

Legendre 配置谱方法求解 Bose-Einstein 凝聚态的基态解*

刘文杰¹, 王汉权^{1,2}

(1. 云南财经大学 统计与数学学院, 昆明 650221;
2. 云南师范大学 数学学院, 昆明 650504)

摘要: 近年来,有关 Bose-Einstein 凝聚态基态解的实验研究已经取得了一系列重要的成果.该文在相关研究成果的基础上,首先通过降维和无量纲化方法将 Bose-Einstein 凝聚态基态解问题转换成能量泛函极值问题,在离散该泛函时,尝试使用 Legendre 配置谱方法离散该能量泛函的一维和二维情形.其次,对该能量泛函极小值问题进行了数值模拟.最后,通过分析实验数据结果和图像得出,针对非旋转的 Bose-Einstein 凝聚态的基态解问题可以使用 Legendre 配置谱方法来求解,且数值结果的误差较小.

关键词: Bose-Einstein 凝聚态; Legendre 配置谱方法; 数值计算

中图分类号: O242 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.430257

The Legendre Collocation Spectral Method for the Ground State Solutions of the Bose-Einstein Condensates

LIU Wenjie¹, WANG Hanquan^{1,2}

(1. *School of Mathematics and Statistics, Yunnan University of Finance and Economics, Kunming 650221, P.R.China;*
School of Mathematics, Yunnan Normal University, Kunming 650504, P.R.China)

Abstract: In recent years, a series of important achievements have been made in the experimental study of the ground state solutions of the Bose Einstein condensates. First, the ground state solution problem of the Bose Einstein condensate was converted into the extreme value problem of energy functional with the dimensionless method. In the discretization of the energy functional, the Legendre collocation spectral method was used in the 1D and 2D cases. Second, the energy functional minimum problem was numerically simulated. The analyses of the experimental data and graphs show that, the Legendre collocation spectral method is applicable to the ground state solution of the non-rotating Bose Einstein condensate, and the errors of the numerical results are very small.

Key words: Bose-Einstein condensate; Legendre collocation spectral method; numerical calculation

* 收稿日期: 2022-08-10; 修订日期: 2023-05-18

基金项目: 国家自然科学基金项目(11871418;11971120);云南基础研究计划重点项目(202101AS070044);云南省教育厅科研基金项目(2022Y547)

作者简介: 刘文杰(1996—),男,硕士生(E-mail: 1455696828@qq.com);

王汉权(1974—),男,教授,博士(通讯作者. E-mail: hanquan.wang@gmail.com).

引用格式: 刘文杰,王汉权. Legendre 配置谱方法求解 Bose-Einstein 凝聚态的基态解[J]. 应用数学和力学, 2023, 44(6): 719-730.

0 引言

Bose-Einstein 凝聚态是 Bose 气体冷却到接近绝对零度时的一种物态,是 1920 年前后 Einstein 在 Bose 分析光子行为的工作基础上对有质量的粒子所作的预测.20 世纪 90 年代以来,在 3 位物理学家 (Chu (朱棣文)、Cohen、Phillips) 的杰出工作下,激光冷却与囚禁中性原子技术得到了极大发展,也为 Bose-Einstein 凝聚的实现提供了条件.1995 年,第一批实现 Bose-Einstein 凝聚 (BEC) 的几个研究小组分别来自美国科罗拉多大学实验天体物理联合研究所 (JILA)、美国莱斯大学 (Bradley 小组)、麻省理工学院 (MIT) (Wolfgang Ketterle 小组),他们分别独立宣告在实验上观察到了 Bose-Einstein 凝聚现象,在物理界引起了强烈反响,是 Bose-Einstein 凝聚研究历史上的一个重要里程碑.此后,有关 BEC 的研究迅速发展,观察到了一系列新的现象,如 BEC 的相干性、Josephson 效应、涡旋、超冷 Fermi 原子气体.

