

北京師範大學

本科生毕业论文（设计）

毕业论文（设计）题目：

复 Gross-Pitaevskii 方程的稳态解及其随时间演化的数值计算

部 院 系： 数学科学学院

专 业： 数学与应用数学

学 号： 201811130128

学 生 姓 名： 匡昱潼

指 导 教 师： 蔡勇勇

指导教师职称： 教授

指导老师单位： 数学科学学院

北京师范大学本科毕业论文（设计）诚信承诺书

本人郑重声明：所呈交的毕业论文（设计），是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

本人签名：王昱潼

2022年 5月 10日

北京师范大学本科毕业论文（设计）使用授权书

本人完全了解北京师范大学有关收集、保留和使用毕业论文（设计）的规定，即：本科生毕业论文（设计）工作的知识产权单位属北京师范大学。学校有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许毕业论文（设计）被查阅和借阅；学校可以公布毕业论文（设计）的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编毕业论文（设计）。保密的毕业论文（设计）在解密后遵守此规定。

本论文（是、☒）保密论文。

保密论文在 年 月解密后适用本授权书。

本人签名：王昱潼

2022年 5月 10日

导师签字：蔡勇

2022年 5月 10日

摘 要

复 GP 方程是描述激子-极化子体系下玻色-爱因斯坦凝聚态 (BEC) 的模型, 对于这个方程目前有很多问题还未解决. 本文研究了复 GP 方程解的一些性质. 首先通过配点法求解其径向对称稳态解, 之后分析其解在微小扰动下的线性稳定性, 最后采用算子分裂谱方法研究其解随时间演化的结果, 并发现其在不稳定情况下随时间演化最终会达到一种涡旋态, 且涡旋数量随参数的变化会有很大不同.

关键词: BEC, 复 GP 方程, 配点法, 算子分裂谱方法

ABSTRACT

The complex Gross-Pitaevskii equation is a model to describe the Bose-Einstein condensate (BEC) in the exciton-polaritons system. In this paper, some properties of solutions of complex GP equation are studied. Firstly, the stationary radial solutions of the complex GP equation are calculated by collocation method. Then, the linearly stability of the stationary states is analysed. Finally, the full complex GP equation is solved numerically by Strang-splitting spectral method, and find that vortex lattices emergence at some unstable situation.

KEY WORDS: BEC, Complex Gross-Pitaevskii equation, Collocation method, Strang-splitting spectral method

目 录

摘要.....	III
1 引言	1
2 径向对称稳态解.....	2
2.1 方程稳态解的性质	2
2.2 径向对称稳态解的计算	4
3 配点法	6
4 径向对称解的线性稳定性分析.....	8
5 算子分裂傅立叶谱方法求解复 GP 方程	10
5.1 算子分裂傅立叶谱方法	10
5.2 数值结果.....	12
6 总结	15

1 引言

量子理论是上个世纪最重要的科学发现之一. 它认为所有物体在微观尺度上都像波一样运动. 但是, 由于量子的波长极小, 很难观察到量子现象, 所以量子世界仍然是一个谜. 直到玻色-爱因斯坦凝聚态 (BEC) 的发现, 在实验中探索量子世界成为可能. 在 BEC 状态下, 温度很低 (接近绝对零度). 在这种情况下, 物体的波长急剧增加, 导致了可观测的 BEC.

玻色-爱因斯坦凝聚态 (BEC) 是 1924-1925 年由 Bose[5] 和 Einstein[6, 7] 预测的. 1995 年, 在一个由大约 50 万个碱原子冷却到纳米开尔文级温度的系统中, 首次通过实验获得了冷凝物 [1, 8, 9]. 自首次在实验中实现 BEC 以来, BEC 的数值模拟得到了广泛的研究; 见 [2, 3] 及其参考文献.

根据 [2], 原子体系下 BEC 的动力学可以很好的由 Gross-Pitaevskii 方程 (GPE) 所描述:

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) + Ng|\psi|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, t > 0, \quad (1)$$

经过无量纲化处理之后, 方程变为:

$$i\psi_t = -\frac{1}{2}\nabla^2\psi + V(\mathbf{x})\psi + \beta|\psi|^2\psi, \quad \mathbf{x} \in U, \quad t > 0, \quad (2)$$

其中, $\psi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{C}$ 是宏观波函数, $i = \sqrt{-1}$ 是虚数单位, t 是时间, \mathbf{x} 是空间坐标, $\Delta = \nabla^2$ 是 Laplace 算子, U 是全空间 \mathbb{R}^d ($d = 1, 2, 3$) 或 \mathbb{R}^d 的有界区域, $V(\mathbf{x})$ 是实值势能函数, 正/负的 β 对应排斥/吸引的相互作用. 对于 GP 方程的研究, 重点主要有两部分, 一是基态解 (ground states) 的计算, 二是其解的动力学 (随时间的演化). 目前, 关于 (2) 的数值方法已经有了很成熟的结果, 见 [2, 3, 4].

但正如之前所提到的, 原子体系的 BEC 需要在非常低的温度下才能实现, 这对于实验来说是一个非常大的障碍, 这一大难题促使人们去探索可以在相对较高的温度下实现的无原子体系的 BEC. 一个可能的候选系统是激子-极化子系统, 激子-极化子是一种准粒子, 可以在半导体腔中通过激子和腔内激光场的相互作用而产生 [10, 11]. 激子是在耦合量子阱中产生的电子-空穴对, 通过两个高度反射的镜子与被捕获在光学腔中的光子相互作用. 由于这种限制, 极化子的有效质量非常小: 是自由电子质量的 10^{-4} 倍 [11]. 由于凝聚温度与粒子的质量成反比, 激子-极化子

系统提供相对较高的凝聚温度. 通常用于形成激子-极化子 BEC 的温度在 $T = 10K$ 左右, 远高于原子 BEC 所需的纳米开尔文温度. 因为量子效应可以出现在宏观水平上, 而不像大多数系统, 量子效应很容易被温度和退凝聚破坏, 它们在新的量子技术方面非常有前途.

