

数值求解耦合 Gross-Pitaevskii 方程组 基态解的离散归一化梯度流方法

赵子尧, 马强
(四川大学数学学院, 610064)

摘要: 本文提出了一种求解磁场项为常数的耦合 Gross-Pitaevskii 方程组基态解的数值方法. 基于单组分近似理论, 本文将方程组的能量函数等价于单组分的能量泛函, 然后基于降阶后的能量表达式提出了离散归一化梯度流数值方法. 数值算例表明, 该方法高效且可靠.

关键词: 耦合 Gross-Pitaevskii 方程组; 基态解; 单组分近似; 归一化梯度流

中图分类号: O241.82 **文献标志码:** A **DOI:** 10.19907/j.0490-6756.2024.011002

Numerical method for the ground state solution of coupled Gross-Pitaevskii equations

ZHAO Zi-Yao, MA Qiang
(School of Mathematics, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

Abstract: In this paper, a numerical method for solving the ground state solution of the coupled Gross-Pitaevskii equations with constant magnetic field term is proposed. Based on the single mode approximation theory, energy function of the equations is equivalently expressed by a reduced energy function with single component. Then, based on the method of discrete normalized gradient flow, the method is proposed by using the expression of reduced energy function. Numerical examples illustrate the reliability and performance of the method.

Keywords: Coupled Gross-Pitaevskii equations; Ground state solution; Single mode approximation; Normalized gradient flow
(2010 MSC 65M60)

1 引言

玻色-爱因斯坦凝聚 (Bose-Einstein Condensation, BEC) 是一种重要量子态. 1925年, Bose 和 Einstein 最早在理论上预言了它的存在^[1]. 在 BEC 中, 物质的温度接近绝对零度, 因而直到 1995年, 随着激光制冷和电磁俘获技术的成熟, 人类才首次在实验室中制备了分别由⁸⁷Rb 和²³Na 原子组

成的 BEC^[2,3].

在早期的制备实验中, 人们普遍使用磁场势阱来束缚原子, 所得到的 BEC 都是没有自旋的凝聚体. 随着光阱技术的发展, 2012年科学家们终于将自旋数不同的 BEC 分离出来^[4]. 我们将自旋数相同的原子的集合称为一个组分, 并将包含两种以上组分的 BEC 称为多组分旋量玻色-爱因斯坦凝聚体 (spinor Bose-Einstein Condensation, spinor

收稿日期: 2023-04-12

基金项目: 国家自然科学基金(11801387); 四川省自然科学基金(2022NSFSC0322)

作者简介: 赵子尧(1998-), 男, 重庆市人, 硕士, 主要从事数值分析与数值方法研究. E-mail: ziyao.zhao@foxmail.com

通讯作者: 马强. E-mail: maqiang809@scu.edu.cn

BEC). 2012 年制备得到的由 ^{23}Na 原子构成的旋量为 1 的玻色-爱因斯坦凝聚体^[5,6] (spin-1 Bose-Einstein Condensation, spin-1 BEC) 就是包含 3 种组分的 spinor BEC. 这些实验结果揭示了 spinor BEC 中蕴含的丰富物理现象, 同时也激发了科学家们对数值模拟 spinor BEC 基态的兴趣.

在量子理论中, 基态是物质在能量处于最低点时的状态. 在数学上, 基态可以表示为耦合 Gross-Pitaevskii 方程组的能量泛函在 H^1 函数空间中的极小值点. 我们将这个函数称为 spinor BEC 的基态解.

