

李羽,孔令华,罗奕杨. 耦合 Gross-Pitaevskii 方程的高效保质量守恒格式 [J]. 江西师范大学学报(自然科学版),2023,47(2): 194-198.

LI Yu, KONG Linghua, LUO Yiyang. The efficient mass-preserving scheme for coupled Gross-Pitaevskii equations [J]. Journal of Jiangxi Normal University ( Natural Science ),2023,47(2):194-198.

文章编号:1000-5862(2023)02-0194-05

# 耦合 Gross-Pitaevskii 方程的高效保质量守恒格式

李 羽<sup>1</sup>,孔令华<sup>1,2\*</sup>,罗奕杨<sup>1</sup>

(1. 江西师范大学数学与统计学院,江西 南昌,330022;2. 江西省应用数学中心,江西 南昌 330022)

**摘要:** 该文为耦合 Gross-Pitaevskii 方程提出了一个新的保质量守恒格式. 首先对空间导数利用高阶紧致格式离散得到半离散格式;然后在时间方向上利用基于外推的 Crank-Nicolson 格式离散,得到一个半显式的数值格式,然而此格式不能保持 GP 方程固有的质量守恒,因此,对格式得到的数值解利用投影方法进行修正,使其满足离散质量守恒;最后通过数值实验验证了该格式具有高精度以及保持质量守恒.

**关键词:** 耦合 Gross-Pitaevskii 方程;投影法;高阶紧致格式;质量守恒

**中国分类号:** O 241. 8 **文献标识码:** A **DOI:** 10. 16357/j. cnki. issn 1000-5862. 2023. 02. 12

## 0 引言

1924 年, S. N. Bose 和 A. Einstein 分别预言了在极低温度( -273. 15 ℃ 左右)下物质将出现第 5 态,即 Bose-Einstein 凝聚态(BEC),不过此预言直到 1995 年才在实验室中被证明确实存在<sup>[1-3]</sup>. 在 BEC 状态下的物质在现代高端科技领域中被广泛应用,特别是在原子物理、超导超流等科技领域中有潜在的应用. 本文主要讨论含有 2 个波函数的耦合 Gross-Pitaevskii (CGP) 方程的保质量结构算法的构造,CGP 方程具有如下基本形式:

$$\begin{cases} i\partial_t \psi_1 = (-\Delta/2 + V(x) + \delta + \beta_{11} |\psi_1|^2 + \beta_{12} |\psi_2|^2) \psi_1 + \lambda \psi_2, x \in \Omega, t > 0, \\ i\partial_t \psi_2 = (-\Delta/2 + V(x) + \beta_{21} |\psi_1|^2 + \beta_{22} |\psi_2|^2) \psi_2 + \lambda \psi_1, x \in \Omega, t > 0, \\ \psi_1(x, 0) = \psi_1(x), \psi_2(x, 0) = \psi_2(x), x \in \bar{\Omega}, \\ \psi_1(x, t) = \psi_2(x, t) = 0, x \in \partial\Omega, t \geq 0, \end{cases} \quad (1)$$

其中  $i = \sqrt{-1}$ ,  $\Omega \subset \mathbf{R}^d$  ( $d$  是空间维数) 是所考虑的空间区域,  $\psi_1(x, t)$  和  $\psi_2(x, t)$  是波函数,  $\Delta$  是拉普拉斯算子,  $V(x)$  为外势函数,  $\beta_{ij}$  表征粒子间相互作用的纲常数,通常要求  $\beta_{12} = \beta_{21}$ ,  $\lambda$  在量子物理学意义下是通过拉曼跃迁实现内部原子 Josephson Junction (JJ) 的有效 Rabi 频率,  $\delta$  是拉曼跃迁的时谐常数.