然而, 这种新的凝聚物有两个缺点: 一是极化子高度不稳定, 二则是极化子会表现出强烈的相互作用. 随着电子空穴对通过发射光子而重新组合, 激子消失. 解决这个问题的一种方法是引入一个极化子库: 极化子从这个库“冷却 (cooled)”并“泵送 (pumped)”到凝聚物中以补偿衰变. 同时, 为了减少极化子之间的相互作用, 需要保持极化子的低密度水平. 对于这种新的凝聚态, 人们提出了各种数学模型 [12, 13, 14]. 本文探讨了其中的复 GP 方程 [12]. 复 GP 方程通过在 GP 方程中加入泵浦和衰变项 (pumping and decaying terms), 反映了上述的非平衡动力学:

$$\begin{aligned} i\psi_t &= -\Delta\psi + V(x)\psi + |\psi|^2\psi + i[\omega(x) - \sigma|\psi|^2]\psi, \quad t > 0, \quad x \in D = \mathbb{R}^2, \\ \psi(x, 0) &= \psi_0(x), x \in D. \end{aligned} \quad (3)$$

其中, $\psi = \psi(x, t)$ 代表了波函数, $V(x)$ 是势能项, $\omega = \omega(x) \geq 0$ 是泵浦项 (pumping terms), $\sigma > 0$ 代表衰变项 (decaying terms) 的强度.

关乎复 GP 方程, 还有许多问题有待解决. 本文首先使用配点法求解方程的径向对称稳态解, 之后讨论方程解在微小扰动下的线性稳定性, 最后通过算子分裂谱方法求解方程随时间的演化, 并得到解随时间的演化在稳定的情形下会保持稳定的状态, 在不稳定情形下则会在一系列演化之后形成旋转的涡旋态, 并在之后继续保持这样的状态.

2 径向对称稳态解

2.1 方程稳态解的性质

我们先分析方程 (3) 形如 $\psi(x, t) = \exp(-i\mu t)\phi(x)$ 的解, μ 表示实值化学能, ϕ 表示当 $|x| \rightarrow \infty$ 时趋于 0 的振幅函数. 将这个形式的解代入 (3) 得到下面的关于 ϕ 的方程 (同时, 这也是能量泛函的 Euler-Lagrange 方程):

$$\mu\phi(x) = [-\Delta + V(x) + |\phi(x)|^2 + i(\omega(x) - \sigma|\phi(x)|^2)]\phi(x). \quad (4)$$

用 ϕ^* (ϕ 的复共轭) 乘以 (4) 并在 $D = \mathbb{R}^2$ 积分, 得到:

$$\mu \int_D |\phi(x)|^2 dx = \int_D [|\nabla \phi(x)|^2 + V(x)|\phi(x)|^2 + |\phi(x)|^4 + i(\omega(x) - \sigma|\phi(x)|^2)|\phi(x)|^2] dx. \quad (5)$$

不难看出, 为了使 μ 为实值, 必须满足以下条件:

$$\int_D (\omega(x) - \sigma|\phi(x)|^2)|\phi(x)|^2 dx = 0. \quad (6)$$

同时注意到由于 $\psi(x, t) = \exp(-i\operatorname{Re}(\mu)t) \exp(i\operatorname{Im}(\mu)t)\phi(x)$, 如果允许 $\operatorname{Im}(\mu) \neq 0$ 将导致解的指数级增长 ($\operatorname{Im}(\mu) > 0$) 或者解指数衰减到零 ($\operatorname{Im}(\mu) < 0$).

现在, 我们来了解一下 (3) 的稳态解的性质. 首先定义 ψ 的相位为 $S = S(x, t)$, 以及 $\rho = \rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$. 将 $\psi = \sqrt{\rho} \exp(iS)$ 代入 (3) 并分离实部与虚部得到:

$$\frac{1}{2}\rho_t + \operatorname{div} J - (\omega(x) - \sigma\rho)\rho = 0, \quad (7)$$

$$S_t + |\nabla S|^2 + V - \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} + \rho = 0, \quad (8)$$

其中 $J = J(x, t) = \operatorname{Im}(\psi^* \nabla \psi)$ 代表扩散流密度. 现在对 (8) 式取梯度, 并乘以 ρ , 同时由 7 式和 $\operatorname{div}(J \otimes J / \rho) = \frac{1}{2}\rho \nabla |\nabla S|^2 + \nabla S \cdot \operatorname{div} J$ 可以得到 8 式的等价表述:

$$J_t + 2 \operatorname{div} \left(\frac{J \otimes J}{\rho} \right) + \rho \nabla V - \rho \nabla \left(\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \right) + \frac{1}{2} \nabla \rho^2 = 2(\omega(x) - \sigma\rho)J. \quad (9)$$

通过 (7) 和 (9) 式, 我们可以得出以下结论 (证明见 [15]).