数值求解 spinor BEC 的基态解主要有两种方法. 第一种是离散归一化梯度流方法 (Gradient Flow with Discrete Normalization, GFDN). 该方法最早由 Bao 和 Du 于 2004 年提出, 用于计算单组分 BEC 的基态解^[7,8]. 由于 spin-1 BEC 只有质量和磁通量这两个守恒量, 不足以确定三个组分的单位化系数, 因而该方法不能直接用于计算自旋为 1 的玻色-爱因斯坦凝聚体的基态解^[8]. 2008 年, Bao 和 Lim^[9] 基于 spin-1 BEC 三个组分之间的化学势能关系提出了第三个单位化系数, 从而令该方法可被用于求解 spin-1 BEC 的基态. 第二种方法是带拉格朗日乘子的梯度流方法 (Gradient Flow with Lagrange Multiplier, GFLM). 该方法是一种基于拉格朗日乘子法的、满足质量守恒和磁通量守恒的最优化方法. 2008 年, Tian 等^[10] 利用该方

法数值模拟了一般旋量 F 的 BEC (spin- F BEC) 的基态解. 特别地, 在计算恒定 Ioffe - Pritchard 磁场中的 spin-1 BEC 的基态解时, 已有的方法^[11] 一般基于 spin-1 BEC 的通用数学模型来设计, 需要考虑 spin-1 BEC 的三个组分及其相互作用. 这就导致在大规模的数值模拟中这些方法的计算效率不高, 计算时间长, 对计算资源的占用大.

在本文中, 注意到耦合 Gross-Pitaevskii 方程组的基态解具有的特殊性质, 我们基于单组分近似方法 (Single Mode Approximation, SMA) 提出了一种新的基态解的数值求解方法, 并给出了数值算例. 相较于已有方法, 在相同计算精度下, 本算法高效且可靠.

2 模型

到目前为止, 在已有的描述 spin-1 BEC 的数学模型中, 最成功的是基于平均场理论^[12] 得到的耦合 Gross-Pitaevskii 方程组 (Coupled Gross-Pitaevskii Equations, CGPEs). 在平均场近似意义下, 我们可以用包含 3 个复数值波函数作为分量的函数向量 $\Psi(x, t) := (\psi_1(x, t), \psi_0(x, t), \psi_{-1}(x, t))$ 来表示 spin-1 BEC 的状态, 其中 x 是欧氏空间 \mathbb{R}^d 中的空间变量, t 是时间变量, 而 CGPEs 则是这些波函数的控制方程, 即 $\psi_1(x, t), \psi_0(x, t), \psi_{-1}(x, t)$ 满足如下的 CGPEs:

$$\begin{cases} i\partial_t \psi_1(x, t) = [H + \beta_s (|\psi_1|^2 + |\psi_0|^2 |\psi_{-1}|^2)] \psi_1 + \beta_s \psi_0^2 \psi_{-1}^* + B\psi_0, \\ i\partial_t \psi_0(x, t) = [H + \beta_s (|\psi_1|^2 + |\psi_{-1}|^2)] \psi_0 + 2\beta_s \psi_1 \psi_{-1}^* \psi_0 + B^* \psi_1 + B\psi_{-1}, \\ i\partial_t \psi_{-1}(x, t) = [H + \beta_s (|\psi_{-1}|^2 + |\psi_0|^2 |\psi_1|^2)] \psi_{-1} + \beta_s \psi_0^2 \psi_1^* + B^* \psi_0 \end{cases} \quad (1)$$

在上述 CGPEs 中, 哈密顿算子 H 的定义为

$$H := -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_d(x) + \beta_n \sum_{j=-1}^1 |\psi_j|^2 \quad (2)$$

其中 $V_d(x)$ 表示 \mathbb{R}^d 中的一个约束势能, 并且当 $|x| \rightarrow \infty$ 时 $V_d(x) \rightarrow \infty$, 常数 β_n 和 β_s 分别描述了与自旋无关的粒子间的相互作用和与自旋相关的粒子间相互作用. 在相同的 BEC 中, 这两个常数值与总原子数 N 成线性关系. 当 $\beta_n > 0$ 时, 原子之间相互排斥; 当 $\beta_n < 0$ 时, 原子之间相互吸引. 当 $\beta_s > 0$ 时, 粒子之间具有抗磁性的自旋相互作用; 当 $\beta_s < 0$ 时, 粒子之间具有铁磁性的自旋相互作用. 此外, 复数值函数 $B(x) \in \mathbb{C}$ 描述了一个外加的 Ioffe-Pritchard 磁场^[13] 的强度, 记号 f^* 表示复

数值函数 f 的共轭函数.