不难验证,初边值问题(1) 满足质量守恒

$$M(t) = \int_{\Omega} |\psi_1(x, t)|^2 + |\psi_2(x, t)|^2 dx = M(0), \quad t > 0. \quad (2)$$

近十几年来,对 CGP 方程的研究无论在纯数学理论方面<sup>[3-4]</sup>还是在数值计算模拟方面都取得了丰硕的研究成果<sup>[4-10]</sup>. 在数值计算模拟方面,如 Bao Weizhu 等<sup>[4]</sup>针对无旋 GP 方程构造了 4 阶时间分裂正弦或傅里叶的拟谱方法,符芳芳等<sup>[6,8]</sup>构造了其辛格式和分裂多辛格式, Wang Tingchun 等<sup>[5]</sup>为其构造了 2 个时间空间均为 2 阶的保能量格式,随后又构造了 2 个解耦的 3 层半显式格式,尽管后 2 种

收稿日期:2022-08-27

基金项目:国家自然科学基金(11961036),江西省自然科学基金(20224ACB201001)和江西师范大学研究生创新基金(YJ2021068)资助项目.

通信作者:孔令华(1977—),男,江西石城人,教授,博士,博士生导师,主要从事微分方程数值方法的研究. E-mail: konglh@mail. ustc. edu. cn

格式能够在一定程度上降低计算成本,但这2种格式精度不高.本课题组<sup>[7-10]</sup>也从保能量、保辛或多辛的角度为GP方程构造了一些数值方法.本文致力于构造一种高精度、高效率且能保持质量守恒的数值方法,此方法结合了高阶紧致方法与保结构算法的各自优势,利用投影技术在高效的基础上保持质量守恒.

## 1 数值格式的构造

为了构造数值格式,首先讨论空间导数的离散方式,使其能够高效计算,而且能够保持半离散的质量守恒;然后对时间方向采用具有稳定性好、计算效率高的半隐式外推方法进行离散.为了保持质量守恒,通过投影方法把数值解拉回到质量守恒的线性空间中.

首先对时空区域 $[a, b] \times [0, T]$ 进行网格剖分.将空间 $[a, b]$ 作 $J$ 等分,时间 $[0, T]$ 作 $N$ 等分,记空间步长与时间步长分别为 $h, \tau$ ,则 $h = (b - a)/J$ ,  $\tau = T/N$ ,作区域 $[a, b] \times [0, T]$ 的一致网格剖分:

$$\Omega_{h\tau} = \{(x_j, t_n) \mid x_j = a + jh, t_n = n\tau, j = 0, 1, \dots, J, n = 0, 1, \dots, N\}.$$

使用记号 $(u_j^n, v_j^n)$ 表示 $(\psi_1(x_j, t_n), \psi_2(x_j, t_n))$ 在节点 $(x_j, t_n)$ 处的数值解,为表述方便,引进以下记号:

$$\delta_t u_j^{n+1/2} = (\tilde{u}_j^{n+1} - u_j^n)/\tau, Bu_j^n = \delta_x^2 u_j^n = (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)/h^2, \tilde{u}_j^n = (3u_j^n - u_j^{n-1})/2, Au_j^n = (u_{j+1}^n + 10u_j^n + u_{j-1}^n)/12, \tilde{u}_j^{n+1/2} = (\tilde{u}_j^{n+1} + u_j^n)/2, u_j^{n+1/2} = (u_j^{n+1} + u_j^n)/2, Du_j^n = A^{-1}Bu_j^n.$$

首先推导出具有精度高、模板小的高阶紧致格式.由Taylor公式可知

$$(\psi(x_{j+1}) - 2\psi(x_j) + \psi(x_{j-1}))/h^2 = \psi''(x_j) + h^2\psi^{(4)}(x_j)/12 + O(h^4) = \psi''(x_j) + O(h^2), \quad (3)$$

若直接略去高阶项 $O(h^2)$ ,则2阶中心差商为

$$\delta_x^2 u_j^n = (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)/h^2.$$