定理 2.1. 设 $\omega(x)$ 是光滑函数且 $\{x | \omega(x) > 0\}$ 单连通. 则 (7)-(9) 满足 $J \equiv 0$ 的稳态解存在当且仅当

1. $\rho \equiv 0$, 或
2. $\rho = \frac{\omega(x)}{\sigma}$. 在这种情况下, $V(x) = C + \frac{\Delta\sqrt{\omega(x)}}{\sqrt{\omega(x)}} - \frac{1}{\sigma}\omega(x)$, $x \in \{x | \omega(x) > 0\}$, 其中 C 是一个常数.

现在, 将 (7) 在空间上积分得到:

$$\frac{1}{2} \frac{dM}{dt} = \int_D (\omega(x) - \sigma\rho)\rho dx,$$

其中 $M \equiv \int_D \rho dx$ 是系统质量. 因此, 我们可以发现方程 (4) 在条件 (6) 下可以使系统质量关于时间的导数为零, 也即泵浦项和衰变项达到平衡. 此外, 条件 (6) 还保证了化学势能 μ 是一个非负实数.

2.2 径向对称稳态解的计算

在文章接下来的部分, 令 $V(x) = |x|^2, \omega(x) = \alpha\Theta(R - |x|)$, 其中 $\alpha > 0$ 代表泵浦项的强度, $R > 0$ 是有光滑的 Heaviside 函数 $\Theta(x) = (1 + \tanh(\kappa x))/2$ 界定的泵浦区域的半径, $\kappa > 0$ 是一个固定参数.

下面我们来计算 (4) 的径向对称稳态解. 此时 (4) 可以表示为 ($' = \frac{d}{dr}$, $\Theta_R = \Theta(R - r)$):

$$\mu\phi = -\phi'' - \frac{1}{r}\phi' + r^2\phi + |\phi|^2\phi + i(\alpha\Theta_R - \sigma|\phi|^2)\phi, \quad (10)$$

其中 $r = |x| \geq 0$, 并满足边界条件 $\phi(r) = 0 (r \rightarrow \infty)$ 以及 $\phi'(0) = 0$. 条件 (6) 可以表述成:

$$\int_0^\infty (\alpha\Theta_R - \sigma|\phi(r)|^2) |\phi(r)|^2 r dr = 0, \quad (11)$$

通过定义:

$$\xi(r) = \int_0^r (\alpha\Theta_R - \sigma|\phi(s)|^2) |\phi(s)|^2 s ds, \quad (12)$$

条件 (11) 可以表述成:

$$\xi'(r) = (\alpha\Theta_R - \sigma|\phi(r)|^2) |\phi(r)|^2 r, \quad (13)$$

且:

$$\xi(\infty) = 0. \quad (14)$$

这样, ξ 后续的数值积分非常方便. 同时由于 μ 关于 r 为一个常数, 我们有:

$$\mu'(r) = 0. \quad (15)$$

因为 ϕ 的相位是任意的, 我们不妨设:

$$\text{Im}(\phi(0)) = 0. \quad (16)$$

注意到二阶常微分方程 (10) 可以通过由两个一阶方程组成的微分方程组来表达. 同时由于泵浦区域是有限的, 我们可以在一个有界区域上考虑方程的解. 在数

值计算中, 对于一个足够大的 b , 我们不妨设积分区域 $D = [0, b]$. 因此, 右方的边界条件 $\phi(\infty) = 0$ 和 $\xi(\infty) = 0$ 可以被 $\phi(b) = 0$ 和 $\xi(b) = 0$ 所替代. 最终, 我们得到了以下的常微分方程组:

$$\begin{aligned}
\phi' &= \varphi, \\
\varphi' &= -\frac{1}{r}\varphi - \mu\phi + r^2\phi + |\phi|^2\phi + i(\alpha\Theta_R - \sigma|\phi|^2)\phi, \\
\xi' &= (\alpha\Theta_R - \sigma|\phi(r)|^2)|\phi(r)|^2r, \\
\mu' &= 0, \\
\phi(b) &= 0, \quad \varphi(0) = 0, \quad \text{Im}(\phi(0)) = 0, \quad \xi(b) = 0.
\end{aligned} \tag{17}$$

这样, 边界条件的数目与方程一致. 同时, 为了之后数值计算的方便, 我们可以通过下式决定 φ' 在 $r = 0$ 时的值 (注意边界条件 $\varphi(0) = 0$):

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\varphi(r) - \varphi(0)}{r - 0} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\varphi(r)}{r} = \varphi_r(0), \tag{18}$$

于是, 方程组 (17) 的第二个式子在 $r = 0$ 时为:

$$\varphi'(0) = \frac{1}{2} [-\mu\phi(0) + |\phi(0)|^2\phi(0) + i(\alpha - \sigma|\phi(0)|^2)\phi(0)]. \tag{19}$$

由于使 (17) 是实值, 自治的, 并且限制在区间 $[0, 1]$ 上会给数值计算带来很大的方便 (这使得算法得到很大的简化), 我们对 (17) 再做一些处理. 首先将 $\phi = \theta + i\eta$ 插入 (10), 分离实部与虚部并使之分别相等, 并将得到的方程写成一阶常微分方程组, 这样我们就得到了实值的系统. 再定义 $\varrho(r) = r$ 使得 $\varrho'(r) = 1$ 以及 $\varrho(0) = 0$, 将 $\varrho(r)$ 加入到系统中, 这样我们得到了自治的系统. 最后, 令 $\tilde{r} = \frac{r}{b}$, 将积分区域限

