



唐庆霖, 四川大学数学学院教授, 博士生导师, 教育部重要人才计划入选者, 国家级重要人才计划入选者, 四川省重要人才计划入选者。2013 年博士毕业于新加坡国立大学, 师从国际著名数值分析专家、新加坡科学院院士包维柱教授, 先后在维也纳大学、洛林大学等高校从事博士后研究工作。主要从事量子物理学中数学模型的计算方法及理论分析等方面的研究, 在 SINUM、SISC、JCP 等重要期刊上发表论文多篇, 主持国家重点研发计划、国家自然科学基金等多项科研项目。

计算带 Lee-Huang-Yang 项的三维 Gross-Pitaevskii 方程基态的能量耗散投影梯度流方法

唐庆霖, 汤开智

(四川大学数学学院, 成都 610065)

摘要: 本文提出了一种数值方法, 用于计算带 Lee-Huang-Yang (LHY) 修正项的三维 Gross-Pitaevskii 方程 (GPE) 的基态。在三维情况下, GPE 方程所对应的能量泛函中的 LHY 项为 $|\psi|^6$, 被用于描述玻色-爱因斯坦凝聚中的量子涨落。为了高效稳健地计算带 LHY 项的 GPE 所对应的能量泛函的基态, 本文首先提出了一种带拉格朗日乘子项的连续投影梯度方法, 对这种方法在空间方向上使用傅里叶伪谱法进行离散, 在时间方向上采用向后欧拉格式进行离散, 从而得到一种线性隐式的向后欧拉格式 (PGF-BESP)。该方法的核心思想是: 通过引入一个正交条件来隐式地离散拉格朗日乘子, 以保证质量守恒 (归一化约束), 并直接从正交条件给出拉格朗日乘子的显式表达式。这可以保留带拉格朗日乘子项的连续投影梯度流质量守恒和能量耗散的两个重要性质。接着, 本文对格式进行了严格的理论分析, 在时间步长满足合适的条件下证明了离散能量是单调非增的。然后, 本文进行数值实验, 以验证理论结果。结果表明, 质量的确是守恒的, 并且能量是单调衰减的。最后, 本文使用该方法计算了不同势能项和不同相互作用参数下的基态构型, 发现随着相互作用参数的增大基态密度分布的整体尺寸也随之增加。综上, 理论和数值结果都表明 PGF-BESP 方法可以为计算带 LHY 修正的 GPE 基态提供一种稳定、高效且易于实现的数值工具。

关键词: 玻色爱因斯坦凝聚态; 基态; Lee-Huang-Yang 修正; 投影梯度流; 傅里叶谱方法

中图分类号: O241.82

文献标志码: A

DOI: 10.19907/j.0490-6756.260193

An energy-decreasing projected gradient flow method for computing ground states of the 3D Gross-Pitaevskii equation with Lee-Huang-Yang correction

TANG Qinglin, TANG Kaizhi

(School of Mathematics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

Abstract: This paper presents a numerical method for computing the ground states of the three-dimensional

收稿日期: 2026-06-05 修回日期: 2026-07-20 接受日期: 2026-08-04

基金项目: 国家重点研发计划 (2024YFA1012803)

作者简介: 唐庆霖 (1986—), 男, 教授, 福建莆田人, 博士生导师, 主要研究方向为偏微分方程数值解. E-mail: qinglin_tang@scu.edu.cn

通信作者: 汤开智. E-mail: kaizhi_tang@stu.scu.edu.cn

Gross-Pitaevskii equation (GPE) that includes the Lee-Huang-Yang (LHY) correction. The LHY term in the Gross-Pitaevskii energy functional is of the form $|\phi|^5$ and accounts for quantum fluctuations in Bose-Einstein condensates (BECs). First, the continuous projected gradient flow is discretized with a Lagrange multiplier by using a Fourier pseudo-spectral method in space and a backward Euler scheme in time, obtaining a linearly implicit backward Euler scheme (PGF-BESP). The key idea is to implicitly determine the Lagrange multiplier through an orthogonal condition, thereby guaranteeing mass conservation (the normalization constraint) and providing an explicit expression for the Lagrange multiplier directly from the orthogonal condition. This preserves the two fundamental properties of the continuous normalized gradient flow with a Lagrange multiplier: Mass conservation and energy dissipation. Next, we carry out a rigorous theoretical analysis of the scheme and prove that the discrete energy is monotonically non-increasing under a suitable condition on the time step size. We then perform numerical experiments to verify the theoretical results, and the results show that mass is indeed conserved and the energy decays monotonically. Finally, we use the proposed method to compute ground state configurations for different potential terms and different interaction parameters. We find that as the interaction parameter increases, the overall size of the ground state density distribution also increases, and under the optical lattice potential, multi-layer structures are observed. In summary, both theoretical and numerical results show that the proposed PGF-BESP method provides a stable, efficient and easy to implement numerical tool for ground state computations of GPE with LHY correction.

Keywords: Bose-Einstein condensate; ground state; Lee-Huang-Yang correction; projected gradient flow; Fourier spectral method

(2020 MSC 65M60)

Gross-Pitaevskii 方程 (Gross-Pitaevskii Equation, GPE) 是描述玻色-爱因斯坦凝聚态 (Bose-Einstein Condensate, BEC)^[1] 宏观量子行为的基础理论框架^[2-3]。借助平均场近似, 它将复杂的多体问题简化为单个粒子波函数所满足的非线性演化方程。Lee-Huang-Yang (LHY) 修正源于 Bogoliubov 理论, 描述了量子涨落对系统基态能量的贡献, 在超越平均场近似的 BEC 研究中起着关键作用。在不同空间维度下, LHY 修正的数学形式及其物理效应存在本质差异: 在二维情形下, LHY 修正项呈对数形式; 在一维和三维情形下, LHY 修正项呈幂函数形式^[4-5]。