为了研究 Bose-Einstein 凝聚态的基态解和动力学问题,2005 年, Bao 等^[1] 计算了旋转 Bose-Einstein 凝聚态的基态、对称及中心的漩涡态,并研究了其能量和化学势的变化.2017 年,冯悦^[2] 介绍了在多维势阱下的一种时空自适应有限元方法求解 Bose-Einstein 凝聚态的基态解.同年, Liu 等^[3] 提出了梯度法来求解旋转的双原子 Bose-Einstein 凝聚态基态解,并用大量的例子来证明其有效性.2018 年,温建蓉等^[4] 采用数值方法和 Fermi 近似来求解非线性 Schrödinger 方程,并且研究了 Bose 子凝聚态的基态稳定性.2021 年, Gaidamour 等^[5] 提出了一个 HPC 谱解器 (BEC2HPC), 用来求解非线性的 Schrödinger 方程和带旋转的 BEC 基态解问题,该方法主要考虑基于快速 Fourier 变化的标准伪谱离散化方法,再采用预处理非线性共轭梯度方法来求解归一化约束条件下能量泛函极小化问题的基态解.2020 年,王智军^[6] 介绍了正规梯度流和预条件共轭梯度法求旋转 Bose-Einstein 凝聚体的基态.同年, Xu 等^[7] 改进了时空自适应有限元方法求解 Bose-Einstein 凝聚态的基态解.2022 年, Chen 等^[8] 引入了两种二阶流作为约束非凸优化问题的能量最小化策略来求解带旋转的 Bose-Einstein 凝聚态的基态问题,并且讨论了几种数值离散方案.而针对非旋转 Bose-Einstein 凝聚, 1995 年, Edwards 等^[9] 提出了一种 Runge-Kutta 方法来解决方程的基态解.2003 年, Bao 和 Du^[10] 利用归一化的梯度流方法来计算 Bose-Einstein 凝聚态的基态解和第一激发态问题,并探讨了离散系统的稳定性.2005 年, Bao 等^[11-12] 介绍了时间分裂谱方法,用来计算 Bose-Einstein 凝聚态的基态解,并验证了该方法的有效性和准确性.2007 年,舒级等^[13] 在二维空间中讨论了一类拟线性 Schrödinger 方程,并证明了该方程所对应初值问题的解在一定条件下爆破,同时利用变分方法,也得到了整体解存在的一个充分条件.2013 年, Caliarì 等^[14] 利用 MATLAB 的一个套件程序 (GSGPES) 来求解 GPE 系统的基态解问题.2011 年, 华冬英等^[15] 将具有径向对称的三维 Bose-Einstein 凝聚态问题简化为一维的雪茄形问题,并提出了有限元虚数法求解基态解问题.2017 年, Wu 等^[16] 使用一种正则化 Newton 法来求解 Bose-Einstein 凝聚态的基态解.2018 年, 杨娜等^[17] 针对广义带导数的非线性 Schrödinger 方程的精确解问题进行了研究分析,采用行波变换,将其化为常微分方程动力系统,并计算出该方程动力系统的首次积分,讨论了系统在不同参数条件下的奇点与相图,得到了对应的精确解.2019 年,代猛等^[18] 研究了立方 Schrödinger 方程的二阶向后差分有限元方法 (BDF2-FEM) 的无条件最优误差估计.2021 年,曹蕊等^[19] 用一种迭代求解方法对所得非线性离散方程进行计算,与常规采用的线性化处理方法所得的数值结果进行了详细比较和分析.结果表明,线性化求解法和迭代求解法这两种算法均可用于求解基态解,计算所得能量均随时间演化呈衰减趋势.而求基态解的数值方法通常分为三类:第一类就是本文所用的方法,第二类是直接离散原来泛函极小值问题所对应的 Euler-Lagrange 方程,第三类是构造含时间的梯度流方法.三类方法各有优势,第二类方法的优点是求解跟矩阵相关的非线性特征向量与特征值问题,第三类方法是求解含时间的偏微分方程,而本文这种方法的优点在于可以使用现有的最优化理论与方法^[20] 中介绍的 constrained minimization 方法来求解带约束的优化问题.基于此,本文对 Bose-Einstein 凝聚态的基态解问题做了 3 个方面的研究.首先,对 Bose-Einstein 凝聚态的 Gross-Pitaevskii 方程 (GPE) 进行降维和无量纲化处理,将 GPE 问题转换成能量泛函极小值问题.其次,尝试通过 Legendre 配置谱方法^[21] 的离散方法对能量泛函极小值问题进行离散.最后,进行数值模拟实验,并对实验结果进行分析,得出结论.

本文的结构安排如下:第 1 节对 Bose-Einstein 凝聚态的能量泛函极小值模型进行了简单的介绍;第 2

节介绍了 Legendre 配置谱方法一维和二维的具体离散格式;第 3 节通过给出的数值例子对该问题进行数值模拟并进行了分析;第 4 节对本文的工作做了一个简单的总结.

1 Bose-Einstein 凝聚态的能量泛函极小值模型简介

自从稀 Bose 原子气体中首次实验的实现, BEC 引起了原子、分子和光学 (AMO) 物理界和凝聚态物质界的极大兴趣. 在描述三维 (3D) 的 GPE 时^[22-25], 可以用非线性 Schrödinger 方程 (NLSE) 或宏观波函数 $\psi = \psi(x, t)$ 来描述绝对零度和低温状态下的性质. 然后通过使用降维和无量纲化^[1, 26]的手法对原问题进行适当降维并得到无量纲 GP 方程 (对于非旋转的 BEC, 即 $\Omega = 0$ 时 $d = 1, 2, 3$):

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(x) + \beta |\psi(x, t)|^2 \right) \psi(x, t), \quad x \in \mathbb{R}^d, t > 0, \quad (1)$$

其中 $\beta \in \mathbb{R}$ 为无量纲化相互作用系数, $V(x)$ 为无量纲化实值外部捕获势. 且波函数归一化和能量泛函分别表示为

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

$$E(\phi) = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla \phi(x)|^2 + V(x) |\phi(x)|^2 + \frac{\beta}{2} |\phi(x)|^4 \right] dx. \quad (3)$$

因此 BEC 的基态通常被定义为非凸极小化问题的最优值问题^[27-29]:

$$\phi_g = \arg \min_{\phi \in S} E(\phi), \quad (4)$$

其中球面约束 S 被定义为

$$S = \left\{ \phi \mid E(\phi) < \infty, \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx = 1 \right\}. \quad (5)$$

我们能够验证问题 (4) 的变分形式是一个非线性特征值问题.

对于方程 (3), 令

$$F(\phi) = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} \phi_x \bar{\phi}_x + V(x) \phi \bar{\phi} + \frac{\beta}{2} \phi \bar{\phi} \phi \bar{\phi} \right] dx, \quad (6)$$

存在实数 μ , 使得

$$f(\phi) = F(\phi) - \mu \left(\int_{\mathbb{R}^d} \phi \bar{\phi} dx - 1 \right). \quad (7)$$

根据变分法的基本引理

$$\frac{\partial F}{\partial \phi} = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial (\nabla \phi)} \right) = 0 \quad (8)$$

可得

$$\int_{\mathbb{R}^d} -\frac{1}{2} \nabla^2 \phi(x) + V(x) \phi(x) + \beta \phi^2(x) \bar{\phi}(x) - \mu \phi(x) dx = 0. \quad (9)$$

即得到在限制条件下求解特征值问题:

$$\mu \phi(x) = -\frac{1}{2} \nabla^2 \phi(x) + V(x) \phi(x) + \beta |\phi(x)|^2 \phi(x), \quad (10)$$

$$\|\phi\|_2^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx = 1. \quad (11)$$

这是一个正规化限制下的非线性特征值问题, 任何特征值 μ 都可以用与之对应的 $\phi(x)$ 通过下式得到:

$$\mu = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + V(x) |\phi|^2 + \beta |\phi|^4 \right] dx = E(\phi) + \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\beta}{2} |\phi|^4 dx. \quad (12)$$

事实上, 求得特征函数是单位球面上能量泛函的临界点. 为了找到 Bose-Einstein 凝聚态的基态解, 在单位球面上最小化能量泛函, 即求 $\phi_g \in S$, 使得满足式 (4) 和 (5).

