

基于 TSSP 虚时演化求解 BEC 中的 GP 方程

赵莹杉* 张婧瑶†

June 8, 2022

Abstract

本文回顾了玻色-爱因斯坦凝聚 (Bose-Einstein condensate, BEC) 的背景及描述 BEC 基态的非线性薛定谔方程—Gross-Pitaevskii (GP) 方程。对一维定态 GP 方程, 使用时间劈裂谱法 (TSSP) 结合虚时演化算法求解了系统基态化学势及波函数。本文编写了相应程序, 研究了无相互作用、排斥/吸引相互作用下, 谐振子势和草帽形势中的波函数基态。谐振子势中, 数值结果呈现的相互作用非线性项对波包形状的影响与定性分析一致。草帽形势中, 吸引势会造成对称破缺, 使得基态失去势能的空间反演对称性, 并出现二重简并。最后, 本文对虚时演化和实际实验中的动力学过程的关联进行了简单讨论。

*学号: 1952275 负责数值求解 GP 方程与分析部分

†学号: 1952498 负责 BEC 与 GP 方程概述部分

1 玻色-爱因斯坦凝聚概述

1.1 背景介绍

理想玻色气体温度降低到对应的临界温度之下后，宏观数量的玻色子将占据同一个量子态，此时发生凝聚现象，这种奇特的量子现象被称为**玻色-爱因斯坦凝聚**（Bose-Einstein condensate，简称 BEC）。玻色-爱因斯坦凝聚呈现出的一种气态的、超流性的物质状态。在这种状态下，几乎全部原子都聚集到能量最低的量子态 [1]。

1925 年，Einstein 在光子玻色统计的基础上预言了该凝聚态的存在。1938 年 London 提出超流态液氦本质上是 BEC。然而由于 BEC 的实现条件太过苛刻，既要求能达到极低的温度，又希望原子体系仍处于气态，所以研究者们一直未能观测到严格意义上的 BEC 现象。直到 70 年后，美国科罗拉多大学实验天体物理联合研究所（JILA）和国家标准技术研究所（NIST）的 Wieman 小组于 1995 年首先报道了在实验上观察到的 ^{87}Rb 原子的玻色-爱因斯坦凝聚现象。目前，国际上已有多个实验室采取冷却、操控等技术实现了多种元素的玻色-爱因斯坦凝聚现象。已实现 BEC 的原子种类有： ^{87}Rb , ^7Li , ^{23}Na , ^{85}Rb , ^{41}K , ^{133}Ce , ^1H , ^4He , ^{174}Yb 等，另外分子玻色-爱因斯坦凝聚也已经实现 [2]。

玻色-爱因斯坦凝聚的实现，具有巨大的理论和实践意义。BEC 是典型的**宏观量子态**，具有高度可控的量子特性，因此，被用于开展对包括超流现象在内的凝聚态物理量子模拟研究。随着近几年相关实验技术的突飞猛进，特别是光晶格、量子气体显微镜以及微结构光阱等实验技术的发展，BEC 不仅能用于模拟凝聚态物理中已有的量子现象，甚至能够模拟传统凝聚态物理中不存在的新奇量子物态和物理过程。BEC 具有相干时间长、参数可控、实验技术成熟等优势，已成功在中性原子气体中模拟了人工规范势、自旋轨道耦合、量子霍尔效应、拓扑物态等重要现象 [3]。BEC 的制备是量子模拟和量子精密测量研究的基础。