制在区间 $[0, 1]$ 上. 这样, (17) 变为 ($' = \frac{d}{dt}$):

$$\begin{aligned}
\frac{1}{b}\theta' &= \varphi, \\
\frac{1}{b}\varphi' &= -\frac{1}{\varrho}\varphi - \mu\theta + \varrho^2\theta + (\theta^2 + \eta^2)\theta - (\alpha\Theta(R - \varrho) - \sigma(\theta^2 + \eta^2))\eta, \\
\frac{1}{b}\eta' &= \zeta, \\
\frac{1}{b}\zeta' &= -\frac{1}{\varrho}\zeta - \mu\eta + \varrho^2\eta + (\theta^2 + \eta^2)\eta + (\alpha\Theta(R - \varrho) - \sigma(\theta^2 + \eta^2))\theta, \\
\frac{1}{b}\xi' &= (\alpha\Theta(R - \varrho) - \sigma(\theta^2 + \eta^2))(\theta^2 + \eta^2)\varrho, \\
\frac{1}{b}\mu' &= 0, \\
\frac{1}{b}\varrho' &= 1,
\end{aligned} \tag{20}$$

$$\varphi(0) = 0, \quad \theta(1) = 0, \quad \zeta(0) = 0, \quad \eta(0) = 0, \quad \eta(1) = 0, \quad \xi(1) = 0, \quad \varrho(0) = 0.$$

下面, 我们考虑求解方程组 (20) 的数值方法.

3 配点法

配点法可以高精度的求解方程组 (20). 考虑使用一个函数集合 (通常是多项式) 中函数的线性组合来作为解的估计, 其中的系数由要求这个线性组合在某些点 (配置点) 上满足方程组以及边界条件来得到.

我们考虑如下的一阶常微分方程组:

$$u'(r) = f(u(r)), \quad r \in I = [0, 1], \quad u(\cdot), f(\cdot) \in \mathbb{R}^d, \tag{21}$$

满足边界条件:

$$b(u(0), u(1)) = 0, \quad b(\cdot) \in \mathbb{R}^d.$$

令 $I_h = \{r_n : 0 = r_0 < r_1 < \dots < r_N = 1\}$ 是给定的 I 上的网格, 且 $h_n = r_n - r_{n-1}$ ($n = 1, \dots, N$). 定义向量值分段多项式函数空间 $\mathcal{P}^m(I_h)$ 如下:

$$\mathcal{P}^m(I_h) = \left\{ v \in C(I) : v|_{[r_{n-1}, r_n]} \in \pi_m, \quad (1 \leq n \leq N) \right\},$$

其中 π_m 是所有阶数小于 m 的向量值多项式的空间. 配点法的想法是找到 $q_h \in \mathcal{P}^m(I_h)$ 来近似 (21) 的解. 这个近似通过要求 q_h 在 I 的一个有限子集 S_h 和边界条件上满足 (21) 来得出.

配置点集 S_h 如下所示:

$$S_h = \{r_{n,i} = r_{n-1} + c_i h_n : 1 \leq n \leq N, \quad 0 = c_1 < c_2 < \cdots < c_m = 1\},$$

其中 $\{c_i\}$ 通常是 Gauss, Radau, 或 Lobatto 点 (见 [16]). 这样, (21) 的解的近似 $q_h \in \mathcal{P}^m(I_h)$ 通过以下方程来定义:

$$q'_h(r_{n,i}) = f(q_h(r_{n,i})), \quad r_{n,i} \in S_h, \quad b(q_h(0), q_h(1)) = 0.$$

现在, 考虑 q_h 的局部 Lagrange 基函数. 定义:

$$L_i(\delta) := \prod_{k=1, k \neq i}^m \frac{\delta - c_k}{c_i - c_k}, \quad (i = 1, \dots, m), \quad \delta \in [0, 1].$$

则全局多项式可以表示成:

$$q_n(r_{n-1} + \delta h_n) = \sum_{i=1}^m L_i(\delta) q_h(r_{n-1} + c_i h_n), \quad 1 \leq n \leq N, \quad \delta \in [0, 1].$$

由此, 需要求解的配点方程可表示为:

$$q'_n(r_{n,i}) = f(q_n(r_{n,i})), \quad r_{n,i} \in S_h, \quad 1 \leq n \leq N, \quad (22)$$

加上边界条件方程:

$$b_l(u_0, u_N) = 0, \quad l = 1, \dots, d. \quad (23)$$

可以证明如果方程组的解 $u(r)$ 是充分光滑的, 配点法的精度是 m , 即: $\|q_h - u\|_\infty = \mathcal{O}(h^m)$, 其中 $h := \max\{h_n : 1 \leq n \leq N\}$. 配点法更详细的描述见 [16].

方程 (22)-(23) 可以通过 Newton-Chord 迭代来求解. 相比于传统 Newton 方法, 这种方法在处理雅可比矩阵时, 只求一次雅可比矩阵或每隔几次迭代求一次雅可比矩阵, 而不像传统 Newton 方法要求在每次迭代时求值. 也即:

$$F'(x_k) \approx F'(x_0), \quad \text{for all } k.$$

这种方法可以减少求解的计算量.

使用 MATLAB 函数 *bvp5c* 通过配置法求解方程组 (20). 这个函数执行四点 Lobatto 方法, 可以处理第一类奇点并可以实现网格自适应. 并且即使初始估计并不是非常接近方程组的解, *bvp5c* 同样可以收敛, 即利用 Thomas-Fermi 轮廓 [12] 作为初始估计, 函数是收敛的.

在区域 $D = [0, 15]$ 上求解, 对于不同情况, 得到的最大残差小于 10^{-7} . 其中, $\alpha = 4.4, \sigma = 0.3, \kappa = 10, 0 < R < 10$.