当不存在外加 Ioffe-Pritchard 磁场时, 即磁场强度 $B(x) \equiv 0$ 时, 方程组 (1) 中有两个重要的守恒量. 第一个守恒量是质量 N . 方便起见我们一般将总质量单位化, 即

$$\begin{aligned} N[\Psi] &:= \|\Psi(\cdot, t)\|^2 = \sum_{j=-1}^1 \|\psi_j(\cdot, t)\|^2 = \\ &= \sum_{j=-1}^1 \int_{\mathbb{R}^d} |\psi_j(x, t)|^2 dx \equiv \|\Psi(\cdot, 0)\|^2 = 1 \end{aligned} \quad (3)$$

另一个守恒量是磁通量 M , 表达式为

$$\begin{aligned} M[\Psi] &:= \int_{\mathbb{R}^d} (|\psi_1(x, t)|^2 - |\psi_{-1}(x, t)|^2) dx \equiv \\ &M[\Psi(\cdot, 0)] = M \end{aligned} \quad (4)$$

其中 M 是一个满足 $-1 \leq M \leq 1$ 的常数. 当存在一个外加的 Ioffe-Pritchard 磁场时, 即磁场强度 $B(x) \neq 0$ 时, 由于外加磁场的影响磁通量 M 不再是守恒量, 此时就只有质量这一个守恒量.

对于函数向量 $\Psi = (\psi_1, \psi_0, \psi_{-1})$, 它所表示的 spin-1 BEC 的能量定义为:

$$E[\Psi] := \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \sum_{j=-1}^1 |\nabla \psi_j|^2 + V(x) |\Psi|^2 + \beta_n |\Psi|^4 + \beta_s |\Psi^* S \Psi|^2 + 2\text{Re}[B(\psi_1^* \psi_0 + \psi_0^* \psi_{-1})] dx \quad (5)$$

其中记号 $\text{Re}(f)$ 表示复数值函数 f 的实部, $S := (S_x, S_y, S_z)$ 是由三个矩阵构成的向量, S_x, S_y 和 S_z 分别对应三个不同的 spin-1 泡利矩阵:

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

利用上面所定义的能量可以得到 spin-1 BEC 的基态解的数学定义:

定义 2.1 当磁场强度 $B(x) \equiv 0$ 时, spin-1 BEC 的基态解 $\Psi_g := (\psi_g^1, \psi_g^0, \psi_g^{-1})$ 为

$$\Psi_g = \arg \min_{\Psi \in S_0} E[\Psi],$$

$$S_0 := \{ \Psi | N[\Psi] = 1, [\Psi] = M \} \quad (6)$$

我们将这个能量的最小值记为 E_g , 即

$$E_g := E[\Psi_g] = \min_{\Psi \in S_0} E[\Psi] \quad (7)$$

当磁场强度 $B(x) \neq 0$ 时, 可以类似地定义这种情况下的基态解 Ψ_g 和最小能量 E_g , 即

$$\Psi_g = \arg \min_{\Psi \in S_1} E[\Psi], S_1 := \{ \Psi | N[\Psi] = 1 \} \quad (8)$$

$$E_g := E[\Psi_g] = \min_{\Psi \in S_1} E[\Psi] \quad (9)$$

3 单组分近似方法

单组分近似方法在 spinor BEC 的基态解的研究中有重要作用. 该理论主要通过分析 BEC 的不同组分之间的特征关系达到运用一个单组分 BEC 的基态解来表示多组分 BEC 的基态解的目的. 在 spinor BEC 的研究中, 单组分近似的定义如下:

定义 3.1 对于一个描述 spin-F BEC 的由 $2F+1$ 个复数值函数 $\psi_j (j \in \mathbb{N}, -F \leq j \leq F)$ 组成的向量 Ψ , 如果对每个指标 j 都满足

$$\psi_j = \gamma_j \psi_g \quad (10)$$

其中每个 γ_j 都是常数, ψ_g 是一个与 j 无关的复数

值函数, 那么我们就说 Ψ 满足单组分近似.

