

关于偶极玻色-爱因斯坦凝聚态中
Bogoliubov-de Gennes 激发的研究

**Mathematical analysis and numerical study
of the Bogoliubov-de Gennes excitation in
the dipolar Bose-Einstein condensates**

学科专业: 数学
研 究 生: 张雨晴
指导教师: 张勇 教授

天津大学数学学院
二〇二一年五月

独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是本人在导师指导下进行的研究工作和取得的研究成果，除了文中特别加以标注和致谢之处外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得天津大学或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

学位论文作者签名: 签字日期: 年 月 日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解天津大学有关保留、使用学位论文的规定。特授权天津大学可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，并采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编以供查阅和借阅。同意学校向国家有关部门或机构送交论文的复印件和磁盘。

(保密的学位论文在解密后适用本授权说明)

学位论文作者签名: 导师签名:

签字日期: 年 月 日 签字日期: 年 月 日

摘要

本文提出一种高效、高精度的数值方法来研究偶极玻色-爱因斯坦凝聚态 (Dipolar Bose-Einstein condensates, 简记为 DBEC) 的基态激发, 该激发由平均场基态附近的具有偶极-偶极相互作用 (Dipole-Dipole Interaction, 简记为 DDI) 的 Bogoliubov-de Gennes 方程 (简记为 BdG 方程) 来描述。本文首先研究 BdG 方程的解析性质, 得到可作为数值方法基准的解析解。为准确、高效地计算非局部相互作用, 本文提出快速谱卷积算法 (Simple Fourier Spectral Convolution Method, 简记为 SFSC)。然后, 本文将 SFSC 算法、Fourier 谱方法和特征值问题的隐式重启的 Arnoldi 方法 (Implicitly Restarted Arnoldi Methods, 简记为 IRAM) 相结合, 得到有效求解 BdG 方程的 SFSC-IRAM 算法。本文提供大量数值实验来说明 SFSC-IRAM 算法的高效性和准确性。最后, 本文应用 SFSC-IRAM 算法来研究在二维和三维空间中具有不同参数的 BdG 方程的特征值和特征函数。

关键词: Bogoliubov-de Gennes 激发, 偶极玻色-爱因斯坦凝聚态, 卷积型非局部相互作用, Fourier 谱卷积方法

ABSTRACT

In this paper, we propose an efficient and robust numerical method to study the elementary excitation of Dipolar Bose-Einstein condensates (DBEC), which is governed by the Bogoliubov-de Gennes (BdG) equations with nonlocal Dipole-Dipole Interaction, around the mean field ground state. Analytical properties of the BdG equations are investigated, which could serve as benchmarks for the numerical methods. To evaluate the nonlocal interactions accurately and efficiently, we propose a new Simple Fourier Spectral Convolution Method (SFSC). Then, integrating SFSC with the standard Fourier spectral method for spatial discretization and Implicitly Restarted Arnoldi Methods (IRAM) for the eigenvalue problem, we derive an efficient and spectrally accurate method, named as SFSC-IRAM method, for the BdG equations. Ample numerical tests are provided to illustrate the accuracy and efficiency. Finally, we apply the new method to study systematically the excitation spectrum and Bogoliubov amplitudes around the ground state with different parameters in different spatial dimensions.

KEY WORDS: Bogoliubov-de Gennes excitations, Dipolar Bose-Einstein condensates, Convolution-type nonlocal interaction, Fourier spectral convolution method

目 录

目 录	III
第一章 绪论	1
1.1 研究背景	1
1.2 研究现状	2
1.3 研究内容	3
1.4 结构安排	4
第二章 关于 Bogoluibov-de Gennes 方程的介绍	5
2.1 偶极玻色-爱因斯坦凝聚态	5
2.2 Bogoluibov-de Gennes 方程	6
2.3 本章小结	9
第三章 Bogoluibov-de Gennes 方程的解析性质	11
3.1 一般位势下的性质	11
3.2 简谐位势下的性质	12
3.3 Thomas-Fermi 极限下的性质	13
3.4 本章小结	18
第四章 数值方法	19
4.1 波函数的 Fourier 谱逼近	19
4.2 特征值 / 特征函数求解器	20
4.3 非局部作用的快速卷积算法	21
4.4 本章小结	24
第五章 数值结果	25
5.1 数值方法的精度	25
5.2 Bogoluibov-de Gennes 方程的特征值的研究	27
5.3 Bogoluibov-de Gennes 方程的特征函数的研究	28
5.4 本章小结	29
第六章 总结与展望	35
6.1 本文总结	35
6.2 工作展望	35
参考文献	37
发表论文和参加科研情况说明	41
致 谢	43

第一章 绪论

本章第一节主要介绍本文的研究背景，第二节主要介绍研究现状，第三节主要介绍研究内容，第四节主要介绍结构安排。

1.1 研究背景

量子理论揭示了微观物质世界的基本规律，认为所有物质在微观尺度上都是波。但波长极小，肉眼很难观察到量子现象。幸运的是，在 1924 年，Einstein^[22,23] 将 Bose^[14] 的光子统计工作推广到非相互作用的玻色子气体中，提出玻色-爱因斯坦凝聚态（Bose-Einstein condensates，简记为 BEC）的概念。Einstein 预测在临界温度 T_c （接近绝对零度）下，玻色子会凝聚到能量最低的量子态上，形成凝聚态，这为探索量子世界提供了可能。但由于技术的局限性，Einstein 的工作在当时并没有获得较多关注。直到 1938 年，London^[39] 发现 ^4He 在临界温度下形成超流体，激发了人们对超流体和相互作用玻色子系统的研究兴趣。尤其在 20 世纪 80 年代，人们发明了激光冷却技术与蒸发冷却技术，为在实验室中观察 BEC 提供了技术支持，得到了一系列的实验成果。1995 年，Cornell 和 Wieman^[3] 的小组在实验室中获得 ^{87}Rb 的 BEC。之后，Ketterle^[19] 的小组和 Hulet^[15] 的小组分别实现了 ^{23}Na 和 ^7Li 的 BEC 实验。通过这些实验，人们观察到具有短程相互作用的玻色子气体的凝聚态。

冷原子系统的基本粒子之间的长程相互作用也是研究的关键，尤其是偶极-偶极相互作用（Dipole-Dipole Interaction，简记为 DDI）。事实上，在临界温度下，具有 DDI 的玻色子气体也会形成凝聚态，这为实验室观察偶极玻色-爱因斯坦凝聚态（Dipolar Bose-Einstein condensates，简记为 DBEC）提供了可能。近年来，人们一直在尝试实现具有 DDI 的 BEC 的实验。2005 年，Stuttgart 大学在实验室中首次成功获得 ^{52}Cr 原子^[28] 的 DBEC。之后， ^{164}Dy 原子^[40] 和 ^{168}Er 原子^[2] 的 DBEC 也在实验成功。与具有局部相互作用 BEC 不同，在 DBEC 中，DDI 是长程的和各向异性的，即非局部相互作用强度取决于粒子间的距离、粒子间相对位置与偶极朝向之间的夹角。由于 DBEC 具有以上特征，人们可以观察到许多独特而新颖的现象，如 roton-maxon 光谱^[36,43]、自结合液滴状态^[25,46] 和新的涡旋晶格模式^[41]，这些都为 DBEC 的研究提供了动力。

平均场理论^[13,36,55] 可以极好地描述 BEC，但它无法解释量子涨落现象^[31]。我们需要超越平均场理论，通过集体激发来描述量子涨落现象^[31]。事

实上, 集体激发可以用当今流行的 Bogoliubov 理论^[31] 来描述。我们从 BEC 的稳态解出发, 通过 Bogoliubov 理论^[31] 来研究稳态解附近的激发, 从而得到描述集体激发行为的 Bogoliubov-de Gennes 方程 (简记为 BdG 方程) ^[5,26,32,37,43]。迄今为止, BEC 稳态解及其附近的激发的分析工作主要由描述凝聚态性质的 GP 方程和描述非凝聚态的 Bogoliubov 理论^[31] 组成。

1.2 研究现状

计算数学家和物理学家对 BEC 稳态解的数值模拟十分感兴趣, 研究了许多高效、高精度的数值方法。

关于 BEC 稳态解的计算, Bao 和 Du^[9] 提出向后欧拉有限差分方法和时间分裂正弦谱方法, 得到二阶精度的数值解; Bao 等人^[8] 提出向后欧拉正弦谱方法, 得到谱精度数值解; Heid 等人^[30] 基于能量最小化原理提出自适应有限元梯度流方法; Wang^[51] 提出计算自旋为 2 的 BEC 的投影梯度方法; Wu 等人^[53] 提出正则化牛顿方法; Danaila 和 Protas^[18] 提出黎曼流形上无约束优化方法。

关于非局部 DDI 的计算, Bao、Cai、Wang、Zhang 等人^[6,7,10] 提出正弦谱方法, Bao、Jiang、Tang、Zhang 等人^[11,12,33] 提出非均匀快速 Fourier 变换方法, Exl、Mauser 和 Zhang^[24] 提出高斯和方法, Ronen、Rozzi、Vico 等人^[43,44,50] 提出核截断方法, Greengard、Jiang 和 Zhang^[27] 提出各向异性核截断方法 (Anisotropic Truncated Kernel Method, 简记为 AKTM)。在计算非局部相互作用时, 最后三种方法都可以在 $O(N\log(N))$ 次运算中得到谱精度的数值解。

关于具有 DDI 的 BEC 稳态解的计算, Bao、Cai 和 Wang^[7] 通过解耦 DDI 提出向后欧拉正弦谱方法, Li 等人^[38] 提出间断 Galerkin 方法, Antoine、Levitt 和 Tang^[4] 提出预处理共轭梯度法 (Preconditioned Conjugate Gradient Method, 简记为 PCG)。其中, PCG 方法^[4] 是目前最有效的基态解求解器。最近, Tang、Wang 和 Zhang^[48] 将计算 DDI 的 AKTM 方法与 PCG 方法相结合, 提出 PCG-AKTM 方法。PCG-AKTM 方法效率高、复杂度低, 且可以得到谱精度的数值解。

在过去几十年里, 数学家和物理学家对 BEC 稳态附近的 BdG 方程^[31,47] 进行了理论和数值上的大量研究^[20,26,31,34,35,42,43,47,52]。

关于 BEC 稳态附近的 BdG 方程的研究, 大部分是针对非偶极系统的。在理论方面, 基于简谐位势中稀薄玻色气体的低能集体激发, Stringari^[47] 提出在 Thomas-Fermi 极限 (简记: TF 极限) 下, 有约束条件的 BEC 的长波激发频率只与位势中单粒子的振荡频率有关; Hu 等人^[31] 提出在超越 TF 极限的

BEC 低能激发态下求解 BdG 方程解析解的方法。在数值计算方面, Edwards 等人^[20,42]以有限差分法为基础,利用 ARPACK 库求解稀疏代数特征值问题; Danaila 等人^[17]用有限元方法研究了多组分 BEC 的 BdG 方程; Gao 和 Cai^[26]系统地研究了经典 GP 方程下的 BdG 方程,并提出正弦谱方法、有限差分法和紧致差分法。

在理论和数值方法方面,人们对 DBEC 稳态附近的 BdG 方程的研究都比较少。Yi 等人^[32]用 Fourier 谱方法研究带旋转项的二维系统的低能集体激发; Ronen 等人^[43,52]针对柱对称系统改进一维离散 Hankel 变换的算法。这些研究主要适用于低维情况或具有特定对称结构的系统,且在精度和效率方面略显不足。因此,我们有必要从理论上研究 BdG 方程的数学性质,并建立准确、高效的数值方法来求解 DBEC 附近的 BdG 方程。

1.3 研究内容

本文通过 GP 方程描述 DBEC,从以下三个方面研究其稳态附近的 BdG 方程:

- (一) 从理论上研究 BdG 方程在不同条件下的特殊解析解。
- (1) 在一般位势 $V(\mathbf{x})$ 下,满足归一化条件的特征函数对应的特征值只能为实值。
 - (2) 在简谐位势 $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha}^2 \alpha^2$ 下,当 GP 方程的稳态解是实值函数时, BdG 方程始终存在满足归一化条件的特解。
 - (3) 在 TF 极限下,取沿 z 轴的偶极朝向 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ 和柱对称简谐位势 $V(\mathbf{x}) = \frac{\gamma_x^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\gamma_z^2}{2}z^2$,当短程相互作用强度 β 无穷大时,半径 R_x, R_y, R_z 和化学势 μ_g^{TF} 的渐近估计为 $O(\beta^{1/5})$ 和 $O(\beta^{2/5})$, $\beta \rightarrow \infty$ 。
 - (4) 在 TF 极限下,取沿 z 轴的偶极朝向 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ 和各项同性简谐位势 $V(\mathbf{x}) = x^2 + y^2 + z^2$,当短程相互作用强度 β 无穷大时,特征值为 $\omega_{\infty}^{lk} = \sqrt{2} \sqrt{l + 3k + 2kl + 2k^2}$, $l \geq 0, k \geq 0$ 。

(二) 提出 SFSC-IRAM 算法,求解 BdG 方程的特征解。

为高效、高精度求解 BdG 方程,我们需要完成以下三项工作:

- (1) 高精度计算稳态解(或基态解);
- (2) 在高维空间中设计 DDI 高效求解器;
- (3) 高效、高精度计算 BdG 方程的特征解。

在本文中,我们利用 Tang、Wang 和 Zhang^[48]提出的 PCG-AKTM 方法,来计算偶极 BEC 的稳态解,得到的数值解是谱精度的。关于求解非局部 DDI 的部分,我们通过密度函数的 Fourier 谱近似得到卷积的 Fourier 谱近似,进而提

出复杂度低，预因子小的快速谱卷积算法（Simple Fourier Spectral Convolution Method，简记为 SFSC）。我们利用 Fourier 谱方法来离散 BdG 方程，得到大型稠密矩阵的特征值问题。为避免耗费内存成本，我们调用 ARPACK 库，应用非显式矩阵存储的隐式重启的 Arnoldi 方法（Implicitly Restarted Arnoldi Methods，简记为 IRAM），来求解 BdG 方程的特征值和特征函数。

（三）应用 SFSC-IRAM 算法研究 BdG 方程的特征值和特征函数。

我们首先测试 SFSC-IRAM 算法的精度，再应用 SFSC-IRAM 算法研究不同的简谐位势、偶极朝向和相互作用强度对 BdG 方程的特征值和特征函数的影响。在任意局部（或非局部）相互作用强度下，都存在与简谐位势约束频率相等的特征值 ω 。BdG 方程的特征函数 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) 沿约束频率较大的方向压缩。在对称简谐位势下，特征函数 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) 沿偶极方向是对称（或反对称）的。

1.4 结构安排

文章具体规划如下：

第一章简要介绍 BEC，DBEC，BdG 方程的研究背景和已有的研究成果。

第二章简要介绍描述 DBEC 的 GP 方程，并推导出其稳态解附近激发的 BdG 方程。

第三章研究 BdG 方程的解析性质，重点研究其在不同条件下的特殊解析解。

第四章提出计算 DDI 的 SFSC 算法，并将 SFSC 算法、Fourier 谱方法和 IRAM 方法相结合，提出 SFSC-IRAM 算法。

第五章通过大量数值算例来验证 SFSC-IRAM 算法的有效性，并应用 SFSC-IRAM 算法计算不同参数的 BdG 方程的特征值和特征向量。

第六章总结本文的主要内容，并展望未来的工作。

第二章 关于 Bogoliubov-de Gennes 方程的介绍

本章第一节通过 GP 方程描述 DBEC，第二节研究其稳态附近的 BdG 方程。

2.1 偶极玻色-爱因斯坦凝聚态

在低于临界温度 T_c 时，具有 DDI 的 BEC 的宏观行为由如下 GP 方程^[6] 来描述：

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

$$\Phi(\mathbf{x}, t) := (U * |\psi|^2)(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad t \geq 0, \quad (2-2)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t=0) = \psi_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (2-3)$$

其中， t 是时间， $\mathbf{x} = (x, y)^T \in \mathbb{R}^2$ 和 $\mathbf{x} = (x, y, z)^T \in \mathbb{R}^3$ ， $V(\mathbf{x})$ 是实值位势函数，常见的简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 是

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \begin{cases} \gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2, & d = 2, \\ \gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2, & d = 3, \end{cases} \quad (2-4)$$

其中， $\gamma_v > 0$ ($v = x, y, z$)，与 v 方向的约束频率成正比， β 和 λ 代表短程和长程相互作用的强度， $\Phi(\mathbf{x}, t)$ 是 DDI， $*$ 是空间变量的卷积算子，相互作用函数 $U(\mathbf{x})$ 是

$$U(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\delta(\mathbf{x}) - 3 \partial_{\mathbf{m}} \left(\frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} \right), & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \\ -\frac{3}{2} \left(\partial_{\mathbf{n}_\perp \mathbf{n}_\perp} - n_3^2 \nabla_\perp^2 \right) \left(\frac{1}{2\pi|\mathbf{x}|} \right), & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2, \end{cases} \quad (2-5)$$