在温度 T 低于临界温度 T_c 时, 带有 LHY 修正的三维 BEC 可由复值波函数 $\psi(x, t)$ 精确描述, 其演化服从 Gross-Pitaevskii 方程, 无量纲形式为^[6-8]:

$$i\partial_t \psi = H_\psi \psi, H_\psi := -\frac{1}{2} \Delta + V(x) + \beta |\psi|^2 + \delta |\psi|^3, x \in \mathbb{R}^3, t > 0 \quad (1)$$

其中 t 为时间, $x = (x, y, z)^T$ 为空间坐标, $V(x)$ 为有界实值外势, 且满足 $\lim_{|x| \rightarrow +\infty} V(x) = \infty$, 通常取为调和势:

$$V_{\text{har}}(x) = \frac{1}{2} (\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2) \quad (2)$$

其中 $\gamma_x > 0, \gamma_y > 0$ 和 $\gamma_z > 0$ 为无量纲常数, 分别正比于 x, y, z 方向的囚禁频率, β 和 δ 表示非线性相互作用强度。

GPE 的两个重要守恒量是波函数的模方 (归一化):

$$N(\psi(\cdot, t)) = \|\psi(\cdot, t)\|^2 := \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\cdot, t)|^2 dx \equiv 1, t \geq 0 \quad (3)$$

以及能量:

$$E(\psi(\cdot, t)) := \left(\frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + V(x) |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{2\delta}{5} |\psi|^5 \right) dx \equiv E(\psi(\cdot, 0)), t \geq 0 \quad (4)$$

基态定义为使 GPE 能量泛函达到最小的宏观波函数 $\phi_g = \phi_g(x)$, 即

$$\begin{aligned} \phi_g &:= \arg \min_{\phi \in S} E(\phi), \\ S &:= \left\{ \phi \mid N(\phi) = 1, E(\phi) < \infty \right\} \end{aligned} \quad (5)$$

与之对应的 Euler-Lagrange 方程为

$$\begin{cases} \mu \phi = H_\phi \phi, x \in \mathbb{R}^3, \\ N(\phi) = 1 \end{cases} \quad (6)$$

特征值 μ 可由下式计算:

$$\mu(\phi) = \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + V(x) |\phi|^2 + \beta |\phi|^4 + \delta |\phi|^5 \right) dx = E(\phi) + \frac{\beta}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\phi|^4 dx + \frac{3\delta}{5} \int_{\mathbb{R}^3} |\phi|^5 dx.$$

目前,已有多种数值方法可被用于计算 BEC 的基态,如 Bao 和 Tang^[9] 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^[10-12] 等提出了归一化梯度流,并构造了不同的格式。Tang^[13-14] 提出了预处理黎曼共轭梯度方法。此外,研究者还提出了 Sobolev 投影梯度流方法^[15-17]、正则化牛顿法^[18]、Gauss-Seidel 型方法^[19]、二阶流方法^[20] 等方法来计算 BEC 的基态。但是,对于带 LHY 项的三维 BEC 的基态问题,可用的方法相对比较少。本文提出了一种基于投影梯度流框架的线性化向后欧拉时间离散格式(PGF-BESP),并证明离散之后的原能量在时间步长满足某些合理条件下是下降的。

本文的剩余部分安排如下。第 1 节提出 PGF-BESP 方法,并对该方法进行时间和空间上的离散,然后证明其在时间步长满足某些合理条件下离散能量是下降的。第 2 节验证能量的下降性,并计算不同势能项以及不同参数下的基态。最后,第 3 节给出全文所得的结论。

1 方法及性质

1.1 投影梯度流

我们使用如下的连续投影梯度流方法(Projected Gradient Flow, PGF)来计算带 LHY 项的三维 BEC^[10-12]:

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \frac{1}{2} \Delta \phi - V \phi - \beta |\phi|^2 \phi + \delta |\phi|^3 \phi + \lambda_\phi(t) \phi, \\ \phi(x, 0) = \phi_0(x), \quad \|\phi_0\|^2 = 1 \end{cases} \quad (7)$$

其中 $\lambda_\phi(t)$ 是拉格朗日乘子,通过下面方式来计算:

$$\lambda_\phi(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\phi} H_\phi \phi dx \quad (8)$$

加入拉格朗日乘子 $\lambda_\phi(t)$ 是为了确保质量守恒。

在连续情形下,容易证明 PGF 格式具有能量耗散和质量守恒的性质。但是,在离散情况下,大部分离散格式都不能够保证能量递减。文献[21]提出了一种隐式处理拉格朗日乘子的方法。在没有 LHY 项的情况下,该方法将拉格朗日乘子 $\lambda_\phi(t)$ 视为一个新的“未知量”而非已知量,随后对该未知

量进行隐式离散,使其充当数值拉格朗日乘子,从而在不使用投影的情况下强制质量守恒。由于无需投影,可能更容易发展出使原始总能量递减的格式。因此,该方法可以同时保证质量守恒和能量衰减。但是,该方法在隐式离散拉格朗日乘子项的时候需要计算一个一元二次方程组,因而还需要从一元二次方程的解中选取适当的根,大大增加了算法实现的复杂性。为此我们将提出一种正交性条件来隐式地离散 $\lambda_\phi(t)$,以避免求解一元二次方程。同样,我们所提出的格式可以同时保证能量下降和质量守恒,详见 1.3 节。

1.2 空间离散及其性质

本节中我们对式(7)和(8)进行空间离散。由于外势的束缚作用,波函数 ϕ 当 $|x| \rightarrow \infty$ 时指数衰减,因而可将计算区域截断为有界区域 $\mathcal{D}: = [L_x, R_x] \times [L_y, R_y] \times [L_z, R_z]$, 并施加周期边界条件。我们采用傅里叶伪谱方法离散 ϕ ^[22-24], 网格点取为:

$$\mathcal{D}_N = \{ \mathbf{x}_{jkl} := (x_j, y_k, z_l) = (L_x + jh_x, L_y + kh_y, L_z + lh_z), (j, k, l) \in \mathcal{O}_N \},$$