1.2 理论推导

考虑由 N 个全同、近独立的玻色子组成的系统，温度为 T ，体积为 V ，根据玻色分布，处在能级 ε_l 的粒子数为

$$a_l = \frac{\omega_l}{\exp(\frac{\varepsilon_l - \mu}{kT}) - 1} \quad (1)$$

处在任一能级的粒子数都不为负值，可得 $\varepsilon_0 > \mu$ ，如果取最低能级为能量零点， $\mu < 0$ 。

粒子数密度为 $n = N/V$ ，化学势由下式定出

$$\frac{2\pi}{h^3}(2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{\exp(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}) - 1} = n \quad (2)$$

n 给定的情形下, 化学势随温度的降低而升高, 温度降到临界温度时, 化学势趋于-0, 则临界温度 T_C 由下式定出:

$$\frac{2\pi}{h^3}(2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{\exp(\frac{\varepsilon}{kT_C}) - 1} = n \quad (3)$$

临界温度为:

$$T_C = \frac{2\pi}{(2.612)^{2/3}} \frac{\hbar^2}{mk} (n)^{2/3} \quad (4)$$

可改写为:

$$n \left(\frac{h}{\sqrt{2\pi mkT_C}} \right)^3 = n\lambda^3 = 2.612 \quad (5)$$

即出现凝聚体的条件为 $n\lambda^3 \geq 2.612$, 当相空间密度达到 2.612 时, 开始形成 BEC, 此时对应温度为 BEC 临界转变温度。

$T \leq T_C$ 时,

$$n_0(T) + \frac{2\pi}{h^3}(2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{\exp(\frac{\varepsilon}{kT}) - 1} = n \quad (6)$$

处在最低能级的粒子数密度为 $n_0(T) = n \left[1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^{3/2} \right]$

温度低于转变温度时, 大量原子凝聚于动能基态温度越低, 凝聚的原子数比例越高。BEC 的主要特征是原子的热德布罗意波长范围内只有一个原子, 即原子的物质波波长大于原子间距, 整个原子体系成为一个整体, 可用统一的波函数描述。

1.3 实验基础

在“原子气体玻色爱因斯坦凝聚体虚拟仿真实验”中, 运用了激光冷却、磁光陷阱冷却和蒸发冷却等技术。其中激光冷却的极限温度有限制, 到不了形成 BEC 所需要的温度, 要进一步降低温度并提高相空间密度最终实现 BEC 使用到蒸发冷却。动能越大的原子越容易跑到势阱的较高处, 这样降低势阱深度时, 动能大的原子较容易逃逸出势阱。剩下的原子通过弹性碰撞重新达到热平衡, 同时具有更低的温度和更高的相空间密度。蒸发冷却的温度极限取决于最小阱深能到多少, 对于光阱, 强制蒸发冷却的方法能将原子团冷却到几十纳开的量级, 远低于 BEC 的临界转变温度。最终制备了 ^{87}Rb 玻色爱因斯坦凝聚体。

实验中通过时间飞行法测原子温度, 光学黏团中的原子在自由扩散之前的速度分布满足麦克斯韦-玻尔兹曼速度分布率, 常用黏团扩展法来测量原子的温度。该方法是在关闭冷却光一段时间后用吸收成像方法来观察原子团密度分布, 从而得到原子团温度。由 BEC 飞行时间图像, 处理得到温度在 100 nK 左右。

但是实验中没有涉及描述 BEC 状态的模型，玻色-爱因斯坦凝聚体的状态可以通过凝聚态密度、超流体速度和基本激发分布函数的耦合演化方程等来描述。我们选择较为简单情况下的 **Gross-Pitaevskii 方程** 来描述 BEC 系统，帮助进一步理解凝聚态粒子的状态。

2 Gross-Pitaevskii 方程

2.1 理论推导

Gross-Pitaevskii equation (GPE) 使用 Hartree-Fock 近似和赝势模型描述了由全同玻色子组成的量子多体系统的基态 [4]。

假设 BEC 气体中的所有粒子都处于相同的量子态，则它们各自的单体波函数都可以使用相同的 ψ 来表示。根据 Hartree-Fock 近似， N 体玻色系统的整体波函数 Ψ 可以使用各个单体波函数的直积表示：

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2) \cdots \psi(\mathbf{r}_N) \quad (7)$$