其中， $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)^T \in \mathbb{R}^3$ 是偶极朝向，且 $|\mathbf{n}| = 1$ ， $\partial_{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \nabla$ ， $\partial_{\mathbf{m}} = \partial_{\mathbf{n}}(\partial_{\mathbf{n}})$ ， $\nabla_\perp = (\partial_x, \partial_y)^T$ ， $\mathbf{n}_\perp = (n_1, n_2)^T$ ， $\partial_{\mathbf{n}_\perp} = \mathbf{n}_\perp \cdot \nabla_\perp$ ， $\partial_{\mathbf{n}_\perp \mathbf{n}_\perp} = \partial_{\mathbf{n}_\perp}(\partial_{\mathbf{n}_\perp})$ 。

上述 GP 方程 (2-1)-(2-3) 满足两个重要的守恒定律，即质量守恒

$$N(\psi(\cdot, t)) := \|\psi(\mathbf{x}, t)\|^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |\psi|^2 d\mathbf{x} \equiv N(\psi(\cdot, 0)), \quad t \geq 0, \quad (2-6)$$

能量守恒

$$E(\psi(\cdot, t)) = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla\psi|^2 + V(\mathbf{x})|\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{\lambda}{2} \Phi |\psi|^2 \right] d\mathbf{x} \equiv E(\psi(\cdot, 0)), \quad t \geq 0. \quad (2-7)$$

如果波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 具有变量分离形式

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{i\mu_s t} \phi_s(\mathbf{x}), \quad (2-8)$$

那么, 称 $\phi_s(\mathbf{x})$ 为稳态解。将 (2-8) 代入 (2-1)-(2-2), 得到如下非线性特征值问题:

$$\mu_s \phi_s(\mathbf{x}) = \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) + \beta |\phi_s|^2 + \lambda (U * |\phi_s|^2) \right] \phi_s(\mathbf{x}), \quad (2-9)$$

$\phi_s(\mathbf{x})$ 是 (2-9) 的特征函数, $\mu_s \in \mathbb{R}$ 是 (2-9) 的特征值, 也称为化学势。化学势 μ_s 还可以表示成

$$\mu_s = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla \phi_s|^2 + V(\mathbf{x}) |\phi_s|^2 + \beta |\phi_s|^4 + \lambda (U * |\phi_s|^2) |\phi_s|^2 \right] \mathbf{d}\mathbf{x}. \quad (2-10)$$

我们将能量最低的稳态解 $\phi_s(\mathbf{x})$ 称为基态解, 记为 $\phi_g(\mathbf{x})$, 同时基态解 $\phi_g(\mathbf{x})$ 也可以定义为如下泛函问题的极小子:

$$\phi_g(\mathbf{x}) = \arg \min_{\phi \in \mathcal{S}} E(\phi), \quad (2-11)$$

其中

$$\mathcal{S} := \{ \phi(\mathbf{x}) \mid \|\phi\|^2 := \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(\mathbf{x})|^2 \mathbf{d}\mathbf{x} = 1, \quad E(\phi) < \infty \}. \quad (2-12)$$

关于基态解 ϕ_g 存在性和唯一性的相关结论, 可参见 Bao 和 Cai 的文献^[6]。

在二维空间中, 如果下面条件之一成立, 则基态解 ϕ_g 存在:

(1) $\lambda = 0$ 且 $\beta > -C_b$; (2) $\lambda > 0$, $n_3 = 0$ 且 $\beta > -C_b$; (3) $\lambda < 0$, $n_3^2 \geq \frac{1}{2}$ 且 $\beta > -C_b$ 。

如果下面条件之一成立, 则正的基态解 $|\phi_g|$ 是唯一的:

(1) $\lambda = 0$ 且 $\beta \geq 0$; (2) $\lambda > 0$, $n_3 = 0$ 且 $\beta \geq 0$; (3) $\lambda < 0$, $n_3^2 \geq \frac{1}{2}$ 且 $\beta \geq 0$ 。

在三维空间中, 如果 $\beta \geq 0$ 且 $-\frac{1}{2}\beta \leq \lambda \leq \beta$, 则基态解 ϕ_g 存在, 且正的基态解 $|\phi_g|$ 是唯一的。关于更多基态解的介绍, 文献^[6]中有详细说明。

2.2 Bogoliubov-de Gennes 方程

我们考虑 GP 方程 (2-1)-(2-3) 在稳态解 $\phi_s(\mathbf{x})$ 附近的激发行为, 其行为可由 Bogoliubov 理论^[5,26,37,43] 来描述。从 GP 方程 (2-1)-(2-3) 的稳态解 $\phi_s(\mathbf{x})$ 出发, 将波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 写成

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i\mu_s t} \left[\phi_s(\mathbf{x}) + p \sum_{j \in \mathbb{N}} \left(u_j(\mathbf{x}) e^{-i\omega_j t} + \bar{v}_j(\mathbf{x}) e^{i\omega_j t} \right) \right], \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad t > 0, \quad (2-13)$$

其中, \bar{v}_j 是 v_j 的复共轭, $0 < p \ll 1$ 是一个微小扰动, $\omega_j \in \mathbb{R}$ 是激发频率, $u_j(\mathbf{x})$

和 $v_j(\mathbf{x})$ 是相应的 Bogoliubov 激发状态，满足归一化条件

$$\int_{\mathbb{R}^d} (|u_j(\mathbf{x})|^2 - |v_j(\mathbf{x})|^2) d\mathbf{x} = 1, \quad j \in \mathbb{N}. \quad (2-14)$$

对波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ (2-13) 关于 t 方向求偏导，得到

$$\begin{aligned} \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = & -i\omega_j e^{-i\mu_s t} p \sum_{j \in \mathbb{N}} (u_j(\mathbf{x}) e^{-i\omega_j t} + \bar{v}_j(\mathbf{x}) e^{i\omega_j t}) \\ & -i\mu_s e^{-i\mu_s t} \left[\phi_s(\mathbf{x}) + p \sum_{j \in \mathbb{N}} (u_j(\mathbf{x}) e^{-i\omega_j t} + \bar{v}_j(\mathbf{x}) e^{i\omega_j t}) \right], \end{aligned} \quad (2-15)$$

将 (2-13), (2-15) 代入 (2-1)-(2-2) 中，保留关于 p 的线性项，得到

$$\begin{aligned} & \mu_s (u_j e^{-i\omega_j t} + \bar{v}_j e^{i\omega_j t}) + \omega_j (u_j e^{-i\omega_j t} - \bar{v}_j e^{i\omega_j t}) = \\ & -\frac{1}{2} (\Delta u_j e^{-i\omega_j t} + \Delta \bar{v}_j e^{i\omega_j t}) + V(\mathbf{x}) (u_j e^{-i\omega_j t} + \bar{v}_j e^{i\omega_j t}) \\ & + 2\beta |\phi_s|^2 (u_j e^{-i\omega_j t} + \bar{v}_j e^{i\omega_j t}) + \beta \phi_s^2 (v_j e^{-i\omega_j t} + \bar{u}_j e^{i\omega_j t}) \\ & + \lambda \phi_s \left\{ U * [(v_j e^{-i\omega_j t} + \bar{u}_j e^{i\omega_j t}) \phi_s] \right\} + \lambda \phi_s \left\{ U * [(u_j e^{-i\omega_j t} + \bar{v}_j e^{i\omega_j t}) \bar{\phi}_s] \right\} \\ & + \lambda (u_j e^{-i\omega_j t} + \bar{v}_j e^{i\omega_j t}) (U * |\phi_s|^2), \end{aligned}$$

按频率 $e^{-i\omega_j t}$ 和 $e^{i\omega_j t}$ 展开，可得到 BdG 方程

$$\mathcal{L}_{\text{GP}} u_j + \beta |\phi_s|^2 u_j + \beta \phi_s^2 v_j + \lambda [U * (\bar{\phi}_s u_j + \phi_s v_j)] \phi_s = \omega_j u_j, \quad (2-16)$$

$$\mathcal{L}_{\text{GP}} v_j + \beta \bar{\phi}_s^2 u_j + \beta |\phi_s|^2 v_j + \lambda [U * (\bar{\phi}_s u_j + \phi_s v_j)] \bar{\phi}_s = -\omega_j v_j, \quad (2-17)$$

其中

$$\mathcal{L}_{\text{GP}} := -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) + \beta |\phi_s|^2 + \lambda \Phi_s - \mu_s, \quad (2-18)$$

$$\Phi_s = U * |\phi_s|^2. \quad (2-19)$$

当不考虑相位^[6]因素的影响时，在适当的条件下，可证明稳态解 $\phi_s(\mathbf{x})$ 是唯一确定的。稳态解 ϕ_s 所对应的 BdG 方程的特征对为 (ω_j, u_j, v_j) ，那么稳态解 $e^{i\theta} \phi_s$ 所对应的 BdG 方程的特征对为 $(\omega_j, e^{i\theta} u_j, e^{-i\theta} v_j)$ 。为简化表示，下文中删除 u_j, v_j, w_j 的所有下标，并分别将它们不加区分地写成 u, v, w 。

定义以下算子

$$\mathcal{L}_{11} := \mathcal{L}_{\text{GP}} + \beta |\phi_s|^2 + \lambda \hat{\chi}_1, \quad \mathcal{L}_{12} := \beta \phi_s^2 + \lambda \hat{\chi}_2, \quad (2-20)$$

$$\mathcal{L}_{21} := -\beta \bar{\phi}_s^2 - \lambda \hat{\chi}_2^*, \quad \mathcal{L}_{22} := -\mathcal{L}_{\text{GP}} - \beta |\phi_s|^2 - \lambda \hat{\chi}_1^*, \quad (2-21)$$

其中， $\hat{\chi}_j$ 和 $\hat{\chi}_j^*$ ($j = 1, 2$) 为非局部算子，定义为

$$\hat{\chi}_1(\xi) := \phi_s [U * (\bar{\phi}_s \xi)], \quad \hat{\chi}_2(\xi) := \phi_s [U * (\phi_s \xi)], \quad (2-22)$$

$$\hat{\chi}_1^*(\xi) := \bar{\phi}_s [U * (\phi_s \xi)], \quad \hat{\chi}_2^*(\xi) := \bar{\phi}_s [U * (\bar{\phi}_s \xi)]. \quad (2-23)$$

带约束条件 (2-14) 的 BdG 方程 (2-16)-(2-17) 可以被改写为

$$\begin{pmatrix} \mathcal{L}_{11} & \mathcal{L}_{12} \\ \mathcal{L}_{21} & \mathcal{L}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (2-24)$$

约束条件为

$$\int_{\mathbb{R}^d} (|u(\mathbf{x})|^2 - |v(\mathbf{x})|^2) d\mathbf{x} = 1. \quad (2-25)$$

通过变量替换

$$u(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}), \quad v(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x}), \quad (2-26)$$

将 (2-24) 转化为

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{11} + \mathcal{L}_{12} + \mathcal{L}_{21} + \mathcal{L}_{22} & \mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{12} + \mathcal{L}_{21} - \mathcal{L}_{22} \\ \mathcal{L}_{11} + \mathcal{L}_{12} - \mathcal{L}_{21} - \mathcal{L}_{22} & \mathcal{L}_{11} - \mathcal{L}_{12} - \mathcal{L}_{21} + \mathcal{L}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}. \quad (2-27)$$

特别地, 当稳态解 ϕ_s 为实值函数时, 所有非局部算子都是相同的, 即

$$\hat{\chi}_1 \equiv \hat{\chi}_2 \equiv \hat{\chi}_1^* \equiv \hat{\chi}_2^*. \quad (2-28)$$

此时, (2-27) 可简化为

$$\begin{pmatrix} 0 & \mathcal{L}_{\text{GP}} \\ \mathcal{L}_{\text{GP}} + 2\beta|\phi_s|^2 + 2\lambda\hat{\chi}_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \quad (2-29)$$

即

$$H_+ f(\mathbf{x}) = \omega g(\mathbf{x}), \quad H_- g(\mathbf{x}) = \omega f(\mathbf{x}), \quad (2-30)$$

其中,

$$H_- := \mathcal{L}_{\text{GP}}, \quad H_+ := \mathcal{L}_{\text{GP}} + 2\beta|\phi_s|^2 + 2\lambda\hat{\chi}_1. \quad (2-31)$$

对应 (2-25) 的归一化条件为

$$\int_{\mathbb{R}^d} \Re(f(\mathbf{x}) \bar{g}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} = \frac{1}{4}, \quad (2-32)$$

其中, $\Re(\alpha)$ 表示数值 α 的实值部分。所以, 可以得到一个关于 $f(\mathbf{x})$ 和 $g(\mathbf{x})$ 的特征问题

$$(H_- H_+) f(\mathbf{x}) = \omega^2 f(\mathbf{x}), \quad (H_+ H_-) g(\mathbf{x}) = \omega^2 g(\mathbf{x}). \quad (2-33)$$

在本文中, 我们只研究稳态解 ϕ_s 为实值函数的情况, 首先通过 (2-33) 求解 f (或 g), 再通过 (2-30) 计算 g (或 f), 然后通过变量替换 (2-26) 得到 u, v , 最后对 u, v 同时进行伸缩, 使其满足归一化条件 (2-25)。

2.3 本章小结

DBEC 的宏观行为满足 GP 方程 (2-1)-(2-3), GP 方程满足质量守恒定律和能量守恒定律。如果 GP 方程有稳态解, 我们可以通过 BdG 方程来研究其稳态附近的 Bogoliubov 激发。通过将波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ (2-13) 带入 GP 方程, 得到 BdG 方程 (2-16)-(2-17), 通过变量替换 (2-26) 将 BdG 方程 (2-16)-(2-17) 转化为 (2-27)。当稳态解 $\phi_s(\mathbf{x})$ 是实值函数时, 所有非局部算子均相同, 此时方程 (2-27) 可简化为方程 (2-30), 这样我们就可以得到关于 $f(\mathbf{x})$ 和 $g(\mathbf{x})$ 的特征值问题 (2-33)。在实际计算中, 通过求解 $f(\mathbf{x})$ 和 $g(\mathbf{x})$, 得到满足归一化条件的 BdG 方程的解 $u(\mathbf{x})$ 和 $v(\mathbf{x})$ 。

第三章 Bogoluibov-de Gennes 方程的解析性质

本章主要介绍 BdG 方程的在不同限定条件下的解析性质。

3.1 一般位势下的性质

对于一般位势 $V(\mathbf{x})$, 稳态解附近的 BdG 方程有以下结果:

引理 3.1 如果 $\{u, v, \omega\}$ ($\omega \in \mathbb{C}$) 是 BdG 方程 (2-24) 的一对解, 则 $\{\bar{v}, \bar{u}, -\bar{\omega}\}$ 也是 BdG 方程 (2-24) 的一对解, 并且

$$(\omega - \bar{\omega}) \int_{\mathbb{R}^d} (|u(\mathbf{x})|^2 - |v(\mathbf{x})|^2) d\mathbf{x} = 0. \quad (3-1)$$

此外, 如果 $u(\mathbf{x}), v(\mathbf{x})$ 满足归一化条件 (2-25), 则特征值 ω 是实值的。

证明:

在 BdG 方程 (2-16)-(2-17) 的等式两边同时取共轭, 可得

$$\mathcal{L}_{\text{GP}} \bar{u} + \beta(\bar{\phi}_s)^2 \bar{v} + \beta|\phi_s|^2 \bar{u} + \lambda U * (\bar{\phi}_s \bar{v} + \phi_s \bar{u}) \bar{\phi}_s = \bar{\omega} \bar{u}, \quad (3-2)$$

$$\mathcal{L}_{\text{GP}} \bar{v} + \beta|\phi_s|^2 \bar{v} + \beta\phi_s^2 \bar{u} + \lambda U * (\bar{\phi}_s \bar{v} + \phi_s \bar{u}) \phi_s = -\bar{\omega} \bar{v}, \quad (3-3)$$

可得到 $\{\bar{v}, \bar{u}, -\bar{\omega}\}$ 也是 BdG 方程 (2-16)-(2-17) 的一对解。

\bar{u} 和 \bar{v} 分别乘 BdG 方程 (2-16) 和 (2-17), 积分可得

$$\begin{aligned} \omega \int_{\mathbb{R}^d} |u(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} &= \int_{\mathbb{R}^d} \left\{ \frac{1}{2} |\nabla u(\mathbf{x})|^2 + (V + 2\beta|\phi_s|^2 + \lambda\Phi_s - \mu_s) |u(\mathbf{x})|^2 \right. \\ &\quad \left. + \beta\phi_s^2 \bar{u}v + \lambda[\bar{u}\hat{\chi}_1(u) + \bar{u}\hat{\chi}_2(v)] \right\} d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (3-4)$$

$$\begin{aligned} -\omega \int_{\mathbb{R}^d} |v(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} &= \int_{\mathbb{R}^d} \left\{ \frac{1}{2} |\nabla v(\mathbf{x})|^2 + (V + 2\beta|\phi_s|^2 + \lambda\Phi_s - \mu_s) |v(\mathbf{x})|^2 \right. \\ &\quad \left. + \beta\bar{\phi}_s^2 \bar{v}u + \lambda[\bar{v}\hat{\chi}_2^*(u) + \bar{v}\hat{\chi}_1^*(v)] \right\} d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (3-5)$$