此方法具有2阶精度,节点模板涉及了3个节点 $x_{j-1}, x_j, x_{j+1}$ ,在用于空间离散时将产生带宽为3的带状矩阵,且具有对称性.为充分利用节点信息和提高计算精度,本文仍然利用上述3个节点,尝试构造4阶格式,把在格式(3)中的4阶误差主项 $\psi^{(4)}(x_j)h^2/12$ 保留下来,采用如下方式进行离散:

$$(h^2/12) \cdot d^2(d^2\psi(x_j)/dx^2)/dx^2 = (h^2/12) \cdot (\psi''(x_{j+1}) - 2\psi''(x_j) + \psi''(x_{j-1}))/h^2 + O(h^4).$$

将上式代入(3)式可得

$$(\psi''(x_{j+1}) + 10\psi''(x_j) + \psi''(x_{j-1}))/12 = (\psi(x_{j+1}) - 2\psi(x_j) + \psi(x_{j-1}))/h^2 + O(h^4).$$

若忽略高阶项 $O(h^4)$ 并将 $\psi_j^n$ 看作 $\psi(x_j, t_n)$ 的近似值,引入算子记号 $A, B$ ,则得到如下3个节点的4阶紧致格式<sup>[11-13]</sup>:

$$A\psi_j'' = (\psi''(x_{j+1}) + 10\psi''(x_j) + \psi''(x_{j-1}))/12 = (\psi(x_{j+1}) - 2\psi(x_j) + \psi(x_{j-1}))/h_x^2 = B\psi_j. \quad (4)$$

将其写成更加紧凑的矩阵形式

$$\psi'' = A^{-1}B\psi = D\psi,$$

其中

$$A = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 10 & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 10 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 10 \end{pmatrix},$$

$$B = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

把上述高阶紧致格式(4)应用到CGP方程(1),并在时间方向上用基于Crank-Nicolson离散的外推方法,得到格式:

$$\begin{cases} i\delta_t u_j^n = (-D/2 + V_j + \delta)\tilde{u}_j^{n+1/2} + (\beta_{11}|\tilde{u}_j^n| + \beta_{12} \cdot |\tilde{v}_j^n|)\tilde{u}_j^n + \lambda\tilde{v}_j^n, j = 1, 2, \dots, J-1, n = 1, 2, \dots, N-1, \\ i\delta_t v_j^n = (-D/2 + V_j)\tilde{v}_j^{n+1/2} + (\beta_{12}|\tilde{u}_j^n| + \beta_{22} \cdot |\tilde{v}_j^n|)\tilde{v}_j^n + \lambda\tilde{u}_j^n, j = 1, 2, \dots, J-1, n = 1, 2, \dots, N-1, \\ u_j^0 = \psi_1(x_j), v_j^0 = \psi_2(x_j), j = 0, 1, \dots, J. \end{cases} \quad (5)$$

此格式是3层半隐式格式,在实际的数值计算模拟中,每个时间步需要求解2个仅关于 $u_j^{n+1}$ 或仅关于 $v_j^{n+1}$ 解耦的线性代数方程组.由于此格式是3层的,不能自启动,所以采用以下基于Taylor展开和原方程的数值方法获得 $(u_j^1, v_j^1)$ :

$$\begin{cases} u_j^1 = u_j^0 - i\tau(-D/2 + V_j + \delta + \beta_{11}(|u_j^0|^2 + |u_j^1|^2)/2 + \beta_{12}(|v_j^0|^2 + |v_j^1|^2)/2)u_j^{1/2} + \lambda v_j^{1/2}, \\ v_j^1 = v_j^0 - i\tau(-D/2 + V_j + \beta_{21}(|u_j^0|^2 + |u_j^1|^2)/2 + \beta_{22}(|v_j^0|^2 + |v_j^1|^2)/2)|v_j^{1/2}| + \lambda u_j^{1/2}. \end{cases} \quad (6)$$