其中 \mathbf{r}_i 为第 i 个玻色子的位矢。对于超冷 BEC 气体，粒子的德布罗意波长远大于玻色-玻色相互作用长度，故可以近似为 S 波（分波阶数 $l = 0$ ）散射。若粒子平均间距大于散射长度，则可以使用赝势来近似描述粒子间真实相互作用的特征 [5]。于是系统在赝势模型下的哈密顿量为：

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i) \right] + g \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad \text{where } g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (8)$$

其中 m 是玻色子的质量， V 是外部势场， g 是耦合常数，它正比于两玻色子间 S 波散射长度 a_s 。

引入凝聚体波函数 $\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{N}\psi(\mathbf{r})$ ，则系统的粒子密度为 $n(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2$ [2]。使用 Hartree-Fock 近似方法得到该凝聚态波函数满足的定态薛定谔方程，即定态 GPE：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r})|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}) = \mu\Psi(\mathbf{r}) \quad (9)$$

其中 μ 为系统化学势。而系统的归一化条件为：

$$\int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}^3 = \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}^3 = N \quad (10)$$

相应地，含时 GPE 为：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (11)$$

接下来,我们考虑一维的情况,并代换变量为正常归一化的波函数 $\psi(x) = \Psi(x)/\sqrt{N}$, 即 $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$ 。则 GP 方程变为:

$$\begin{cases} \mathbf{A}\psi(x) = \mu\psi(x) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \mathbf{A}\psi(x, t) \end{cases}, \quad \mathbf{A} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + gN|\psi(x, t)|^2 \quad (12)$$

可以发现, GP 方程是一类非线性偏微分方程, 难以精确解析求解, 故而我们试图通过一些数值方法来计算得到凝聚体波函数的基态。接下来, 我们将使用时间劈裂谱方法结合虚时演化方法数值求解含时 GP 方程, 并分析求得的基态波函数及其反应的系统性质。

实际上, 我们在研究过程中也遇到了一些问题, 例如未能成功使用 Krylov 子空间方法求解定态 GPE, 使用空间差分的虚时演化算法不稳定等, 我们也将做进一步分析和讨论。

2.2 时间劈裂谱虚时演化算法

首先介绍求解非线性常微分方程的**时间劈裂谱方法** (Time-splitting spectral, 简称 TSSP)。根据 Baker–Campbell–Hausdorff 展开 [6], 我们知道对于矩阵 A, B 有:

$$e^{(A+B)h + \mathcal{O}(h^2)} = e^{Ah} e^{Bh} \quad (13)$$

即用 $e^{Ah} e^{Bh}$ 代替 $e^{(A+B)h}$ 的误差是 $\mathcal{O}(h^2)$ 量级。一种精度更高的方法是 Suzuki–Trotter 展开 [7]:

$$e^{(A+B)h} \approx e^{Ah/2} e^{Bh} e^{Ah/2} + \mathcal{O}(h^3) \quad (14)$$

也就是这种方法在时间上具有二阶精度。

由式 (14) 可得, 在求解一维 GP 方程时可将传播算符写为:

$$U(\Delta t) \approx e^{-i\frac{V+G}{2}\Delta t} e^{-iT\Delta t} e^{-i\frac{V+G}{2}\Delta t} \quad (15)$$

其中的势能算符和动能算符分别在坐标空间和动量空间是对角的, 因此可以直接求解, 无需计算导数。分别使用 ψ, ϕ 表示坐标和动量空间下的同一波函数, 再将非线性耦合项记作 $G(\psi)$, 得到 TSSP 具体的离散数值格式为:

$$\begin{aligned} \psi_j &:= \psi_j \cdot \exp \left[-\frac{i\Delta t}{2} (V(x_j) + G(\psi_j)) \right] \\ \phi &\leftarrow \text{FFT} \leftarrow \psi \\ \phi_j &:= \phi_j \cdot \exp \left(-i\Delta t \cdot \frac{k_j^2}{2m} \right) \\ \psi &\leftarrow \text{IFFT} \leftarrow \phi \\ \psi_j &:= \psi_j \cdot \exp \left[-\frac{i\Delta t}{2} (V(x_j) + G(\psi_j)) \right] \end{aligned} \quad (16)$$

