

对数非线性薛定谔方程基态解的数值解法

冯子旭, 何维清, 张世全

(四川大学数学学院, 成都, 610064)

摘要: 本文针对对数非线性薛定谔方程构造了一种求其基态解的数值解法. 该方法首先对原始能量泛函进行正则化处理, 然后使用归一化梯度流来求正则化后的基态解, 其中, 在求解的每个时间步采用向后欧拉傅里叶谱方法的隐式数值格式, 并通过不动点迭代求解. 本文分析了该方法的能量误差, 并通过数值模拟验证其可靠性.

关键词: 基态解; 对数薛定谔方程; 正则化; 归一化梯度流; 后向欧拉傅里叶谱方法

中图分类号: O241.82 **文献标识码:** A **DOI:** 10.19907/j.0490-6756.2021.051003

Numerical method for the ground state solution of logarithmic nonlinear Schrödinger equation

FENG Zi-Xu, HE Wei-Qing, ZHANG Shi-Quan

(School of Mathematics, Sichuan University, Chengdu 610064)

Abstract: We construct a numerical method for computing the ground state solution of logarithmic nonlinear Schrödinger equation. We firstly regularize the energy functional of the model and then compute the ground state solution by using the normalized gradient flow method. At each time step, an implicit numerical scheme of the backward Euler Fourier spectral method is proposed and solved by fixed point iteration. In the end, we analyze the energy error of the method and provide numerical simulation to verify it's reliability.

Keywords: Ground state solution; Logarithmic Schrödinger equation; Regularization; Normalized gradient flow; Backward Euler Fourier spectral method

(2010 MSC 65L60)

1 引言

玻色-爱因斯坦凝聚态(BEC)^[1]是由微观粒子的量子特性引起的宏观现象^[2-5]. 在最近的物理实验中, 物理学家把不同组分的 BEC 混合在一起, 使这些 BEC 结合在一起形成量子液滴(液滴态). 液滴态^[6]可以用波函数描述, 满足如下的对数 Gross-Pitaevskii 方程(LogGPE):

$$i\partial_t\psi = \left[-\frac{1}{2}\Delta + V(x) + \beta|\psi|^{2\sigma}\log|\psi|^2 - \Omega L_z\right]\psi \quad (1)$$

这里 x 是空间变量, t 是时间变量, $\Omega > 0$ 是角速度, β, σ 是刻画粒子间相互作用类型的参数, 角动量算子 L_z 和势函数 $V(x)$ 定义如下:

$$L_z = -i(x\partial_y - y\partial_x),$$
$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}(\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2), & d=2, \\ \frac{1}{2}(\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2), & d=3. \end{cases}$$

收稿日期: 2021-01-13

基金项目: 国家自然科学基金(11971335)

作者简介: 冯子旭(1993-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为微分方程数值解. E-mail: 2018222010022@stu.scu.edu.cn, cn

通讯作者: 张世全, E-mail: shiquanzhang@scu.edu.cn

这里的 d 代表空间维度.

对于该对数非线性薛定谔方程,在实际应用中我们主要关心其基态解和动力学演化,本文的研究目标就是构造该方程基态解的数值解法. 另一方面,对于经典的非线性薛定谔方程基态解的研究已有丰富结果,如,对数非线性薛定谔方程(LogSE)基态解的存在性可以参考文献[7].

在非线性薛定谔方程基态解的计算方面,Edwards 和 Burnett^[8]用 Runge-Kutta 方法求解了一维和三维球对称基态解;Chiofalo 等^[9]类比动力学计算方法提出了虚拟时间演化法;Bao 和 Tang^[10]提出利用有限元法直接极小化带质量约束的能量泛函,进而得到基态解;Bao^[11-13]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. 值得注意的是,这些方法都是针对非对数非线性薛定谔方程的. 众所周知,由于对数非线性项的奇异性,这些方法并不能直接应用到对数非线性薛定谔方程基态解的计算. 本文将基于正则化能量泛函和归一化梯度流构造一种求解对数非线性薛定谔方程基态的数值方法.