其中网格步长 $h_\nu = (R_\nu - L_\nu)/N_\nu$, N_ν 为偶数, $N := N_x N_y N_z$, $\mathcal{O}_N = \{(j, k, l) \in \mathbb{N}^3 | 0 \leq j \leq N_x - 1, 0 \leq k \leq N_y - 1, 0 \leq l \leq N_z - 1\}$ 。此外,傅里叶基函数为:

$$W_{p_x p_y p_z}(\mathbf{x}) = \prod_{\nu=x,y,z} e^{i \mu_\nu^\nu (\nu - L_\nu)},$$

$$p_\nu = -\frac{N_\nu}{2}, \dots, \frac{N_\nu}{2} - 1, \mu_{p_\nu}^\nu = \frac{2\pi p_\nu}{R_\nu - L_\nu},$$

傅里叶伪谱逼近及其导数在 $\mathbf{x}_{jkl}$ 处定义为:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}_{jkl}) &\triangleq \tilde{\phi}(\mathbf{x}_{jkl}) := \frac{1}{N} \sum_{p_x, p_y, p_z} (\tilde{\phi})_{p_x p_y p_z} \cdot \\ &\quad W_{p_x p_y p_z}(\mathbf{x}_{jkl}), \\ \partial_\nu \phi(\mathbf{x}_{jkl}) &\triangleq ([\partial_\nu] \tilde{\phi})_{jkl} := \frac{1}{N} \sum_{p_x, p_y, p_z} (i \mu_{p_\nu}^\nu) (\tilde{\phi})_{p_x p_y p_z} \cdot \\ &\quad W_{p_x p_y p_z}(\mathbf{x}_{jkl}), \nu = x, y, z, \\ \partial_\nu^2 \phi(\mathbf{x}_{jkl}) &\triangleq ([\partial_\nu^2] \tilde{\phi})_{jkl} := \\ &\quad -\frac{1}{N} \sum_{p_x, p_y, p_z} (\mu_{p_\nu}^\nu)^2 (\tilde{\phi})_{p_x p_y p_z} W_{p_x p_y p_z}(\mathbf{x}_{jkl}), \end{aligned}$$

其中的 Fourier 系数为:

$$(\tilde{\phi})_{p_x p_y p_z} = \sum_{j, k, l} \tilde{\phi}(\mathbf{x}_{jkl}) \overline{W_{p_x p_y p_z}(\mathbf{x}_{jkl})}.$$

为了方便,下文依然使用 ϕ 表示 $\phi(\mathbf{x}_{jkl})$ 构成的向量。则离散能量泛函为:

$$E(\phi) := \left\langle -\frac{1}{2}[\Delta]\phi + V \odot \phi + \frac{\beta}{2}(|\phi|^2) \odot \phi + \frac{2\delta}{5}(|\phi|^3) \odot \phi, \phi \right\rangle,$$

离散特征值为:

$$\lambda_\phi := E(\phi) + \frac{\beta}{2} \|\phi\|^2 + \frac{3\delta}{5} \langle |\phi|^2, |\phi|^3 \rangle,$$

这里 $\odot$ 表示 Hadamard 乘积, $|\phi|^2$ 表示 $\phi \odot \phi$, $|\phi|^3$ 表示 $\phi \odot \phi \odot \phi$. 为简化记号, 我们省略 $\odot$. 此外, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 和 $\|\cdot\|$ 为欧式内积与欧式范数:

$$\langle U, V \rangle := \operatorname{Re} \left(h_x h_y h_z \sum_{j,k,l} U_{jkl} \overline{V_{jkl}} \right),$$

$$\|U\| = \sqrt{\langle U, U \rangle},$$

其中 Re 表示取实部. 离散的拉普拉斯算子 $[\Delta]$ 定义为 $[\Delta] = [\partial_x^2] + [\partial_y^2] + [\partial_z^2]$. 为了之后的叙述, 我们定义离散 L^p 和 H^1 范数为:

$$\|\phi\|_{L^p} := \left(h_x h_y h_z \sum_{j=0}^{N_x-1} \sum_{k=0}^{N_y-1} \sum_{l=0}^{N_z-1} |\phi_{jkl}|^p \right)^{1/p},$$

$$\|\phi\|_{H^1} := \sqrt{\|\phi\|^2 + \|[\partial_x]\phi\|^2 + \|[\partial_y]\phi\|^2 + \|[\partial_z]\phi\|^2}.$$

为方便, 此文以下内容将舍掉符号 $[\cdot]$.

引理 1.1 给定 $\phi \in \mathbb{C}^N$. 对任意 $u, v \in \mathbb{C}^N$, 有

1) 算子 Δ 是自伴的, 即 $\langle u, \Delta v \rangle = \langle \Delta u, v \rangle$. 因

此离散哈密顿量 $\mathcal{H}_\phi = -\frac{1}{2}\Delta + V + \beta|\phi|^2 + \delta|\phi|^3$ 也是自伴随的, 并且对任意自伴随算子 $\mathcal{G}$ 有:

$$\begin{aligned} 2\langle \mathcal{G}u, u-v \rangle &= \\ \langle \mathcal{G}u, u \rangle - \langle \mathcal{G}v, v \rangle + \langle \mathcal{G}(u-v), u-v \rangle, \\ 2\langle \mathcal{G}v, u-v \rangle &= \langle \mathcal{G}u, u \rangle - \langle \mathcal{G}v, v \rangle - \\ \langle \mathcal{G}(u-v), u-v \rangle \end{aligned} \quad (9)$$

2) Gagliardo-Nirenberg 不等式在 $p=4, 6$ 时成立 (参见文献 [25]):

$$\|v\|_{L^p} \leq C \|v\|_{L^2}^{3/p-1/2} \|v\|_{H^1}^{3/2-3/p} \quad (10)$$

证明 1) 分部积分可得:

$$\begin{aligned} \langle u, \partial_x v \rangle &= -\langle \partial_x u, v \rangle, \langle u, \partial_y v \rangle = \\ -\langle \partial_y u, v \rangle, \langle u, \partial_z v \rangle &= -\langle \partial_z u, v \rangle. \end{aligned}$$

