arXiv:2603.05194v1 [math.NA] 5 Mar 2026

强各向异性阱中三维旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体基态计算的高效精确数值方法 *

Qinglin Tang†、Hanquan Wang‡、Shaobo Zhang †、和Yong Zhang§

摘要。本文提出一种高效且具有谱精度的数值方法，用于计算强各向异性囚禁势下三维（3D）旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体（BEC）的基态。核奇异性、卷积非局域性以及密度各向异性，使偶极势的求值更加复杂。快速旋转机制不仅会形成包含许多局部极小值的复杂能量景观，还会在凝聚体中产生大量涡旋。这些因素共同使基态计算在收敛性、精度和效率方面面临挑战，尤其对于三维各向异性系统。我们将各向异性截断核方法（ATKM）用于偶极势求值，并结合傅里叶谱离散，提出一种预条件共轭梯度法（PCG）。我们设计了自适应步长控制策略；ATKM 在不增加任何依赖于各向异性的额外内存需求或计算时间的情况下，实现了谱精度。该算法具有谱精度、高效且节省内存。我们给出了大量数值结果以验证其精度和效率，并将其应用于研究模型参数对临界旋转频率、能量和化学势的影响。此外，这些模拟还揭示了新的基态图样，例如弯曲涡旋。

关键词：三维各向异性旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体，基态，各向异性截断核函数方法，预条件共轭梯度法，弯曲涡旋

1. 引言。 自玻色-爱因斯坦凝聚（BEC）在 1995 [4, 16, 18], 首次成功实现以来，该领域已见证众多重大进展 [13, 23, 41]。值得注意的是，引入旋转参考系会产生涡旋 [2, 25], ，而长程偶极势则导致磁致伸缩等引人入胜的现象 [36] 以及量子液滴的形成 [33] ，这些量子液滴可自组织成超固相 [17, 32, 38]。近来，微波屏蔽技术已被用于抑制钠铯分子中的二体和三体损失，并首次实现了偶极分子玻色–爱因斯坦凝聚体，从而为强偶极量子物质和量子模拟提供了一个干净且高度可调的体系 [14]。此外，通过打破囚禁势的对称性，各向异性陷阱成为研究广泛基本机制与性质的多功能平台，从量子气体的形貌和各向异性膨胀[23] 到涡旋排列 [31] 以及准粒子激发 [41]。一个引人注目的发现是，弯曲涡旋 [2, 21, 22] 在具有强局域相互作用的细长旋转BEC中被观测到，这进一步启发了

*本研究得到国家重点研发计划（编号：2024YFA1012803）（Q. Tang、S. Zhang 和 Y. Zhang）、四川大学校级科研基金（编号：2020SCUNL110）（Q. Tang 和 S. Zhang）、天津大学基础研究基金（编号：2025XJ21-0010）（Y. Zhang）、国家自然科学基金委员会（编号：12271400）（S. Zhang 和 Y. Zhang）及（编号：11871418、11971120）（H. Wang），以及云南省基础研究计划（编号：202101AS070044）（H. Wang）的资助。

†中国四川省成都市一环路南一段24号，四川大学数学学院，邮编：610065。（qinglin_tang@scu.edu.cn, shaobo_zhang@scu.edu.cn）。

‡云南财经大学统计与数学学院，中国云南昆明，650221。（wang_hanquan@hotmail.com）。§通讯作者。天津大学应用数学中心和 KL-AAGDM，中国天津，300072。（Zhang_Yong@tju.edu.cn）。

对涡旋线的探索。鉴于这些进展，强各向异性势阱下旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体的研究引起了物理学界的极大兴趣，有望涌现出更多新颖的量子现象。

在温度 T 远低于临界温度 T_c时，三维旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体的性质可由复值波函数 $\psi(\mathbf{x}\ t)$ 描述，其演化由无量纲 Gross-Pitaevskii 方程（GPE）支配[8] ，如下所示

$$i\partial_t\psi(\mathbf{x},t) = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) + \beta|\psi|^2 + \lambda\,\Phi(\mathbf{x},t) - \Omega L_z\right]\psi(\mathbf{x},t), \tag{1.1}$$

$$\Phi(\mathbf{x},t) = \left(U_{\rm dip} * |\psi|^2\right)(\mathbf{x},t), \tag{1.2}$$

$$\psi(\mathbf{x},0) = \psi_0(\mathbf{x}), \tag{1.3}$$

其中，t 是时间变量，$*$ 表示关于空间变量 $\mathbf{x}\ =(x,y,z)^T\ \in\ \mathbb{R}^3$的卷积算子。旋转项 $L_z\ =\ -i(x\partial_y\ -y\partial_x)\ =\ -i\partial_\theta$ 是角动量的 z 分量，Ω 表示旋转频率。无量纲常数 β 描述凝聚体中短程双体相互作用的强度，而 $V(\mathbf{x})$ 是给定的实值外部囚禁势，其由所研究的系统决定。在大多数玻色-爱因斯坦凝聚实验中，通常选择谐势来囚禁凝聚体，即，