应用动能重分布定理 (Kinetic Energy Redistribution Theorem)^[14], 文献[15]证明: 在 $\beta_s \leq 0$ 的情况下, 当 $B(x) \equiv 0$ 时定义 2.1 中所定义的 spin-1 BEC 的基态解 Ψ_g 满足单组分近似. 更一般地, 文献[16]进一步证明: 当 $B(x) \equiv C$ (C 为复常数) 时, spin-1 BEC 的基态解也满足单组分近似. 因此, 我们有以下的引理.

引理 3.2^[17] 在 $\beta_s \leq 0$ 的 spin-1 BEC 中, 假设函数向量 $\Psi_g = (\psi_g^1, \psi_g^0, \psi_g^{-1})$ 是基态解, 那么 Ψ_g 满足单组分近似并且存在一个复值函数 φ , $\|\varphi\|^2 = 1$, 使得当 $C=0$ 时

$$\psi_g^1 = \frac{1+M}{2} \varphi, \psi_g^0 = \sqrt{\frac{1-M^2}{2}} \varphi, \psi_g^{-1} = \frac{1-M}{2} \varphi \quad (11)$$

当 $C \neq 0$ 时,

$$\psi_g^1 = \frac{1}{2} e^{i \arg(C)} \varphi, \psi_g^0 = \frac{\sqrt{2}}{2} e^{i \arg(C)} \varphi,$$

$$\psi_g^{-1} = \frac{1}{2} e^{i \arg(C)} \varphi \quad (12)$$

其中 $\arg(C)$ 表示复数 C 的幅角.

将(11)(12)式分别代入(7)式和(9)式, 得

$$E[\Psi_g] = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{2} |\nabla \varphi(x)|^2 + V_d(x) \varphi^2(x) + \frac{\beta_n + \beta_s}{2} \varphi^4(x) - \frac{\sqrt{2}}{2} |B| \varphi^2(x) dx = E_g = E_{\text{SMA}}[\varphi] \quad (13)$$

我们将 $E_{\text{SMA}}[\varphi]$ 定义为 spin-1 BEC 的 SMA 能量. 值得注意的是, spin-1 BEC 的 SMA 能量与原基态能量相等, 且 $E_{\text{SMA}}[\varphi]$ 是一个只与函数 φ 有关的能量泛函.

4 数值方法

本节中我们基于单组分近似理论提出一种求解在强度为常数的 Ioffe-Pritchard 磁场中的 spin-1 BEC 的基态解的数值方法 SMA-GFDN. 根据式(9)~(11), 求解基态解 Ψ_g 等价于求解使得 SMA 能量泛函在质量约束条件下的最小值点, 即

$$\varphi_g = \arg \min_{\|\varphi\|^2=1} E_{\text{SMA}}[\varphi] \quad (14)$$

为了数值求得(12)式, 我们首先对(11)式做一个虚时间演化^[7,18], 即 $t \rightarrow it$, 然后再对时间方向进行离散并使用 GFDN 方法.

对一个固定的时间步长 $\Delta t > 0$, 我们可以构造一个时间序列 $t_n = n \Delta t$, $n \in \mathbb{N}^*$, 在时间区间

$[t_n, t_{n+1})$ 内, GFDN 方法构造如下:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\delta E_{\text{SMA}}[\varphi]}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \nabla^2 \varphi - (V_d(x) - \frac{\sqrt{2}}{2} |B|) \varphi - (\beta_n + \beta_s) \varphi^3, \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad t \in [t_n, t_{n+1}) \quad (15)$$

$$N_{t_{n+1}} = \|\varphi(\cdot, t_{n+1}^-)\|^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |\varphi(x, t_{n+1}^-)|^2 dx \quad (16)$$

$$\varphi(x, t_{n+1}^+) := \frac{\varphi(x, t_{n+1}^-)}{\sqrt{N_{t_{n+1}}}}, \quad x \in \mathbb{R}^d \quad (17)$$