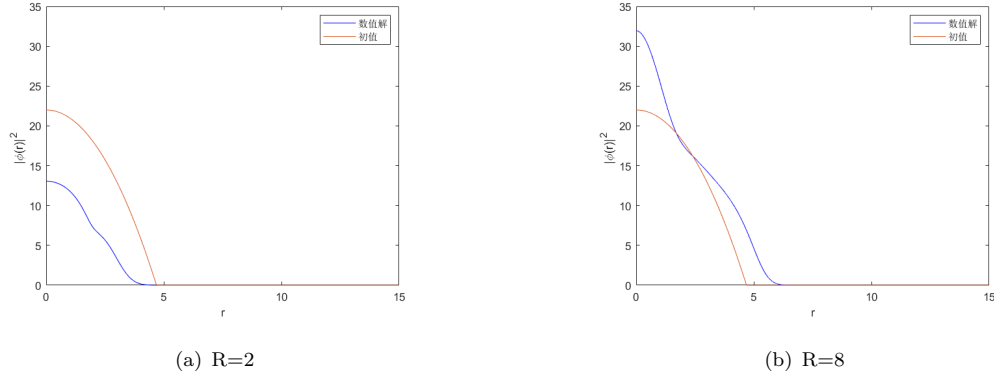


图 1: 配点法计算结果

4 径向对称解的线性稳定性分析

现在我们考虑前面得到的径向对称解 $\psi(r, t) = \exp(-i\mu t)\phi(r)$ 在微小扰动下的线性稳定性. 首先我们将波函数的微小扰动表述如下:

$$\psi(r, \theta, t) = \exp(-i\mu t) [\phi(r) + \varepsilon (u(r) \exp(-i(m\theta + \omega t)) + v^*(r) \exp(i(m\theta + \omega^* t)))], \quad (24)$$

其中 $\varepsilon \ll 1, m = 1, 2, 3, \dots$

这种形式的扰动和随后的计算被称为 Bogoliubov-De Gennes 分析. 可以注意到, 如果 $\text{Im}(\omega) > 0$, 径向对称解将是线性不稳定的. 我们现在将测试波函数 (24) 代入方程 (4) 进行分析. 下面, 为了简化表述, 将 $\phi(r), u(r)$ 和 $v(r)$ 分别表述为 ϕ, u

和 v . 计算项 $\exp(-i\mu t)$ 的系数给出:

$$\mu\phi = \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + r^2 + |\phi|^2 + i(\alpha\Theta_R - \sigma|\phi|^2) \right) \phi. \quad (25)$$

项 $\exp(-i(m\theta + (\mu + \omega)t))$ 的系数给出:

$$(\mu + \omega)u = \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{m^2}{r^2} + r^2 + 2|\phi|^2 + i(\alpha\Theta_R - 2\sigma|\phi|^2) \right) u + (1 - i\sigma)\phi^2 v. \quad (26)$$

项 $\exp(i(m\theta - (\mu - \omega^*)t))$ 的系数给出:

$$(\mu - \omega^*)v^* = \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{m^2}{r^2} + r^2 + 2|\phi|^2 + i(\alpha\Theta_R - 2\sigma|\phi|^2) \right) v^* + (1 - i\sigma)\phi^2 u^*. \quad (27)$$

做 (27) 的复共轭可得:

$$(\mu - \omega)v = \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{m^2}{r^2} + r^2 + 2|\phi|^2 - i(\alpha\Theta_R - 2\sigma|\phi|^2) \right) v + (1 + i\sigma)(\phi^*)^2 u. \quad (28)$$

最终, 方程 (26) 和 (28) 可以被写为:

$$\begin{bmatrix} L_1 & L_2 \\ -L_2^* & -L_1^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \omega \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad (29)$$

其中,

$$\begin{aligned} L_1 &= -\mu - \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{m^2}{r^2} + r^2 + 2|\phi|^2 + i(\alpha\Theta_R - 2\sigma|\phi|^2) \\ &= -\mu - \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{m^2}{r^2} + r^2 + 2(1 - i\sigma)|\phi|^2 + i\alpha\Theta_R, \\ L_2 &= (1 - i\sigma)\phi^2. \end{aligned}$$

特征值问题 (29) 可以通过 Matlab 函数 `eig` 求解. 文献 [15] 中的结果显示, 当 R 超过一定值 ($R \gtrsim 4.4$) 之后或是非常小 ($R \lesssim 0.6$) 的时候, 有可能出现线性不稳定的情况 (具体是否稳定与所取 m 有关).

5 算子分裂傅立叶谱方法求解复 GP 方程

5.1 算子分裂傅立叶谱方法

本节, 我们通过算子分裂傅立叶谱方法来求解复 GP 方程, 观察解随时间的演化, 来验证方程解出现线性不稳定之后会演化成为一种涡旋态. 为了表述的方便, 我们只在一维情形下描述这个方法. 高维的情形可以由张量积网格推广得出. 问题表述如下:

$$\begin{aligned} i\psi_t &= -\psi_{xx} + V(x)\psi + |\psi|^2\psi + i(\alpha\Theta_R - \sigma|\psi|^2)\psi, \\ \psi(x, 0) &= \psi_0(x), \quad a \leq x \leq b, \quad \psi(a, t) = \psi(b, t), \quad \psi_x(a, t) = \psi_x(b, t), \quad t > 0. \end{aligned} \quad (30)$$

注意由于在其中一个步骤需要使用离散傅立叶变换, 指定周期边界条件对于方法的执行是必要的. 并且, 由于 $V(x)$ (捕获势) 的存在, ψ 的值是集成的, 随着 $|x|$ 的增大, ψ 很快归于 0. 因此, 这个边界条件是一个很好的选择.