本文剩余部分安排如下. 第 2 节介绍方程(1)的基态定义和物理意义及带正则化参数 $1 < \epsilon \ll 0$ 的正则化方法. 第 3 节给出了具体的数值方法和计算过程. 第 4 节我们用数值算例验证方法的可靠性. 最后,第 5 节给出全文的结论.

2 预备知识

方程(1)有两个重要的相关物理量,分别是能量和质量,定义如下:

$$E(\psi) = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + V(x) |\psi|^2 + F(|\psi|^2) - \Omega \bar{\psi} L_z \psi \right] dx \quad (2)$$

$$M(\psi) = \int_{\mathbb{R}^d} |\psi|^2 dx \quad (3)$$

其中

$$F(\rho) = \beta \int_0^\rho s^\sigma \log s ds \quad (4)$$

数学上,基态解 $\varphi_g(x)$ 是能量泛函在质量约束条件下的极小值点,即

$$\varphi_g(x) = \arg \min_{\varphi \in S} E(\varphi), S = \{\varphi \mid \|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = M\} \quad (5)$$

由于对数非线性项的奇异性,即当 $\rho \rightarrow 0^+$ 时, $\log \rho \rightarrow -\infty$, 我们不能直接使用前文的方法. 为了解决这个难题,我们参考正则化(ERLogSE)方

法^[14],对能量泛函的对数项引入正则化参数 ϵ 进行修正,修正后的能量泛函为

$$E^\epsilon(\psi^\epsilon) = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla \psi^\epsilon|^2 + V(x) |\psi^\epsilon|^2 + F^\epsilon(|\psi^\epsilon|^2) - \Omega \bar{\psi}^\epsilon L_z \psi^\epsilon \right] dx \quad (6)$$

其中正则化函数

$$F^\epsilon(\rho) = \beta \int_0^\rho s^\sigma \log(s + \epsilon) ds,$$

或

$$F^\epsilon(\rho) = \beta \int_0^\rho s^\sigma \log(\sqrt{s} + \epsilon)^2 ds \quad (7)$$

根据正则化能量泛函,我们有如下的正则化方程:

$$i\partial_t \psi^\epsilon = \left[-\frac{1}{2} \Delta + V(x) + f^\epsilon(|\psi^\epsilon|^2) - \Omega L_z \right] \psi^\epsilon, \\ f^\epsilon(\rho) = (F^\epsilon(\rho))' \quad (8)$$

通过正则化处理,我们将问题转变成求解 $\varphi_g^\epsilon \in S$ 使得

$$E^\epsilon(\varphi_g^\epsilon) = \min_{\varphi \in S} E^\epsilon(\varphi) \quad (9)$$

对于上式所得的基态解能量与原问题的基态解能量的误差,我们下面的定理.

定理 2.1 令 $\sigma \geq 1$. 假设 $\varphi_g(x), \varphi_g^\epsilon(x)$ 分别是极小化问题(5)式和(9)式的解. 则

$$|E^\epsilon(\varphi_g^\epsilon) - E(\varphi_g)| \leq C\epsilon \quad (10)$$

其中 C 是与 ϵ 无关的正常数.

证明 首先, $\forall \varphi \in S \cap H^1$, 有

$$E(\varphi) - E^\epsilon(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^{|\varphi|^2} (f(s) - f^\epsilon(s)) ds dx,$$

$$f(s) - f^\epsilon(s) = -s^\sigma \log\left(1 + \frac{\epsilon}{s}\right), \text{ or}$$

$$-s^\sigma \log\left(1 + \frac{\epsilon}{\sqrt{s}}\right)^2.$$

利用不等式 $0 \leq \log(1+x) \leq x, \forall x \geq 0$ 可得

$$-C\epsilon \leq E(\varphi) - E^\epsilon(\varphi) \leq 0.$$

根据基态的定义可知,

$$E(\varphi_g) - E^\epsilon(\varphi_g^\epsilon) \leq E(\varphi_g^\epsilon) - E^\epsilon(\varphi_g^\epsilon),$$

$$E(\varphi_g) - E^\epsilon(\varphi_g^\epsilon) \geq E(\varphi_g) - E^\epsilon(\varphi_g).$$

综合上述不等式即可得到定理 2.1.