通过Taylor展开可知,格式(5)和(6)在时间方向上均具有2阶精度,在空间方向上用的是4阶的

高阶紧致格式(4). 因此,该格式在空间方向上也是4阶收敛的. 格式(5)是半显式格式,其计算效率高. 然而,此格式并不能保持质量守恒律(2). 因此,对格式(5)和(6)的解进一步采用投影法更新计算<sup>[14-15]</sup>. 可以利用 Lagrange 乘子法把它限制在质量守恒的线性空间子空间中. 具体做法如下:

$$\begin{cases} u^{n+1} = \tilde{u}^{n+1} + \lambda \tilde{u}^{n+1}, \\ v^{n+1} = \tilde{v}^{n+1} + \lambda \tilde{v}^{n+1}, \\ M_h(u^{n+1}, v^{n+1}) = M_h(u^0, v^0), \end{cases} \quad (7)$$

其中  $\lambda$  是 Lagrange 乘子,  $(\tilde{u}^{n+1}, \tilde{v}^{n+1})$  是由格式(5)和(6)得到的数值解. 进一步要求其满足离散的质量守恒律,即在投影法(7)中的第3式:

$$M_h(u, v) = (\|u\|^2 + \|v\|^2)/2.$$

格式(7)是关于  $u^{n+1}, v^{n+1}, \lambda$  的非线性方程组,可以通过把格式(7)的前2个式子代入第3个式子,从而得到一个关于  $\lambda$  的非线性方程. 对于得到的方程,可以考虑用 Newton 迭代法进行求解,然后再反代回前2个式子,从而得到想要的数值解  $(u^{n+1}, v^{n+1})$ . 此解能够保持系统的质量  $M_h(u, v) = (\|u\|^2 + \|v\|^2)/2$  不变.

## 2 数值实验

本节主要通过数值实验来验证上节所构造的格式的有效性,并且给出一些数值结果,通过表格及图像直观地展示格式的收敛阶及离散的质量守恒律.

取  $[a, b] = [-7, 7]$ , CGP 方程(1)的参数  $\beta_{11} = \beta_{22} = 1.5, \beta_{12} = \beta_{21} = 0.5, \lambda = -0.5$ , 且  $V(x) = x^2/2, d = 1$ , 初值条件为  $\psi_1(x) = \psi_2(x) = e^{-x^2}/\sqrt{\pi}$ . 由于无法给出其精确解的解析表达式,所以,为便于分析,利用格式在相对小的时间步长与空间步长下所得到的数值解作为“精确解”. 在此,取  $h = 1/32, \tau = 1 \times 10^{-4}$ . 为了计算收敛阶,使用公式  $r_\tau = (\ln(\|e(h, \tau_1)\|_\infty / \|e(h, \tau_2)\|_\infty)) / \ln(\tau_1 / \tau_2)$ ,  $r_h = (\ln(\|e(h_1, \tau)\|_\infty / \|e(h_2, \tau)\|_\infty)) / \ln(h_1 / h_2)$  来分别计算时间方向与空间方向的收敛阶数,其中  $\|e(h, \tau)\|_\infty$  表示在空间步长  $h$  以及时间步长  $\tau$  下误差的  $\infty$ -范数. 对于高阶紧致格式,在计算空间方向的收敛阶时,可以选取不同的空间步长并固定一个

相对小的时间步长来数值模拟,以便于减少时间方向对误差的影响,在计算时间方向的收敛阶时同理. 本文选择  $\tau = 1 \times 10^{-4}$  和  $h = 1/2, 1/4, 1/8, 1/16$  来计算空间方向的收敛阶,选择  $h = 1/32$  和  $\tau = 1/25, 1/50, 1/100, 1/200$  来计算时间方向的收敛阶,该问题取  $T = 10$ . 从表1和表2可以看出,格式(7)在空间方向上有4阶收敛率,在时间方向上有2阶收敛率. 这与理论分析相吻合.