2 能量泛函极小值问题的离散化

2.1 一维情形

在齐次 Dirichlet 边界条件下,对有界计算区域 U 上截断的

$$E(\phi) = \int_U \left[\frac{1}{2} |\nabla \phi(x)|^2 + V(x) |\phi(x)|^2 + \frac{\beta}{2} |\phi(x)|^4 \right] dx \quad (13)$$

和

$$S = \left\{ \phi \mid E(\phi) < \infty, \int_U |\phi(x)|^2 dx = 1 \right\} \quad (14)$$

进行离散化,用 Lagrange 插值多项式来逼近空间导数,用 Legendre-Gauss-Lobatto 积分公式求解定积分.接下来我们进行方程的离散.

选取 $U = (a, b)$ 作为计算空间,对该定义域进行区域剖分,设 N 是空间区域分割的网格数,定义节点值 $x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k (k = 0, 1, 2, \dots, N)$, 其中 $s_k \in [-1, 1]$ 为 x 方向上的 Legendre-Gauss-Lobatto 节点.定义 ω_k 为 Legendre-Gauss-Lobatto 权重点, $a = x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_{N-1} < x_N = b$.用 ϕ_k 表示函数 $\phi(x_k)$ 在节点 x_k 处的近似值.

首先基于 Legendre-Gauss-Lobatto 节点,有如下的 Lagrange 插值多项式形式:

$$\phi(x) \approx \phi_N(x) = \sum_{j=0}^N \phi(x_j) l_j \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right), \quad (15)$$

其中 $l_j(s)$ 为 Lagrange 插值基函数

$$l_j \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right) = \frac{-1}{N(N+1)} \frac{\left(1 - \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right)^2 \right) P'_N \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right)}{P_N \left(\frac{x_j - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right)} \quad (16)$$

且满足 Lagrange 正交性.

$$\phi'(x_k) = \sum_{j=0}^N \phi(x_j) dl_j \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right) / dx \Big|_{x=x_k} = \frac{2}{b-a} \sum_{j=0}^N \phi(x_j) D_{kj}, \quad (17)$$

其中

$$D_{kj} = \begin{cases} -\frac{N(N+1)}{4}, & k=j=0, \\ \frac{P_N(x_k)}{P_N(x_j)} \frac{1}{x_k - x_j}, & k \neq j, \\ 0, & k=j=1, 2, \dots, N-1, \\ \frac{N(N+1)}{4}, & k=j=N. \end{cases} \quad (18)$$

因此对原函数基于 Legendre-Gauss-Lobatto 积分公式进行如下的离散操作:

$$\begin{aligned} E(\phi) &= \int_U \left[\frac{1}{2} |\nabla \phi(x)|^2 + V(x) |\phi(x)|^2 + \frac{\beta}{2} |\phi(x)|^4 \right] dx = \\ &= \int_a^b \left[\frac{1}{2} (\phi'(x))^2 + V(x) \phi^2(x) + \frac{\beta}{2} \phi^4(x) \right] dx = \\ &= \int_{-1}^1 \left[\frac{1}{2} \left(\phi' \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s \right) \right)^2 + V \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s \right) \phi^2 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s \right) + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\beta}{2} \phi^4 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s \right) \Big] \frac{b-a}{2} ds \approx \\ & \sum_{k=0}^N \left[\frac{1}{2} \left(\phi' \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k \right) \right)^2 + V \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k \right) \phi^2 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k \right) \right] + \\ & \frac{\beta}{2} \phi^4 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k \right) \Big] \frac{b-a}{2} \omega_k = \\ & \sum_{k=0}^N \left[\frac{1}{2} (\phi'(x_k))^2 + V(x_k) \phi^2(x_k) + \frac{\beta}{2} \phi^4(x_k) \right] \frac{b-a}{2} \omega_k \equiv f(\Phi), \end{aligned}$$

其中 $\Phi = (\phi(x_1), \phi(x_2), \dots, \phi(x_{N-1}))$.

同样地,我们把约束条件也进行离散操作:

$$\begin{aligned} \|\phi\|^2 & \approx \int_a^b \phi^2(x) dx = \\ & \int_{-1}^1 \phi^2 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s \right) \frac{b-a}{2} ds = \\ & \sum_{k=0}^N \phi^2 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k \right) \frac{b-a}{2} \omega_k = \\ & \sum_{k=0}^N \phi^2(x_k) \frac{b-a}{2} \omega_k = 1 \equiv g(\Phi), \end{aligned}$$

其中 $\Phi = (\phi(x_1), \phi(x_2), \dots, \phi(x_{N-1}))$.

于是得到一个普通优化问题:

$$\min_{\Phi \in U^{N-1}} f(\Phi), \quad \text{s.t.} \quad g(\Phi) - 1 = 0. \quad (19)$$

2.2 二维情形

在齐次 Dirichlet 边界条件下,对有界计算区域 U 上截断的

$$E(\phi) = \int_a^b \int_c^d \left[\frac{1}{2} |\nabla \phi(x, y)|^2 + V(x, y) |\phi(x, y)|^2 + \frac{\beta}{2} |\phi(x, y)|^4 \right] dx dy$$

和

$$S = \left\{ \phi \mid E(\phi) < \infty, \int_a^b \int_c^d |\phi(x, y)|^2 dx dy = 1 \right\}$$

进行离散化,用 Lagrange 插值多项式来逼近空间导数,用 Legendre-Gauss-Lobatto 积分公式求解定积分.接下来我们进行方程的离散.

选取 $U = (a, b) \times (c, d)$ 作为空间,对该定义域进行区域剖分,设 N 是空间区域分割的网格数,定义节点

值 $x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k (k=0, 1, 2, \dots, N)$, $y_j = \frac{d+c}{2} + \frac{d-c}{2} r_j (j=0, 1, 2, \dots, N)$, 其中 $s_k, r_j \in [-1, 1]$ 分别为 x, y 方向的 Legendre-Gauss-Lobatto 节点.定义 ω_k 为 Legendre-Gauss-Lobatto 权重点,用 $\phi_{k,j}$ 来表示函数 $\phi(x_{k,j})$ 在节点 (x_k, y_j) 处的近似值.