3 数值解法

为求解(5)式的能量泛函极小化问题,我们首先对(1)式使用虚时演化: $t \rightarrow -it$, 再利用离散归一化梯度流(DNGF)方法.

选择一个固定的时间步长 $\Delta t > 0$. 对 $n = 0, 1, 2, \dots$ 和一个时间序列 $t_n = n\Delta t$, 在每个时间步 $t \in [t_n, t_{n+1})$, DNGF 方法如下:

$$\partial_t \varphi^\varepsilon(x, t) = \frac{1}{2} \Delta \varphi^\varepsilon - V(x) \varphi^\varepsilon + \Omega L_z \varphi^\varepsilon - f^\varepsilon(|\varphi^\varepsilon|^2) \varphi^\varepsilon, x \in \mathbf{R}^d \quad (11)$$

$$\varphi^\varepsilon(x, t_{n+1}) \triangleq \varphi^\varepsilon(x, t_{n+1}^+) = \sqrt{M} \frac{\varphi(x, t_{n+1}^-)}{\|\varphi(\cdot, t_{n+1}^-)\|}, x \in \mathbf{R}^d, n \geq 0 \quad (12)$$

$$\varphi^\varepsilon(x, 0) = \varphi_0(x), x \in \mathbf{R}^d, \|\varphi_0(x)\|^2 = \int_{\mathbf{R}^d} |\varphi_0(x)|^2 dx = M \quad (13)$$

其中 $\varphi^\varepsilon(x, t_{n+1}^\pm) = \lim_{t \rightarrow t_{n+1}^\pm} \varphi^\varepsilon(x, t)$. (11)~(13)式可以理解为如下两步操作:

- 对无约束条件的能量泛函使用速降法;
- 为了满足约束条件,在每个时间步将解拉回到解空间 S .

接下来我们用向后欧拉傅里叶谱(BFFP)方法来离散(11)~(13)式.由势函数的性质,(11)~(13)式的解会在无穷远处呈指数衰减到零,所以在实际计算时我们可以把计算区域截断到一个合适的有界区域上,并假设解满足零边界条件.不失一般性,我们以二维的BFFP方法为例,对其它维数来说也是类似的.

在二维的情况下,对(11)~(13)式的截断问题如下:

$$\partial_t \varphi^\varepsilon(x, t) = \frac{1}{2} \Delta \varphi^\varepsilon - V(x) \varphi^\varepsilon + \Omega L_z \varphi^\varepsilon - f^\varepsilon(|\varphi^\varepsilon|^2) \varphi^\varepsilon, x \in D, t \in [t_n, t_{n+1}) \quad (14)$$

$$\varphi^\varepsilon(x, t_{n+1}) \triangleq \varphi^\varepsilon(x, t_{n+1}^+) = \sqrt{M} \frac{\varphi(x, t_{n+1}^-)}{\|\varphi(\cdot, t_{n+1}^-)\|}, x \in D, n \geq 0 \quad (15)$$

$$\varphi^\varepsilon(x, t) = 0, x \in \Gamma = \partial D, t \in [t_n, t_{n+1}) \quad (16)$$

$$\varphi^\varepsilon(x, 0) = \varphi_0(x), x \in D \text{ 且有 } \|\varphi_0(x)\|^2 = \int_D |\varphi_0(x)|^2 dx = M \quad (17)$$