为避免混淆, 上述各行左侧均为新值, 右侧为旧值, 一经更新则旧值已经被覆盖, 于是当整个流程结束时, $\psi(t + \Delta t)$ 就求出了。于是也能够看出, TSSP 方法通过傅里叶变换, 使得动能和势能在各自对角的表象下发挥作用。

TSSP 方法的主要优点是具有很高的精度的同时数值稳定性非常强, 这也是赝谱方法共有的特点。

若要求得波函数 $\psi(x)$ 的基态, 即式 (12) 中算符 \mathbf{A} 的能量最低本征态, 可以通过**虚时演化方法** (Imaginary-time propagation method) 计算。对于含时薛定谔方程, 令虚时间 $\tau = it$, 可以得到:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \psi(x, \tau) = -\mathbf{A} \psi(x, \tau) \quad (17)$$

随机给定初态并在各个本征态上展开:

$$\psi(x, 0) = \sum_i c_i \psi_i(x) \quad (18)$$

那么随虚时演化的结果为:

$$\psi(x, \tau) = \sum_i c_i e^{-E_i \tau} \psi_i(x) = e^{-E_0 \tau} \left[c_0 \psi_0 + \sum_{i=1} c_i e^{-(E_i - E_0) \tau} \psi_i(x) \right] \quad (19)$$

随着虚时间的增大, 由于 $E_i - E_0 > 0$, 各个激发态会以更快的速度衰减, 在一定长虚时间后可以近似为 $\psi(x, \tau) \approx \psi_0(x) e^{-E_0 \tau}$, 即得到波函数的基态。

此外, 理论上我们可以使用空间差分代替 TSSP 来求解非线性偏微分方程, 但在实际运算中由于空间精度比较低, 同时配合使用前向的显式龙格库塔方法则不稳定, 高频噪声会迅速发散。当然, 对于定态 GP 方程的本征值问题, 理论上也可以直接求解得到。但是对于式 (12) 中非线性算符 \mathbf{A} 通过 Krylov 迭代求其本征值和本征向量, 却未能成功解出, 分析发现原因在于各个本征波函数不正交, 迭代容易收敛到不需要的本征值上。故最终我们仅使用 TSSP 结合虚时演化方法求解 GP 方程, 接下来对结果进行分析和讨论。

2.3 结果分析

我们首先定性地讨论 GP 方程中相互作用的耦合项对 BEC 系统特性的影响。以谐振子外部势场为例, 基于 TSSP 虚时演化方法分别求解玻色子间相互作用分别为无/排斥/吸引的 BEC 系统的基态凝聚体波函数。使用的势参数与耦合系数为:

ω	$g_{\text{non}} N$	$g_{\text{rep}} N$	$g_{\text{att}} N$
1.0	0.0	5.0	-2.0

计算得到的系统化学势为:

μ_{non}	μ_{rep}	μ_{att}
0.50	2.02	-0.48

无相互作用的系统化学势与谐振子势下的基态能量一致，验证了程序的正确性。可以发现，玻色子间的相互排斥使得系统化学势提高，而相互吸引使得化学势降低，这也符合我们的物理直觉。图1展示了三种情况下的基态波函数，观察图像分析，同样的外部势场下，相对单体系统的基态波函数，**多体系统的行为与系统粒子间的耦合有关**，排斥相互作用使凝聚体波函数更弥散，吸引相互作用则使凝聚态波函数更集中。