其中 $\varphi(x, t_{n+1}^\pm) := \lim_{t \rightarrow t_{n+1}^\pm} \varphi(x, t)$. GFDN 方法中的 (14)~(15) 式保证了在每一个时间步长的端点处 φ 满足质量守恒的约束条件. 由于势能函数满足 $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V_d(x) = \infty$, 梯度流 (15) 的解 φ 在无穷远处指数衰减到 0. 因此, 我们可以设置一个合适的有界区域 D 并在该区域的边界 ∂D 处做一个零截断. 我们假设 φ 在 ∂D 上满足 Dirichlet 边界条件.

不失一般性, 我们以一维的情况为例给出我们的数值格式. 假设我们所选定的有界区域为区间 $[a, b]$. 对一个固定的空间步长 $\Delta x > 0$, 构造一个空间网格

$$x_k := a + k\Delta x, \quad k = 0, 1, \dots, K \quad (18)$$

其中 K 是一个正偶数并且 $b = a + K\Delta x$. 在端点处, 我们有 Dirichlet 边界条件 $\varphi(a, t) = \varphi(b, t) = 0$. 在 $t=0$ 时刻, 给定的初值条件

$$\varphi(x, 0) = \varphi^0(x), \quad x \in [a, b], \quad \|\varphi^0\|^2 = 1 \quad (19)$$

可以离散为

$$\varphi_k^0 = \varphi^0(x_k), \quad k = 0, 1, \dots, K \quad (20)$$

接下来, 我们在这个网格上用正弦伪谱方法 (Sine Pseudo-Spectral Method, SPSM) 以及向前欧拉格式 (Forward Euler Scheme, FES) 对式 (13)~(15) 分别进行空间和时间上的离散, 具体的数值格式如下:

$$\begin{cases} \frac{\varphi_k^{(1)} - \varphi_k^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} D_{xx}^s \Phi^{(1)}|_{x=x_k} - \alpha^n (\varphi_k^{(1)} - \varphi_k^n) + F_k^n, \\ \varphi_k^{n+1} = \frac{\varphi_k^{(1)}}{\|\Phi^{(1)}\|}, \quad k = 1, 2, \dots, K-1, \quad n = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (21)$$

其中 φ_k^n 表示 $\varphi(x_k, t_n)$ 的数值逼近, $\Phi^{(1)}$ 是由 K 个分量 $\varphi_k^{(1)}$ 组成的一个向量, $\|\Phi^{(1)}\| =$

$$\sqrt{\Delta x \sum_{k=1}^{K-1} (\varphi_k^{(1)})^2}, \quad F_k^n \text{ 的定义为}$$

$$F_k^n := -[(V_d(x_k) - \frac{\sqrt{2}}{2} |B|) \varphi_k^n + (\beta_n + \beta_s) (\varphi_k^n)^3] \quad (22)$$

D_{xx}^s 是正弦伪谱方法中用于近似二阶偏导 ∂_{xx} 的一个算子, 定义如下:

$$D_{xx}^s \Phi^{(1)}|_{x=x_k} = \sum_{j=1}^{K-1} (-\mu_j^2 \widehat{\Phi}_j^{(1)}) \sin(\mu_j(x_k - a)) \quad (23)$$

其中 $\widehat{\Phi}_j^{(1)}$ 表示向量 $\Phi^{(1)}$ 的离散正弦变换的第 j 个系数, 即

$$\widehat{\Phi}_j^{(1)} = \frac{2}{K} \sum_{k=1}^{K-1} \varphi_k \sin(\mu_j(x_k - a)) \quad (24)$$