令 $h = \Delta x = (b - a)/M > 0$ 为空间网格步长, 其中 M 是一个正整数. 定义 $\tau = \Delta t > 0$ 作为时间步长. 网格点 $x_j = a + jh, j = 0, 1, \dots, M$, 时间 $t_n = n\tau, n = 0, 1, 2, \dots$. 最后, 定义 Ψ_j^n 作为 $\psi(x_j, t_n)$ 的估计.

下面我们将方程 (30) 分离为以下两个方程:

$$i\psi_t = V(x)\psi + |\psi|^2\psi + i(\alpha\Theta_R - \sigma|\psi|^2)\psi, \quad (31)$$

$$i\psi_t = -\psi_{xx}. \quad (32)$$

结合这两个方程我们来得出 (30) 在 $[t_n, t_{n+1}]$ 上的近似解.

Step1: 在一半的时间步长上求解方程 (31), 也即, 从 t_n 到 $t_n + \tau/2$. 对于 $\Theta_R = 0$ 的情况, 方程 (31) 为:

$$i\psi_t = V(x)\psi + |\psi|^2\psi - i\sigma|\psi|^2\psi. \quad (33)$$

将 $\psi(x, t) = \rho(x, t)e^{i\theta(x, t)}$ (ρ, θ 分别是 ψ 的振幅, 相位) 插入到 (31), 得:

$$i\rho_t - \rho\theta_t = V(x)\rho + \rho^3 + i(\alpha\Theta_R - \sigma\rho^2)\rho. \quad (34)$$

分离 (34) 的实部与虚部, 得:

$$\theta_t = -V(x) - \rho^2, \quad (35)$$

$$\rho_t = (\alpha\Theta_R - \sigma\rho^2) \rho. \quad (36)$$

我们可以显式的解出这两个方程, 首先解方程 (36) 得:

$$\rho = \sqrt{\frac{\rho_0^2 e^{2\alpha\Theta_R t}}{1 + \frac{\sigma}{\alpha}\rho_0^2 (e^{2\alpha\Theta_R t} - 1) / \Theta_R}},$$

其中, $\rho_0 = \rho(x, 0)$. 根据这个结果, 我们可以解出方程 (35):

$$\theta = -V(x)t - \frac{1}{2\sigma} \ln \left| 1 + \frac{\sigma}{\alpha}\rho_0^2 (e^{2\alpha\Theta_R t} - 1) / \Theta_R \right| + \theta_0,$$

其中 θ_0 是初始估计的相位.

类似的, 对于 $\Theta_R = 0$ 的情况我们可以得出:

$$\rho = \frac{\rho_0}{\sqrt{2\sigma\rho_0^2 t + 1}},$$

$$\theta = -V(x)t - \frac{1}{2\sigma} \ln |2\sigma\rho_0^2 t + 1| + \theta_0.$$

因此, 定义 $\Theta_j \equiv \Theta(R - |x_j|)$, Step1 的解可以写成:

$$\Psi_j^{(1)} = \begin{cases} \Psi_j^n U_j^{(1)} e^{i\theta_j^{(1)}}, & \Theta_j > 0, \\ \Psi_j^n W_j^{(1)} e^{i\phi_j^{(1)}}, & \Theta_j = 0, \end{cases}$$

其中,

$$U_j^{(1)} = \sqrt{\frac{e^{\alpha\Theta_j \tau}}{1 + \frac{\sigma}{\alpha} |\Psi_j^n|^2 (e^{\alpha\Theta_j \tau} - 1) / \Theta_j}},$$

$$\theta_j^{(1)} = -V(x_j) \tau / 2 - \frac{1}{2\sigma} \ln \left| 1 + \frac{\sigma}{\alpha} |\Psi_j^n|^2 (e^{\alpha\Theta_j \tau} - 1) / \Theta_j \right|,$$

$$W_j^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{\sigma |\Psi_j^n|^2 \tau + 1}},$$

$$\phi_j^{(1)} = -V(x_j) \tau / 2 - \frac{1}{2\sigma} \ln |\sigma |\Psi_j^n|^2 \tau + 1|.$$

Step2: 在一个完整的时间步长 (即 t_n 到 $t_n + \tau$) 上求解方程 (32), 并使用 Step1 得到的解作为初始值. 方程 (32) 的解可以写成 $\psi(x, t) = e^{it\Delta} \psi_0$. 对此方程在空间上通过 Fourier 谱方法离散并在时间上积分, 得到:

$$\Psi_j^{(2)} = \frac{1}{M} \sum_{l=-M/2}^{M/2-1} e^{-i\omega_l^2 \tau} \widehat{\Psi}_l^{(1)} e^{i\omega_l(x_j-a)}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, M-1,$$

其中,

$$\hat{\Psi}_l^{(1)} = \sum_{j=0}^{M-1} \Psi_j^{(1)} e^{-i\omega_l(x_j-a)}, \quad \omega_l = \frac{2\pi l}{b-a}, \quad l = -\frac{M}{2}, \dots, \frac{M}{2} - 1.$$

Step3: 在 $t_n + \tau/2$ 到 $t_n + \tau$ 上求解方程 (31). 过程与 Step1 相同, 但使用 $\Psi_j^{(2)}$ 作为初值, 得到的结果即为 Ψ^{n+1} .