(3-4) 与 (3-5) 相加, 可得

$$\begin{aligned} &\omega \int_{\mathbb{R}^d} (|u(\mathbf{x})|^2 - |v(\mathbf{x})|^2) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \left\{ \frac{1}{2} (|\nabla u(\mathbf{x})|^2 + |\nabla v(\mathbf{x})|^2) + (V + 2\beta|\phi_s|^2 + \lambda\Phi_s - \mu_s) (|u(\mathbf{x})|^2 + |v(\mathbf{x})|^2) \right. \\ &\quad \left. + \beta(\phi_s^2 \bar{u}v + \bar{\phi}_s^2 \bar{v}u) + \lambda[\bar{u}\hat{\chi}_1(u) + \bar{u}\hat{\chi}_2(v) + \bar{v}\hat{\chi}_2^*(u) + \bar{v}\hat{\chi}_1^*(v)] \right\} d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (3-6)$$

对 (3-6) 取共轭, 可得

$$\begin{aligned} & \bar{\omega} \int_{\mathbb{R}^d} (|u(\mathbf{x})|^2 - |v(\mathbf{x})|^2) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \left\{ \frac{1}{2} (|\nabla u(\mathbf{x})|^2 + |\nabla v(\mathbf{x})|^2) + (V + 2\beta|\phi_s|^2 + \lambda\Phi_s - \mu_s)(|u(\mathbf{x})|^2 + |v(\mathbf{x})|^2) \right. \\ & \quad \left. + \beta(\bar{\phi}_s^2 u \bar{v} + \phi_s^2 v \bar{u}) + \lambda[u\hat{\chi}_1^*(\bar{u}) + u\hat{\chi}_2^*(\bar{v}) + v\hat{\chi}_2(\bar{u}) + v\hat{\chi}_1(\bar{v})] \right\} d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (3-7)$$

因为

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} u\hat{\chi}_1^*(\bar{u}) d\mathbf{x} &= \int_{\mathbb{R}^d} (u\bar{\phi}_s) [U * (\phi_s \bar{u})] d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} u(\mathbf{x}) \bar{u}(\mathbf{x}') \bar{\phi}_s(\mathbf{x}) \phi_s(\mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} u(\mathbf{x}') \bar{u}(\mathbf{x}) \bar{\phi}_s(\mathbf{x}') \phi_s(\mathbf{x}) U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} (\bar{u}\phi_s) [U * \phi_s u] d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{u}\hat{\chi}_1(u) d\mathbf{x}, \end{aligned}$$

同理

$$\int_{\mathbb{R}^d} u\hat{\chi}_2^*(\bar{v}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{v}\hat{\chi}_2^*(u) d\mathbf{x}, \quad \int_{\mathbb{R}^d} v\hat{\chi}_2(\bar{u}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{u}\hat{\chi}_2(v) d\mathbf{x}, \quad \int_{\mathbb{R}^d} v\hat{\chi}_1(\bar{v}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{v}\hat{\chi}_1(v) d\mathbf{x}.$$

所以, (3-6) 与 (3-7) 相减得到 (3-1), 当 $u(\mathbf{x}), v(\mathbf{x})$ 满足归一化条件 (2-25) 时, 特征值 ω 是实值的。 \square

注意: 引理 3.1 中, 在归一化条件 (2-25) 下, BdG 方程 (2-24) 的特征值只能是实值; 只有在 $\|u\| = \|v\|$ 成立时, BdG 方程才可能存在复特征值。在本文中, 我们只研究归一化条件下的 BdG 方程的实特征值。

3.2 简谐位势下的性质

对于简谐位势 $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha}^2 \alpha^2$, 二维空间 $\alpha = x, y$, 三维空间 $\alpha = x, y, z$, 对相应的 Bogoliubov 激发有以下结果:

引理 3.2 若 GP 方程 (2-1)-(2-3) 的稳态解 ϕ_s 是实值函数, 则 BdG 方程 (2-24) 始终存在满足归一化条件 (2-25) 的解析解:

$$\{u_{\alpha}, v_{\alpha}, \omega_{\alpha}\} =: \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_{\alpha}^{-1/2} \partial_{\alpha} \phi_s - \gamma_{\alpha}^{1/2} \alpha \phi_s), \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_{\alpha}^{-1/2} \partial_{\alpha} \phi_s + \gamma_{\alpha}^{1/2} \alpha \phi_s), \gamma_{\alpha} \right\}, \quad (3-8)$$

二维空间中 $\alpha = x, y$, 三维空间中 $\alpha = x, y, z$ 。

证明: 在二维空间中, $\alpha = x, y$, 实值函数 ϕ_s 是 GP 方程 (2-1)-(2-3) 的稳态解。DDI 项 Φ_s 和非局部算子 $\hat{\chi}_1$ 满足如下关系

$$\phi_s \partial_x \Phi_s = \phi_s \partial_x (U * |\phi_s|^2) = 2\phi_s [U * (\phi_s \partial_x \phi_s)] = 2\hat{\chi}_1(\partial_x \phi_s),$$

稳态解 ϕ_s 满足欧拉-拉格朗日方程 (2-9)，对方程 (2-9) 关于 x 变量求偏导，可得

$$\mu_s(\partial_x \phi_s) = \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V + 3\beta|\phi_s|^2 + \lambda\Phi_s + 2\lambda\hat{\chi}_1 \right)(\partial_x \phi_s) + \gamma_x^2 x \phi_s, \quad (3-9)$$

即

$$H_+(\partial_x \phi_s) = \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V + 3\beta|\phi_s|^2 + \lambda\Phi_s + 2\lambda\hat{\chi}_1 - \mu_s \right)(\partial_x \phi_s) = \gamma_x(-\gamma_x x \phi_s). \quad (3-10)$$

∇^2 算子作用于 $x\phi_s$ ，可得

$$\nabla^2(x\phi_s) = x(\nabla^2\phi_s) + 2\partial_x\phi_s,$$

H_- 算子作用于 $-\gamma_x x \phi_s$ ，并结合方程 (2-9)，可得

$$H_-(-\gamma_x x \phi_s) = \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V + \beta|\phi_s|^2 + \lambda\Phi_s - \mu_s \right)(-\gamma_x x \phi_s) = \gamma_x(\partial_x \phi_s). \quad (3-11)$$

所以， $(\gamma_x, \partial_x \phi_s, -\gamma_x x \phi_s)$ 是方程 (2-30) 的解。利用分部积分公式，可得

$$\begin{aligned} -\int_{\mathbb{R}^2} \gamma_x x \phi_s \partial_x \phi_s dx dy &= -\frac{\gamma_x}{2} \int_{\mathbb{R}} dy \left(\int_{\mathbb{R}} x \partial_x \phi_s^2 dx \right) \\ &= -\frac{\gamma_x}{2} \int_{\mathbb{R}} dy \left(x \phi_s^2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}} \phi_s^2 dx \right) = \frac{\gamma_x}{2} \int_{\mathbb{R}^2} \phi_s^2 dx dy = \frac{\gamma_x}{2}, \end{aligned}$$

对 $(\partial_x \phi_s, -\gamma_x x \phi_s)$ 做伸缩变换，得到满足归一化条件 (2-32) 的 BdG 方程 (2-33) 的特征解

$$(f, g) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \gamma_x^{-\frac{1}{2}} \partial_x \phi_s, -\frac{1}{\sqrt{2}} \gamma_x^{\frac{1}{2}} x \phi_s \right).$$

利用变量替换 (2-26)，得到解析解

$$\omega_x = \gamma_x, \quad u_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\gamma_x^{-\frac{1}{2}} \partial_x \phi_s - \gamma_x^{\frac{1}{2}} x \phi_s \right), \quad v_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\gamma_x^{-\frac{1}{2}} \partial_x \phi_s + \gamma_x^{\frac{1}{2}} x \phi_s \right).$$

对于 $\alpha = y$ ，同理可证成立。在三维空间中， $\alpha = x, y, z$ ，由类似证明，结论成立。 \square

3.3 Thomas-Fermi 极限下的性质

在 TF 极限下 ($\beta \gg 1$)，对于柱对称的简谐位势 $V(\mathbf{x}) = \frac{\gamma_x^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\gamma_z^2}{2}z^2$ ，当偶极朝向 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ 时，关于 DBEC 的基态解 $\phi_g(\mathbf{x})$ 和相应的 Bogoliubov 激发，我们有以下结果：

引理 3.3 在 TF 极限下 ($\beta \gg 1$)，当偶极朝向为 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ ，取柱对称简谐位势 $V(\mathbf{x}) = \frac{\gamma_x^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\gamma_z^2}{2}z^2$ 时，GP 方程 (2-1)-(2-3) 的基态解 $\phi_g(\mathbf{x})$ 可由 $\phi_g^{\text{TF}}(\mathbf{x})$ [21]

逼近, 即

$$\phi_g(\mathbf{x}) \approx \phi_g^{\text{TF}}(\mathbf{x}) := \sqrt{\frac{15}{8\pi R_x^2 R_z} \left(1 - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} - \frac{z^2}{R_z^2}\right)}, \quad (3-12)$$

化学势 μ_g^{TF} 为

$$\mu_g^{\text{TF}} = \frac{15(\beta - \lambda \eta(\kappa))}{8\pi R_x^2 R_z}, \quad (3-13)$$

其中, $f_+(\mathbf{x}) := \max\{0, f(\mathbf{x})\}$, $R_x = R_y$,

$$\eta(\kappa) := \begin{cases} \frac{1+2\kappa^2}{1-\kappa^2} - \frac{3\kappa^2 \operatorname{arctanh}(\sqrt{1-\kappa^2})}{(1-\kappa^2)^{3/2}}, & \kappa \leq 1, \\ \frac{1+2\kappa^2}{\kappa^2-1} - \frac{3\kappa^2 \operatorname{arctan}(\sqrt{\kappa^2-1})}{(\kappa^2-1)^{3/2}}, & \kappa > 1, \end{cases} \quad (3-14)$$

比例系数 $\kappa := R_x/R_z$ 由以下超越方程决定,

$$\frac{3\lambda\kappa^2}{\beta} \left[\left(\frac{1}{2} \frac{\gamma_z^2}{\gamma_x^2} + 1 \right) \frac{\eta(\kappa)}{1-\kappa^2} - 1 \right] + \left(\frac{\lambda}{\beta} - 1 \right) \left(\kappa^2 - \frac{\gamma_z^2}{\gamma_x^2} \right) = 0, \quad (3-15)$$

半径 R_x 为

$$R_x = \left\{ \frac{15\kappa}{4\pi\gamma_x^2} \beta \left[1 + \frac{\lambda}{\beta} \left(\frac{3\kappa^2 \eta(\kappa)}{2(1-\kappa^2)} - 1 \right) \right] \right\}^{\frac{1}{5}}. \quad (3-16)$$

当 $\beta \rightarrow \infty$ 时, $R_x, R_y, R_z, \mu_g^{\text{TF}}$ 有以下渐近估计:

$$R_x = R_y = \mathcal{O}(\beta^{1/5}), \quad R_z = \mathcal{O}(\beta^{1/5}), \quad \mu_g^{\text{TF}} = \mathcal{O}(\beta^{2/5}), \quad \beta \rightarrow \infty. \quad (3-17)$$

证明: 在 TF 极限下 ($\beta \gg 1$), 我们首先证明方程 (3-15) 的解存在且唯一。

其中, $\eta(\kappa)$ 的定义为

$$\eta(\kappa) := \begin{cases} \frac{1+2\kappa^2}{1-\kappa^2} - \frac{3\kappa^2 \operatorname{arctanh}(\sqrt{1-\kappa^2})}{(1-\kappa^2)^{3/2}}, & \kappa \leq 1, \\ \frac{1+2\kappa^2}{\kappa^2-1} - \frac{3\kappa^2 \operatorname{arctan}(\sqrt{\kappa^2-1})}{(\kappa^2-1)^{3/2}}, & \kappa > 1, \end{cases} \quad (3-18)$$

$\lim_{\kappa \rightarrow 1} \eta(\kappa) = 0$, $\lim_{\kappa \rightarrow \infty} \eta(\kappa) = -2$, $\eta(\kappa)$ 在 $[0, \infty)$ 上连续有界且单调递减, 值域为 $(-2, 1]$ 。定义 $F(\kappa)$ 为

$$F(\kappa) := \frac{3\lambda\kappa^2}{\beta} \left[\left(\frac{\gamma^2}{2} + 1 \right) \frac{\eta(\kappa)}{1-\kappa^2} - 1 \right] + \left(\frac{\lambda}{\beta} - 1 \right) (\kappa^2 - \gamma^2), \quad (3-19)$$

其中, $\gamma = \frac{\gamma_z}{\gamma_x}$ 。定义 $H(\kappa) := \frac{\kappa^2 \eta(\kappa)}{1-\kappa^2}$, $\lim_{\kappa \rightarrow 1} H(\kappa) = \frac{2}{5}$, $\lim_{\kappa \rightarrow \infty} H(\kappa) = 2$, $H(\kappa)$ 在 $[0, \infty)$ 上连续且有界。整理 (3-19), 得到

$$F(\kappa) = \frac{3\lambda}{\beta} \left(\frac{\gamma^2}{2} + 1 \right) H(\kappa) - \left(\frac{2\lambda}{\beta} + 1 \right) \kappa^2 - \frac{\lambda}{\beta} \gamma^2 + \gamma^2, \quad (3-20)$$

$F(\kappa)$ 在 $[0, \infty)$ 上连续。当 $\beta \gg 1$ 时, $F(0) = \gamma^2 > 0$, $\lim_{\kappa \rightarrow \infty} F(\kappa) = -\infty$, 根据介值定理, $F(\kappa)$ 在 $[0, \infty)$ 上存在零点, 方程 (3-15) 的解存在。

$F(\kappa)$ 对 κ 求导, 得到

$$F'(\kappa) = \frac{3\lambda}{\beta} \left(\frac{\gamma^2}{2} + 1 \right) H'(\kappa) - \frac{4\lambda}{\beta} \kappa - 2\kappa, \quad (3-21)$$

其中,

$$H'(\kappa) = \begin{cases} -\frac{\kappa(2+13\kappa^2)}{(1-\kappa^2)^3} - \frac{3\kappa^3(4+\kappa^2)\operatorname{arctanh}(\sqrt{1-\kappa^2})}{(1-\kappa^2)^{7/2}}, & \kappa \leq 1, \\ -\frac{\kappa(2+13\kappa^2)}{(\kappa^2-1)^3} - \frac{3\kappa^3(4+\kappa^2)\operatorname{arctan}(\sqrt{\kappa^2-1})}{(\kappa^2-1)^{7/2}}, & \kappa > 1, \end{cases} \quad (3-22)$$

$\lim_{\kappa \rightarrow 1} H'(\kappa) = \frac{16}{35}$, $\lim_{\kappa \rightarrow \infty} H'(\kappa) = 0$, $H'(\kappa)$ 在 $[0, \infty)$ 上连续且有界。整理 (3-21), 得到

$$F'(\kappa) = \frac{3\lambda}{\beta} \left(\frac{\gamma^2}{2} + 1 \right) H'(\kappa) - \left(\frac{4\lambda}{\beta} + 2 \right) \kappa, \quad (3-23)$$

我们可以证明, 当 $\beta \gg 1$ 时, $F'(\kappa) < 0$ 在 $(0, \infty)$ 上恒成立, $F(\kappa)$ 在 $[0, \infty)$ 上严格单调递减, 方程 (3-15) 的解是唯一的。

接下来, 当 $\beta \rightarrow \infty$ 时, 我们估计 $R_x, R_y, R_z, \mu_g^{\text{TF}}$ 的渐近行为。

将方程 (3-15) 改写为

$$\frac{\lambda}{\beta} = \frac{\kappa^2 - \gamma^2}{3\left(\frac{\gamma^2}{2} + 1\right)\frac{\kappa^2\eta(\kappa)}{1-\kappa^2} - 2\kappa^2 - \gamma^2} = \frac{1 - \frac{\gamma^2}{\kappa^2}}{3\left(\frac{\gamma^2}{2} + 1\right)\frac{\eta(\kappa)}{1-\kappa^2} - 2 - \frac{\gamma^2}{\kappa^2}}, \quad (3-24)$$