这里的计算区域 $D = [a, b] \times [c, d]$, 其中 $|a|$, $|b|$, $|c|$ 和 $|d|$ 是足够大的常数.选择空间网格,其中 J 和 K 是两个正偶数,网格点如下:

$$x_j := a + j \Delta x, j = 0, 1, \dots, J; \\ y_k := c + k \Delta y, k = 0, 1, \dots, K.$$

定义下标集

$$T_{JK} = (j, k) | j = 1, 2, \dots, J-1, \\ k = 1, 2, \dots, K-1, \\ T_{JK}^0 = (j, k) | j = 0, 1, 2, \dots, J, \\ k = 0, 1, 2, \dots, K.$$

φ_{jk}^n 是(11)-(13)式的解 φ_{jk}^ε 在网格点的数值近似, $(j, k) \in T_{JK}^0, n \geq 0, \varphi^n \in \mathbf{C}^{(J+1) \times (K+1)}$ 表示方程在

$t = t_n$ 时的数值解.

引入记号

$$\lambda_p^x = \frac{2p\pi}{b-a}, \lambda_q^y = \frac{2q\pi}{d-c},$$

$$p = -\frac{J}{2}, \dots, \frac{J}{2} - 1, q = -\frac{K}{2}, \dots, \frac{K}{2} - 1.$$

则求解(14)~(15)式的BFFP方法离散格式为^[11,15]:

$$\frac{\varphi_{jk}^{\varepsilon, (1)} - \varphi_{jk}^{\varepsilon, n}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \Delta \varphi^{\varepsilon, (1)}|_{jk} + i\Omega(y \partial_x \varphi^{\varepsilon, (1)} - x \partial_y \varphi^{\varepsilon, (1)})|_{jk} - [f^\varepsilon(|\varphi_{jk}^{\varepsilon, n}|^2) + V_{jk}] \varphi_{jk}^{\varepsilon, (1)} \quad (18)$$

$$\varphi_{jk}^{\varepsilon, n+1} = \frac{\varphi_{jk}^{\varepsilon, (1)}}{\|\varphi^{\varepsilon, (1)}\|_2},$$

$$\varphi_{jk}^0 = \varphi_0(x_j, y_k), (j, k) \in T_{JK}^0 \quad (19)$$

这里 $V_{jk} = V(x_j, y_k), (j, k) \in T_{JK}^0, \|\varphi^{\varepsilon, (1)}\|_2$ 表示离散的 l^2 范数,即

$$\|\varphi^{\varepsilon, (1)}\|_2^2 = \Delta x \Delta y \sum_{j=0}^{J-1} \sum_{k=0}^{K-1} |\varphi_{jk}^{\varepsilon, (1)}|^2.$$

对 $\Delta, \partial x$ 和 ∂y , 我们可以使用傅里叶谱方法逼近,即

$$\Delta \varphi^{\varepsilon, n}(x_j, y_k) \approx ([\Delta] \varphi^{\varepsilon, n})_{jk} := \frac{1}{JK} \sum_{p=-J/2}^{J/2-1} \sum_{q=-K/2}^{K/2-1} [\lambda_p^x + \lambda_q^y] \varphi_{pq}^{\varepsilon, n} e^{i\lambda_p^x(x_j - a)} e^{i\lambda_q^y(y_k - c)} \quad (20)$$

$$\partial_x \varphi^{\varepsilon, n}(x_j, y_k) \approx ([\partial_x] \varphi^{\varepsilon, n})_{jk} := \frac{1}{JK} \sum_{p=-J/2}^{J/2-1} \sum_{q=-K/2}^{K/2-1} \lambda_p^x \varphi_{pq}^{\varepsilon, n} e^{i\lambda_p^x(x_j - a)} e^{i\lambda_q^y(y_k - c)} \quad (21)$$

$$\partial_y \varphi^{\varepsilon, n}(x_j, y_k) \approx ([\partial_y] \varphi^{\varepsilon, n})_{jk} := \frac{1}{JK} \sum_{p=-J/2}^{J/2-1} \sum_{q=-K/2}^{K/2-1} \lambda_q^y \varphi_{pq}^{\varepsilon, n} e^{i\lambda_p^x(x_j - a)} e^{i\lambda_q^y(y_k - c)} \quad (22)$$

其中 $\varphi^{\varepsilon, n}$ 表示的是 $\varphi^{\varepsilon, n}$ 的傅里叶系数.