这种方法在时间上是二阶精度, 在空间上则为谱精度. 它的稳定性可以按 [17] 中的想法研究. 令 $\|\cdot\|_{l^2}$ 作为离散 l^2 -范数, 即 $\|\Psi\|_{l^2} = \sqrt{\frac{b-a}{M} \sum_{j=0}^{M-1} |\psi_j|^2}$, 我们有:

$$\|\Psi^{n+1}\|_{l^2}^2 \leq e^{2\alpha\tau} \|\Psi^n\|_{l^2}^2,$$

这表明该方法在 lax - richmyer 意义下是无条件稳定的.

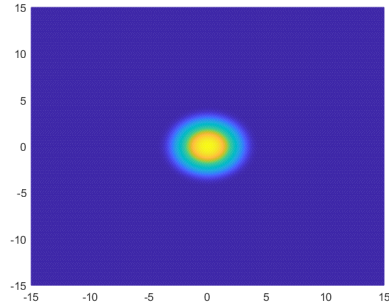
最后, 对于目前提出的所有方法, 选择光滑的 Heaviside 函数的是很重要的. 否则, 不连续性会降低配点法的精度, 并会在算子分裂谱方法中产生 Gibbs 现象.

5.2 数值结果

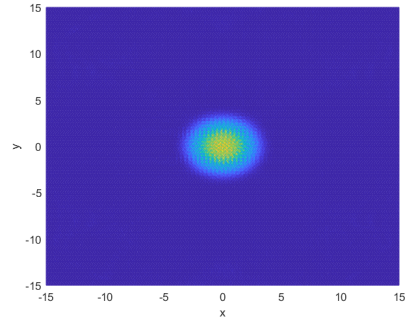
本节展示了解在二维情形下随时间演化的结果. 所选区域为 $[-15, 15] \times [-15, 15]$, 每条坐标轴上的网格点数目为 400 ($N = 400$), $\tau = 0.01$. 并使用前文配点法所计算出的稳态解作为解随时间演化的初值, 下面给出 $R = 2$, 和 $R = 8$ 两种情况的计算结果.

$R = 2$ 的情况见图2, 解随时间的演化是保持稳定的, 达到一种旋转对称静止状态. 这是符合我们在第四节的稳定性分析中所给出的结果的, 在 $R = 2$ 的情况下解保持稳定. 在 $t = 100$ 时, 解出现了一定的误差, 这可能是由于计算过程中误差的累计所引起的.

$R = 8$ 的情况如图3, 图4, 可以看到在这种情况下解变得不稳定, 在 $t = 0$ 时解的密度分布半径在 8 以内, 随着时间演化逐渐破坏了对称状态并扩散到范围更大的区域, 最后逐渐出现涡旋, 并随时间达到一个以恒定角速度旋转的稳定涡旋态.

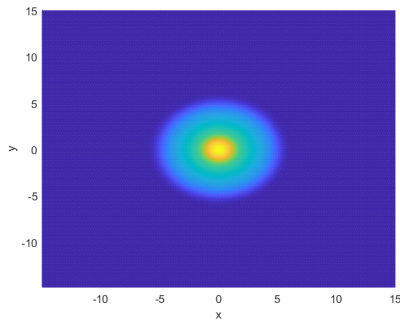


(a) $t=0$

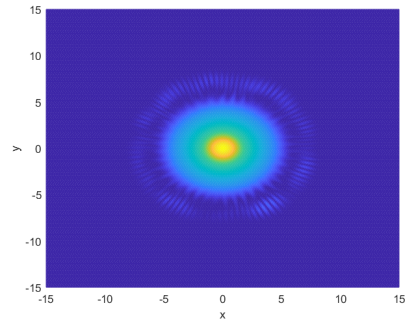


(b) $t=100$

图 2: $R = 2$ 时的仿真结果, 图像展示了解的密度分布, 深蓝色区域代表解的密度在此区域几乎为 0, 可以看到在此情形下解是稳定的.

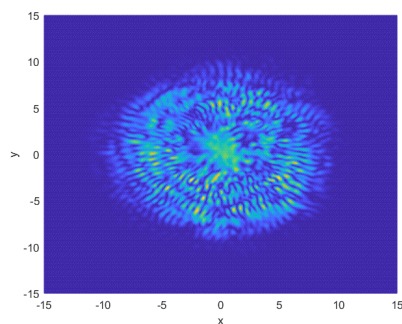


(a) $t=0$

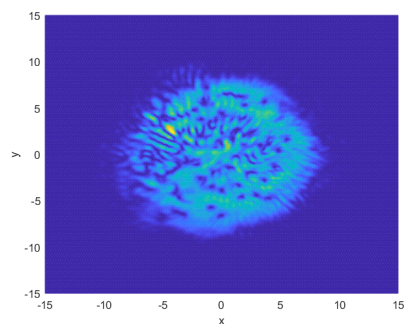


(b) $t=3$

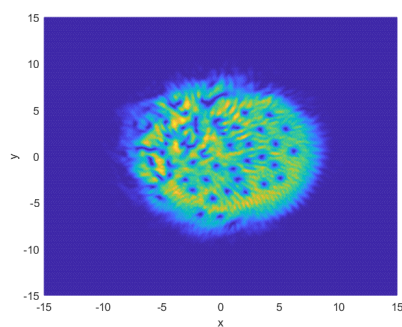
图 3: $R = 8$ 时的仿真结果, 图像展示了解的密度分布, 深蓝色区域代表解的密度在此区域几乎为 0, 可以看到在此情形下解是不稳定的, 并随时间演化最终达到旋转涡旋态.(下接图4)