因

$$\begin{aligned} \langle u, \Delta v \rangle &= -\langle \partial_x u, \partial_x v \rangle - \langle \partial_y u, \partial_y v \rangle - \\ \langle \partial_z u, \partial_z v \rangle &= \langle \Delta u, v \rangle, \end{aligned}$$

离散的哈密顿量 $\mathcal{H}_\phi$ 是自伴随的. 对任意的自伴算子 $\mathcal{G}$, 令:

$$G_u := 2\langle \mathcal{G}u, u-v \rangle, G_v := 2\langle \mathcal{G}v, u-v \rangle.$$

我们可以得到

$$\begin{aligned} G_u + G_v &= 2\langle \mathcal{G}u, u-v \rangle + 2\langle \mathcal{G}v, u-v \rangle = \\ 2\langle \mathcal{G}u, u \rangle - 2\langle \mathcal{G}u, v \rangle + 2\langle \mathcal{G}v, u \rangle - \\ 2\langle \mathcal{G}v, v \rangle &= 2\langle \mathcal{G}u, u \rangle - 2\langle \mathcal{G}u, v \rangle + \\ 2\langle \mathcal{G}u, v \rangle - 2\langle \mathcal{G}v, v \rangle &= 2\langle \mathcal{G}u, u \rangle - \\ 2\langle \mathcal{G}v, v \rangle, \\ G_u - G_v &= 2\langle \mathcal{G}u, u-v \rangle - 2\langle \mathcal{G}v, u-v \rangle = \\ 2\langle \mathcal{G}(u-v), u-v \rangle. \end{aligned}$$

因此,

$$\begin{aligned} G_u &= \frac{[(G_u + G_v) + (G_u - G_v)]}{2} = \\ \langle \mathcal{G}u, u \rangle - \langle \mathcal{G}v, v \rangle + \langle \mathcal{G}(u-v), (u-v) \rangle, \\ G_v &= \frac{[(G_u + G_v) - (G_u - G_v)]}{2} = \\ \langle \mathcal{G}u, u \rangle - \langle \mathcal{G}v, v \rangle - \langle \mathcal{G}(u-v), (u-v) \rangle. \end{aligned}$$

2) 的证明与文献 [25] 中的相应证明类似, 为了文章的简便性此处省略. 证毕.

1.3 时间离散及其性质

在本节中我们对已经空间离散完之后的 (7) 和 (8) 式进行时间离散. 考虑如下线性化向后欧拉时间离散格式 (PGF-BESP), 该格式可显式求解:

求 $(\phi^{n+1}, \lambda^{n+1})$, 使得:

$$\begin{cases} \frac{\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n}{\tau} = \frac{1}{2} \Delta \tilde{\phi}^{n+1} - \\ (V(x) + \beta|\phi^n|^2 + \delta|\phi^n|^3) \tilde{\phi}^{n+1} + \lambda^{n+1} \phi^n, \\ \langle \tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n, \phi^n \rangle = 0, \\ \phi^{n+1} = \frac{\tilde{\phi}^{n+1}}{\|\tilde{\phi}^{n+1}\|}, n=0, 1, \dots \end{cases} \quad (11)$$

将 (11) 式的第一个方程重新整理得到:

$$(I + \tau \mathcal{H}_{\phi^n}) \tilde{\phi}^{n+1} = \phi^n + \tau \lambda^{n+1} \phi^n,$$

其中,

$$\mathcal{H}_{\phi^n} = -\frac{1}{2} \Delta + V + \beta|\phi^n|^2 + \delta|\phi^n|^3.$$

通过引入 $\tilde{\phi}^{n+1} = \phi_1^{n+1} + \lambda^{n+1} \phi_2^{n+1}$, 并令 $\mathcal{A}_n := I + \tau \mathcal{H}_{\phi^n}$, 可得:

$$\phi_1^{n+1} := \mathcal{A}_n^{-1} \phi^n, \phi_2^{n+1} = \tau \phi_1^{n+1}.$$

因此, $\tilde{\phi}^{n+1} = (1 + \tau \lambda^{n+1}) \phi_1^{n+1}$. 由正交条件, 可以得到 λ^{n+1} 的显式表达式:

$$(1 + \tau\lambda^{n+1}) \langle \phi_1^{n+1}, \phi^n \rangle = 1 \Rightarrow \lambda^{n+1} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{1}{\langle \phi_1^{n+1}, \phi^n \rangle} - 1 \right) = \frac{\langle \phi^n - \phi_1^{n+1}, \phi^n \rangle}{\tau \langle \phi_1^{n+1}, \phi^n \rangle} \quad (12)$$

计算可得 $\lim_{\tau \rightarrow 0} \lambda^{n+1} = \langle \phi^n, \mathcal{H}_{\phi^n} \phi^n \rangle = \lambda_{\phi^n}$. 因此, 离散的 λ^{n+1} 和连续的 λ_{ϕ^n} 是相容的.

为了证明离散能量是下降的, 我们首先需要对 $\tilde{\phi}^{n+1}$ 做一个先验估计. 我们有如下的引理:

引理 1.2 (先验估计) 设 $\{\phi^n\}_{n \geq 0}$ 由格式 (11) 生成. 当 $0 < \tau \leq 1/(5E^n)$ 时, 有:

$$\|\tilde{\phi}^{n+1}\|_{H^1} \leq C\sqrt{1 + E^n},$$

其中 C 是一个常数.