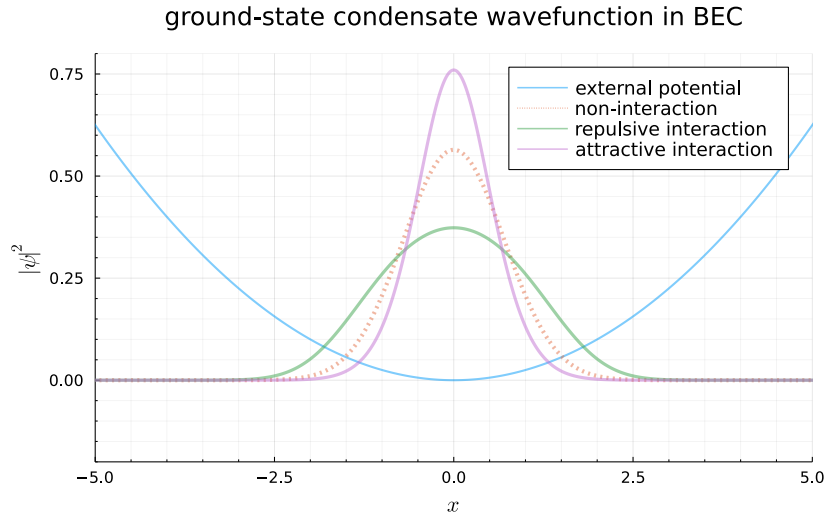


Figure 1: 展示了在谐振子外部势场下，玻色子间相互作用分别为无/排斥/吸引的 BEC 系统的凝聚体波函数基态。排斥相互作用使波函数更弥散，吸引相互作用使波函数更集中。

我们还观察到更有趣的现象：特别地，**凝聚体波函数的基态可能会出现简并**。对于式 (12) 的一维 GP 方程，算符 \mathbf{A} ，可以理解为哈密顿量，具有空间反演对称性。因此理论上基态波函数应为偶宇称且非简并的。但是下面我们可以发现，在一些情况下，计算结果会随机收敛到不同的基态波函数上，即能量基态出现简并。

设定外部势场和耦合系数为：

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{20}x^4 + 4\exp(-2x^2), \quad gN = -0.5 \quad (20)$$

图2绘制了由施加不同的初始噪声的对称初态计算得到的凝聚体波函数基态，并与无相互作用的情况进行对比。无耦合的系统与单体系统行为保持一致，其基态波函数是偶宇称且非简并的。然而在此吸引相互作用下，凝聚体波函数是对称破缺的，多次计算还发现，结果会随机收敛到不同的基态波函数上，即能量基态出现简并。