在每一个时间步,为了求非线性方程组(18)式的解 $\varphi^{\varepsilon, (1)}$, 我们使用带稳定参数项的离散傅里叶变换方法,迭代求解下面的线性方程组,直至收敛:

$$\frac{\varphi_{jk}^{\varepsilon, (1), m+1} - \varphi_{jk}^{\varepsilon, n}}{\Delta t} = \frac{1}{2} ([\Delta] \varphi^{\varepsilon, (1), m+1})_{jk} + i\Omega y_k ([\partial_x] \varphi^{\varepsilon, (1), m})_{jk} - i\Omega x_j ([\partial_y] \varphi^{\varepsilon, (1), m})_{jk} - [f^\varepsilon(|\varphi_{jk}^{\varepsilon, n}|^2) + V_{jk}] \varphi_{jk}^{\varepsilon, (1), m} - \alpha^n (\varphi_{jk}^{\varepsilon, (1), m+1} - \varphi_{jk}^{\varepsilon, (1), m}) \quad (23)$$

其中 $m \geq 0, \varphi^{\varepsilon, (1), 0} = \varphi^{\varepsilon, n}, \alpha^n = \alpha(t_n) \geq 0$ 是稳定化参数.在实际计算中,需要选择最优的参数 α_{opt}^n 以提高算法效率^[11],选取方式如下:

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

$$b_{\text{max}}^n = \max_{(j, k) \in T_{MN}} [f^\varepsilon(|\varphi_{jk}^{\varepsilon, n}|^2) + V_{jk}],$$

$$b_{\min}^n = \min_{(j,k) \in T_{MN}} [f^\varepsilon(|\varphi_{jk}^{\varepsilon,n}|^2) + V_{jk}].$$

对(23)式两边使用离散傅里叶变换,有

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{2}((\lambda_p^x)^2 + (\lambda_q^y)^2) + \alpha^n \right] (\widehat{\varphi^{\varepsilon,(1),m+1}})_{pq} = \\ & \frac{1}{\Delta t} (\widehat{\varphi^{\varepsilon,(1),n}})_{pq} + (\widehat{G^m})_{pq} \end{aligned} \tag{24}$$

这里的 $\widehat{G^m}$ 是 $G^m \in \mathbf{C}^{(J+1) \times (K+1)}$ 的傅里叶系数, G_{jk}^m ,定义如下:

$$\begin{aligned} G_{jk}^m := & \mathrm{i} \Omega y_k ([\partial_x] \phi^{\varepsilon,(1),m} - \mathrm{i} \Omega x_j ([\partial_y] \phi^{\varepsilon,(1),m})_{jk} - \\ & [f^\varepsilon(|\varphi_{jk}^{\varepsilon,n}|^2) + V_{jk}] \varphi_{jk}^{\varepsilon,m} + \alpha^n \varphi_{jk}^{\varepsilon,(1),m} \end{aligned} \tag{25}$$

$(j,k) \in T_{JK}$. 对(24)式两边使用离散傅里叶逆变换即可得到 $\varphi^{\varepsilon,(1),m+1}$. 最后满足迭代终止条件

$$\max_{(j,k) \in T_{JK}} |\varphi_{jk}^{\varepsilon,(1),m+1} - \varphi_{jk}^{\varepsilon,(1),m}| < 10^{-13}$$

的 $\varphi^{\varepsilon,(1),m+1}$ 即为当前时间步的解 $\varphi^{\varepsilon,(1)}$.