当 $\beta \rightarrow \infty$ 时, 假设 $\kappa(\beta) \rightarrow \infty$, (3-24) 的等号右边是 $-\frac{1}{2}$, 等号左边为 0, 假设不成立, $\kappa(\beta)$ 为有界值。整理 (3-16), 可得

$$R_x = [c_1(\beta + c_2)]^{\frac{1}{5}}, \quad (3-25)$$

其中, $c_1 = \frac{15\kappa}{4\pi\gamma_x^2}$, $c_2 = \lambda \left[\frac{3\kappa^2\eta(\kappa)}{2(1-\kappa^2)} - 1 \right] = \lambda \left[\frac{3}{2}H(\kappa) - 1 \right]$, 均为有界量。

当 $\beta \rightarrow \infty$ 时, $R_x, R_y, R_z, \mu_g^{\text{TF}}$ 有以下渐近估计:

$$R_x = R_y = O(\beta^{1/5}), \quad R_z = O(\beta^{1/5}), \quad \mu_g^{\text{TF}} = O(\beta^{2/5}), \quad \beta \rightarrow \infty. \quad (3-26)$$

□

引理 3.4 在 TF 极限下 ($\beta \gg 1$), 当偶极朝向为 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$, 我们取柱对称简谐位势 $V(\mathbf{x}) = \frac{\gamma_x^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\gamma_z^2}{2}z^2$ 。那么, 当 $\beta \rightarrow \infty$ 时, BdG 方程 (2-16)-(2-17) 的特征值 $\omega_\beta \rightarrow \omega_\infty$, 其中, ω_∞ 满足如下方程:

$$\begin{aligned} (\omega_\infty)^2 q(\mathbf{x}) = & - \left[1 - \frac{1}{2}(\gamma_x^2 x^2 + \gamma_x^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2) \right] \Delta q(\mathbf{x}) \\ & + (\gamma_x^2 x \partial_x + \gamma_y^2 y \partial_y + \gamma_z^2 z \partial_z) q(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D_\infty, \end{aligned} \quad (3-27)$$

定义域为

$$D_\infty := \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid 1 - \frac{1}{2}(\gamma_x^2 x^2 + \gamma_x^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2) \geq 0 \right\}.$$

特别地，当我们取各向同性简谐位势

$$\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = \sqrt{2},$$

特征值的表达式为

$$\omega_{\infty}^{l,k} = \sqrt{2} \sqrt{l+3k+2kl+2k^2}, \quad l \geq 0, \quad k \geq 0. \quad (3-28)$$

证明：为了估计 $\beta \rightarrow \infty$ 时的 ω_{β} ，我们首先引入坐标变换

$$\tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{\sqrt{\mu_g}}, \quad \tilde{\phi}_g(\tilde{\mathbf{x}}) = \sqrt{\frac{\beta}{\mu_g}} \phi_g(\mathbf{x}), \quad (3-29)$$

并定义

$$\tilde{\Phi}_g(\tilde{\mathbf{x}}) := (U * |\tilde{\phi}_g|^2)(\tilde{\mathbf{x}}), \quad (3-30)$$

可推导出以下公式

$$\tilde{\Phi}_g(\tilde{\mathbf{x}}) = \frac{\beta}{\mu_g} \Phi_g(\mathbf{x}), \quad [\hat{\chi}(\tilde{f})](\tilde{\mathbf{x}}) = \frac{\beta}{\mu_g} [\hat{\chi}(f)](\mathbf{x}), \quad \tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}}) = f(\mathbf{x}). \quad (3-31)$$

BdG 方程 $H_+ H_- g = \omega^2 g$ ，变换为

$$\tilde{H}_+ \tilde{H}_- \tilde{g} = \frac{\omega^2}{\mu_g^2} \tilde{g}, \quad (3-32)$$

其中

$$\tilde{H}_+ = -\frac{1}{2\mu_g^2} \tilde{\nabla}^2 + \tilde{V}(\tilde{\mathbf{x}}) + 3|\tilde{\phi}_g|^2 + \frac{\lambda}{\beta} \tilde{\Phi}_g + 2\frac{\lambda}{\beta} \tilde{\chi} - 1, \quad (3-33)$$

$$\tilde{H}_- = -\frac{1}{2\mu_g^2} \tilde{\nabla}^2 + \tilde{V}(\tilde{\mathbf{x}}) + |\tilde{\phi}_g|^2 + \frac{\lambda}{\beta} \tilde{\Phi}_g - 1, \quad (3-34)$$

且

$$\tilde{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2},$$

$$\tilde{V}(\tilde{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} (\gamma_x^2 \tilde{x}^2 + \gamma_y^2 \tilde{y}^2 + \gamma_z^2 \tilde{z}^2).$$

特征值问题 (2-9) 转化为

$$\left[-\frac{1}{2\mu_g^2} \tilde{\nabla}^2 + \tilde{V}(\tilde{\mathbf{x}}) + |\tilde{\phi}_g|^2 + \frac{\lambda}{\beta} \tilde{\Phi}_g \right] \tilde{\phi}_g = \tilde{\phi}_g. \quad (3-35)$$

结合 (3-32)-(3-35)，可以得到

$$\begin{aligned} \frac{\omega^2}{\mu_g^2} \tilde{g} &= \left[-\frac{1}{2\mu_g^2} \tilde{\nabla}^2 + \tilde{V}(\tilde{\mathbf{x}}) + 3|\tilde{\phi}_g|^2 + \frac{\lambda}{\beta} \tilde{\Phi}_g + 2\frac{\lambda}{\beta} \tilde{\chi} - 1 \right] \\ &\quad \times \left[-\frac{1}{2\mu_g^2} \tilde{\nabla}^2 + \frac{1}{2\mu_g^2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi}_g \right] \tilde{g}. \end{aligned} \quad (3-36)$$

在 TF 极限下 ($\beta \gg 1$)， $\tilde{\phi}_g^{\text{TF}}$ 收敛于 $\tilde{\phi}_g^{\infty}(\tilde{\mathbf{x}})$ ，

$$\tilde{\phi}_g^{\infty}(\tilde{\mathbf{x}}) = \left(1 - \frac{1}{2} (\gamma_x^2 \tilde{x}^2 + \gamma_y^2 \tilde{y}^2 + \gamma_z^2 \tilde{z}^2) \right)_+^{\frac{1}{2}}, \quad \beta \rightarrow \infty. \quad (3-37)$$

在方程 (3-36) 中, 当 $\beta \rightarrow \infty$ 时, $\lambda/\beta \rightarrow 0$, 用 $\tilde{\phi}_g^{\text{TF}}$ 和 $\tilde{\mu}_g^{\text{TF}}$ 代替基态解 $\tilde{\phi}_g$ 和化学势 μ_g , 得到以下特征值问题

$$\begin{aligned} \frac{\omega^2}{(\mu_g^{\text{TF}})^2} \tilde{g} \approx & \left[-\frac{1}{2(\mu_g^{\text{TF}})^2} \tilde{\nabla}^2 + \tilde{V}(\tilde{\mathbf{x}}) + 3|\tilde{\phi}_g^{\text{TF}}|^2 - 1 \right] \\ & \times \left[-\frac{1}{2(\mu_g^{\text{TF}})^2} \tilde{\nabla}^2 + \frac{1}{2(\mu_g^{\text{TF}})^2} \frac{1}{\tilde{\phi}_g^{\text{TF}}} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi}_g^{\text{TF}} \right] \tilde{g}. \end{aligned} \quad (3-38)$$

当 $\beta \rightarrow \infty$ 时, 带入极限函数 $\tilde{\phi}_g^\infty$ 并且舍弃高阶无穷小项 $1/\mu_g^{\text{TF}}$, 可得

$$\omega_\infty^2 \tilde{g} = \left[\tilde{V}(\tilde{\mathbf{x}}) + 3|\tilde{\phi}_g^\infty|^2 - 1 \right] \times \left[-\frac{1}{2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{g} + \frac{1}{2} \frac{\tilde{g}}{\tilde{\phi}_g^\infty} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi}_g^\infty \right]. \quad (3-39)$$

令 $q = \tilde{g}/\tilde{\phi}_g^\infty$, 可得

$$\omega_\infty^2 q \tilde{\phi}_g^\infty = \left[\tilde{V}(\tilde{\mathbf{x}}) + 3|\tilde{\phi}_g^\infty|^2 - 1 \right] \times \left[-\frac{1}{2} \tilde{\nabla}^2 (q \tilde{\phi}_g^\infty) + \frac{1}{2} q \tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi}_g^\infty \right]. \quad (3-40)$$

进一步整理得到

$$\begin{aligned} \omega_\infty^2 q(\tilde{\mathbf{x}}) = & - \left[1 - \frac{1}{2} (\gamma_x^2 \tilde{x}^2 + \gamma_y^2 \tilde{y}^2 + \gamma_z^2 \tilde{z}^2) \right] \tilde{\nabla}^2 q \\ & + \left(\gamma_x^2 \tilde{x} \partial_{\tilde{x}} + \gamma_y^2 \tilde{y} \partial_{\tilde{y}} + \gamma_z^2 \tilde{z} \partial_{\tilde{z}} \right) q, \quad \tilde{\mathbf{x}} \in D_\infty. \end{aligned} \quad (3-41)$$

当 $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = \sqrt{2}$ 时, 即得

$$\omega_\infty^2 q(\tilde{\mathbf{x}}) = - \left[1 - (\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \tilde{z}^2) \right] \tilde{\nabla}^2 q + 2 \left(\tilde{x} \partial_{\tilde{x}} + \tilde{y} \partial_{\tilde{y}} + \tilde{z} \partial_{\tilde{z}} \right) q, \quad \tilde{\mathbf{x}} \in D_\infty. \quad (3-42)$$

考虑球坐标变换

$$\begin{cases} \tilde{x} = r \sin \theta \cos \varphi, \\ \tilde{y} = r \sin \theta \sin \varphi, \\ \tilde{z} = r \cos \theta \end{cases} \quad r \in [0, 1], \varphi \in [0, 2\pi), \theta \in [0, \pi], \quad (3-43)$$

利用变量分离,

$$q(r, \theta, \varphi) = Q(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l,$$

其中 $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ 为球面调和函数, 得到特征值问题

$$\omega_\infty^2 Q = -(1-r^2) \left[Q''(r) + \frac{2}{r} Q'(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} Q(r) \right] + 2r Q'(r), \quad r \in (0, 1) \quad (3-44)$$

可解得

$$\omega_\infty^{l,k} = \sqrt{2} \sqrt{l+3k+2kl+2k^2}, \quad l \geq 0, \quad k \geq 0. \quad (3-45)$$

□

3.4 本章小结

本章共介绍了 BdG 方程的四个解析性质，分别为

(1) 在一般位势 $V(\mathbf{x})$ 下， $\{u, v, \omega\}$ ($\omega \in \mathbb{C}$) 和 $\{\bar{v}, \bar{u}, -\bar{\omega}\}$ ($\omega \in \mathbb{C}$) 同为 BdG 方程的一组解，并且在归一化条件下，特征值 ω 为实数。

(2) 在简谐位势 $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha}^2 \alpha^2$ 下，当 GP 方程的稳态解是实值函数时，BdG 方程始终存在满足归一化条件的解析解。

(3) 在 TF 极限下，当 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ ，取 $V(\mathbf{x}) = \frac{\gamma_x^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\gamma_z^2}{2}z^2$ 时，半径和化学势在 $\beta \rightarrow \infty$ 时的渐近估计为 $R_x = R_y = O(\beta^{1/5})$ ， $R_z = O(\beta^{1/5})$ ， $\mu_g^{\text{TF}} = O(\beta^{2/5})$ 。

(4) 在 TF 极限下，当 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ ，取 $V(\mathbf{x}) = \frac{\gamma_x^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\gamma_z^2}{2}z^2$ 时，特征值 ω 在 $\beta \rightarrow \infty$ 时满足的方程 (3-27)。特别地，当取各向同性简谐位势 $V(\mathbf{x}) = x^2 + y^2 + z^2$ 时，特征值 ω 的表达式为 $\omega_{\infty}^{l,k} = \sqrt{2} \sqrt{l + 3k + 2kl + 2k^2}$, $l \geq 0, k \geq 0$ 。

第四章 数值方法

本章主要提出 SFSC-IRAM 算法来求解具有归一化条件 (2-14) 的 BdG 方程 (2-16)-(2-17)。

当 $V(\mathbf{x})$ 在无穷远处快速增长, $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} V(\mathbf{x}) = +\infty$ 时, GP 方程的稳态解 $\phi_s(\mathbf{x})$ 和 BdG 方程的特征函数 $(u(\mathbf{x}), v(\mathbf{x}))$ 都是光滑且快速衰减的。我们将全空间 \mathbb{R}^d 截断为有界域 $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$, 当区域足够大时, 截断误差可忽略不计。稳态解 $\phi_s(\mathbf{x})$ 和 BdG 方程的特征函数 $(u(\mathbf{x}), v(\mathbf{x}))$ 满足周期边界条件。

本章数值求解 BdG 方程 (2-16)-(2-17) 的具体过程为:

- (1) 利用 PCG-AKTM 方法计算基态解 ϕ_s 和化学势 μ_s ;
- (2) 通过 SFSC 算法计算非局部相互作用 $\hat{\chi}_j$;
- (3) 利用 Fourier 谱方法来离散 BdG 方程;
- (4) 利用 IRAM 方法求解 BdG 方程的特征值问题。

4.1 波函数的 Fourier 谱逼近

在得到谱精度的基态解 ϕ_s (请参见文献^[48]) 和非局部相互作用 $\hat{\chi}_j$ (在本章第三节有详细的介绍) 之后, 本节利用 Fourier 谱方法^[6-8] 来离散 BdG 方程 (2-16)-(2-17)。

在二维空间中 (三维空间类似), 我们等距离散有界区域 $\mathcal{D} := [L_x, R_x] \times [L_y, R_y]$, 取 x 方向步长 $h_x = \frac{R_x - L_x}{N}$, 取 y 方向步长 $h_y = \frac{R_y - L_y}{M}$, 其中 N 和 M 是正偶数。定义网格点集为

$$\mathcal{I}_{NM} = \{(n, m)^T \in \mathbb{N}^2 \mid 0 \leq n \leq N-1, 0 \leq m \leq M-1\}, \quad (4-1)$$

$$\tilde{\mathcal{I}}_{NM} = \{(\ell, k)^T \in \mathbb{Z}^2 \mid -N/2 \leq \ell \leq N/2-1, -M/2 \leq k \leq M/2-1\}, \quad (4-2)$$

$$\mathcal{T}_{\mathbf{x}} = \{(x_n, y_m)^T =: (L_x + n h_x, L_y + m h_y)^T, (n, m)^T \in \mathcal{I}_{NM}\}. \quad (4-3)$$

引入符号

$$W_{\ell k}(x, y) = e^{i\mu_{\ell}^x(x-L_x)} e^{i\mu_k^y(y-L_y)}, \quad \mu_{\ell}^x = \frac{2\pi\ell}{R_x - L_x}, \quad \mu_k^y = \frac{2\pi k}{R_y - L_y}, \quad (\ell, k)^T \in \tilde{\mathcal{I}}_{NM}. \quad (4-4)$$

并定义

$$P_{nm} := P(x_n, y_m), \quad (P = u, v, f, g, \phi_s, |\phi_s|^2, \phi_s^2, \Phi_s, \dots) \quad (4-5)$$

为函数 $P(x, y)$ 在点 $(x_n, y_m) \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}}$ 的值, \mathbf{P} 是 P_{nm} 的向量。

P 和 $\nabla^2 P$ ($P = u, v, f, g$) 在 \mathcal{T}_x 上的 Fourier 谱近似为

$$P(x, y) \approx \tilde{P}(x, y) := \sum_{\ell=-N/2}^{N/2-1} \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} \hat{\mathbf{P}}_{\ell k} W_{\ell k}(x, y), \quad (4-6)$$

$$(\nabla^2 P)(x, y) \approx (\nabla^2 \tilde{P})(x, y) := \sum_{\ell=-N/2}^{N/2-1} \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} -(\mu_\ell^x)^2 + (\mu_k^y)^2 \hat{\mathbf{P}}_{\ell k} W_{\ell k}(x, y), \quad (4-7)$$

其中, $\hat{\mathbf{P}} \in \mathbb{C}^{NM}$ 是 \mathbf{P} 的离散 Fourier 变换的系数, 表示为

$$\hat{\mathbf{P}}_{\ell k} = \frac{1}{NM} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{M-1} P_{nm} \bar{W}_{\ell k}(x_n, y_m), \quad (\ell, k)^T \in \tilde{\mathcal{I}}_{NM}. \quad (4-8)$$