表1 空间收敛阶及误差( $\tau = 10^{-4}$ )

$h$	$u$		$v$	
	$\ e(h, \tau)\ _\infty$	$r_h$	$\ e(h, \tau)\ _\infty$	$r_h$
1/2	$4.1569 \times 10^{-3}$		$5.2552 \times 10^{-3}$	
1/4	$1.9106 \times 10^{-4}$	4.4434	$2.4118 \times 10^{-4}$	4.4456
1/8	$1.1520 \times 10^{-5}$	4.0518	$1.4549 \times 10^{-5}$	4.0511
1/16	$6.7399 \times 10^{-7}$	4.0953	$8.5115 \times 10^{-7}$	4.0954

表2 时间收敛阶及误差( $h = 1/32$ )

$\tau$	$u$		$v$	
	$\ e(h, \tau)\ _\infty$	$r_\tau$	$\ e(h, \tau)\ _\infty$	$r_\tau$
1/25	$1.2657 \times 10^{-3}$		$1.5542 \times 10^{-3}$	
1/50	$3.0571 \times 10^{-4}$	2.0497	$3.7707 \times 10^{-4}$	2.0433
1/100	$7.5271 \times 10^{-5}$	2.0220	$9.3076 \times 10^{-5}$	2.0184
1/200	$1.8663 \times 10^{-5}$	2.0119	$2.3118 \times 10^{-5}$	2.0094

最后考察格式在投影使用前后离散系统的质量的保持情况,同时考察各个时间步 Lagrange 乘子的取值情况和解随时间的演化关系. 图1画出了投影使用前后离散系统的粒子质量随时间的演化关系,图2描绘了投影解随时间的演化情况,图3给出了各个时间步的 Lagrange 乘子  $\lambda$  的取值情况,图4给出了投影法对解  $u$  和  $v$  的修正量,即  $|\tilde{u}_j^n - u_j^n|$  以及  $|\tilde{v}_j^n - v_j^n|$ .

由图1可知,在未采用投影方法之前的格式(5)并不能保持 CGP 方程(1)的质量(2)守恒,经过投影方法(7)之后,离散系统的质量得以精确保持. 从图2可知格式能够非常准确地模拟 CGP 方程所描述的波. 从图3和图4可以观察到:虽然原来的格式(5)不能保持质量守恒,但是由投影方法拉回的幅度较小,大约在  $0 \sim 2.5 \times 10^{-8}$  范围内波动,拉回因子  $\lambda$  一直也比较小,在  $-4 \times 10^{-8} \sim 4 \times 10^{-8}$  的范围内波动.