4 数值模拟

在这个部分,我们先研究这两种不同正则化方法在数值上的差异. 为了简便起见,我们选择一维算例. 首先设置参数 $M=1, \gamma=1, \beta=1, \sigma=1, \Omega=0, D=[-16,16], \varepsilon=10^{-14}, \Delta t=0.001, J=2^{12}$, 选择初始函数为 $\varphi_0(x)=(\pi/2)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-x^2}$, 同时选取不同的参数 $\beta=2^{i-1}, i=1,2,\cdots,8$. 在不同参数下两种正则化方法得到的基态解能量分别为 E_1 和 E_2 , 结果如下.

表 1 对不同参数 β , 两种正则化方法得出的基态解能量及能量之差

Tab. 1 The energy and energy difference of the ground state solution obtained by two regularization methods for different β

β	2^0	2^1	2^2	2^3
E_1	0.235	-0.032	-0.571	-1.665
$ E_1-E_2 $	<1e-13	<1e-13	<1e-13	<1e-13
β	2^4	2^5	2^6	2^7
E_2	-3.894	-8.411	-17.69	-36.45
$ E_1-E_2 $	<1e-13	<1e-13	<1e-13	<1e-13

由上表可知,在数值上来说两种正则化方法的结果几乎没有区别. 因此,在后面计算二维情况的基态解时我们统一使用第一种正则化方法.

下面我们来验证模型能量误差. 在此算例中,我们设置参数 $M=1, \gamma=1, \beta=1, \sigma=1, \Omega=0, D=[-16,16]$. 选择初始函数为 $\varphi_0(x)=(\pi/2)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-x^2}$.

我们把计算参数设置为 $\varepsilon=10^{-14}, \Delta t=0.0001, J=2^{12}$ 时得到的数值解作为精确解, 然后固定计算参数 Δ, J . 选择不同的正则化参数 $\varepsilon_i=0.1/2^i, i=1, 2, \cdots, 8$ 测试能量误差, 结果如下.

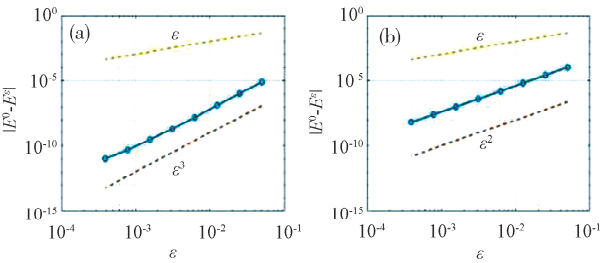


图 1 基态解的能量差, (a) 正则项为 $f^\varepsilon(\rho)=\rho\log(\rho+\varepsilon)$, (b) 正则项为 $f^\varepsilon(\rho)=\rho\log(\sqrt{\rho}+\varepsilon)$

Fig. 1 Energy difference of the ground state solution, (a) the regular term is $f^\varepsilon(\rho)=\rho\log(\rho+\varepsilon)$, (b) the regular term is $f^\varepsilon(\rho)=\rho\log(\sqrt{\rho}+\varepsilon)$

表 2 对不同的正则化参数 ε , 两种正则化方法得出的基态解的运行时间

Tab. 2 Running time of the ground state solution obtained by the two regularization methods for different ε

ε	0.1/2	0.1/2 ²	0.1/2 ³	0.1/2 ⁴
方法 1	91.396 s	91.025 s	90.869 s	91.494 s
方法 2	91.869 s	92.175 s	92.981 s	92.415 s
ε	0.1/2 ⁵	0.1/2 ⁶	0.1/2 ⁷	0.1/2 ⁸
方法 1	91.885 s	91.931 s	94.242 s	91.791 s
方法 2	91.760 s	91.978 s	91.853 s	91.539 s

从上图 1 可知,左图的正则化方法能量关于参数 ε 的收敛阶高于一阶,略低于三阶;而右图的正则化方法能量关于参数 ε 的收敛阶高于一阶,非常接近二阶,与理论分析相符,并且数值试验的结果优于理论结果. 再由上表 2 可知,计算耗时基本不受正则化参数大小的影响. 所以在求解基态时我们可以选择尽可能小的正则化参数.