证明 由于 H_{ϕ^n} 正定, $\mu_{\min}(\mathcal{A}_n) \geq 1$, 从而 $\|\phi_1^{n+1}\| \leq 1$. 展开 $\langle \phi_1^{n+1}, \phi^n \rangle$ 得:

$$\begin{aligned} \langle \phi_1^{n+1}, \phi^n \rangle &= \langle (I + \tau H_{\phi^n})^{-1} \phi^n, \\ &\quad (I - \tau H_{\phi^n} + \tau H_{\phi^n}) \phi^n \rangle = \\ &= 1 - \tau \langle (I + \tau H_{\phi^n})^{-1} \phi^n, H_{\phi^n} \phi^n \rangle = \\ &= 1 - \tau \langle H_{\phi^n} \phi^n, \phi^n \rangle + \tau^2 \langle H_{\phi^n} \phi^n, \mathcal{A}_n^{-1} H_{\phi^n} \phi^n \rangle \geq \\ &= 1 - \tau \langle H_{\phi^n} \phi^n, \phi^n \rangle. \end{aligned}$$

因为 $\langle H_{\phi^n} \phi^n, \phi^n \rangle \leq \frac{5}{2} E^n$, 故 $\langle \phi_1^{n+1}, \phi^n \rangle \geq 1 - \frac{5}{2} \tau E^n$. 取 $\tau \leq 1/(5E^n)$ 可得 $\langle \phi_1^{n+1}, \phi^n \rangle \geq 1/2$, 于是 $0 \leq \lambda^{n+1} \leq 1/\tau$. 因此,

$$\|\tilde{\phi}^{n+1}\| = (1 + \tau\lambda^{n+1}) \|\phi_1^{n+1}\| \leq 2.$$

对于梯度项, 利用 $H_{\phi^n} \geq -\frac{1}{2} \Delta$ 可得:

$$\begin{aligned} \|\nabla \phi_1^{n+1}\|^2 &\leq 2 \langle H_{\phi^n} \phi_1^{n+1}, \phi_1^{n+1} \rangle \leq \\ &= 2 \langle H_{\phi^n} \phi^n, \phi^n \rangle \leq 5E^n. \end{aligned}$$

其中最后一步我们利用了非线性项可由能量控制的事实. 最终, 我们有:

$$\|\tilde{\phi}^{n+1}\|_{H^1} = (1 + \tau\lambda^{n+1}) \|\phi_1^{n+1}\|_{H^1} \leq 2\sqrt{1 + 5E^n}.$$

证毕.

接下来, 我们有如下的离散能量耗散性:

定理 1.3 假设 $\{\phi^n\}_{n \geq 0}$ 由格式 (11) 生成. 则当

$$0 < \tau \leq \tau_0 := \min \left\{ \frac{1}{5E^0}, \frac{2}{C\beta^4(1 + E^0)^3 + C\delta^4(1 + E^0)^6} \right\}$$

时能量非增, 即 $E(\phi^{n+1}) \leq E(\phi^n), \forall n \geq 0$.

证明 将 (11) 式的第一个方程与 $2\tilde{\phi}^{n+1} - 2\phi^n$

作离散内积得:

$$2\tau^{-1} \|\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n\|^2 = -2 \langle H_{\phi^n} \tilde{\phi}^{n+1}, \tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n \rangle.$$

利用引理 1.2 的性质, 我们可以得到:

$$\begin{aligned} \langle H_{\phi^n} \tilde{\phi}^{n+1}, \tilde{\phi}^{n+1} \rangle - \langle H_{\phi^n} \phi^n, \phi^n \rangle &= \\ &= -2\tau^{-1} \|\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n\|^2 - \\ &\quad \langle H_{\phi^n} (\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n), \tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n \rangle. \end{aligned}$$

由于 $V \geq 0$, 我们有:

$$\begin{aligned} \langle H_{\phi^n} (\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n), \tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n \rangle &\geq \\ &= \frac{1}{2} \|\nabla (\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n)\|^2 + \\ &\quad \langle \beta |\phi^n|^2 + \delta |\phi^n|^3, |\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n|^2 \rangle \end{aligned}$$

从而,

$$\begin{aligned} \langle H_{\phi^n} \tilde{\phi}^{n+1}, \tilde{\phi}^{n+1} \rangle - \langle H_{\phi^n} \phi^n, \phi^n \rangle &\leq \\ &= (-2\tau^{-1} + 1/2) \|\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n\|^2 - \\ &= 1/2 \|\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n\|_{H^1}^2 - \\ &\quad \langle \beta |\phi^n|^2 + \delta |\phi^n|^3, |\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n|^2 \rangle. \end{aligned}$$

现在我们来计算能量差. 利用能量和 Hamiltonian 的表达式, 有:

$$\begin{aligned} E(\tilde{\phi}^{n+1}) - E(\phi^n) &= \left(\langle H_{\phi^n} \tilde{\phi}^{n+1}, \tilde{\phi}^{n+1} \rangle - \langle H_{\phi^n} \phi^n, \phi^n \rangle \right) + \frac{\beta}{2} \|\tilde{\phi}^{n+1}\|^2 - \|\phi^n\|^2 + \\ &= \frac{\delta}{5} \langle |\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n|^2, 2|\tilde{\phi}^{n+1}|^3 + 4|\tilde{\phi}^{n+1}|^2 |\phi^n| + \\ &\quad 6|\tilde{\phi}^{n+1}| |\phi^n|^2 + 3|\phi^n|^3 \rangle \leq \\ &= (-2\tau^{-1} + 1/2) \|\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n\|^2 - \\ &= 12 \|\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n\|_{H^1}^2 + \beta \|\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n\|^2 + \\ &= \frac{\delta}{5} \langle |\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n|^2, 2|\tilde{\phi}^{n+1}|^3 + 4|\tilde{\phi}^{n+1}|^2 |\phi^n| + \\ &\quad 6|\tilde{\phi}^{n+1}| |\phi^n|^2 - 22|\phi^n|^3 \rangle. \end{aligned}$$