在这里我们设置势场为式 (20)，势能具有两个极小值。在实验中，光晶格是周期势，它相比谐振子就会有多个极小，我们相当于仅考虑最简单的两个极小的情况。

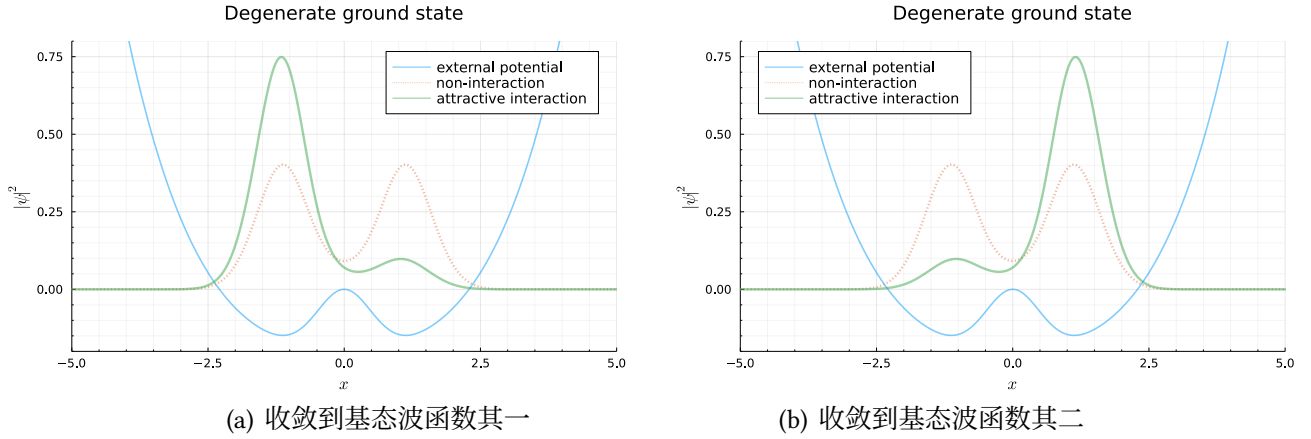


Figure 2: 在对称初态上施加不同的初始噪声，最后收敛的基态波函数，左右分别为两个随机可能出现的情况。可以看出在一些情况下，吸引势造成了对称破缺，凝聚体波函数基态不再具有哈密顿量的空间反演对称性，能量基态出现二重简并。

对于空间上局域的势而言，一维的单体薛定谔方程基态总是非简并的，同时基态波函数和势能相同，而更高维的情况基态则可以存在着简并（以 Ising 模型为例，Z2 对称性导致基态的二重简并），这些简并很多时候来源于多体相互作用。我们上面的算例中只是引入一个非线性项，就导致了基态的二重简并和对称性破缺。这说明，尽管 BEC 态的粒子可以用同一套波函数去描述，但是因为多体相互作用的存在，波函数的性质和单体的波函数相比也有很大的不同。

当然，我们在求解中还发现，对于排斥势而言，求解基态过程中有时会收敛到一些暂稳态，需要长时间的迭代才能进一步弛豫到稳态，这与自旋玻璃的行为有一些类似。我们可以想见，在真实的 BEC 实验的有限时间内，逐步冷却的原子团也可能处于某种暂稳态而非能量最低的基态上。不过，GP 方程对描述实验的含时动力学而言是一个过于粗糙的近似了，对粒子的泵浦和耗散等过程（见图3）均没有考虑，因此我们就不再

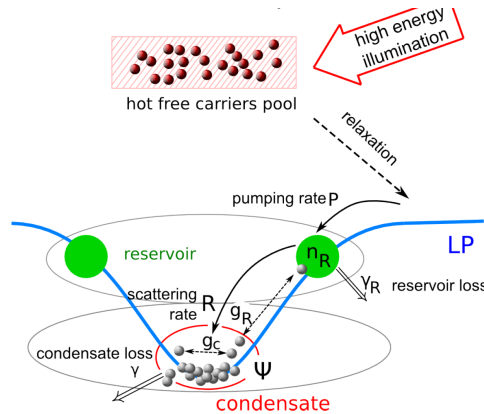


Figure 3: 开放耗散的 BEC 系统示意图 [8]。

讨论真实实验中的动力学行为。

3 总结与讨论

本文为课程实验“原子气体玻色爱因斯坦凝聚体虚拟仿真实验”的拓展设计与思考，对 **Bose-Einstein condensate** 理论和实验背景，及量子力学对 BEC 系统的微观描述—**Gross-Pitaevskii** 方程进行了了解和探究。

本文侧重于求解 GP 方程并对结果进行分析和讨论。由于 GP 方程是一类非线性偏微分方程，难以精确解析求解，故而我们试图通过一些数值方法来计算得到凝聚体波函数的基态。我们使用**时间劈裂赝谱方法**结合**虚时演化方法**数值求解含时 GP 方程，并通过无相互作用系统的基态能量验证了算法的正确性。此外，我们还分析了不能使用 Krylov 子空间方法求解定态 GPE 和使用空间差分的虚时演化算法不稳定的原因，并说明了 TSSP 方法的优势。