下面我们用第一种正则化方法来研究在正则化参数 $\varepsilon=10^{-14}$ 时的质量 M^0 和能量 E^0 随计算时间 t 的变化, 结果如下.

根据图 2, 我们可以看到该数值方法在此算例中是质量守恒, 能量稳定的.

最后,应用前面提出的数值方法计算 LogSE 的基态解. 如文献[6], 我们设置各参数为: $M=1\ 000, \gamma_x=\gamma_y=\gamma=0.04, \beta=1, \sigma=1, D=[-30, 30] \times [-30, 30]$. 我们选择如下函数的线性组合作为初始函数^[16]:

$$\varphi(x) = C|x|^k e^{-\gamma|x|^2/2 + i\theta},$$

$$\theta(x, y) = \arctan(y/x),$$

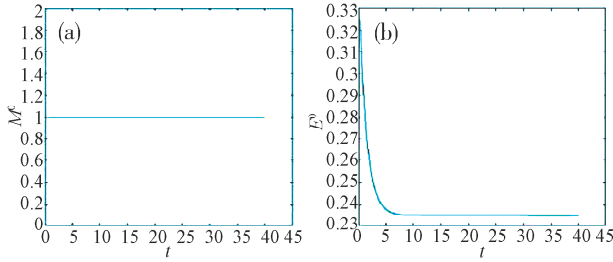


图 2 质量 M^0 随时间的变化(a); 能量 E^0 随时间的变化(b)

Fig. 2 The change of mass M^0 over time(a), and the change of energy E^0 over time(b)

C 是归一化常数, 使得 $\|\varphi_0\|^2 = M$. 我们研究如下四种情况:

Case 1 $\Omega/\gamma=0$, $\varphi_0(x, y) = Ce^{-\gamma|x|^2/2}$;

Case 2 $\Omega/\gamma=0.375$,

$$\varphi_0(x, y) = C(x + iy)e^{-\gamma|x|^2/2};$$

Case 3 $\Omega/\gamma=0.45$,

$$\varphi_0(x, y) = C|x|e^{-\gamma|x|^2/2 + i\theta};$$

Case 4 $\Omega/\gamma=0.5125$,

$$\varphi_0(x, y) = C \sum_{l=1}^3 |x - x_l| e^{-\gamma|x - x_l|^2/2 + i\theta(x - x_l)}.$$

在 Case 4 中

$$x_1 = (5, 0)^T, x_2 = (-5, 0)^T,$$

$$x_3 = (0, -5)^T.$$

进一步, 我们取选择非常小的正则化参数 $\epsilon = 10^{-14}$, 时间步长 $\Delta t = 0.001$ 以及网格 $J = K = 2^8$, 计算结果如下.

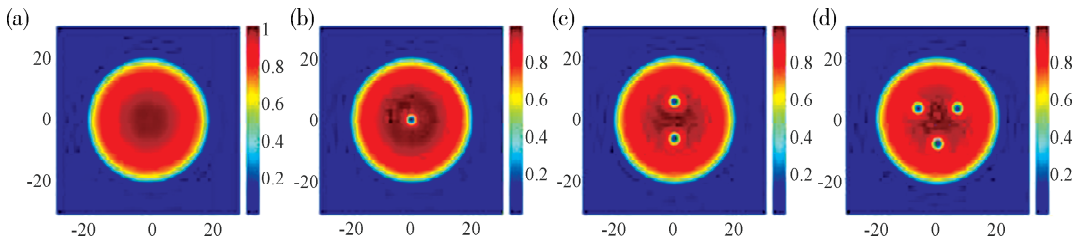


图 3 (a~d) 依次为 Case 1~4 的基态解 $|\varphi_\epsilon^0|^2$

我们的计算结果与文献[6]中的结果相符, 这说明了我们的方法的可靠性.