首先基于 Legendre-Gauss-Lobatto 节点,有如下的 Lagrange 插值多项式形式:

$$\phi(x, y) \approx \phi_N(x, y) = \sum_{i=0}^N \sum_{n=0}^N \phi(x_i, y_n) l_i \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right) l_n \left(\frac{y - \frac{c+d}{2}}{\frac{d-c}{2}} \right), \quad (20)$$

其中 $l_i(s), l_n(s)$ 为 Lagrange 插值基函数

$$l_i \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right) = \frac{-1}{N(N+1)} \frac{\left(1 - \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right) / \frac{b-a}{2} \right)^2 P'_N \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right)}{P_N \left(\frac{x_i - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right)}, \quad (21)$$

$$l_n \left(\frac{y - \frac{c+d}{2}}{\frac{d-c}{2}} \right) = \frac{-1}{N(N+1)} \frac{\left(1 - \left(\left(y - \frac{c+d}{2} \right) / \frac{d-c}{2} \right)^2 \right) P'_N \left(\left(y - \frac{c+d}{2} \right) / \frac{d-c}{2} \right)}{P_N \left(\left(y_n - \frac{c+d}{2} \right) / \frac{d-c}{2} \right)}, \quad (22)$$

且满足 Lagrange 正交性.

$$\phi_x(x, y) = \sum_{i=0}^N \sum_{n=0}^N \phi(x_i, y_n) \frac{dl_i \left(\left(x - \frac{a+b}{2} \right) / \frac{b-a}{2} \right)}{dx} l_n \left(\frac{y - \frac{c+d}{2}}{\frac{d-c}{2}} \right) \Bigg|_{\substack{y=y_j \\ x=x_k}} = \frac{2}{b-a} \sum_{i=0}^N \sum_{n=0}^N \phi(x_i, y_n) D_{ki} l_n \left(\frac{y_j - \frac{c+d}{2}}{\frac{d-c}{2}} \right), \quad (23)$$

$$\phi_y(x, y) = \sum_{i=0}^N \sum_{n=0}^N \phi(x_i, y_n) \frac{dl_n \left(\left(y - \frac{c+d}{2} \right) / \frac{d-c}{2} \right)}{dy} l_i \left(\frac{x - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right) \Bigg|_{\substack{y=y_j \\ x=x_k}} = \frac{2}{d-c} \sum_{i=0}^N \sum_{n=0}^N \phi(x_i, y_n) D_{jn} l_i \left(\frac{x_k - \frac{a+b}{2}}{\frac{b-a}{2}} \right), \quad (24)$$

其中

$$D_{ki} = \begin{cases} -\frac{N(N+1)}{4}, & k=i=0, \\ \frac{P_N(x_k)}{P_N(x_i)} \frac{1}{x_k - x_i}, & k \neq i, \\ 0, & k=i=1, 2, \dots, N-1, \\ \frac{N(N+1)}{4}, & k=i=N, \end{cases} \quad (25)$$

$$D_{jn} = \begin{cases} -\frac{N(N+1)}{4}, & j=n=0, \\ \frac{P_N(x_j)}{P_N(x_n)} \frac{1}{y_j - y_n}, & j \neq n, \\ 0, & j=n=1, 2, \dots, N-1, \\ \frac{N(N+1)}{4}, & j=n=N. \end{cases} \quad (26)$$

因此对原函数基于 Legendre-Gauss-Lobatto 积分公式进行如下的离散操作:

$$\begin{aligned} E(\phi) &= \int_a^b \int_c^d \left[\frac{1}{2} \phi_x^2(x, y) + \frac{1}{2} \phi_y^2(x, y) + V(x, y) \phi^2(x, y) + \frac{\beta}{2} \phi^4(x, y) \right] dx dy \approx \\ &= \sum_{k=0}^N \sum_{j=0}^N \left[\frac{1}{2} \phi_x^2 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k, \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2} r_j \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2} \phi_y^2 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} z_k, \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2} z_j \right) + \right. \\ &\quad \left. V \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k, \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2} r_j \right) \cdot \phi^2 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k, \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2} r_j \right) + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left. \frac{\beta}{2} \phi^4 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k, \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2} r_j \right) \right] \frac{b-a}{2} \cdot \frac{d-c}{2} \omega_k \omega_j = \\ & \sum_{k=0}^N \sum_{j=0}^N \left[\frac{1}{2} \phi_x^2(x_k, y_j) + \frac{1}{2} \phi_y^2(x_k, y_j) + V(x_k, y_j) \phi^2(x_k, y_j) + \right. \\ & \left. \frac{\beta}{2} \phi^4(x_k, y_j) \right] \frac{b-a}{2} \cdot \frac{d-c}{2} \omega_k \omega_j \equiv f(\Phi), \end{aligned}$$

其中 Φ 是一个 $(N-1) \times (N-1)$ 的矩阵.

同样地,把约束条件也进行离散操作:

$$\begin{aligned} \|\phi\|^2 & \approx \int_a^b \int_c^d \phi^2(x, y) dx dy = \\ & \sum_{k=0}^N \sum_{j=0}^N \phi^2 \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} s_k, \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2} r_j \right) \cdot \frac{b-a}{2} \cdot \frac{d-c}{2} \omega_k \omega_j = \\ & \sum_{k=0}^N \sum_{j=0}^N \phi^2(x_k, y_j) \frac{b-a}{2} \cdot \frac{d-c}{2} \omega_k \omega_j = 1 \equiv g(\Phi), \end{aligned}$$

其中 Φ 是一个 $(N-1) \times (N-1)$ 的矩阵.

于是得到一个普通优化问题:

$$\min_{\Phi \in U^{(N-1) \times (N-1)}} f(\Phi), \quad \text{s.t.} \quad g(\Phi) - 1 = 0. \quad (27)$$

对于优化问题(17)和(25),我们对解的存在性进行了讨论.首先针对约束优化问题考虑使用 Lagrange 函数:

$$L(\Phi, \lambda) = f(\Phi) - \lambda (g(\Phi) - 1), \quad (28)$$

其中 λ 为 Lagrange 乘子.