非局部算子 $\hat{\chi}_j$ 和 $\hat{\chi}_j^*$ ($j = 1, 2$) 的近似为

$$(\hat{\chi}_j P)(x, y) \approx (\hat{\chi}_j \tilde{P})(x, y), \quad (\hat{\chi}_j^* P)(x, y) \approx (\hat{\chi}_j^* \tilde{P})(x, y), \quad (x, y)^T \in \mathcal{D}. \quad (4-9)$$

函数 $\mathcal{L}_{\text{GP}}P$ 和 $\mathcal{L}_{ij}P$ ($i, j = 1, 2$) 在点 $\mathbf{x}_{nm} := (x_n, y_m)^T \in \mathcal{T}_x$ 上离散为

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}_{\text{GP}}P)(\mathbf{x}_{nm}) &\approx (\mathcal{L}_{\text{GP}}\tilde{P})(\mathbf{x}_{nm}) := (\mathbf{L}_{\text{GP}}\mathbf{P})_{nm} \\ &= -\frac{1}{2}(\nabla^2 \tilde{P})(\mathbf{x}_{nm}) + [V_{nm} + \beta|(\phi_s)_{nm}|^2 + \lambda(\Phi_s)_{nm} - \mu_s] \tilde{P}(\mathbf{x}_{nm}), \end{aligned} \quad (4-10)$$

$$(\mathcal{L}_{ij}P)(\mathbf{x}_{nm}) \approx (\mathcal{L}_{ij}\tilde{P})(\mathbf{x}_{nm}) := (\mathbf{L}_{ij}\mathbf{P})_{nm}, \quad i, j = 1, 2. \quad (4-11)$$

函数 H_-P 和 H_+P 在点 $\mathbf{x}_{nm} := (x_n, y_m)^T \in \mathcal{T}_x$ 上离散为

$$\begin{aligned} (H_-P)(\mathbf{x}_{nm}) &\approx (H_- \tilde{P})(\mathbf{x}_{nm}) := (\mathbf{H}_-\mathbf{P})_{nm} \\ &= -\frac{1}{2}(\nabla^2 \tilde{P})(\mathbf{x}_{nm}) + [V_{nm} + \beta|(\phi_s)_{nm}|^2 + \lambda(\Phi_s)_{nm} - \mu_s] \tilde{P}(\mathbf{x}_{nm}), \end{aligned} \quad (4-12)$$

$$\begin{aligned} (H_+P)(\mathbf{x}_{nm}) &\approx (H_+ \tilde{P})(\mathbf{x}_{nm}) := (\mathbf{H}_+\mathbf{P})_{nm} \\ &= -\frac{1}{2}(\nabla^2 \tilde{P})(\mathbf{x}_{nm}) + [V_{nm} + 3\beta|(\phi_s)_{nm}|^2 + \lambda(\Phi_s)_{nm} - \mu_s] \tilde{P}(\mathbf{x}_{nm}) + 2\lambda(\hat{\chi}_1 \tilde{P})(\mathbf{x}_{nm}). \end{aligned} \quad (4-13)$$

具有归一化条件 (2-25) 的 BdG 方程 (2-24) 可以离散为以下特征问题:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{L}_{11} & \mathbf{L}_{12} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{L}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}, \quad h_x h_y (\|\mathbf{u}\|^2 - \|\mathbf{v}\|^2) = 1, \quad (4-14)$$

其中, $\|\cdot\|$ 是 l^2 范数。具有归一化条件 (2-32) 的 BdG 方程 (2-33) 可以离散为以下特征问题:

$$\mathbf{H}_-\mathbf{H}_+\mathbf{f} = \omega^2\mathbf{f}, \quad \mathbf{H}_+\mathbf{H}_-\mathbf{g} = \omega^2\mathbf{g}, \quad h_x h_y \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{M-1} \mathbf{f}_{nm} \mathbf{g}_{nm} = \frac{1}{4}. \quad (4-15)$$

4.2 特征值 / 特征函数求解器

为求解特征值问题 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$, 我们选单位初始向量 \mathbf{x}_1 , 构造 n 维 Krylov 子空间, 通过 Arnoldi 方法^[45] 将矩阵 \mathbf{A} 约化成 n 维 Hessenberg 矩阵 \mathbf{H}_n 。当子空间

的维数 n 足够大时，矩阵 \mathbf{A} 的特征值可通过矩阵 \mathbf{H}_n 的特征值近似。

对于大型稠密矩阵 \mathbf{A} ，我们利用隐式重启的 Arnoldi 方法（Implicitly Restarted Arnoldi Methods，简记为 IRAM）^[29,45,54] 来求解特征值问题。IRAM 方法先通过 m 次 Arnoldi 分解，再通过 p 次原点位移的 QR 迭代，得到 $k = m - p$ 次 Arnoldi 分解。重复执行以上过程，直到残余向量小于预先给定的精度 ϵ ，即可求得矩阵 \mathbf{A} 的特征值和特征函数。

在本文中，利用 IRAM 方法可以求解 BdG 方程 (4-14) 的前几个按模取最小的正特征值 ω_k 及其对应的特征函数 $(\mathbf{u}_k^*, \mathbf{v}_k^*)$ ，然后通过伸缩变换，得到满足归一化条件的特征函数 $(\mathbf{u}_k, \mathbf{v}_k)$ 。但是，方程 (4-14) 中的矩阵是稠密且非对称的，它的显式存储需要消耗超大内存，往往较难实现，从而导致 IRAM 方法可能无法启动。

在高维空间中，我们调用 ARPACK^[49] 库，应用非显式矩阵存储的 IRAM 方法，来求解 BdG 方程。我们只需应用函数句柄提供离散空间中的矩阵-向量乘法（连续空间中的算子-函数乘法），通过向量 $\mathbf{u}^p, \mathbf{v}^p \in \mathbb{C}^{NM}$ 的迭代更新反复计算 $\mathbf{L}_{i1}\mathbf{u}^p + \mathbf{L}_{i2}\mathbf{v}^p (i = 1, 2)$ ，直到得到满足条件的特征值 ω^h 和特征函数 $\mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h$ 。

在本文中，我们只研究基态解为实值函数的情况。首先通过向量 $\mathbf{f}^p \in \mathbb{R}^{NM}$ （或 $\mathbf{g}^p \in \mathbb{R}^{NM}$ ）的迭代更新反复计算 $\mathbf{H}_-\mathbf{H}_+\mathbf{f}^p$ （或 $\mathbf{H}_+\mathbf{H}_-\mathbf{g}^p$ ），直到得到满足条件的特征值 ω^h 和特征函数 \mathbf{f}^h （或 \mathbf{g}^h ），再通过 $\mathbf{H}_+\mathbf{f}^h = \omega^h\mathbf{g}^h$ （或 $\mathbf{H}_-\mathbf{g}^h = \omega^h\mathbf{f}^h$ ）得到 \mathbf{g}^h （或 \mathbf{f}^h ），最后通过变量替换和伸缩变换得到满足归一化条件的 BdG 方程的特征解 $\mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h$ 。

4.3 非局部作用的快速卷积算法

本节研究快速谱卷积算法（Simple Fourier Spectral Convolution Method，简记为 SFSC）来计算非局部相互作用 $\hat{\chi}_j$ 。

非局部相互作用由卷积与函数相乘得到，难点为卷积 $\varphi := U * (\phi_s f)$ 的计算。其中， ϕ_s 是基态解， f 是给定函数， U 是相互作用函数。 ϕ_s 和 f 是光滑且快速衰减的函数， U 在无穷远是多项式衰减的函数。我们将全空间截断为有界区域 \mathcal{D} ，当有界区域足够大时，截断误差可忽略不计。

在二维空间中，我们将卷积等价改写为

$$\varphi = \left(\frac{1}{2\pi|\mathbf{x}|} \right) * \left(-\frac{3}{2}(\partial_{n_\perp n_\perp} - n_3^2 \nabla_\perp^2) \rho \right) := \left(\frac{1}{2\pi|\mathbf{x}|} \right) * \tilde{\rho}, \quad \mathbf{x} = (x, y)^T, \quad (4-16)$$

其中， $U(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi|\mathbf{x}|}$ 是库仑核函数， $\rho := \phi_s f$ 是密度函数， $\tilde{\rho}$ 是等效密度函数。在三维空间中，卷积也可以等价改写为

$$\varphi := \left(\frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} \right) * \tilde{\rho}, \quad \mathbf{x} = (x, y, z)^T. \quad (4-17)$$

为简化符号，我们用 ρ 代替 $\tilde{\rho}$ 。在二维空间中（三维空间类似），我们假设计算区域为 $\mathcal{D} = \mathcal{D}_L := [-L, L] \times [-L, L]$ ，并且假设 ρ 是具有紧致支撑的函数，紧致支撑集包含在 \mathcal{D}_L 中。

因为等效密度函数 ρ 的紧致支撑集包含在 \mathcal{D}_L 中，对于任意 $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_L$ ，当 $\mathbf{x} - \mathbf{y} \notin \mathcal{D}_L$ 时， $\rho(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$ ，即当 $\mathbf{y} \notin \mathbf{x} + \mathcal{D}_L$ 时， $\rho(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$ ，所以全空间 \mathbb{R}^2 上的积分可等效写成 $\mathbf{x} + \mathcal{D}_L$ 上的积分，下式中第二个等号成立；又因为对于任意 $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_L$ ， $\mathbf{x} + \mathcal{D}_L \subset \mathcal{D}_{2L}$ ，当 $\mathbf{y} \notin \mathbf{x} + \mathcal{D}_L$ 时， $\rho(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$ ，所以 $\mathbf{x} + \mathcal{D}_L$ 上的积分也可等效写成 \mathcal{D}_{2L} 上的积分，下式中的第三个等式成立，

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbb{R}^2} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x} - \mathbf{y})d\mathbf{y}, \quad \mathbf{x} \in \mathcal{D}_L, \\ &= \int_{\mathbf{x} + \mathcal{D}_L} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x} - \mathbf{y})d\mathbf{y} = \int_{\mathcal{D}_{2L}} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x} - \mathbf{y})d\mathbf{y}. \end{aligned} \quad (4-18)$$

对于 $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}_L$ ， $\mathbf{y} \in \mathcal{D}_{2L}$ ，有 $\mathbf{x} - \mathbf{y} \in \mathcal{D}_{3L}$ ，我们要在 \mathcal{D}_{3L} 上近似逼近等效密度函数 ρ 。由于 Fourier 基底的周期性，我们仅需要在 \mathcal{D}_{2L} 上用 Fourier 谱方法逼近等效密度函数 ρ 即可，详情请参阅^[24]。

ρ 在 \mathcal{D}_{2L} 上的 Fourier 谱逼近为

$$\rho(\mathbf{z}) \approx \sum_{p=-N}^{N-1} \sum_{q=-M}^{M-1} \hat{\rho}_{pq} e^{i\tilde{\mu}_p^x(x+2L)} e^{i\tilde{\mu}_q^y(y+2L)}, \quad \mathbf{z} := (x, y)^T \in \mathcal{D}_{2L}, \quad (4-19)$$

其中， $\tilde{\mu}_p^x = \pi p/(2L)$ ， $\tilde{\mu}_q^y = \pi q/(2L)$ ， $\hat{\rho}_{pq}$ 是 ρ 的 Fourier 变换的系数。将 (4-19) 代入 (4-18)，用 $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ 代替 \mathbf{z} ，得到

$$\varphi(\mathbf{x}) \approx \sum_{p=-N}^{N-1} \sum_{q=-M}^{M-1} \hat{\rho}_{pq} \hat{U}_{pq} e^{i\tilde{\mu}_p^x(x+2L)} e^{i\tilde{\mu}_q^y(y+2L)}, \quad \mathbf{x} \in \mathcal{D}_L, \quad (4-20)$$

其中 $\hat{U}_{pq} =: \hat{U}(\tilde{\mu}_p^x, \tilde{\mu}_q^y)$ 是 U 在有界域 \mathcal{D}_{2L} 上的 Fourier 变换，其表达式为

$$\hat{U}_{pq} = \int_{\mathcal{D}_{2L}} U(\mathbf{x}) e^{-i\tilde{\mu}_p^x x} e^{-i\tilde{\mu}_q^y y} d\mathbf{x}. \quad (4-21)$$

通过变量替换 $\mathbf{x} = 2L\tilde{\mathbf{x}}$ ，将 (4-21) 改写为 $\mathcal{D}_1 = [-1, 1]^2$ 上的 Fourier 积分

$$\hat{U}_{pq} = (2L) \int_{\mathcal{D}_1} U(\mathbf{x}) e^{-i\pi p x} e^{-i\pi q y} d\mathbf{x}. \quad (4-22)$$

\hat{U}_{pq} 可以通过 Advanpix 工具箱^[1] 预先计算出来，也可以通过高斯和技术^[24] 来实现高精度快速计算。 $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}$ 上的库仑位势 φ 可以通过一组 FFT / iFFT 与长度为 $4NM$ 的函数相乘来计算，总计算量为 $O(4NM + 4NM \log(4NM))$ 。

本节通过以下三个步骤计算非局部相互作用 $\hat{\chi}_j(f)$ （或 $\hat{\chi}_j^*(f)$ ）：

- (1) 基态解 ϕ_s （或 $\bar{\phi}_s$ ）与函数 f 相乘计算密度函数 $\rho = \phi_s f$ （或 $\rho = \bar{\phi}_s f$ ）；
- (2) 计算卷积 $\varphi = U * (\phi_s f)$ （或 $\varphi = U * (\bar{\phi}_s f)$ ）；
- (3) 基态解 ϕ_s （或 $\bar{\phi}_s$ ）与卷积 φ 相乘计算非局部相互作用 $\hat{\chi}_j(f)$ （或 $\hat{\chi}_j^*(f)$ ）。

下面我们以 $\hat{\chi}_1(f)$ 为例给出计算 $\hat{\chi}_j(f)$ （或 $\hat{\chi}_j^*(f)$ ）的详细过程：

算法 1 计算 $\hat{\chi}_1(f)$ 的快速卷积算法

输入: 给定网格点集 \mathcal{T}_x 上的光滑函数 f 、稳态解 ϕ_s 和 Φ_s 。

输入: 预计算傅立叶变换 \hat{U}_{pq} (4-21), 达到误差精度 ϵ 。

- 1: 基态解 ϕ_s 与函数 f 相乘计算密度函数 $\rho =: \phi_s f$;
- 2: 利用 Fourier 谱方法对 \mathcal{T}_x 上的密度函数 ρ 进行微分运算, 得到等效密度函数 $\tilde{\rho}$ (4-16);
- 3: 通过 FFT 计算 $\tilde{\rho}$ 的 Fourier 系数 $\hat{\rho}_{pq}$ (4-19);
- 4: $\hat{\rho}_{pq}$ 与 \hat{U}_{pq} 相乘计算 $\hat{\rho}_{pq}\hat{U}_{pq}$;
- 5: 通过 iFFT 计算 \mathcal{T}_x 上的卷积 φ (4-20);
- 6: 基态解 ϕ_s 与卷积 φ 相乘计算 $\hat{\chi}_1(f) = \varphi\phi_s$ 。

本文进行以下数值实验, 计算二维和三维中的非局部相互作用 $\hat{\chi}_1(f)$ 。令

$$f(\mathbf{x}) = e^{-\frac{|\mathbf{x}|^2}{2\sigma^2}}, \quad \phi_s(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (4-23)$$

偶极朝向为 $\mathbf{n} = (0.82778, 0.41505, -0.37751)^T$, 计算区域为 $\mathcal{D} = [-8, 8]^d$ 。我们等距离散区域 \mathcal{D} , 在各方向上取相同步长 h 。定义误差为

$$E_h := \frac{\|[\hat{\chi}_1(f)]_{\text{num}} - [\hat{\chi}_1(f)]_{\text{exact}}\|_{\infty}}{\|[\hat{\chi}_1(f)]_{\text{exact}}\|_{\infty}}, \quad (4-24)$$

其中 $[\hat{\chi}_1(f)]_{\text{num}}$ 是数值解, $[\hat{\chi}_1(f)]_{\text{exact}}$ 是精确解。

例 1 在二维空间中, 我们选择 f 和 ϕ_s (4-23), 可以显式地给出精确解 $\hat{\chi}_1(f)$,

$$\begin{aligned} [\hat{\chi}_1(f)](\mathbf{x}) &= \frac{3\sqrt{\pi}n_3n_3se^{-s}}{\sigma} \left[I_0(s) - I_1(s) - \frac{I_0(s)}{2s} \right] f(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{3\sqrt{\pi}e^{-s}}{4\sigma} \left[(\mathbf{n}_{\perp} \cdot \mathbf{n}_{\perp})(I_0(s) - I_1(s)) - \frac{2(\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_{\perp})^2}{\sigma^2} \left(I_0(s) - \frac{1+2s}{2s} I_1(s) \right) \right] f(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4-25)$$

