并行技术对

NLS/GP 方程进行模拟研究. 本文对不同边界下高维 NLS 方程的模拟给出的 HSS-CPSPH 法较已有粒子方法具有较高精度和较快收敛速度, 较网格类方法具有更好、更灵活的拓展应用性, 为高维 NLS 方程的数值模拟提供了一种高效准确的粒子方法.

## 参考文献

- [1] Bandrauk A D, Shen H 1994 *J. Phys. A: Gen. Phys.* **27** 7147
- [2] Yoshida H 1990 *Phys. Lett. A* **150** 262
- [3] Wang T C, Guo B L, Xu Q B 2013 *J. Comput. Phys.* **243** 382
- [4] Cheng R J, Cheng Y M 2016 *Chin. Phys. B* **25** 020203
- [5] Wang D S, Xue Y S, Zhang Z F 2016 *Rom. J. Phys.* **61** 827
- [6] Bao W Z, Wang H Q 2006 *J. Comput. Phys.* **217** 612
- [7] Bao W Z, Shen J 2005 *SIAM J. Sci. Comput.* **26** 2010
- [8] Wang H Q 2005 *Appl. Math. Comput.* **170** 17
- [9] Chen R Y, Nie L R, Chen C Y 2018 *Chaos* **28** 053115
- [10] Chen R Y, Nie L R, Chen C Y, Wang C J 2017 *J. Stat. Mech.* **2017** 013201
- [11] Chen R Y, Pan W L, Zhang J Q, Nie L R 2016 *Chaos* **26** 093113
- [12] Chen R Y, Tong L M, Nie L R, Wang C I, Pan W 2017 *Physica A* **468** 532
- [13] Gao Y L, Mei L Q 2016 *Appl. Numer. Math.* **109** 41
- [14] Xu Y, Shu C W 2005 *J. Comput. Phys.* **205** 72–97
- [15] Jiang T, Chen Z C, Lu W G, Yuan J Y, Wang D S 2018 *Comput. Phys. Commun.* **231** 19
- [16] Liu M B, Liu G R 2010 *Arch. Comput. Meth. Eng.* **17** 25
- [17] Jiang T, Chen Z C, Ren J L, Li G 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 130201 (in Chinese) [蒋涛, 陈振超, 任金莲, 李刚 2017 物理学报 **66** 130201]
- [18] Chen J K, Beraun J E 2000 *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **190** 225
- [19] Liu G R, Liu M B 2003 *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Mesh-free Particle Method* (Singapore: World Scientific)
- [20] Crespo A J C, Domínguez J M, Rogers B D, Gómez-Gesteira M, Longshaw S, Canelas R, Vacondio R, Barreiro A, García-Feal O 2015 *Comput. Phys. Commun.* **187** 204
- [21] Ren J L, Jiang T, Lu W G, Li G 2016 *Comput. Phys. Commun.* **205** 87
- [22] Liu M B, Chang J Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3654 (in Chinese) [刘谋斌, 常建忠 2010 物理学报 **59** 3654]
- [23] Sun P N, Colagrosso A, Marrone S, Zhang A M 2016 *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **305** 849
- [24] Huang C, Lei J M, Liu M B, Peng X Y 2015 *Int. J. Numer. Methods Fluids* **78** 691
- [25] Huang C, Zhang D H, Shi Y X, Si Y L, Huang B 2018 *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **113** 179
- [26] Weideman J A C, Herbst B M 1986 *SIAM J. Numer. Anal.* **23** 485

# Numerical study of nonlinear Schrödinger equation with high-order split-step corrected smoothed particle hydrodynamics method\*

Jiang Tao    Huang Jin-Jing    Lu Lin-Guang    Ren Jin-Lian<sup>†</sup>

(School of Mathematical Sciences, School of Hydraulic, Energy and Power Engineering, Yangzhou University, Yangzhou 225002, China)

(Received 29 January 2019; revised manuscript received 24 February 2019)

## Abstract

To improve the numerical accuracy and computational efficiency of solving high-dimensional nonlinear Schrödinger/Gross-Pitaevskii (NLS/GP) equation by using traditional SPH method, a high-order split-step coupled with a corrected parallel SPH (HSS-CPSPH) method is developed by applying virtual particles to the boundary. The improvements are described as follows. Firstly, the nonlinear Schrödinger equation is divided into linear derivative term and nonlinear term based on the high-order split-step method. Then, the linear derivative term is solved by extending the first-order symmetric SPH method in explicit time integration. Meanwhile, the MPI parallel technique is introduced to enhance the computational efficiency. In this work, the accuracy, convergence and the computational efficiency of the proposed method are tested by solving the NLS equations with the periodic and Dirichlet boundary conditions, and compared with the analytical solutions. Also, the singularity of solitary waves under the periodic boundary condition is accurately obtained using the proposed particle method. Subsequently, the proposed HSS-CPSPH method is used to predict the results of complex two-dimensional and three-dimensional GP problems which are compared with other numerical results. The phenomenon of singular sharp angle in the propagation of nonlinear solitary wave and the process of quantum vortex under Bose-Einstein condensates with external rotation are presented accurately.

**Keywords:** nonlinear Schrödinger equation, smoothed particle hydrodynamics, time split-step, Bose-Einstein condensates

**PACS:** 02.60.-x, 02.70.-c, 03.65.Ge

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190169

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11501495, 51779215), the China Postdoctoral Science Foundation of China (Grant Nos. 2015M581869, 2015T80589), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK20150436), the National Key Technologies Research and Development Program of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2015BAD24B02-02), the Top-notch Academic Programs Project of Jiangsu Higher Education Institutions, China (Grant No. PPZY2015B109), and the Undergraduate Research and Innovation Project of Jiangsu Province, China (Grant No. 201611117016Z).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [rjl20081223@126.com](mailto:rjl20081223@126.com)