其中系数 $\mu_j := \frac{j\pi}{b-a}$, $1 \leq j \leq K-1$. 另外, $\alpha^n = \alpha(t_n)$ 是一个稳定化系数. 在实际的计算过程中, 为了提高方法的效率^[18] 需要选取最优的参数 α_{opt}^n , 其表达式为

$$\alpha_{\text{opt}}^n = \frac{1}{2} (b_{\text{max}}^n + b_{\text{min}}^n) \quad (25)$$

$$b_{\text{max}}^n = \max_{1 \leq k \leq K-1} [V_d(x_k) \varphi_k^n + (\beta_n + \beta_s) (\varphi_k^n)^3] \quad (26)$$

$$b_{\text{min}}^n = \min_{1 \leq k \leq K-1} [V_d(x_k) \varphi_k^n + (\beta_n + \beta_s) (\varphi_k^n)^3] \quad (27)$$

注意, 在方法的实现过程中我们需要设置一个终止条件. 选择一个足够小的常数 ϵ , 当

$$\max_{1 < k < K-1} |\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n| < \epsilon \quad (28)$$

时, 方法停止迭代. φ_k^n 就是当前时间步的解, 最后将 φ_k^n 代入 (10) 式中的 φ 就可以分别得到 φ_k^a, φ_k^b 和 φ_k^E 的数值解.

5 数值算例

我们首先验证 SMA-GFDN 数值方法的可靠性, 然后数值地研究不同参数与铁磁性 spin-1 BEC 基态能量之间的关系, 最后比较 SMA-GFDN 方法与一般 GFDN 方法的计算效率.

我们选择 2 维算例, 计算区域和网格尺寸分别为 $D = [-8, 8] \times [-8, 8]$, $\Delta x = 1/32$. 时间方向上的步长为 $\Delta t = 0.001$, 终止条件参数 $\epsilon = 1 \times 10^{-13}$.

算例 5.1 本算例中的参数 $\beta_n = 200$, $\beta_s = -100$, 磁场强度 $B = 3 + 4i$, 势能为 2 维光学晶格势能 (two-dimensional optical lattice potential)

$$V_2(x, y) = \frac{x^2 + y^2}{2} + 25 \left(\sin^2\left(\frac{\pi x}{4}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi y}{4}\right) \right) \quad (29)$$

初值函数为 $\varphi^0(x, y) = \frac{e^{-(x^2+y^2)/2}}{\sqrt{\pi}}$, 计算结果如图 1 所示.

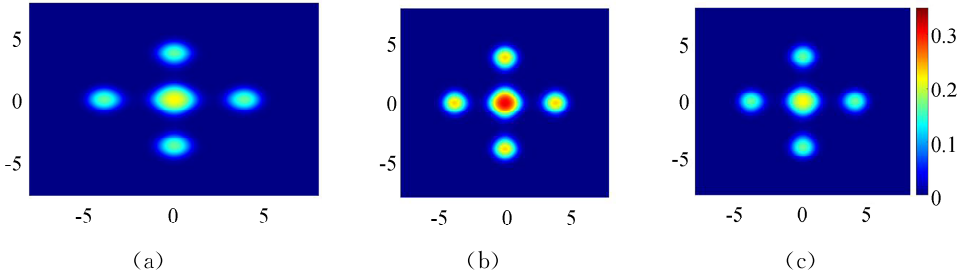


图 1 Spin-1 BEC 基态的密度: (a) $|\varphi_0^0|$; (b) $|\varphi_0^50|$; (c) $|\varphi_0^{225}|$
 Fig. 1 Density of the ground states of spin-1 BEC: (a) $|\varphi_0^0|$; (b) $|\varphi_0^50|$; (c) $|\varphi_0^{225}|$

图 2 中展示了在该算例的计算过程中总质量和总能量随计算时间的变化.

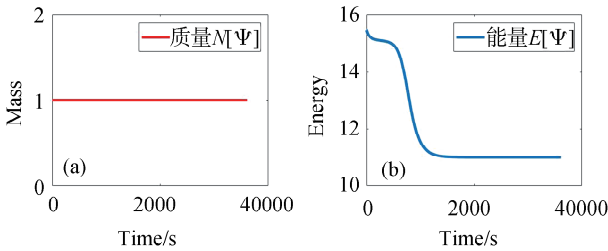


图 2 (a) 质量随计算时间的变化; (b) 能量随计算时间的变化
 Fig. 2 (a) Change of mass; (b) Change of energy

从图 2 中我们可以看到, 在计算过程中质量保持守恒, 能量单调下降, 说明数值方法是可靠的.