其中 $s = \frac{|\mathbf{x}|^2}{2\sigma^2}$, I_0 和 I_1 是 0 阶和 1 阶修正贝塞尔函数。

在三维空间中, 我们选择 f 和 ϕ_s (4-23), 可以显式地给出精确解 $\hat{\chi}_1(f)$,

$$\begin{aligned} [\hat{\chi}_1(f)](\mathbf{x}) &= - \left[\rho(\mathbf{x}) + 3 \partial_{nm} \left(\frac{\sigma^2 \sqrt{\pi} \text{Erf}(r/\sigma)}{4} \frac{r/\sigma}{r/\sigma} \right) \right] f(\mathbf{x}) \\ &= - \left[\rho(\mathbf{x}) + 3 \mathbf{n}^T B(\mathbf{x}) \mathbf{n} \right] f(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4-26)$$

其中, 矩阵 $B(\mathbf{x}) = (b_{jl}(\mathbf{x}))_{j,l=1}^3$ 中的元素 $b_{jl}(\mathbf{x})$ 定义为

$$\begin{aligned} b_{jl}(\mathbf{x}) &= \left[\frac{\sigma^2}{2r^2} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} - \frac{\sigma^3 \sqrt{\pi}}{4r^3} \text{Erf}\left(\frac{r}{\sigma}\right) \right] \delta_{jl} \\ &+ x_j x_l \left[-\frac{3\sigma^2}{2r^4} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} - \frac{1}{r^2} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} + \frac{3\sigma^3 \sqrt{\pi}}{4r^5} \text{Erf}\left(\frac{r}{\sigma}\right) \right], \end{aligned} \quad (4-27)$$

其中 $r = |\mathbf{x}|$, δ_{jl} 是 Kronecker 符号, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)^T$, $\text{Erf}(r) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^r e^{-t^2} dt$ 是误差

函数。

表 4-1 在二维（上）和三维（下）空间中，用 SFSC 算法计算例 1 在不同步长 h 下的非局部相互作用 $\hat{\chi}_1(f)$ 的误差和 CPU 时间。

	$h = 2$	$h = 1$	$h = 1/2$	$h = 1/4$
E_h	1.9385E-01	1.1617E-02	7.6144E-08	3.7585E-15
E_h	1.5743E-01	8.2904E-03	1.7048E-07	1.8485E-14
CPU	6.0000E-04	5.5000E-03	5.6300E-02	9.5620E-01

表 4-1 展示了例 1 在不同步长 h 下应用 SFSC 算法求非局部相互作用 $\hat{\chi}_1(f)$ 的误差 E_h 和相应的 CPU 时间。由于在二维空间中 CPU 运行时间太短，我们只提供三维的 CPU 时间。从表 4-1 中，可以清楚地看到 SFSC 算法是高效的，并达到了谱精度。

4.4 本章小结

本章提出 SFSC-IRAM 算法来求解有约束条件的 BdG 方程。首先通过 PCG-AKTM 方法^[48] 计算基态解 ϕ_s ；然后通过 SFSC 算法计算非局部相互作用 $\hat{\chi}_j$ ；再利用 Fourier 谱方法^[6-8] 来离散 BdG 方程；最后通过 IRAM 方法求解 BdG 方程的特征值问题。

第五章 数值结果

本章第一节测试 IRAM-SFSC 算法的精度。第二节和第三节研究简谐位势、偶极朝向和局部、非局部相互作用强度对 BdG 方程的特征值和特征函数的影响。

在本章中，我们取简谐位势 $V(\mathbf{x})$ ，计算区域 $\mathcal{D} = [-12, 12]^2$ （或 $\mathcal{D} = [-10, 10]^3$ ），将计算区域进行等距离散，取步长 $h_x = h_y = h$ （或 $h_x = h_y = h_z = h$ ）。我们只研究稳态解为实值函数的情况，通过 IRAM-SFSC 算法得到 BdG 方程的数值特征解。

5.1 数值方法的精度

在二维空间中（三维空间类似），我们取简谐位势 $V(x, y) = \frac{1}{2}(\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2)$ 。 $(\omega_\ell, \mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ ($\ell = x, y$) 是 BdG 方程 (4-14) 的解析解 (3-8)， $(\omega_\ell^h, \mathbf{u}_\ell^h, \mathbf{v}_\ell^h)$ ($\ell = x, y$) 是 BdG 方程 (4-14) 的数值解。我们研究下面两种情况：

(1) $\gamma_x = \gamma_y = \gamma$

在这种情况下， $\omega_x = \omega_y = \omega$ 的代数重数是二。 ω 对应的特征空间为 $P_u := \text{span}\{\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y\}$ 和 $P_v := \text{span}\{\mathbf{v}_x, \mathbf{v}_y\}$ ，其中， $\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y$ 是 P_u 的一组基， $\mathbf{v}_x, \mathbf{v}_y$ 是 P_v 的一组基。数值解 \mathbf{u}_ℓ^h ($\ell = x, y$) 和 \mathbf{v}_ℓ^h ($\ell = x, y$) 的正交投影 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ 和 $\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h$ 定义为

$$\langle \mathbf{u}_\ell^h - \mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h, \eta \rangle = 0, \quad \forall \eta \in \text{span}\{\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y\}, \quad \ell = x, y, \quad (5-1)$$

$$\langle \mathbf{v}_\ell^h - \mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h, \xi \rangle = 0, \quad \forall \xi \in \text{span}\{\mathbf{v}_x, \mathbf{v}_y\}, \quad \ell = x, y, \quad (5-2)$$

其中， $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 是 l^2 内积。

求 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ 和 $\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h$ 的方法为：

我们用 \mathbf{u}_x 和 \mathbf{u}_y 的线性组合表示 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ ，即

$$\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h = c_1 \mathbf{u}_x + c_2 \mathbf{u}_y, \quad (5-3)$$

其中， c_1, c_2 是待求常数。(5-3) 两边同时内积 \mathbf{u}_x ，得到

$$\langle \mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h, \mathbf{u}_x \rangle = c_1 \langle \mathbf{u}_x, \mathbf{u}_x \rangle + c_2 \langle \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_x \rangle, \quad (5-4)$$

(5-3) 两边同时内积 \mathbf{u}_y ，得到

$$\langle \mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h, \mathbf{u}_y \rangle = c_1 \langle \mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y \rangle + c_2 \langle \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_y \rangle, \quad (5-5)$$

(5-4) 和 (5-5) 的矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} \langle \mathbf{u}_x, \mathbf{u}_x \rangle & \langle \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_x \rangle \\ \langle \mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y \rangle & \langle \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_y \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h, \mathbf{u}_x \rangle \\ \langle \mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h, \mathbf{u}_y \rangle \end{bmatrix}. \quad (5-6)$$

我们求解 (5-6), 得到 $(c_1, c_2)^T$, 进而得到 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ ($\ell = x, y$)。同理可得 $\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h$ ($\ell = x, y$)。

(2) $\gamma_x \neq \gamma_y$

在这种情况下, ω_x 和 ω_y 是单一的特征值。 ω_x 对应的特征函数空间为 $P_u := \text{span}\{\mathbf{u}_x\}$ 和 $P_v := \text{span}\{\mathbf{v}_x\}$; ω_y 对应的特征函数空间为 $P_u := \text{span}\{\mathbf{u}_y\}$ 和 $P_v := \text{span}\{\mathbf{v}_y\}$ 。数值解 \mathbf{u}_ℓ^h 和 \mathbf{v}_ℓ^h ($\ell = x, y$) 的正交投影 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ 和 $\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h$ 定义为

$$\langle \mathbf{u}_\ell^h - \mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h, \eta \rangle = 0, \quad \forall \eta \in \text{span}\{\mathbf{u}_\ell\}, \quad \ell = x, y,$$

和

$$\langle \mathbf{v}_\ell^h - \mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h, \xi \rangle = 0, \quad \forall \xi \in \text{span}\{\mathbf{v}_\ell\}, \quad \ell = x, y.$$

求 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ 和 $\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h$ 的方法为:

$$\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h = \frac{\langle \mathbf{u}_\ell^h, \mathbf{u}_l \rangle}{\langle \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_l \rangle} \mathbf{u}_l, \quad \ell = x, y,$$

$$\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h = \frac{\langle \mathbf{v}_\ell^h, \mathbf{v}_l \rangle}{\langle \mathbf{v}_l, \mathbf{v}_l \rangle} \mathbf{v}_l, \quad \ell = x, y.$$

我们将 \mathbf{u}_ℓ^h 和 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ 之间的夹角记为 α_ℓ ($\ell = x, y$), 将 \mathbf{v}_ℓ^h 和 $\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h$ 之间的夹角记为 α'_ℓ ($\ell = x, y$)。我们选择 \mathbf{u}_ℓ^h 和 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ 之间夹角的正弦值 $\sin(\alpha_\ell)$ 来度量 \mathbf{u}_ℓ^h 与 $\mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h$ 之间的误差, 记为

$$e_u^{h,\ell} := \frac{\|\mathbf{u}_\ell^h - \mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h\|_2}{\|\mathbf{u}_\ell^h\|_2} = \sin(\alpha_\ell).$$

我们选择 \mathbf{v}_ℓ^h 和 $\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h$ 之间夹角的正弦值 $\sin(\alpha'_\ell)$ 来度量 \mathbf{v}_ℓ^h 与 $\mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h$ 之间的误差, 记为

$$e_v^{h,\ell} := \frac{\|\mathbf{v}_\ell^h - \mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h\|_2}{\|\mathbf{v}_\ell^h\|_2} = \sin(\alpha'_\ell).$$

特征值和特征函数的误差定义为

$$e_{\omega_\ell}^h := \frac{|\omega_\ell^h - \omega_\ell|}{|\omega_\ell|}, \quad \ell = x, y, \quad (5-7)$$

$$e_{uv}^{h,\ell} := \frac{\|\mathbf{u}_\ell^h - \mathcal{P}_u \mathbf{u}_\ell^h\|_2}{\|\mathbf{u}_\ell^h\|_2} + \frac{\|\mathbf{v}_\ell^h - \mathcal{P}_v \mathbf{v}_\ell^h\|_2}{\|\mathbf{v}_\ell^h\|_2}, \quad \ell = x, y. \quad (5-8)$$

例 2 在二维和三维空间中, 设 $\beta = 100$, $\lambda = 50$, 我们研究下述四种情况:

(I) 二维空间: $\gamma_x = \gamma_y = 1$, $\mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta, 0)^T$, 取不同的角度 θ 和步长 h ;

(II) 二维空间: $\gamma_x = \gamma_y/2 = 1$, $\mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta, 0)^T$, 取不同的角度 θ 和步长 h ;

(III) 三维空间: $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 1$, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$, 取不同的步长 h ;

(IV) 三维空间: $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z/2 = 1$, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$, 取不同的步长 h 。

对于 (I), BdG 方程有两个特征值 $\omega_x = \omega_y =: \omega = 1$, 所以 $\omega = 1$ 对应的特征函数空间 P_u 和 P_v 都是二维的。对于 (II), BdG 方程的特征值 $\omega_x = 1$ 对应的特征函数空间 P_u 和 P_v 都是一维的, $\omega_y = 2$ 对应的特征函数空间 P_u 和 P_v 都是一维的。对于 (III), BdG 方程有三个特征值 $\omega_x = \omega_y = \omega_z =: \omega = 1$, 所以 $\omega = 1$ 对应的特征函数空间 P_u 和 P_v 都是三维的。对于 (IV), BdG 方程有两个特征值 $\omega_x = \omega_y =: \omega = 1$, 和一个特征值 $\omega_z = 2$, 所以 ω 对应的特征函数空间 P_u 和 P_v 都是二维的, ω_z 对应的特征函数空间 P_u 和 P_v 都是一维的。

表 5-1 和 5-2 展示 (I) - (IV) 在不同步长 h 和偶极朝向 \mathbf{n} 下的特征值和特征函数的误差。由表 5-1 和 5-2 可知, IRAM-SFSC 算法是谱精度的。

5.2 Bogoluibov-de Gennes 方程的特征值的研究

本节研究不同的简谐位势、偶极朝向和局部（或非局部）相互作用强度对 BdG 方程的特征值 ω 的影响。

在二维空间中, 我们取步长 $h = 1/8$, 只展示前几个按模取最小的正特征值的结果。

例 3 在对称和非对称简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 下, 我们研究局部（或非局部）相互作用强度对 BdG 方程的特征值 ω 的影响:

- (I) $\gamma_x = \gamma_y = 1$, $\beta = 500$, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$, λ 的范围为 $-400 \sim 0$;
- (II) $\gamma_x = \gamma_y = 1$, $\lambda = -100$, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$, β 的范围为 $0 \sim 400$;
- (III) $\gamma_x = 1$, $\gamma_y = \pi$, $\beta = 500$, $\mathbf{n} = (1, 0, 0)^T$, λ 的范围为 $0 \sim 800$;
- (IV) $\gamma_x = 1$, $\gamma_y = \pi$, $\lambda = 100$, $\mathbf{n} = (1, 0, 0)^T$, β 的范围为 $0 \sim 800$ 。

图 5-1 展示 (I) - (IV) 的前 9 个按模取最小的正特征值 ω_ℓ ($\ell = 1, \dots, 9$), 由图可知:

(i) 对于 (I) 和 (II), 最小正特征值 $\omega_1 = \omega_2$ 不随相互作用强度的变化而变化。无论局部（或非局部）相互作用强度 λ （或 β ）取任何值, 特征值 $\omega_1 = \omega_2 = 1$ 都与引理 3.2 中的结果一致, 最小正特征值 $\omega_1 = \omega_2 = 1$ 对应约束频率 $\gamma_x = \gamma_y = 1$ 。特征值 ω_7 的代数重数是一, 特征值 $\omega_1, \omega_3, \omega_5, \omega_8$ 的代数重数是二, 且 $\omega_1 = \omega_2$, $\omega_3 = \omega_4$, $\omega_5 = \omega_6$, $\omega_8 = \omega_9$ 。

(ii) 对于 (III) 和 (IV), 无论局部（或非局部）相互作用强度 λ （或 β ）取任何值, 特征值 $\omega_1 = 1$ 和 $\omega_4 = \pi$ （或 $\omega_5 = \pi$ ）都与引理 3.2 中的结果一致, 最小正特征值 $\omega_1 = 1$ 对应约束频率 $\gamma_x = 1$, 另一个特征值 π 对应约束频率 $\gamma_y = \pi$, 且所有特征值的代数重数是一。随着局部（或非局部）相互作用强度

的变化，第四个和第五个最小特征值在 π 点存在一个次序的交换，**(III)** 的次序交换点约为 $\lambda = 251.24$ ，**(IV)** 的次序交换点约为 $\beta = 275.10$ ，这种次序交换也可能发生在其他特征值上，例如在 **(III)** 和 **(IV)** 中的 ω_7 和 ω_8 之间。

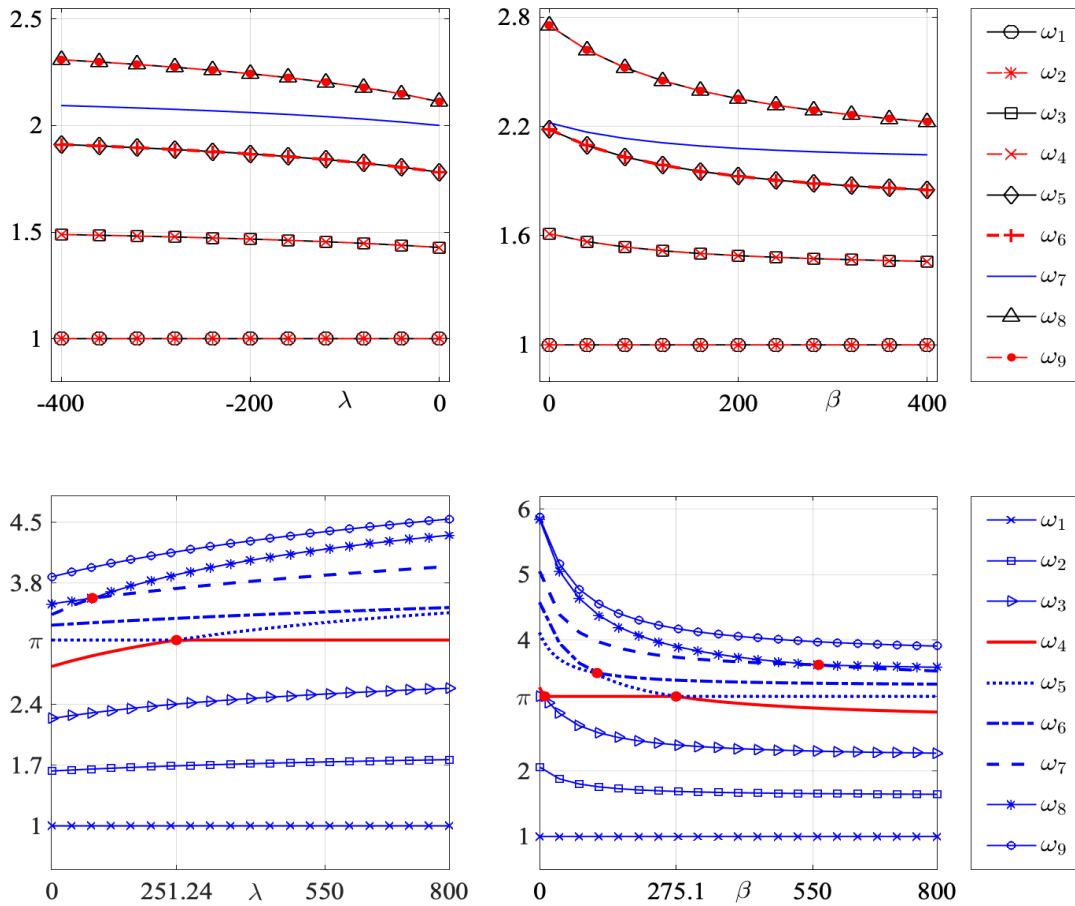


图 5-1 例 3 中 **(I)** - **(IV)** 的 BdG 方程的前 9 个按模取最小的正特征值 ω_ℓ ($\ell = 1, \dots, 9$)。