下面估计非线性项. 由 Hölder 不等式、Young 不等式及引理 1.1, 有:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{5} \langle |\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n|^2, 2|\tilde{\phi}^{n+1}|^3 + 4|\tilde{\phi}^{n+1}|^2 |\phi^n| + \\ &= 6|\tilde{\phi}^{n+1}| |\phi^n|^2 - 2|\phi^n|^3 \rangle \leq \\ &= \frac{\delta}{5} \left(\frac{20}{3} \|\tilde{\phi}^{n+1}\|_{L^6}^3 + \frac{10}{3} \|\phi^n\|_{L^6}^3 \right) \|\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n\|_{L^4}^2 \leq \end{aligned}$$

$$C\delta\left(\left\|\tilde{\phi}^{n+1}\right\|^3+\left\|\phi^n\right\|_{H^1}^3\right)\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|$$

$$\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|_{H^1}^{3/2} \leq C\delta(1+E^n)$$

$$\left(\epsilon_2^4\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|^2+\epsilon^{-4/3}\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|_{H^1}^2\right)$$

取 $\epsilon=4C\delta(1+E^n)$ 。我们有:

$$\frac{\delta}{5}\left\langle\left|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right|^2,2\left|\tilde{\phi}^{n+1}\right|^3+4\left|\tilde{\phi}^{n+1}\right|^2\left|\phi^n\right|+6\left|\tilde{\phi}^{n+1}\right|\left|\phi^n\right|^2+3\left|\phi^n\right|^3\right\rangle \leq$$

$$C\delta^4(1+E^n)^6\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|^2+\frac{1}{1}\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|_{H^1}^2$$

类似地,对四次方项有:

$$\beta\left\|\tilde{\phi}^{n+1}\left|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right|\right\|^2 \leq C\beta^4(1+E^n)^3$$

$$\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|^2+\frac{1}{4}\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|_{H^1}^2$$

因此,我们有

$$E\left(\tilde{\phi}^{n+1}\right)-E\left(\phi^n\right) \leq\left(-2 \tau^{-1}+C \beta^4\left(1+E^n\right)^3\right.$$

$$\left.+C \delta^4\left(1+E^n\right)^6\right)\left\|\tilde{\phi}^{n+1}-\phi^n\right\|^2$$

于是,若

$$\tau \leq \min \left\{\frac{1}{5 E^n}, \frac{2}{C \beta^4\left(1+E^n\right)^3+C \delta^4\left(1+E^n\right)^6}\right\},$$

则有 $E\left(\tilde{\phi}^{n+1}\right) \leq E\left(\phi^n\right)$ 。由于 $\left\|\tilde{\phi}^{n+1}\right\| \geq 1$, 故 $E\left(\phi^{n+1}\right) \leq E\left(\tilde{\phi}^{n+1}\right)$ 。因此, $E\left(\phi^{n+1}\right) \leq E\left(\phi^n\right)$ 。

最后,我们通过归纳法证明当

$$0<\tau \leq \tau_0=$$

$$\min \left\{\frac{1}{5 E^0}, \frac{2}{C \beta^4\left(1+E^0\right)^3+C \delta^4\left(1+E^0\right)^6}\right\}$$

时能量耗散成立。当 $n=0$ 时结论显然。假设对 $n \leq k$ 以及 $0<\tau \leq \tau_0$ 能量耗散成立。则 $0 \leq E^i \leq E^0$, 从而 $\tau_0 \leq \tau_i$ 对 $i=0,1, \cdots, k$ 成立。于是, 当 $0<\tau \leq \tau_0 \leq \tau_k$ 时, 有 $0 \leq E^{k+1} \leq E^k$ 。因此, 对 $n=k+1$ 以及 $0<\tau \leq \tau_0$, 能量依然耗散。于是 PGF-BESP 格式的能量耗散性得证, 即

$$E\left(\phi^{n+1}\right)-E\left(\phi^n\right) \leq 0, \forall n \geq 0, 0<\tau \leq \tau_0$$

证毕。

2 数值模拟

在计算带 LHY 修正项的三维 BEC 的基态时, 采用如下的算法终止准则:

$$\frac{\left\|\phi^{n+1}-\phi^n\right\|_{\infty}}{\tau} \leq \epsilon_r$$

实际计算中, 取 $\epsilon_r=10^{-7}$ 。算法在 MATLAB (2022b) 中实现, 运行环境为 Ubuntu GNU/Linux, CPU Intel(R) Xeon(R) Gold 6136R @ 3.00GHz, 缓存 25 MB。所有空间方向均采用均匀网格, $h=h_x=h_y=h_z$ 。本文考虑两类囚禁势: 调和势(2)和光学晶格势:

$$V_d^1(x)=V_{\text {har }}(x)+\sum_v \kappa_v \sin ^2\left(q_v v\right) \quad(13)$$

其中 $v=x, y, z$ 。计算区域取为 $[-8,8]^3$, 空间步长取为 $h=1/8$ 。初值取为:

$$\phi(x)=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi^3}} e^{-\frac{|x|^2}{2}}.$$

算例 2.1 本算例旨在测试 PGF-BESP 格式的迭代步数及 CPU 时间。考虑调和势(2)下的带三维 LHY 修正项的 BEC, 取 $\gamma_x=\gamma_y=\gamma_z=1, \beta=100, \delta=100$, 结果参见表 1 和图 1。可以看到, 随时间步长的增大, 迭代步数和 CPU 时间都减小, 且格式在时间步长大于定理 1 中给出的时间步长时仍能稳定运行。

表 1 迭代步数与 CPU 时间

Tab. 1 Iteration steps and CPU time					
τ	迭代步数	CPU 时间/s	最终残差	质量误差	能量
0.01	482	299	1.13e-7	0	2.960
0.05	112	111	1.06e-7	0	2.960
0.1	66	89	1.3e-7	-1.1e-16	2.960
0.5	28	71	1.8e-7	-1.1e-16	2.960