在 Φ^*, λ^* 处对 Lagrange 函数(26)求偏导:

$$\nabla_{\Phi} L(\Phi^*, \lambda^*) = \nabla_{\Phi} f(\Phi^*) - \lambda^* \nabla_{\Phi} (g(\Phi^*) - 1). \quad (29)$$

因此对于方程(27),如果对于任意解 Φ^*, λ^* 使得 $\nabla_{\Phi} L(\Phi^*, \lambda^*) \neq 0$,则优化问题的解不存在.反之,如果对于任意解 Φ^*, λ^* 使得 $\nabla_{\Phi} L(\Phi^*, \lambda^*) = 0$,则此优化问题解存在,并且满足最优性条件(KKT):

$$\begin{cases} \nabla_{\Phi} L(\Phi^*, \lambda^*) = 0, \\ g(\Phi^*) - 1 = 0, \\ \lambda^* \geq 0, \\ \lambda^* (g(\Phi^*) - 1) = 0. \end{cases}$$

针对以上一维、二维的离散优化问题有解的情况,考虑对优化问题(17)和(25)使用现有的最优化理论与文献[20]中介绍的内点法来求解.

3 数值计算

前面我们已经对一维和二维的能量泛函方程进行了离散,下面对具体的计算例子进行数值计算和分析.

3.1 一、二维数值误差分析

在文献[30-31]中已经证明了在近似空间中的误差估计,在本小节中,我们首先考虑能量泛函极小值问题(4)的一种简单情形,特别地,当 $\beta = 0$ 时,一维情形($d = 1$),能量泛函极小值问题(4)有真解,为 $\phi_g(x) = (1/\pi^{1/4}) e^{-x^2/2}$.二维情形($d = 2$),能量泛函极小值问题(4)有真解,为 $\phi_g(x) = (1/\pi^{1/2}) e^{-(x^2+y^2)/2}$,并且考虑 Legendre 配置谱方法的近似和空间 $X_N = \text{span} \{l_i(x), i = 1, 2, \dots\}$,其中 $l_i(x)$ 为 Lagrange 基函数,假设 ϕ_N 为离散问题的最小化解,则

$$\phi_N = \sum_{i=0}^N \phi_i l_i(x).$$

在 X_N 空间下,有如下形式:

$$\|\phi_N - \phi_g\|_{L^2} \leq \|\phi_N - \phi_g\|_{H^1} \leq C \min_{v_N \in X_N} \|v_N - \phi\|_{H^1}.$$

又由式(16)知,当 $N \rightarrow \infty$ 时, $\min_{v_N \in X_N} \|v_N - \phi\|_{H^1} \rightarrow 0$, 故当 $N \rightarrow \infty$ 时, $\|\phi_N - \phi_g\|_{L^2} \rightarrow 0$, 即是收敛的.

因此本文对离散误差 $\varepsilon = \|\phi_N - \phi_g\|_{L^2}$ 进行了数值模拟. 表 1 和表 2 为一维和二维的误差值与 N 的变化关系, 从表中数据可以看出当 $N \rightarrow \infty$ 时, 空间分割较细, $\phi_N \rightarrow \phi_g$, 则 $\|\phi_N - \phi_g\|_{L^2} \rightarrow 0$, 因此是具有收敛性的. 图 1 为一维 $(-16, 16)$ 和二维 $(-8, 8) \times (-8, 8)$ 的误差收敛性图像, 从图中可以发现当 $N \geq 30$ 时, 误差值很小, 收敛率快, 精确度很高. 此外 Legendre 配置谱方法具有收敛性强, 收敛速度快等特点.

表 1 一维情况下, 改变 N 的大小, 误差 ε 的变化情况

Table 1 In the 1D case, changes of error ε with N

N	10	20	30	40	50
error ε	6.46E-1	1.79E-1	4.67E-2	1.10E-2	1.10E-3

表 2 二维情况下, 改变 N 的大小, 误差 ε 的变化情况

Table 2 In the 2D case, changes of error ε with N

N	10	20	30	40	50
error ε	3.65E-1	2.23E-2	5.38E-4	9.31E-7	1.22E-9

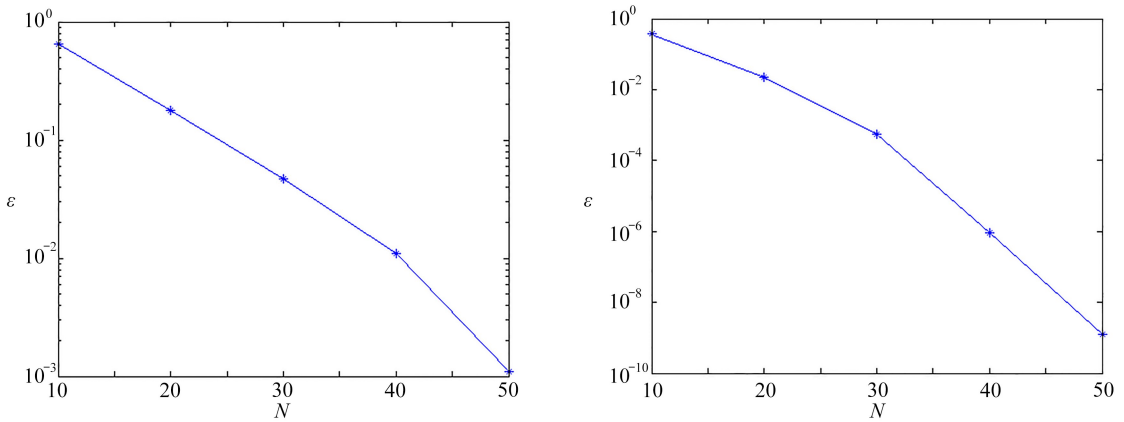


图 1 一维(左图)、二维(右图)情况下, 改变 N 的大小, 误差 ε 的变化情况

Fig. 1 Changes of error ε with N in the 1D case (left) and the 2D case (right)