5.3 Bogoluibov-de Gennes 方程的特征函数的研究

本节研究不同的简谐位势、偶极朝向对 BdG 方程的特征函数 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) 的影响。

在二维和三维空间中，我们取步长 $h = 1/8$ ，只展示前几个按模取最小的正特征值对应的特征函数的结果。

例 4 在二维空间中，在对称和非对称简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 下，设 $\beta = 500$ ， $\lambda = 400$ ，我们研究偶极朝向 \mathbf{n} 对 BdG 方程的特征函数 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) 的影响：

(I) $\gamma_x = \gamma_y = 1$ ， $\mathbf{n} = (1, 0, 0)^T$ ；

- (II) $\gamma_x = \gamma_y = 1$, $\mathbf{n} = (\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2, 0)^T$;
 (III) $\gamma_x = 1$, $\gamma_y = \pi$, $\mathbf{n} = (1, 0, 0)^T$ 。

图 5-2 展示 (I) - (III) 中的前 4 个按模取最小的正特征值 ω_ℓ ($\ell = 1, 2, 3, 4$) 对应的特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ ($\ell = 1, 2, 3, 4$), 由图可知:

偶极朝向 \mathbf{n} 和简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 对特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ ($\ell = 1, 2, 3, 4$) 的形状都有显著影响。在对称简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 下, 我们通过 (I) 和 (II), 得到特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ 沿偶极朝向对称 (或反对称) 的结论。通过 (I) 和 (III), 得到特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ 沿约束频率较大的方向压缩的结论。

例 5 在三维空间中, 在对称和非对称简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 下, 设 $\beta = 500$, $\lambda = 400$, 我们研究偶极朝向 \mathbf{n} 对 BdG 方程的特征函数 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) 的影响:

- (I) $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 1$, $\mathbf{n} = (1, 0, 0)^T$;
 (II) $\gamma_x = \gamma_z = 1$, $\gamma_y = 2$, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ 。

图 5-3 展示 (I) 中的前 4 个按模取最小的正特征值 ω_ℓ ($\ell = 1, \dots, 4$) 对应的特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ ($\ell = 1, \dots, 4$), 图 5-4 展示 (II) 中的前 5 个按模取最小的正特征值 ω_ℓ ($\ell = 1, \dots, 5$) 对应的特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ ($\ell = 1, \dots, 5$), 由图可知:

与二维空间类似, 偶极朝向 \mathbf{n} 和简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 对特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ 的形状都有显著的影响。特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ 沿约束频率较大的方向压缩。在对称简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 下, 特征函数 $(\mathbf{u}_\ell, \mathbf{v}_\ell)$ 沿偶极朝向是对称 (或反对称) 的。

注意: 特征值 $\omega = 1$ 在 (I) 和 (II) 中的重数是三 (或二), 即在 (I) / (II) 中有三 (或二个) 线性无关的特征函数, 在这里我们只展示一个特征函数 $(\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_1)$, 其他特征函数只有对称轴的位置不同。

5.4 本章小结

本章第一节测试 IRAM-SFSC 算法的精度。BdG 方程通过 IRAM-SFSC 算法得到的数值解 $(\omega, \mathbf{u}, \mathbf{v})$ 是谱精度的。第二节介绍 BdG 方程的特征值 ω 的相关结果。在对称和非对称简谐位势 $V(\mathbf{x})$ 下, 对于任意相互作用强度, 都存在与简谐位势约束频率相等的特征值 ω 。第三节介绍 BdG 方程的特征函数 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) 的相关结果。特征函数 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) 沿约束频率较大的方向压缩。在对称简谐位势下, 特征函数 (\mathbf{u}, \mathbf{v}) 沿偶极方向是对称 (或反对称) 的。

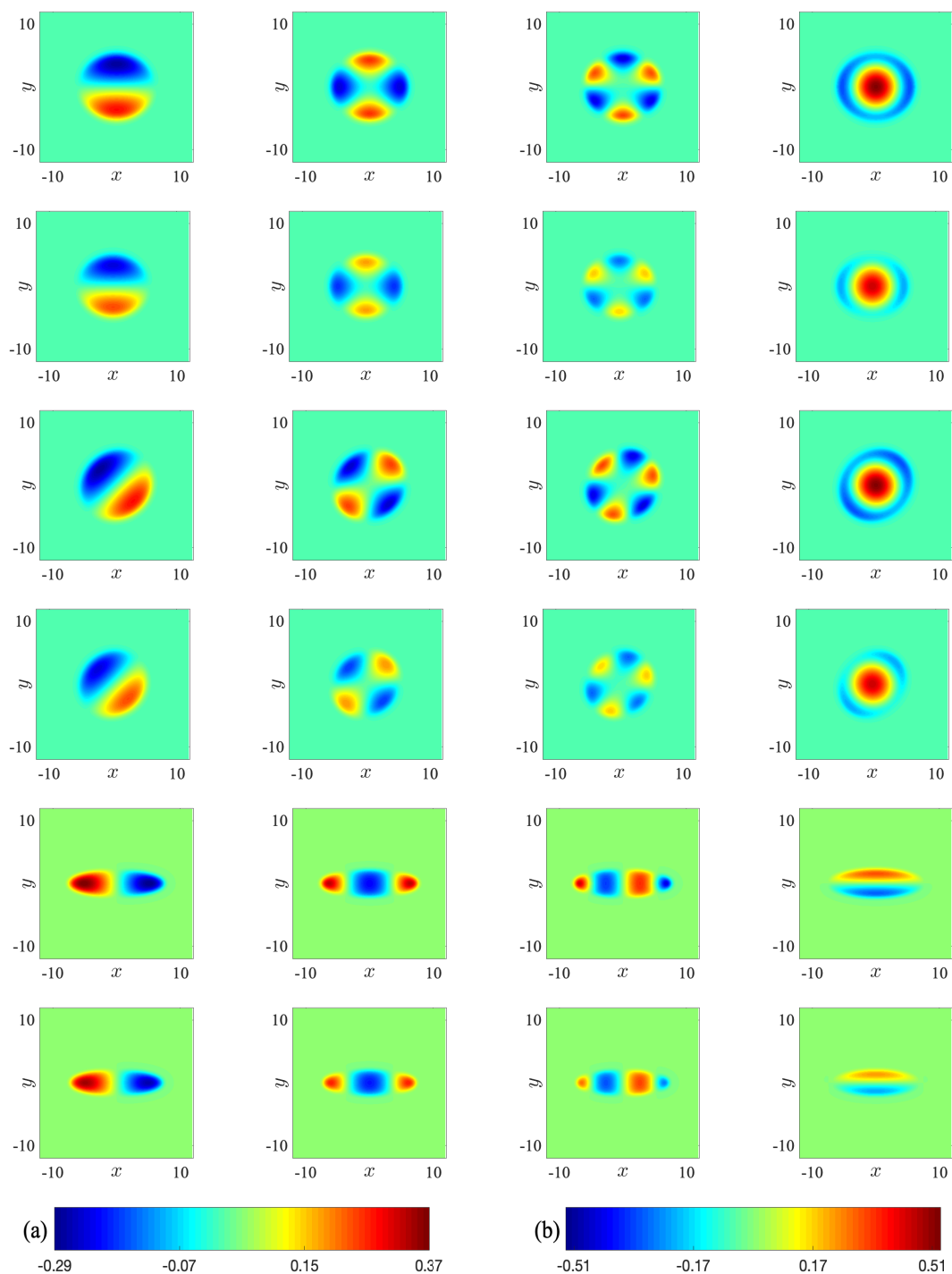


图 5-2 例 4 中 (I) (第 1 行和第 2 行), (II) (第 3 行和第 4 行) 和 (III) (第 5 行和第 6 行) 的特征函数 (u_ℓ, v_ℓ) ($\ell = 1, \dots, 4$) 的等高线图, 奇数行是 u_ℓ , 偶数行是 v_ℓ (从左到右依次为 $\ell = 1, \dots, 4$), 对应色条为 (I) - (II) (a) 和 (III) (b)。

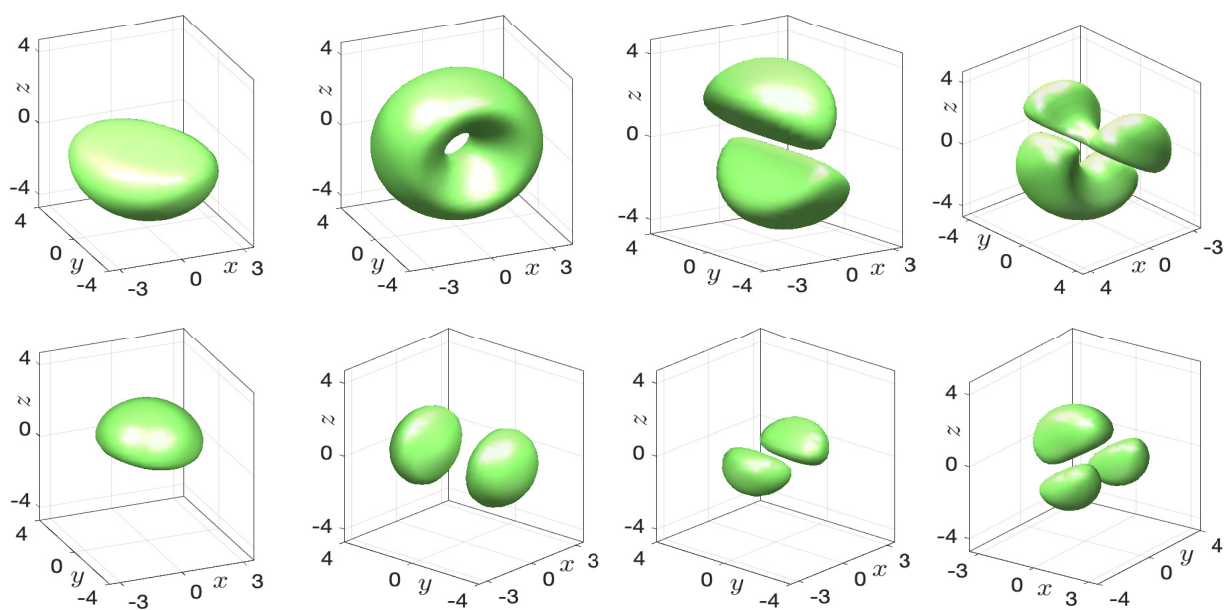


图 5-3 例 5 中 (I) 的特征函数 (u_ℓ, v_ℓ) ($\ell = 1, 2, 3, 4$) 的等值面图, 上面是 u_ℓ , 下面是 v_ℓ (从左到右: $\ell = 1, \dots, 4$)。

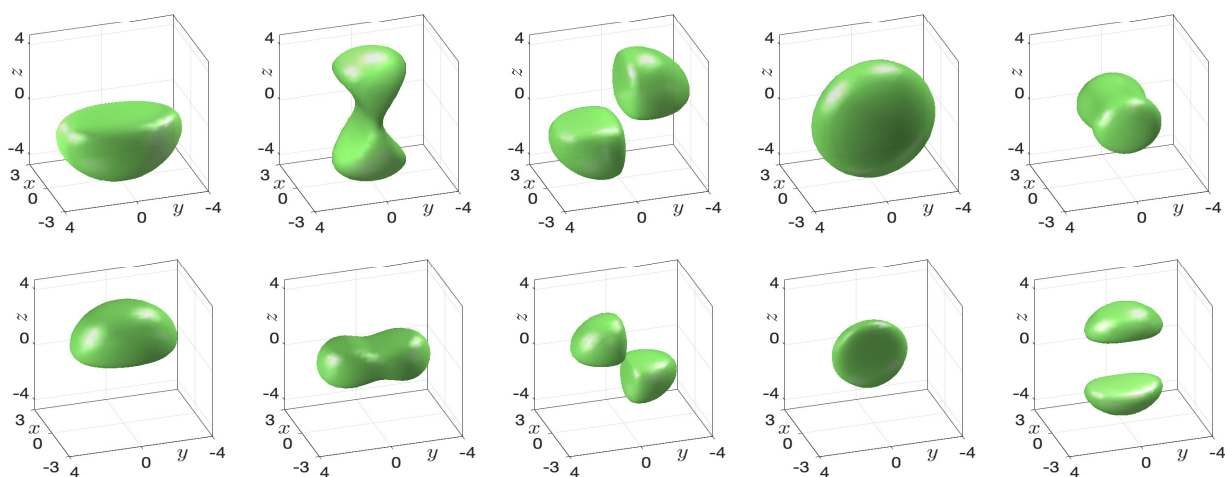


图 5-4 例 5 中 (II) 的特征函数 (u_ℓ, v_ℓ) ($\ell = 1, 2, 3, 4, 5$) 的等值面图, 上面是 u_ℓ , 下面是 v_ℓ (从左到右: $\ell = 1, \dots, 5$)。

表 5-1 例 2 中 (I) (上) 和 (II) (下) 的特征值 ω 和特征函数 u, v 的误差。

(I): $\gamma_x = 1, \gamma_y = 1, \mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta, 0)^T$ 。						
	h	$h_0 = 3/2$	$h_0/2$	$h_0/4$	$h_0/8$	$h_0/16$
$\theta = 0$	$e_{\omega_x}^h$	1.569E-01	6.618E-04	7.652E-07	1.516E-12	1.129E-11
	$e_{\omega_y}^h$	9.973E-02	1.927E-03	6.508E-08	7.641E-13	1.129E-11
	e_{uv}^{h,ω_x}	1.993E-01	1.211E-02	2.144E-04	3.474E-08	6.107E-11
	e_{uv}^{h,ω_y}	2.068E-01	1.932E-02	2.715E-05	4.611E-09	3.938E-11
$\theta = \pi/4$	$e_{\omega_x}^h$	2.085E-01	6.525E-04	3.957E-07	1.451E-13	5.653E-12
	$e_{\omega_y}^h$	1.283E-01	1.682E-03	1.967E-07	5.680E-13	1.299E-11
	e_{uv}^{h,ω_x}	1.851E-01	1.644E-02	1.214E-04	8.606E-09	3.962E-11
	e_{uv}^{h,ω_y}	2.989E-01	1.657E-02	1.325E-04	8.822E-09	5.275E-11
$\theta = \pi/3$	$e_{\omega_x}^h$	1.889E-01	7.926E-04	1.375E-07	4.345E-13	1.637E-11
	$e_{\omega_y}^h$	1.209E-01	3.174E-03	1.234E-06	1.217E-12	7.761E-12
	e_{uv}^{h,ω_x}	1.848E-01	1.490E-02	7.475E-05	1.851E-08	6.890E-11
	e_{uv}^{h,ω_y}	2.775E-01	1.779E-02	1.679E-04	1.873E-08	2.595E-11
(II): $\gamma_x = 1, \gamma_y = 2, \mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta, 0)^T$ 。						
	h	$h_0 = 3/4$	$h_0/2$	$h_0/4$	$h_0/8$	$h_0/16$
$\theta = 0$	$e_{\omega_x}^h$	1.583E-01	2.000E-03	2.131E-06	4.209E-12	1.220E-11
	$e_{\omega_y}^h$	1.858E-02	5.973E-03	1.388E-05	9.854E-13	9.976E-12
	e_{uv}^{h,ω_x}	4.431E-01	2.076E-02	2.421E-04	8.561E-08	5.781E-11
	e_{uv}^{h,ω_y}	2.000	7.879E-02	8.098E-04	8.165E-08	5.241E-11
$\theta = \pi/4$	$e_{\omega_x}^h$	2.168E-01	3.823E-03	3.399E-06	1.854E-11	1.004E-11
	$e_{\omega_y}^h$	1.215E-01	3.346E-02	1.104E-04	4.233E-10	3.712E-12
	e_{uv}^{h,ω_x}	5.428E-01	2.272E-02	1.931E-04	4.903E-08	1.565E-10
	e_{uv}^{h,ω_y}	2.000	1.022E-01	2.049E-03	1.910E-06	1.962E-10
$\theta = \pi/3$	$e_{\omega_x}^h$	2.251E-01	3.529E-04	7.674E-06	2.561E-11	4.069E-12
	$e_{\omega_y}^h$	1.553E-01	5.355E-03	1.755E-04	1.225E-09	6.111E-13
	e_{uv}^{h,ω_x}	4.452E-01	2.279E-02	1.768E-04	6.936E-08	5.168E-10
	e_{uv}^{h,ω_y}	2.000	1.014E-01	2.808E-03	3.584E-06	5.872E-11