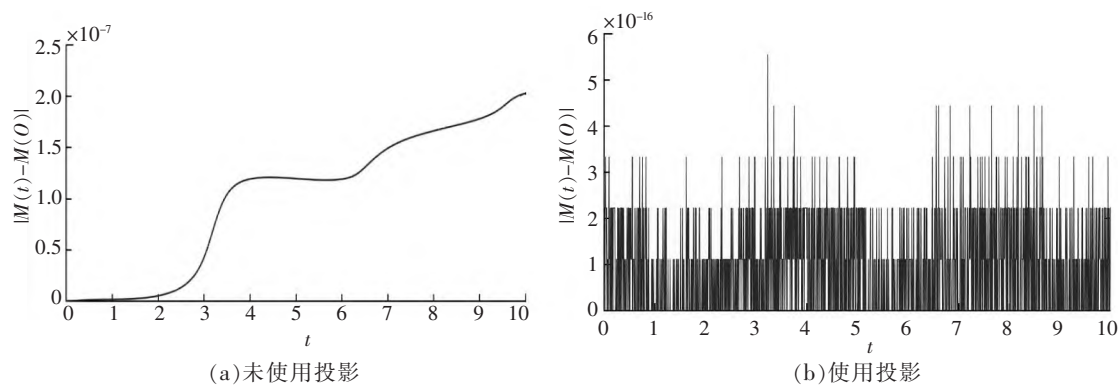
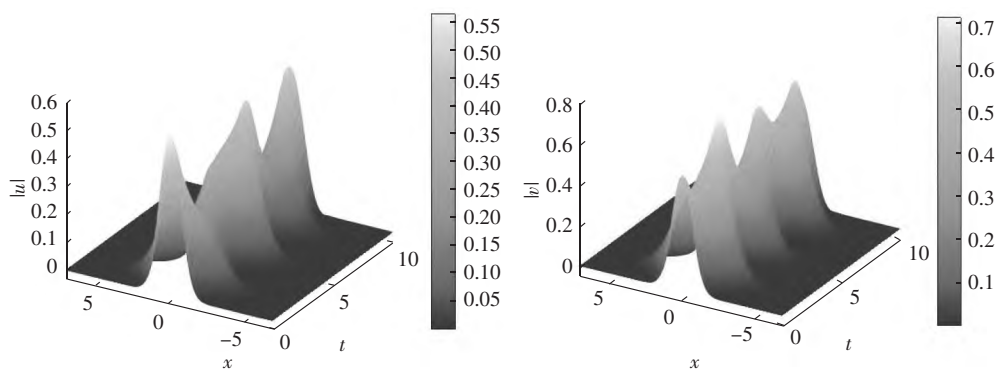
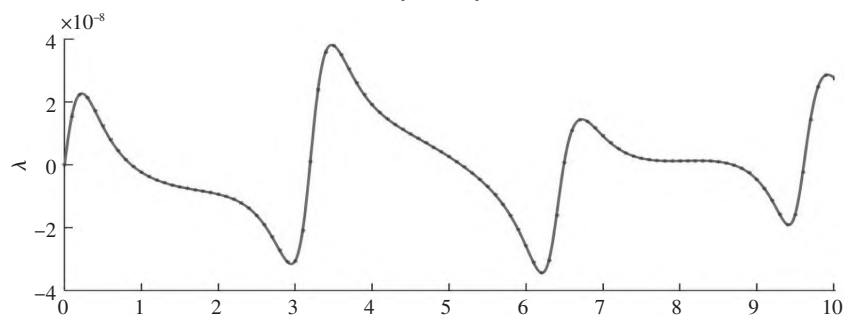
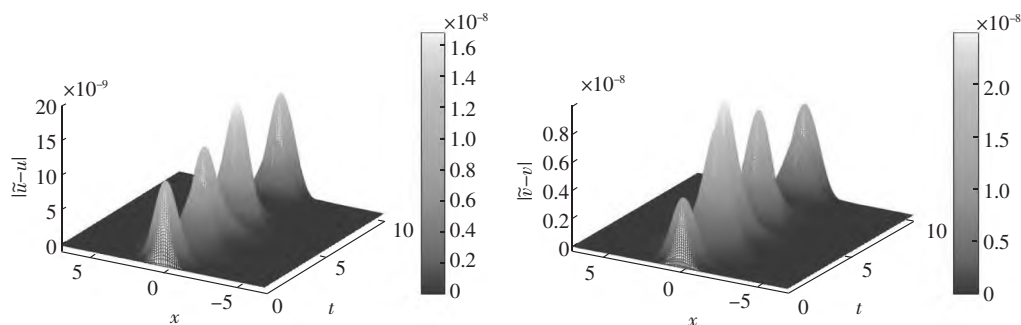


图1 质量的误差随时间的演化关系

图2 在投影作用下  $|u_j^n|$  和  $|v_j^n|$  随时间的演化关系图3 每个时间步的 Lagrange 乘子  $\lambda$  的值图4  $|u_j^n|$  和  $|v_j^n|$  在使用投影法后的修正量

### 3 参考文献

- [1] ANDERSON M H, ENSHER J R, MATTHEWA M R, et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor [J]. Science, 1995, 269(5221): 198-201.
- [2] DAVIS K B, MEWES M O, ANDREWS M R, et al. Bose-

Einstein condensation in a gas of sodium atoms [J]. Physical Review Letters, 1995, 75(22): 3969-3973.