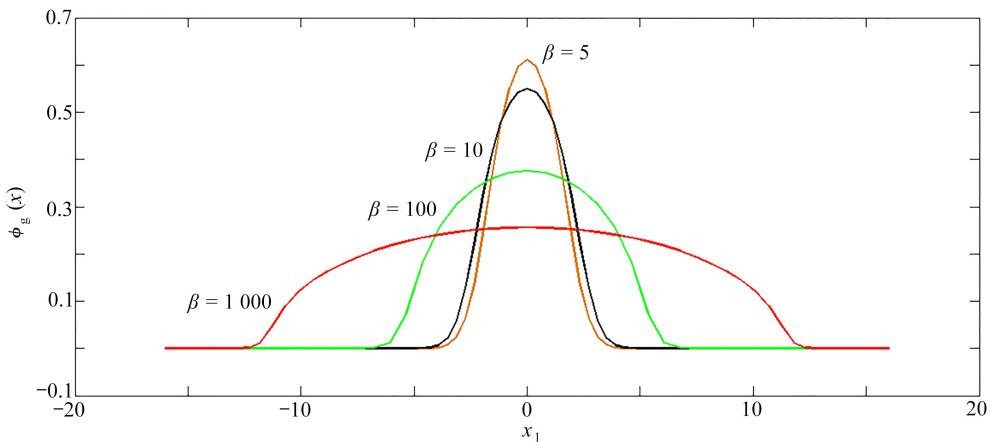


图 2 $\beta = 5, 10, 100, 1\ 000$ 时, 一维 Bose-Einstein 凝聚态的基态解 $\phi_g(x)$

Fig. 2 Ground state solution $\phi_g(x)$ of the 1D Bose-Einstein condensates for $\beta = 5, 10, 100, 1\ 000$

3.2 一维情形

针对具有强相互作用的非旋转 BEC, 即 $\beta \gg 1$, 初始解通常选择 Thomas-Fermi 近似:

$$\phi_0(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu - V(x)}{\beta}}, & \mu - V(x) \geq 0, \\ 0, & \text{others,} \end{cases}$$

其中 $\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{3\beta}{2} \right)^{2/3}$, 并且我们取 $a = -16, b = 16, U = (-16, 16)$. 然后进行数值模拟得到图 2, 从图中可以发现基态解在 $x = 0$ 处的值随着 β 的增大而逐渐减小, 且随着 β 的增大, 基态解会提前出现山峰状的区域, 在该区域基态解数值变化剧烈. 表 3 为当 $N = 64$ 时, Fourier 谱方法和 Legendre 配置谱方法离散后得到的函数值与 β 的变化关系. 在表中我们对两种离散格式进行了比较, 其中特殊情况 $\beta = 0$ 时采取的初始条件为 $\phi_0(x) = (1/\pi^{1/4}) e^{-x^2/2}$. 通过比较可以发现, Legendre 配置谱方法离散后得到的函数值与 Fourier 谱方法离散后得到的函数值误差很小.

表 3 一维情况下 Legendre 配置谱方法的能量值 $E_\beta(\phi_g)$ 和 Fourier 谱方法的能量值 $E_\beta(\phi_g^{FP})$ 与 β 之间的变化情况

Table 3 Energy value $E_\beta(\phi_g)$ of the Legendre collocation spectrum method and energy value $E_\beta(\phi_g^{FP})$ of the Fourier spectrum method in the 1D case, changing with β

β	0	5	10	100	1 000
$E_\beta(\phi_g)$	0.499 9	1.316 0	1.947 2	8.508 5	39.322 4
$E_\beta(\phi_g^{FP})$	0.500 0	1.316 1	1.947 1	8.508 5	39.322 4

3.3 二维情形

对于二维方程, 初始解同样选择 Thomas-Fermi 近似:

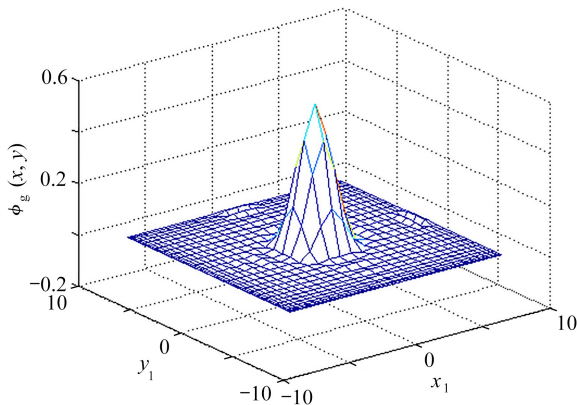
$$\phi_0(x, y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu - V(x, y)}{\beta}}, & \mu - V(x, y) \geq 0, \\ 0, & \text{others,} \end{cases}$$

其中 $\mu = (\beta/\pi)^{1/2}$, 并且我们取 $U = (-8, 8) \times (-8, 8)$, 然后进行数值模拟. 表 4 为当 $N = 30$ 时, Fourier 谱方法和 Legendre 配置谱方法离散后得到的函数值与 β 的变化关系. 在表中我们对两种离散格式进行了比较, 其中特殊情况 $\beta = 0$ 时采取的初始条件为 $\phi_0(x, y) = (1/\pi^{1/2}) e^{-(x^2+y^2)/2}$. 通过比较可以发现, Legendre 配置谱方法离散后得到的函数值与 Fourier 谱方法离散后得到的函数值误差也很小. 图 3 为在 $N = 30$ 的情况下 $\beta = 5, 10, 100, 1\ 000$ 时, 二维 Bose-Einstein 凝聚态的基态解 $\phi_g(x, y)$.