表 5-2 例 2 中 (III) (上) 和 (IV) (下) 的特征值 ω 和特征函数 u, v 的误差。

(III): $\gamma_x = 1, \gamma_y = 1, \gamma_z = 1, \mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ 。				
	$h_0 = 4/5$	$h_0/2$	$h_0/4$	$h_0/8$
$e_{\omega_x}^h$	3.948E-02	2.623E-04	3.119E-11	4.456E-11
$e_{\omega_y}^h$	1.564E-02	1.463E-05	2.832E-11	1.334E-12
$e_{\omega_z}^h$	1.564E-02	1.463E-05	1.402E-09	9.087E-12
e_{uv}^{h,ω_x}	1.502E-01	5.478E-03	2.628E-07	6.311E-10
e_{uv}^{h,ω_y}	1.356E-01	2.047E-03	2.628E-07	1.753E-10
e_{uv}^{h,ω_z}	1.356E-01	2.047E-03	2.628E-07	1.753E-10
(IV): $\gamma_x = 1, \gamma_y = 1, \gamma_z = 2, \mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ 。				
	$h_0 = 3/2$	$h_0/2$	$h_0/4$	$h_0/8$
$e_{\omega_x}^h$	1.256E-01	1.323E-03	2.963E-08	3.394E-10
$e_{\omega_y}^h$	1.049E-02	6.551E-03	1.885E-06	2.984E-11
$e_{\omega_z}^h$	1.704E-02	4.007E-04	2.352E-07	4.285E-11
e_{uv}^{h,ω_x}	3.592E-01	1.105E-02	1.216E-05	1.349E-09
e_{uv}^{h,ω_y}	2.000	1.240E-01	5.009E-04	8.537E-09
e_{uv}^{h,ω_z}	2.660E-01	1.616E-02	6.010E-05	3.409E-10

第六章 总结与展望

6.1 本文总结

具有 DDI 的 BEC 的宏观行为满足 GP 方程，当 GP 方程有稳态解 ϕ_s 存在时，我们研究其稳态附近的 BdG 方程。BdG 方程的特征值 ω 和特征函数 (u, v) 有如下性质和规律：

关于 BdG 方程的解析性质，本文共介绍四条结论：

- (1) 在一般位势下，如果 BdG 方程的特征函数满足归一化条件，则对应的特征值是实数。
- (2) 当 GP 方程的稳态解 ϕ_s 为实值函数时，简谐位势下的 BdG 方程始终存在满足归一化条件的特解。
- (3) 在 TF 极限中，取沿 z 轴的偶极朝向和柱对称简谐位势，当 β 无穷大时，半径 R_x, R_y, R_z 和化学势 μ_s^{TF} 的渐近估计是 $O(\beta^{1/5})$ 和 $O(\beta^{2/5})$, $\beta \rightarrow \infty$ 。
- (4) 在 TF 极限中，取沿 z 轴的偶极朝向和各向同性简谐位势 $V(\mathbf{x}) = x^2 + y^2 + z^2$ ，当 β 无穷大时，特征值为 $\omega_\infty^{lk} = \sqrt{2} \sqrt{l + 3k + 2kl + 2k^2}$, $l \geq 0, k \geq 0$ 。

本文提出 SFSC-IRAM 算法来求解具有归一化条件的 BdG 方程的特征值和特征函数。本文首先通过 PCG-AKTM 方法^[48] 得到谱精度的基态解，然后通过 SFSC 算法得到非局部相互作用，再利用 Fourier 谱方法来离散 BdG 方程，最后通过 IRAM 方法求解 BdG 方程的特征值和特征向量。

关于 BdG 方程的数值实验，本文首先测试 SFSC-IRAM 算法的精度，再应用 SFSC-IRAM 算法研究不同的简谐位势、偶极朝向和相互作用强度对 BdG 方程的特征值和特征向量的影响。在任意局部（或非局部）相互作用强度下，都存在与简谐位势约束频率相等的特征值 ω 。BdG 方程的特征函数 (u, v) 沿约束频率较大的方向压缩。在对称简谐位势下，特征函数 (u, v) 沿偶极方向是对称（或反对称）的。

6.2 工作展望

本文在非对称简谐位势下只展示了 BdG 方程的特征函数图形，关于特征函数的更深刻性质，将在今后的工作中研究。本文通过 SFSC-IRAM 算法求解 DBEC 基态附近的 BdG 方程，此方法也可以研究旋转偶极 BEC 和自旋转偶极 BEC 基态附近的激发，将在今后的工作中研究。

参考文献

- [1] Advanpix multiprecision computing toolbox. <https://www.advanpix.com>.
- [2] Aikawa K, Frisch A, Mark M, Baier S, Rietzler A, Grimm R, Ferlaino F. Bose-Einstein Condensation of Erbium [J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108: artical 210401.
- [3] Anderson M H, Ensher J R, Mattews M R, Wieman C E, Cornell E A. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor [J]. *Science*, 1995, 269: 198-201.
- [4] Antoine X, Levitt A, Tang Q. Efficient spectral computation of the stationary states of rotating Bose-Einstein condensates by preconditioned nonlinear conjugate gradient methods [J]. *Journal of Computational Physics*, 2017, 343: 92-109.
- [5] Baillie D, Wilson R M, Blakie P B. Collective excitations of self-bound droplets of a dipolar quantum fluid [J]. *Physical Review Letters*, 2017, 119(25): artical 255302.
- [6] Bao W, Cai Y. Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensation [J]. *Kinetic and Related Models*, 2013, 6: 1-135.
- [7] Bao W, Cai Y, Wang H. Efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates [J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, 229: 7874-7892.
- [8] Bao W, Chern I, Lim F Y. Efficient and spectrally accurate numerical methods for computing ground and first excited states in Bose-Einstein condensates [J]. *Journal of Computational Physics*, 2006, 219: 836-854.
- [9] Bao W, Du Q. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow [J]. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 2004, 25: 1674-1697.
- [10] Bao W, Jian H, Mauser N J, Zhang Y. Dimension reduction of the Schrödinger equation with coulomb and anisotropic confining potentials [J]. *Siam Journal on Applied Mathematics*, 2013, 73(6): 2100-2123.
- [11] Bao W, Jiang S, Tang Q, Zhang Y. Computing the ground state and dynamics of the nonlinear Schrödinger equation with nonlocal interactions via the nonuniform FFT [J]. *Journal of Computational Physics*, 2015, 269: 72-89.
- [12] Bao W, Tang Q, Zhang Y. Accurate and efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates via the nonuniform FFT [J]. *Computer Physics Communications*, 2016, 19(5): 1141-1166.
- [13] Baranov M A. Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases [J]. *Physics Reports*, 2008, 464: 71-111.
- [14] Bose S N. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese [J]. *Zeitschrift fr Physik*, 1924, 3: 178-181.

- [15] Bradley C C, Sackett C A, Tollett J J, Hulet R G. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interaction [J]. *Physical Review Letters*, 1995, 75: 1687-1690.
- [16] Dalfovo F, Giorgini S, Pitaevskii L, Stringari S. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1999, 71(3): 463-512.
- [17] Danaila I, Khamehchi M A, Gokhroo V, Engels P, Kevrekidis P G. Vector dark-antidark solitary waves in multicomponent Bose-Einstein condensates [J]. *Physical Review A*, 2016, 94(5): artical 053617.
- [18] Danaila I, Protas B. Computation of Ground States of the Gross-Pitaevskii functional via Riemannian optimization [J]. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 2017, 39: 1102-1129.
- [19] Davis K B, Mewes M O, Andrews M R, Druten N J, Durfee D S, Kurn D M, Ketterle W. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms [J]. *Physical Review Letters*, 1995, 75: 3969-3973.
- [20] Edwards M, Ruprecht P A, Burnett K, Dodd R J, Clark C W. Collective excitations of atomic Bose-Einstein condensates [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(9): 1671-1674.
- [21] Eberlein C, Giovanazzi S, O'Dell D H G. Exact solution of the Thomas-Fermi equation for a trapped Bose-Einstein condensate with dipole-dipole interactions [J]. *Physical Review A*, 2005, 71(3): artical 033618.
- [22] Einstein A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases [J]. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 1924, 22: 261-267.
- [23] Einstein A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases, zweite abhandlung [J]. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 1925, 1: 3-14.
- [24] Exl L, Mauser N J, Zhang Y. Accurate and efficient computation of nonlocal potentials based on Gaussian-sum approximation [J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 327: 629-642.
- [25] Ferrier-Barbut I, Kadau, Schmitt M, Wenzel M, Pfau T. Observation of quantum droplets in a strongly Dipolar Bose gas [J]. *Physical Review Letters*, 2016, 116: article 215301.
- [26] Gao Y, Cai Y. Numerical methods for Bogoliubov-de Gennes excitations of Bose-Einstein condensates [J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, 403: artical 109058.
- [27] Greengard L, Jiang S, Zhang Y. The anisotropic truncated kernel method for convolution with free-space Green's functions [J]. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 2018, 40(6): 3733-3754.
- [28] Griesmaier A, Werner J, Hensler S, Stuhler J, Pfau T. Bose-Einstein condensation of Chromium [J]. *Physical Review Letters*, 2005, 94: article 160401.
- [29] 关治, 陆金甫. 数值分析基础[M]. 北京: 高等教育出版社, 2010.
- [30] Heid P, Stamm B, Wihler T P. Gradient flow finite element discretizations with energy-based adaptivity for the Gross-Gitaevskii equation [J/OL]. <https://arxiv.org/abs/1906.06954>.

-
- [31] Hu B, Huang G, Ma Y L. Analytical solutions of the Bogoliubov-de Gennes equations for excitations of a trapped Bose-Einstein-condensed gas [J]. *Physical Review A*, 2004, 69(6): article 063608.
- [32] Jia L, Wang A B, Yi S. Low-lying excitations of vortex lattices in condensates with anisotropic dipole-dipole interaction [J]. *Physical Review A*, 2018, 97: article 043614.
- [33] Jiang S, Greengard L, Bao W. Fast and accurate evaluation of nonlocal Coulomb and dipole-dipole interactions via the nonuniform FFT [J]. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 2014, 36: 777-794.
- [34] Jin D S, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E, Cornell E A. Collective Excitations of a Bose-Einstein Condensate in a Dilute Gas [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77: 420-423.
- [35] Kadau H, Schmitt M, Wenzel M, Wink C, Maier T, Ferrier-Barbut I, Pfau T. Observing the Rosensweig instability of a quantum ferrofluid [J]. *Nature*, 2016, 530: 194-197.
- [36] Lahaye T, Menotti C, Santos L, Lewenstein M, Pfau T. The physics of dipolar bosonic quantum gases [J]. *Reports On Progress In Physics*, 2009, 72: 126401.
- [37] Leggett A J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2001, 73: 307-356.
- [38] Li X G, Zhu J, Zhang R P, Cao S. A combined discontinuous Galerkin method for the dipolar Bose-Einstein condensation [J]. *journal of computational physics*, 2014, 275: 363-376.
- [39] London F. The λ -phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy [J]. *Nature*, 1938, 141: 643-644.
- [40] Lu M, Burdick N Q, Youn S H, Lev B L. A strongly dipolar Bose-Einstein condensate of Dysprosium [J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107: article 190401.
- [41] Martin A M, Marchant N G, O'Dell D H J, Parker N. G. Vortices and vortex lattices in quantum ferrofluids [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017, 29: 103004.
- [42] Morgan S A, Choi S, Burnett K, Edwards M. Nonlinear mixing of quasiparticles in an inhomogeneous Bose condensate [J]. *Physical Review A*, 1998, 57: article 3818.
- [43] Ronen S, Bortolotti D C E, Bohn J L. Bogoliubov modes of a dipolar condensate in a cylindrical trap [J]. *Physical Review A*, 2006, 57: article 013623.
- [44] Rozzi C A, Varsano D, Marini A, Gross E K U, Rubio A. Exact coulomb cutoff technique for supercell calculations [J]. *Physical Review B*, 2006, 73(20): article 205119.
- [45] Saad Y. Numerical methods for large eigenvalue problems [M]. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2011.
- [46] Schmitt M, Wenzel M, Böttcher F, Ferrier-Barbut I, Pfau T. Self-bound droplets of a dilute magnetic quantum liquid [J]. *Nature*, 2016, 539: 259-262.
- [47] Stringari S. Collective excitations of a trapped Bose-condensed gas [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(12): 2360-2363.

- [48] Tang Q, Wang H, Zhang Y. An efficient anisotropic method for computing the ground state and dynamics of the rotating dipolar BEC [J]. in preparation.
- [49] The ARPACK homepage. <https://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>.
- [50] Vico F, Greengard L, Ferrando M. Fast convolution with free-space green's functions [J]. Journal of Computational Physics, 2016, 323: 191-203.
- [51] Wang H. A projection gradient method for computing ground state of spin-2 Bose-Einstein condensates [J]. Journal of Computational Physics, 2014, 274: 473-488.
- [52] Wilson R, Ronen S, Bohn J L. Stability and excitations of a dipolar Bose-Einstein condensate with a vortex [J]. Physical Review A, 2009, 79: article 013621.
- [53] Wu X, Wen Z, Bao W. A regularized Newton method for computing ground states of Bose-Einstein condensates [J]. Journal of Scientific Computing, 2017, 73: 303-329.
- [54] 徐树方, 高立, 张平文. 数值线性代数[M]. 北京: 北京大学出版社, 2000.
- [55] Yi S, You L. Trapped condensates of atoms with dipole interactions [J]. Physical Review A, 2001, 63: article 053607.

发表论文和参加科研情况说明

(一) 发表的学术论文

- [1] Y. Q. Zhang, M. T. Xie and X. Liu, Efficient and accurate computation of the Bogoliubov-de Gennes excitations for the quasi-2D dipolar Bose-Einstein condensates, East Asian Journal on Applied Mathematics, Accepted, to appear.
- [2] Q. L. Tang, M. T. Xie, Y. Zhang and Y. Q. Zhang, A spectrally accurate numerical method for computing the Bogoliubov-de Gennes excitations of dipolar Bose-Einstein condensates, Under Review.

(二) 参与的科研项目

- [1] 在校期间参加谢满庭老师主持的国家自然科学基金项目：旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚态稳态的高效有限元方法研究（NSFC-12001402）。
- [2] 在校期间参加导师张勇教授主持的国家重点研发计划：低劣生物质转化利用的人工多细胞体系构建（2018YFA0902200）。

致 谢

三年前，我怀着科研梦想，载着家人期待，来到天津大学求学。在学业完成之际，我向读研期间给予我帮助的人们致以最衷心的感谢！

首先，感谢我的导师张勇教授，本论文是在张老师的悉心指导下完成的。在研究生期间，从论文选题、理论推导、数值方法的设计、数据结果的分析，到论文撰写修改，每一个环节张老师都给予我耐心的辅导。张老师的敦敦教诲不仅提升了我的科研创新能力还教会了我处事做人的方法。在此，我衷心的感谢张勇教授三年来给我的关心和指导。

不仅张勇教授对我帮助多多，谢满庭老师也在研究生期间给予了我很大的帮助。尤其是在求解大型稠密矩阵的特征值问题上，谢老师针对我的疑惑总是耐心辅导，还利用休息与我反复讨论每条定理的推导细节，帮助我解决代码中的问题。感谢谢满庭老师这三年来一点一滴帮助和指导。

在校科研之余，辅导员唐婧亚老师、孙鸿鹏老师、冯天强老师，给予我生活上的帮助，学习上的协助，感谢他们让我的生活更加精彩。同时我要感谢我的同学张少波、刘欣、孟祥宇、魏连博、李智轩，对我的研究工作给予的帮助。

我要特别感谢我的父母对我的关心与呵护，家人不仅在经济上给予支持，更在心灵上给我安慰，家人的关爱和鼓励是我的城池堡垒，让我更有勇气，更加坚定的相信梦想，开启崭新的人生。我还要感谢我的好友何北、许天琳、常钰、贾宏杰与我一起分享生命中的开心，陪我分担生活中的痛苦。

学生的时代就要结束了，从本科入学到推免研究生，暑期实习，九月秋招，我得到了很多人的帮助、关心和提携，是你们的存在让我在人生路上不断成长，不断前行，感谢大家。