5 结 论

本文提出了带正则化参数的 ERLogSE 方法, 解决了对数非线性项在零点处的奇异性带来的困难, 并分析了正则化基态解与原问题基态解的能量误差估计. 基于正则化的能量泛函, 本文设计了相应的求基态解的数值格式, 并用数值算例验证了方法的可靠性和理论分析的正确性.

参考文献:

- [1] Bose S N. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese [J]. Zeitschrift Für Physik, 1924, 26: 178.
- [2] Bradley C C, Sackett C A, Tollett J J, *et al.* Evidence of Bose-Einstein condensation in anatomic gas with attractive interactions [J]. Phys Rev Lett, 1995, 75: 1687.
- [3] Dalfovo F, Giorgini S, Pitaevskii L P, *et al.* Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases [J]. Rev Mod Phys, 1998, 71: 463.
- [4] Davis K B, Mewes M O, Andrews M R, *et al.* Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms [J]. Phys Rev Lett, 1995, 75: 3969.
- [5] Anderson M H, Ensher J R. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor [J]. Science, 1995, 269: 198.
- [6] Tengstrand M N, Stürmer P, Karabulut E, *et al.* Rotating binary Bose-Einstein condensates and vortex clusters in quantum droplets [J]. Phys Rev Lett, 2019, 123, 160405.
- [7] Carles R, Dinh V D, Hajaiej H. On stability of rotational 2D binary Bose-Einstein condensates [EB/OL]. [2021-01-09]. <https://arxiv.org/pdf/2010.06862.pdf>.
- [8] Edwards M, Burnett K. Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation for small samples of trapped neutral atoms [J]. Phys Rev A, 1995, 51: 1382.
- [9] Chiofalo M, Succi S, Tosi M. Ground state of trapped interacting Bose-Einstein condensates by an explicit imaginary-time algorithm [J]. Phys Rev E, 2000, 62: 7438.
- [10] Bao W, Tang W. Ground-state solution of Bose-Ein-

stein condensate by directly minimizing the energy functional science direct [J]. J Comput Phys, 2003, 187: 230.

[11] Bao W, Chern I L, Lim F Y. Efficient and spectrally accurate numerical methods for computing ground and first excited states in Bose-Einstein condensates [J]. J Comput Phys, 2006, 219: 836.

[12] Bao W, Du Q. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by anormalized gradient flow [J]. SIAM J Sci Comput, 2003, 25: 1674.

[13] Bao W, Cai Y, Wang H. Efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates [J]. J Comput Phys, 2010, 229: 7874.

[14] Bao W, Carles R, Su C, *et al.* Error estimates of a regularized finite difference method for the logarithmic Schrödinger equation[J]. SIAM J Numer Anal, 2018, 57: 657.

[15] Bao W, Wang H A. Mass and magnetization conservative and energy-diminishing numerical method for computing ground state of spin-1 Bose-Einstein condensates [J]. SIAM J Numer Anal, 2007, 45: 2117.

[16] Li Y, Chen Z, Luo Z, *et al.* Two-dimensional vortex quantum droplets [J]. Phys Rev A, 2018, 98, 063602.

引用本文格式:

中文: 冯子旭, 何维清, 张世全. 对数非线性薛定谔方程基态解的数值解法[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2021, 58: 051003.

英文: Feng Z X, He W Q, Zhang S Q. Numerical method for the ground state solution of Logarithmic nonlinear Schrödinger equation[J]. J Sichuan Univ; Nat Sci Ed, 2021, 58: 051003.