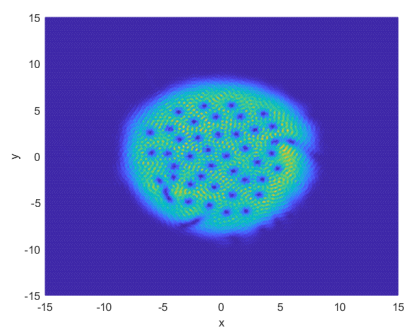
(a) $t=5$



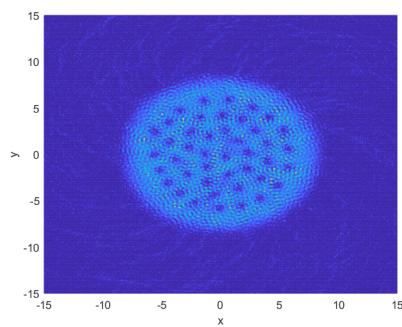
(b) $t=6$



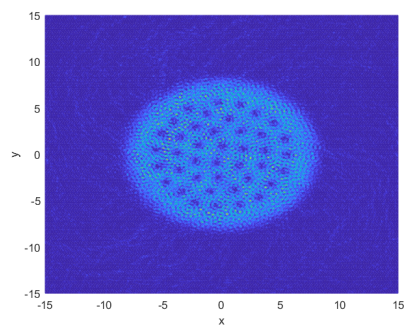
(c) $t=7$



(d) $t=8$



(e) $t=10$



(f) $t=40$

图 4: (上接图3) $R = 8$ 时的仿真结果, 图像展示了解的密度分布, 深蓝色区域代表解的密度在此区域几乎为 0, 可以看到在此情形下解是不稳定的, 并随时间演化最终达到旋转涡旋态.

6 总结

本文采用了不同的方法对复 GP 方程的解的性质做了一定的研究, 并发现其解在不稳定情况下随时间演化会达到一种旋转涡旋态. 关于这个状态的具体性质还有待研究. 同时, 由于复 GP 方程带有复数项以及不具有能量守恒与质量守恒, 在传统 GP 方程研究中的成熟方法 (如梯度流方法) 无法用于复 GP 方程解的计算, 配点法虽然可以计算其径向对称解, 但由于需要将其化为常微分方程求解, 在解的计算上有很多限制, 其解的计算方法还有待探究.

References

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor, *Science*, 269 (1995), pp. 198-201, <https://doi.org/10.1126/science.269.5221.198>.
- [2] W. Bao and Y. Cai, Mathematical theory and numerical methods for Bose - Einstein condensation, *Kinet. Relat. Models*, 6 (2013), pp. 1 - 135, <https://doi.org/10.3934/krm.2013.6.1>.
- [3] W. Bao and Y. Cai, Mathematical models and numerical methods for spinor Bose - Einstein condensates, *Commun. Comput. Phys.*, 24 (2018), pp. 899 - 965, <https://doi.org/10.4208/cicp.2018.hh80.14>.
- [4] W. Bao and Y. Cai, Normalized gradient flow with Lagrange multiplier for computing ground states of Bose-Einstein condensates. *SIAM J. Sci. Comput.* 43 (2021), B219-B242.
- [5] S. Bose. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. *Z. phys*, 26(3):178, 1924.
- [6] A. Einstein. Sitzungsberichte der preussischen akademie der wissenschaften. Physikalisch-mathematische Klasse, 261(3), 1924.
- [7] A. Einstein. Quantum theory of the monoatomic ideal gas. *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss*, page 261, 1925.
- [8] C. Bradley, C. Sackett, J. Tollett, and R. Hulet. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Physical Review Letters*, 75(9):1687, 1995.
- [9] K. Davis, M. Mewes, M. Andrews, N. van Druten, D. Durfee, D. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, 75(22):3969-3973, 1995.
- [10] L. Coldren and S. Corzine. Diode lasers and photonic integrated circuits, volume 218. Wiley Series in Microwave and Optical Engineering, 1995.

- [11] J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann, A. Baas, P. Jeambrun, J. Keeling, Marchetti F., M. Szymanacuta, R. Andre, and Staehli. Bose-Einstein condensation of exciton polaritons. *Nature*, 443(7110):409-414, 2006.
- [12] J. Keeling and N.G. Berloff. Spontaneous rotating vortex lattices in a pumped decaying condensate. *Physical review letters*, 100(25):250401, 2008. ISSN 1079-7114
- [13] D. Sanvitto, F. M. Marchetti, M. H. Szymanska, G. Tosi, M. Baudisch, F.P. Laussy, D.N. Krizhanovskii, M.S. Skolnick, L. Marrucci, A. Lemaitre, J. Bloch, C. Tejedor, and L. Vina. Persistent currents and quantized vortices in a polariton superfluid. *Nature Physics*, 2010. ISSN 1745-2473.
- [14] M. Wouters and I. Carusotto. Excitations in a nonequilibrium Bose-Einstein condensate of exciton polaritons. *Physical review letters*, 99(14):140402, 2007.
- [15] Jesús Sierra, Aslan Kasimov, Peter Markowich, Rada-Maria Weishäupl, On the Gross-Pitaevskii equation with pumping and decay: stationary states and their stability, *J. Nonlinear Sci.* 25 (3) (2015) 709-739.
- [16] U.M. Ascher, R.M. Mattheij, and R.D. Russell. Numerical solution of boundary value problems for ordinary differential equations, volume 13. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987.
- [17] W. Bao, D. Jaksch, and P.A. Markowich. Numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensation. *Journal of Computational Physics*, 187(1):318-342, 2003. ISSN 0021-9991.