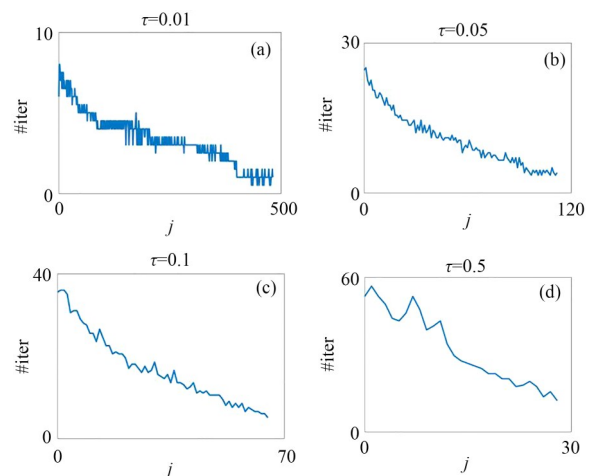


图 1 第 j 步线性迭代的步数

Fig. 1 Linear iterations at step j

算例 2.2 本算例旨在测试 PGF-BESP 格式的能量下降情况。考虑调和势(2)下的带三维 LHY 修正项的 BEC, 取 $\gamma_x=\gamma_y=\gamma_z=1, \beta=$

100, $\delta = 100$, $\tau = 0.01$, 结果参见图 2。可以看到, 能量的确是随着时间下降的, 与我们的分析相符。

算例 2.3 考虑调和势(2)下带 LHY 修正的三维 BEC, 取 $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 1$, $\beta = 100, 500$, $\delta = 100, 2000$, 结果参见图 3。可以看到, 在调和势下基态呈现球形结构, 且基态构型的整体尺寸随着 β 或者 δ 的增大而增大。

算例 2.4 考虑三维光学晶格势(13)下带 LHY 修正的三维 BEC, 取 $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 1$, $q_x = q_y = q_z = \pi/4$, $\kappa_x = \kappa_y = \kappa_z = 20$, $\beta = 100, 2000$, $\delta = 100, 2000$, 结果参见图 4 和图 5。可以看到, 在光学晶格势下, 基态构型形成多层晶格结构, 并且整体尺寸随着 β 或者 δ 的增大而增大。