在定性讨论了 GP 方程中相互作用的耦合项对 BEC 系统特性的影响之后，我们还观察到“一维凝聚体波函数的基态可能会出现简并”的特殊现象。在对称初态上施加不同的初始噪声，最后收敛的基态波函数存在两个随机可能出现的结果。故而可以看出在一些情况下，吸引势造成了对称破缺，凝聚体波函数基态不再具有哈密顿量的空间反演对称性，能量基态出现二重简并。这说明，尽管 BEC 态的粒子可以用同一套波函数去描述，但是因为多体相互作用的存在，波函数的性质和单体的波函数相比也有很大的不同。

我们在求解中还发现，对于排斥势而言，求解基态过程中有时会收敛到一些暂稳态，需要长时间的迭代才能进一步弛豫到稳态，这与自旋玻璃的行为有一些类似。我们可以想见，在真实的 BEC 实验的有限时间内，逐步冷却的原子团也可能处于某种暂稳态而非能量最低的基态上。不过，本文使用的 GP 方程对描述实验的含时动力学而言是一个过于粗糙的近似了，对粒子的泵浦和耗散等过程均没有考虑。这也是本拓展设计的局限性，未来可以进一步研究更为复杂的系统模型，对 BEC 系统进行更深入的理解和探究。

References

- [1] *Bose-einstein condensate*, June 2022.
- [2] 吴迺, “玻色-爱因斯坦凝聚体中的基态和涡旋环动力学性质研究”, MA thesis (扬州大学, 2020).
- [3] 黄巍; 张善超; 颜辉; 朱诗亮; 华南师范大学学报 (自然科学版) **50**, 44-1138/N, 14 (2018).
- [4] *Gross-pitaevskii equation*, Apr. 2022.
- [5] C. Foot and D. Foot, *Atomic physics*, Oxford Master Series in Physics (OUP Oxford, 2005).
- [6] *Baker-campbell-hausdorff formula*, June 2022.
- [7] *Time-evolving block decimation*, May 2022.
- [8] *Theoretical description of bec: the gross-pitaevskii equation*.

4 Appendixes

4.1 TSSP program: TSSP1D.jl

```

## TSSP Method for 1D Non-linear Schrödinger Equation
#  $\psi_0$ ,  $x$  should be 1D arrays of the same size.
#  $V(x,\psi)$  is the non-linear potential.
using LinearAlgebra
using FFTW

@inline function iV_step!( $\psi_n$ ,  $V$ ,  $x$ ,  $dt$ ,  $N_x$ )
    @inbounds for  $i$  in 1: $N_x$ 
         $\psi_n[i] \ast= \exp(-V(x[i],\psi_n[i])*dt)$ 
    end
end

@inline function iT_step!( $\psi_n$ ,  $\omega_g$ ,  $dt$ ,  $N_x$ )
    fft!( $\psi_n$ )
    @inbounds for  $i$  in 1: $N_x$ 
         $\psi_n[i] \ast= \exp(-\omega_g[i]*dt)$ 
    end
    ifft!( $\psi_n$ )
end

function iTSSP( $\psi_0$ ,  $V$ ,  $x$ ,  $t$ )
     $dx = x[2] - x[1]$ 
     $N_x = \text{length}(x)$ ;  $N_t = \text{length}(t)$ 
    #  $k$  空间的离散点
     $k_g = (2\pi / dx) .* (((-N_x \div 2) // N_x) : (1 // N_x) : ((N_x \div 2 - 1) // N_x))$ 
    # 计算对应频率并且按照 fft 的顺序重排
     $\omega_g = (k_g.^2 / 2)$ 
     $\omega_g = \text{circshift}((k_g.^2 / 2), -(N_x \div 2))$ 
     $\psi_s = \text{zeros}(\text{ComplexF64}, N_x, N_t)$  # 分配数组
     $\psi_s[:,1] \ast= \psi_0$  # 初值
    for  $i$  in 1: $N_t-1$ 
        normalize!(@view  $\psi_s[:,i]$ )
         $\psi_s[:,i] ./= \sqrt{dx}$ 
         $dt = t[i+1]-t[i]$ 
         $\psi_n = \text{@view } \psi_s[:,i+1]$ 
        copy!( $\psi_n, \psi_s[:,i]$ )
        # Step V-T-V
        iV_step!( $\psi_n$ ,  $V$ ,  $x$ ,  $dt/2$ ,  $N_x$ )
        iT_step!( $\psi_n$ ,  $\omega_g$ ,  $dt$ ,  $N_x$ )
        iV_step!( $\psi_n$ ,  $V$ ,  $x$ ,  $dt/2$ ,  $N_x$ )
    end
    return  $\psi_s$ 
end