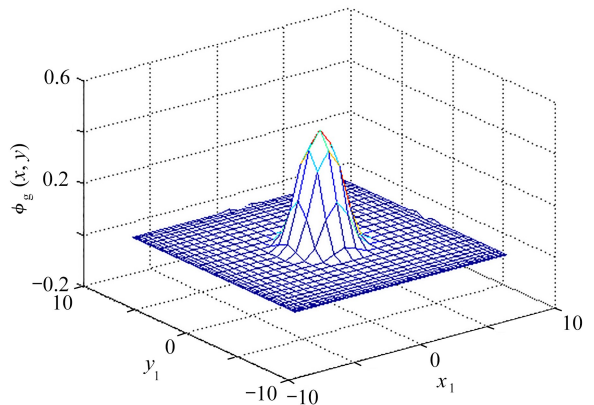
表 4 二维情况下 Legendre 配置谱方法的能量值 $E_\beta(\phi_g)$ 和 Fourier 谱方法的能量值 $E_\beta(\phi_g^{FP})$ 与 β 之间的变化情况

Table 4 Energy value $E_\beta(\phi_g)$ of the Legendre collocation spectrum method and energy value $E_\beta(\phi_g^{FP})$ of the Fourier spectrum method in the 2D case, changing with β

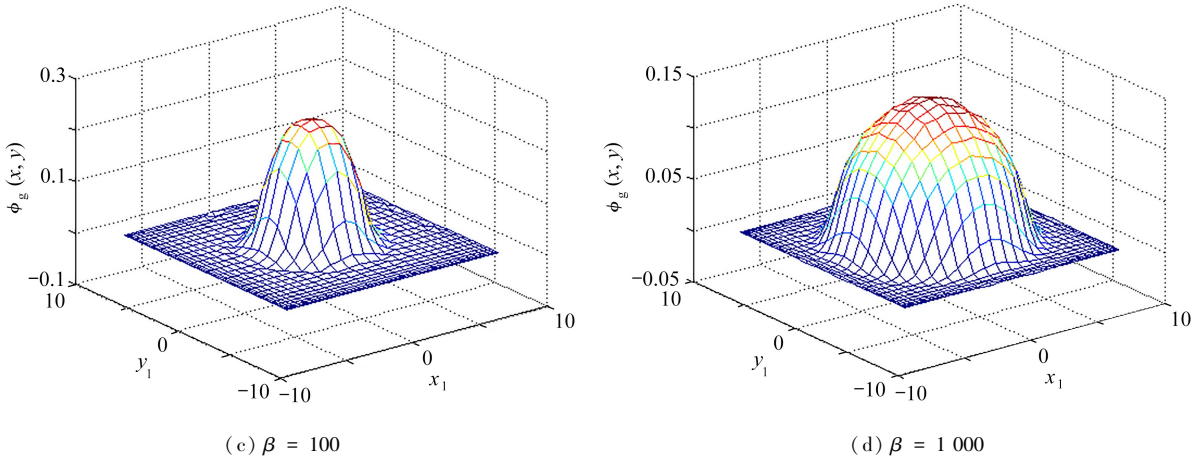
β	0	5	10	100	1 000
$E_\beta(\phi_g)$	1	1.437 1	1.611 7	3.983 6	12.001
$E_\beta(\phi_g^{FP})$	0.968 7	1.501 1	1.697 1	4.004 0	12.001



(a) $\beta = 5$



(b) $\beta = 10$

图3 $\beta = 5, 10, 100, 1000$ 时的 $\phi_g(x, y)$ Fig. 3 The $\phi_g(x, y)$ graphs for $\beta = 5, 10, 100, 1000$

在上述数值算例中我们对 Legendre 配置谱方法求解的数值实验结果与 Fourier 谱方法求解的数值实验结果进行了比较,发现 Legendre 配置谱方法相对而言计算精度更高,而此方法随着精度更高的同时出现了计算效率不高的情况,但是计算精度的优点远远超过计算效率慢的缺点,因此针对非旋转的 Bose-Einstein 凝聚态的基态解问题可以使用 Legendre 配置谱方法来求解。

4 结 论

本文尝试利用 Legendre 配置谱方法求解 Bose-Einstein 凝聚态的基态解,首先系统地介绍了 Bose-Einstein 凝聚的相关历史背景与 Bose-Einstein 的物理模型,然后通过研究模型的推导过程,将 GPE 基态解问题转换成能量泛函极小值问题,对其泛函使用 Legendre 配置谱方法进行离散化,最后进行数值模拟实验.通过数值模拟发现随着数值解趋于稳定,能量也会趋于稳定变化且变化缓慢.在本文实验中,我们将 Legendre 配置谱方法求解的实验结果与 Fourier 谱方法求解的实验结果进行了比较分析,最后通过实验分析结果得出了一个结论:针对非旋转的 Bose-Einstein 凝聚态的基态解问题可以使用 Legendre 配置谱方法来求解,且误差较小。

本文在利用 Legendre 配置谱方法求解 Bose-Einstein 凝聚态的基态解问题上也遇到了一些困难,例如,数值计算效率慢等.因此,接下来的工作我们会继续对 Legendre 配置谱方法求解 Bose-Einstein 凝聚态的基态解问题进行相关的研究,尝试找出一种既能提高效率又能增加计算精度的方法.此外我们也会关注更高维的情况以及带旋转型 Bose-Einstein 凝聚态的基态解问题。

参考文献 (References):

- [1] BAO W, WANG H, MARKOWICH P A. Ground, symmetric and central vortex states in rotating Bose-Einstein condensates[J]. *Communications in Mathematical Sciences*, 2005, **3**(1): 57-88.
- [2] 冯悦. Bose-Einstein 凝聚基态解的时空自适应方法[D]. 硕士学位论文. 杭州: 浙江大学, 2017. (FENG Yue. A spatiotemporal adaptive method for Bose-Einstein condensed ground state solutions[D]. Master Thesis. Hangzhou: Zhejiang University, 2017. (in Chinese))
- [3] LIU H, DENG D, PANG P, et al. Numerical simulations on ground states for rotating two-component Bose-Einstein condensates[J]. *Advances in Applied Mathematics*, 2017, **6**(9): 1187-1200.
- [4] 温建蓉, 李晋斌. 单组份玻色-爱因斯坦凝聚体基态稳定性研究[J]. 西安文理学院学报(自然科学版), 2018, **21**(1): 11-15. (WEN Jianrong, LI Jinbin. Research on ground state stability of single-component Bose-Einstein condensate[J]. *Journal of Xi'an University(Natural Science Edition)*, 2018, **21**(1): 11-15. (in Chinese))
- [5] GAIDAMOUR J, TANG Q, ANTOINE X. BEC2HPC: a HPC spectral solver for nonlinear Schrödinger and rotating Gross-Pitaevskii equations. Stationary states computation [J]. *Computer Physics Communications*,