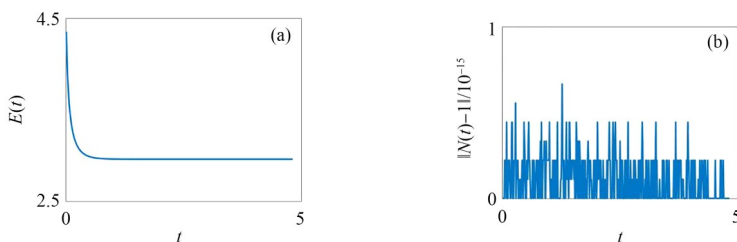


图 2 能量和质量误差随时间的变化

Fig. 2 Evolution of energy and mass errors over time

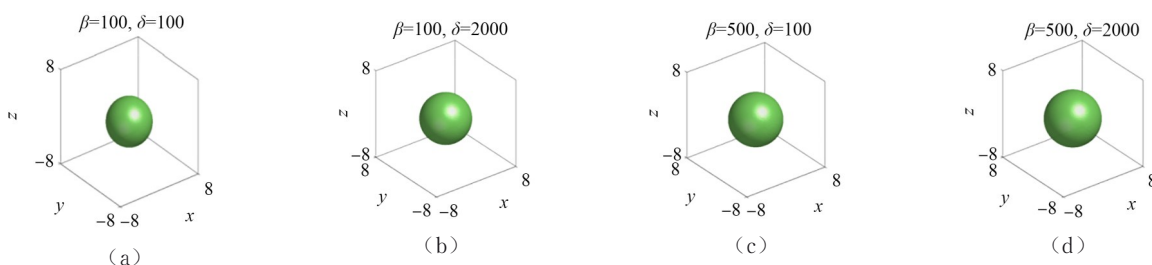


图 3 算例 2.3 中基态的等值面图, $|\phi_g(x)|^2 = 10^{-5}$

Fig. 3 Isosurface of the ground state, $|\phi_g(x)|^2 = 10^{-5}$ in Example 2.3

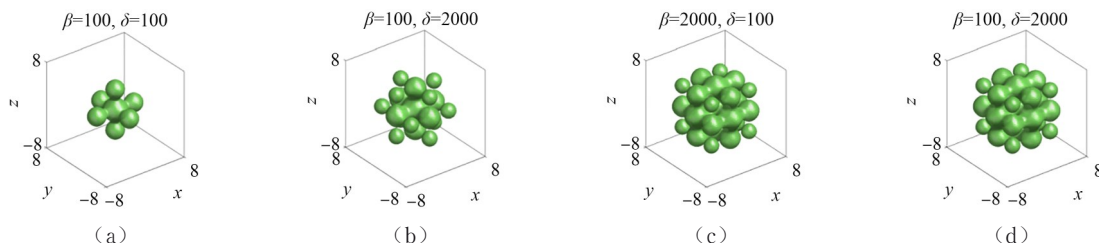


图 4 算例 2.4 中基态的等值面图, $|\phi_g(x)|^2 = 10^{-5}$

Fig. 4 Isosurface of the ground state, $|\phi_g(x)|^2 = 10^{-5}$ in Example 2.4

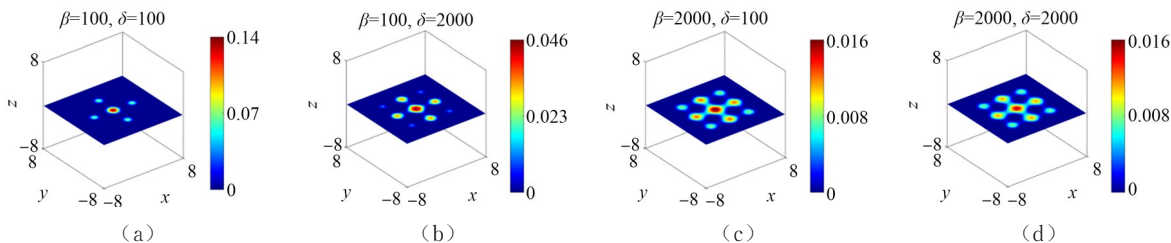


图 5 算例 2.4 中基态的切片图

Fig. 5 Slice plots of the ground state in Example 2.4

3 结 论

本文针对带LHY修正项的三维GPE的基态计算问题提出了一种基于投影梯度流框架的线性化向后欧拉时间离散格式PGF-BESP。该格式通过引入正交条件隐式处理拉格朗日乘子,既避免了已有方法中求解一元二次方程的繁琐步骤,同时又保证了离散质量守恒与能量递减性。理论分析表明,在适当的时间步长条件下,格式能够保证离散能量单调递减。数值实验验证了格式的能量耗散行为,并展示了不同相互作用参数下调和势与光学晶格势中基态密度分布的变化。本文的方法为带高阶非线性项的GPE基态计算提供了一种稳定、高效且易于实现的数值工具。

参考文献:

- [1] Bose S N. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese [J]. Zeitschrift für Physik, 1924, 26(1): 178-181.
- [2] Einstein A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases [J]. Sitz Ber Preuss Akad Wiss, 1924, 22: 261-267.
- [3] Lieb E H, Seiringer R, Yngvason J. Bosons in a trap: A rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional [J]. Phys Rev A, 2000, 61(4): 043602.
- [4] Kadau H, Schmitt M, Wenzel M, *et al.* Observing the Rosensweig instability of a quantum ferrofluid [J]. Nature, 2016, 530(7589): 194-197.
- [5] Lee T D, Huang K, Yang C N. Eigenvalues and eigenfunctions of a Bose system of hard spheres and its low-temperature properties [J]. Phys Rev, 1957, 106(6): 1135-1145.
- [6] Petrov D S. Quantum mechanical stabilization of a collapsing Bose-Bose mixture [J]. Phys Rev Lett, 2015, 115(15): 155302.
- [7] Semeghini G, Ferioli G, Masi L, *et al.* Self-bound quantum droplets of atomic mixtures in free space [J]. Phys Rev Lett, 2018, 120(23): 235301.
- [8] Petrov D S, Astrakharchik G E. Ultradilute low-dimensional liquids [J]. Phys Rev Lett, 2016, 117(10): 100401.
- [9] Bao W, Tang W. Ground state solution of Bose-Einstein condensate by directly minimizing the energy functional [J]. J Comput Phys, 2003, 187(1): 230-254.
- [10] Bao W, Chern I, Lim F. Efficient and spectrally accurate numerical methods for computing ground and first excited states in Bose-Einstein condensates [J]. J Comput Phys, 2006, 219(2): 836-854.
- [11] Bao W, Du Q, Zhang Y. Dynamics of rotating Bose-Einstein condensates and its efficient and accurate numerical computation [J]. SIAM J Appl Math, 2006, 66(3): 758-786.
- [12] Bao W, Cai Y, Wang H. Efficient numerical methods for computing ground states of dipolar Bose-Einstein condensates [J]. J Comput Phys, 2010, 229(20): 7874-7892.
- [13] Shu Q, Tang Q, Zhang S, *et al.* A preconditioned Riemannian conjugate gradient method for computing the ground states of arbitrary-angle rotating Bose-Einstein condensates [J]. J Comput Phys, 2024, 512: 113130.
- [14] Antoine X, Levitt A, Tang Q. Efficient spectral computation of the stationary states of rotating Bose-Einstein condensates by the preconditioned nonlinear conjugate gradient method [J]. J Comput Phys, 2017, 343: 92-109.
- [15] Chen Z, Lu J, Lu Y, *et al.* On the convergence of Sobolev gradient flow for the Gross-Pitaevskii eigenvalue problem [J]. SIAM J Numer Anal, 2024, 62(2): 667-691.
- [16] Danaila I, Kazemi P. A new Sobolev gradient method for direct minimization of the Gross-Pitaevskii energy with rotation [J]. SIAM J Sci Comput, 2010, 32(5): 2447-2467.
- [17] Henning P, Peterseim D. Sobolev gradient flow for the Gross-Pitaevskii eigenvalue problem: global convergence and computational efficiency [J]. SIAM J Numer Anal, 2020, 58(3): 1744-1772.
- [18] Wu X, Wen Z, Bao W. A regularized Newton method for computing ground states of Bose-Einstein condensates [J]. J Sci Comput, 2017, 73(1): 303-329.
- [19] Chang S, Lin W, Shieh S. Gauss-Seidel-type methods for energy states of a multi-component Bose-Einstein condensate [J]. J Comput Phys, 2005, 202(1): 367-390.
- [20] Chen H, Dong G, Liu W, *et al.* Second-order flows for computing the ground states of rotating Bose-Einstein condensates [J]. J Comput Phys, 2023, 475: 111872.
- [21] Feng Z, Shu Q, Tang Q. Mass-preserving and energy-diminishing semi-implicit schemes for comput-

- ing ground states of rotating Bose-Einstein condensates [J]. J Sci Comput, 2026, 106(1): 30.
- [22] Antoine X, Bao W, Besse C. Computational methods for the dynamics of the nonlinear Schrödinger/Gross-Pitaevskii equations [J]. Comput Phys Commun, 2013, 184(12): 2621-2633.
- [23] Antoine X, Duboscq R. Robust and efficient preconditioned Krylov spectral solvers for computing the ground states of fast rotating and strongly interacting Bose-Einstein condensates [J]. J Comput Phys, 2014, 258(1): 509-523.
- [24] Bao W, Shen J. A fourth-order time-splitting Laguerre-Hermite pseudospectral method for Bose-Einstein condensates [J]. SIAM J Sci Comput, 2005, 26(6): 2020-2028.
- [25] Faou E, Jezequel T. Resonant time steps and instabilities in the numerical integration of Schrödinger equations [J]. Differ Integral Equ, 2015, 28(3/4): 221-238.
- (责任编辑: 周兴旺)