- [3] 王灯山. 外势场中玻色-爱因斯坦凝聚体的动力学研究 [M]. 北京: 科学出版社, 2016.
- [4] BAO Weizhu, CAI Yongyong. Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensation [J]. Kinetic & Related Models, 2013, 6(1): 1-135.

- [5] WANG Tingchun, ZHAO Xiaofei. Optimal  $l^\infty$  error estimates of finite difference methods for the coupled Gross-Pitaevskii equations in high dimensions [J]. Science China: Mathematics, 2014, 57(10): 2189-2214.
- [6] 符芳芳, 周媛兰. 2 维 Gross-Pitaevskii 方程的辛格式 [J]. 江西师范大学学报(自然科学版), 2016, 40(6): 599-602.
- [7] 贺增甲, 孔令华, 符芳芳. 2 维 Gross-Pitaevskii 方程的分裂高阶紧致差分格式 [J]. 江西师范大学学报(自然科学版), 2020, 44(6): 599-603.
- [8] 符芳芳, 孔令华, 王兰, 等. 一维 Gross-Pitaevskii 方程的高阶紧致分裂步多辛格式 [J]. 计算物理, 2018, 35(6): 657-667.
- [9] WANG Lan, CAI Wenjun, WANG Yushun. An energy-preserving scheme for the coupled Gross-Pitaevskii equations [J]. Advances in Applied Mathematics and Mechanics, 2021, 13(1): 203-231.
- [10] KONG Linghua, HONG Jialin, ZHANG Jingjing. LOD-MS for Gross-Pitaevskii equation in Bose-Einstein condensates [J]. Communications in Computational Physics, 2013, 14(1): 219-241.
- [11] LELE S K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution [J]. Journal of Computational Physics, 1992, 103(1): 16-42.
- [12] 陈萌, 孔令华, 王兰. Burgers 方程的跳点紧致格式 [J]. 江西师范大学学报(自然科学版), 2017, 41(5): 526-530.
- [13] 翟步祥, 聂涛, 薛翔. 5 次非线性 Schrödinger 方程的一个线性化 4 层紧致差分格式 [J]. 江西师范大学学报(自然科学版), 2019, 43(1): 35-38, 51.
- [14] 洪旗, 王雨顺, 龚跃政. Neumann 边界条件下 sine-Gordon 方程的高效保能量算法 [J]. 中国科学: 数学, 2022, 52(6): 709-728.
- [15] HAIRER E, LUBICH C, WANNER G. Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations [M]. Berlin-Heidelberg: Springer, 2006.

## The Efficient Mass-Preserving Scheme for Coupled Gross-Pitaevskii Equations

LI Yu<sup>1</sup>, KONG Linghua<sup>1,2\*</sup>, LUO Yiyang<sup>1</sup>

(1. School of Mathematics and Statistic, Jiangxi Normal University, Nanchang Jiangxi 330022, China;

2. Jiangxi Provincial Center for Applied Mathematics, Nanchang Jiangxi 330022, China)

**Abstract:** In this paper, the new mass-preserving scheme is proposed for the coupled Gross-Pitaevskii equation. Firstly, the spatial derivative is approximated by high order compact scheme and a semi-discrete scheme is obtained. The temporal derivative is approximated by Crank-Nicolson based extrapolation. Thus, a semi-implicit scheme is obtained. Unfortunately this scheme is not mass-preserving. To make up for this, a projection method is used to pull solution back the mass-preserving space. Finally, some numerical experiments are presented to illustrate high accuracy and mass-preserving of the new scheme.

**Keywords:** coupled Gross-Pitaevskii equation; projection method; high order compact scheme; mass conservation law.

(责任编辑: 曾剑锋)