```

4.2 main program: GPE.jl

```

using BenchmarkTools
using Plots, LaTeXStrings, Measures; gr()
include("TSSP1D.jl")

xgrid = LinRange(-6,6,800)
tgrid = LinRange(0,1000,50000)
C = 1/24/(xgrid[2]-xgrid[1])^2
function energy(q,Vfunc)
    V = Vfunc.(xgrid,q)
    Aq = C * ( circshift(q,2) - 16*circshift(q,1) + 30*q - 16*circshift(q,-1) + circshift(q,-2) ) + V .* q
    E = real( dot(q,Aq) / dot(q,q) )
end

V(x) = x^2 / 2# + x^4/20 + 4exp(-2x^2)
V0(x,ψ) = V(x)
V1(x,ψ) = V(x) + 5.0 * abs2(ψ)
V2(x,ψ) = V(x) - 2.0 * abs2(ψ)
ψ0 = ComplexF64[ exp(-x^2 / 2) / (π)^(1/4) + 0.1randn() for x in xgrid]

ψs0 = iTSSP(ψ0, V0, xgrid, tgrid)
ψs1 = iTSSP(ψ0, V1, xgrid, tgrid)
ψs2 = iTSSP(ψ0, V2, xgrid, tgrid)
E0 = energy( ψs0[:,end-1], V0 )
E1 = energy( ψs1[:,end-1], V1 )
E2 = energy( ψs2[:,end-1], V2 )

p1= plot(size = (800,500), minorgrid = true,
        titlefontsize=16,legendfontsize=12,
        guidefontsize=14,tickfontsize=10,
        legend=:topright,margins=5mm)
title!("ground-state single-particle wavefunction in BEC")
plot!(xgrid, x->0.05*(V(x)-V(0)), line=(2,0.5), labels="external potential")
plot!(xgrid, abs2.(ψs0[:,end-1]), line=(4,0.5,:dot), labels="non-interaction")
plot!(xgrid, abs2.(ψs1[:,end-1]), line=(3,0.5), labels="repulsive interaction")
plot!(xgrid, abs2.(ψs2[:,end-1]), line=(3,0.5), labels="attractive interaction")
xaxis!(L"x")
yaxis!(L"|ψ|^2")
xlims!(-5,5)
ylims!(-0.2,0.8)
savefig(p1,"GPE.svg")

p2= plot(size = (800,500), minorgrid = true,
        titlefontsize=16,legendfontsize=12,
        guidefontsize=14,tickfontsize=10,
        legend=:topleft,margins=5mm)
title!("Degenerate ground state")
plot!(xgrid, x->0.05*(V(x)-V(0)), line=(2,0.5), labels="external potential")
plot!(xgrid, abs2.(ψs0[:,end-1]), line=(3,0.5,:dot), labels="non-interaction")
plot!(xgrid, abs2.(ψs2[:,end-1]), line=(3,0.5), labels="attractive interaction")
xaxis!(L"x")
yaxis!(L"|ψ|^2")
xlims!(-5,5)
ylims!(-0.2,0.8)
savefig(p2,"Degenerate2.svg")

```