算例 5.2 在此算例中, 我们研究不同参数对基态能量的影响. 设置势能函数为 2 维简谐势能 $V_2(x, y) = (x^2 + y^2)/2$. 首先, 我们固定磁场强度 $B(x) = 6 + 8i$, 对不同的相互作用参数 β_n, β_s , spin-1 BEC 基态的能量如图 3 所示.

从图 3 中我们可以看到, 在其他条件相同的情况下, 当 β_n 与 β_s 之和相同时基态解的能量也相同, 且基态的能量随 $\beta_n + \beta_s$ 的增大而增大.

然后, 为研究不同磁场强度 B 对总能量的作用, 我们计算了几组 $\beta_n + \beta_s$ 相同但磁场强度 B 不同的算例. 为演示方便, 我们取 B 为实数, 计算结果如下图 4 所示.

从图 4 中我们可以看到, 当 $\beta_n + \beta_s$ 固定时, 基态能量只与磁场强度 B 的绝对值有关, 并且 $|B|$ 越大基态的能量越小.

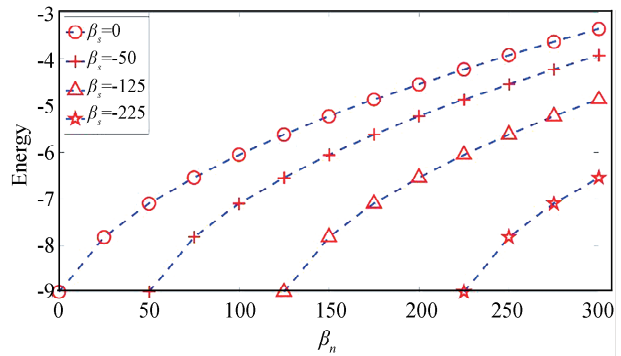


图 3 不同相互作用参数下 spin-1 BECs 基态能量的变化
 Fig. 3 Change of energy of the ground states of spin-1 BECs for different interaction parameters

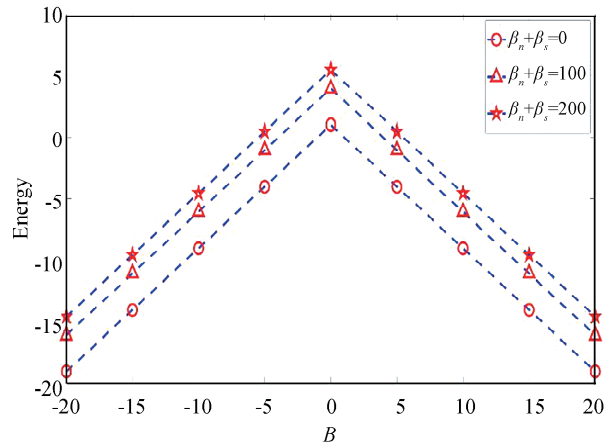


图 4 不同的磁场强度下基态能量的变化
 Fig. 4 Change of energy of the ground states for different strength of magnetic field.

算例 5.3 最后我们研究 SMA-GFDN 方法在计算恒定磁场中铁磁性 spin-1 BEC 基态时的效率. 在本算例中, 取参数 $\beta_n = 200, \beta_s = -100$, 势能为 2 维简谐势能. 我们分别用普通 GFDN 方法和 SMA-GFDN 方法计算不同磁场强度下的基态, 并记录两种方法所用的时间, 结果如表 1 所示.