- 2021, **265**: 108007.
- [6] 王智军. 带杂质旋转玻色-爱因斯坦凝聚体基态的数值模拟[D]. 硕士学位论文. 长沙: 湖南师范大学, 2020. (WANG Zhijun. Numerical simulation of the ground state of a Bose-Einstein condensate with impurities[D]. Master Thesis. Changsha: Hunan Normal University, 2020. (in Chinese))
- [7] XU F, HUANG Q, WANG M, et al. A novel adaptive finite element method for the ground state solution of Bose-Einstein condensates[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2020, **385**: 125404.
- [8] CHEN H, DONG G, LIU W, et al. Second-order flows for computing the ground states of rotating Bose-Einstein condensates[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, **475**: 111872.
- [9] EDWARDS M, BURNETT K. Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation for small samples of trapped neutral atoms[J]. *Physical Review A*, 1995, **51**(2): 1382.
- [10] BAO W, DU Q. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2003, **25**(5): 1674-1697.
- [11] BAO W, SHEN J. A fourth-order time-splitting Laguerre-Hermite pseudo-spectral method for Bose-Einstein condensates[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2005, **26**(6): 2010-2028.
- [12] BAO W, JAKSCH D, MARKOWICH P A. Numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensation[J]. *Journal of Computational Physics*, 2003, **187**(1): 318-342.
- [13] 舒级, 张健. 一类拟线性 Schrödinger 方程[J]. 应用数学和力学, 2007, **28**(7): 877-882. (SHU Ji, ZHANG Jian. On a class of quasilinear Schrödinger equations[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2007, **28**(7): 877-882. (in Chinese))
- [14] CALIARI M, RAINER S. GSGPEs: a MATLAB code for computing the ground state of systems of Gross-Pitaevskii equations[J]. *Computer Physics Communications*, 2013, **184**(3): 812-823.
- [15] 华冬英, 邱镜亮. 玻色-爱因斯坦凝聚基态解的有限元数值计算[J]. 北京信息科技大学学报, 2011, **26**(6): 21-25. (HUA Dongying, QIU Jingliang. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensations by finite element method[J]. *Journal of Beijing Information Science & Technology University*, 2011, **26**(6): 21-25. (in Chinese))
- [16] WU X, WEN Z, BAO W. A regularized Newton method for computing ground states of Bose-Einstein condensates[J]. *Journal of Scientific Computing*, 2017, **73**: 303-329.
- [17] 杨娜, 陈龙伟, 熊梅. 广义带导数的非线性 Schrödinger 方程的动态分析和精确解[J]. 应用数学和力学, 2018, **39**(10): 1198-1205. (YANG Na, CHEN Longwei, XIONG Mei. Dynamic analysis and exact solution of the general nonlinear Schrödinger equation with derivative[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2018, **39**(10): 1198-1205. (in Chinese))
- [18] 代猛, 尹小艳. 立方 Schrödinger 方程的半隐格式 BDF2-FEM 无条件最优误差估计[J]. 应用数学和力学, 2019, **40**(6): 663-681. (DAI Meng, YIN Xiaoyan. Unconditionally optimal error estimates of the semi-implicit BDF2-FEM for cubic Schrödinger equations[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019, **40**(6): 663-681. (in Chinese))
- [19] 曹蕊, 华冬英, 王茜, 等. Bose-Einstein 凝聚问题基态解的数值方法比较和分析[J]. 北京信息科技大学学报, 2021, **36**(6): 6-13. (CAO Rui, HUA Dongying, WANG Xi, et al. Comparison and analysis of numerical methods for ground state solution of Bose-Einstein condensation[J]. *Journal of Beijing Information Science & Technology University*, 2021, **36**(6): 6-13. (in Chinese))
- [20] NOCEDAL J, WRIGHT S J. *Numerical Optimization*[M]. 2nd ed. New York: Springer, 2006.
- [21] SHEN J, TANG T, WANG L L. *Spectral Methods*[M]. Berlin: Springer, 2011.
- [22] ANGLIN J R, KETTERLE W. Bose-Einstein condensation of atomic gases[J]. *Nature*, 2002, **436**: 211-218.
- [23] DALFOVO F, GIORGINI S, PITAEVSKII L P, et al. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases[J]. *Review of Modern Physics*, 1998, **71**(3): 463-512.
- [24] PETHICK C J. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.

- [25] PITAEVSKII L, STRINGARI S. Bose-Einstein condensation[J]. *Physical Review Letters*, 2009, **103**(20): 200402.
- [26] BAO W, TANG W. Ground state solution of Bose-Einstein condensate by directly minimizing the energy functional[J]. *Journal of Computational Physics*, 2003, **187**(1): 230-254.
- [27] BAO W, CAI Y. Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensation[J]. *Kinetic and Related Models*, 2013, **6**(1): 1-135.
- [28] LIEB E H, SEIRINGER R, YNGVASON J. Bosons in a trap: a rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional[J]. *Physical Review A*, 2000, **61**(4): 043602.
- [29] PETHICK C J, SMITH H. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases: Theory of the Condensed State*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2001.
- [30] CANCÈS E, CHAKIR R, MADAY Y. Numerical analysis of nonlinear eigenvalue problems[J]. *Journal of Scientific Computing*, 2009, **45**(1): 1-24.
- [31] AN J, SHEN J, ZHANG Z. The spectral-Galerkin approximation of nonlinear eigenvalue problems[J]. *Applied Numerical Mathematics: Transactions of IMACS*, 2018, **131**: 1-15.