表 1 不同磁场强度下两种方法的计算时长

Tab. 1 Running time of the two methods for different magnetic field strengths

| B | GFDN | SMA-GFDN |
|--------|----------|----------|
| 3+4i | 6432s | 3115. 2s |
| 6+8i | 6656. 2s | 3137. 1s |
| 6-8i | 6934. 8s | 3137. 1s |
| 12+5i | 6908. 2s | 3179s |
| 12+16i | 7065s | 3189s |
| 20+20i | 7084. 5s | 3196. 1s |

由表 1 我们可以看到,在恒定磁场中,SMA-GFDN 方法计算铁磁性 spin-1 BEC 的基态耗时大约是普通 GFDN 方法的一半,说明在这种情况下前者更高效。

6 结 论

本文应用单组分近似理论分析了铁磁性 spin-1 BEC 在恒定磁场中的数学模型和能量泛函表达式,给出了 SMA 能量泛函的具体表达式. 在此基础上,本文利用离散归一化梯度流的思想提出了一种计算恒定磁场中铁磁性 spin-1 BEC 基态的数值方法. 数值算例验证了该方法的可靠性及高效。

参考文献:

[1] Bao W Z, Cai Y Y. Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensation [J]. *Kinet Relat Mod*, 2013, 6: 1.

[2] Anderson M H, Ensher J R. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor [J]. *Science*, 1995, 269: 198.

[3] Davis K B, Mewes M O. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms [J]. *Phys Rev Lett*, 1995, 75: 3969.

[4] Stenger J, Inouye S, Stamper-Kurn D M. Spin domains in ground state spinor Bose-Einstein condensates [J]. *Nature*, 1998, 369: 345.

[5] Swislocki T, Matuszewski M. Controlled creation of spin domains in spin-1 Bose-Einstein condensates by phase separation [J]. *Phys Rev A*, 2012, 85: 023601.

[6] Ueda M, Kawaguchi Y. Spinor Bose-Einstein condensates [J]. *Phys Rep*, 2012, 520: 253.

[7] Bao W, Du Q. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow [J]. *SIAM J Sci Comput*, 2004, 25: 1674.

[8] Bao W Z, Cai Y Y. Ground states of two-component Bose-Einstein condensate with an internal atomic Josephson junction [J]. *East Asian App Math*, 2011, 1: 49.

[9] Bao W Z, Lim F Y. Computing ground state of spin-1 Bose-Einstein condensates by the normalized gradient flow [J]. *SIAM J Sci Comput*, 2008, 30: 1925.

[10] Tian T H, Cai Y Y, Wu X M, *et al.* Ground states of spin-F Bose-Einstein condensates [J]. *SIAM J Sci Comput*, 2020, 42: 983.

[11] Bao W Z, Chern I L, Zhang Y Z. Efficient numerical methods for computing ground states of spin-1 Bose-Einstein condensates based on their characterizations [J]. *J Comput Phys*, 2013, 253: 189.

[12] Law C K, Pu H, Bigelow N P. Quantum spins mix in spinor Bose-Einstein condensates [J]. *Phys Rev Lett*, 1998, 81: 5257.

[13] Ernst U, Marte A, Schuster F, *et al.* Bose-Einstein condensation in a pure Ioffe-Pritchard field configuration [J]. *Euro Phys Lett*, 1998, 41: 1.

[14] Lieb E H, Loss M. *Analysis* [M]. Rhode Island: AMS, 2001.

[15] Zhao Z, Tang Q. The mathematical property and numerical methods for the ground state of rotational ferromagnetic spin-1 Bose-Einstein condensates with constant magnetic field [J]. Preprint.

[16] Lin L, Chern I L. A kinetic energy reduction technique and characterizations of the ground states of spin-1 Bose-Einstein condensates [J]. *Disc Cont Dynam Sys B*, 2014, 19: 1119.

[17] Lieb E, Seiringer R, Yngvason J. Bosons in a trap: a rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional [J]. *Phys Rev A*, 2000, 61: 6104.

[18] Zeng R, Zhang Y. Efficiently computing vortex lattices in fast rotating Bose Einstein condensates [J]. *Comput Phys Comm*, 2009, 180: 854.