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\gamma_x^2x^2 + \gamma_y^2y^2 + \gamma_z^2z^2), \tag{1.4}$$

其中，$\gamma_x\ >\ 0$、$\gamma_y\ >\ 0$ 和 $\gamma_z\ >\ 0$ 是无量纲常数，分别与 x、y和 z方向上的囚禁频率成正比。当 $\gamma_x\ =\ \gamma_y\ =\ \gamma_z$时，囚禁势是各向同性的；否则，它是各向异性的。当囚禁频率比的最大值大于 1 时，即 $\max_{i,\ j=x,\ y,\ z}\{\gamma_i/\gamma_j\}\ \gg\ 1$，我们称该系统具有强各向异性。此外，$\lambda$ 是表征偶极势强度的常数，$U_{\rm dip}(\mathbf{x})$是定义如下的偶极-偶极相互作用核函数:

$$U_{\rm dip}(\mathbf{x}) = \frac{3}{4\pi|\mathbf{x}|^3}\left[1 - \frac{3(\mathbf{x}\cdot\boldsymbol{n})^2}{|\mathbf{x}|^2}\right] = -\delta(\mathbf{x}) - 3\,\partial_{\boldsymbol{nn}}\left(\frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|}\right), \qquad \mathbf{x}\in\mathbb{R}^3, \tag{1.5}$$

其中，偶极取向 $\boldsymbol{n}\ =\ (n_1,n_2,n_3)^T$ 是给定的单位向量，即 $|\boldsymbol{n}|\ =\ \sqrt{n_1^2+n_2^2+n_3^2}\ =\ 1$、$\partial_{\boldsymbol{n}}\ =\ \boldsymbol{n}\cdot\nabla$ 和 $\partial_{\boldsymbol{nn}}\ =\ \partial_{\boldsymbol{n}}(\partial_{\boldsymbol{n}})$。事实上，对于光滑密度$\rho(\mathbf{x})$:$=\ |\psi(\mathbf{x})|^2$，偶极势可通过三维库仑势改写如下:

$$\Phi(\mathbf{x}) = -\rho - 3\ \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} * (\partial_{\boldsymbol{nn}}\rho) := -\rho - 3\,[U * (\partial_{\boldsymbol{nn}}\rho)], \quad U(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|}, \tag{1.6}$$

其中 $U(\mathbf{x})$ 是三维库仑相互作用核。含时 Gross-Pitaevskii 方程 (1.1)–(1.3) 守恒两个重要量：波函数的 总质量 (或归一化)

$$N(\psi(\cdot,t)) := \|\psi(\cdot,t)\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^3}|\psi(\mathbf{x},t)|^2{\rm d}\mathbf{x} \equiv 1,\ \ t\geq 0, \tag{1.7}$$

以及单粒子能量

$$E(\psi(\cdot,t)) := \int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{2}|\nabla\psi|^2 + V(\mathbf{x})|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 + \frac{\lambda}{2}\Phi|\psi|^2 - \Omega\bar{\psi}L_z\psi\right){\rm d}\mathbf{x} \equiv E(\psi(\cdot,0)), \tag{1.8}$$

¯其中， ψ 是 ψ的共轭。

为求得方程（1.1）的定态解，我们设 ψ（$\mathbf{x}$ t）$=\phi$（$\mathbf{x}$）$e^{-i\mu t}$，其中 μ是凝聚体的化学势，而 ϕ（$\mathbf{x}$）是定态。将其代入（1.1），得到

$$\mu\ \phi(\mathbf{x}) = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) + \beta|\phi|^2 + \lambda\left(U_{\mathrm{dip}} * |\phi|^2\right) - \Omega L_z\right]\phi(\mathbf{x}). \tag{1.9}$$

这确实是在归一化约束 $N(\phi)$ =1 下的非线性特征值问题，且任意特征值 μ 均可由其对应的特征函数 ϕ 通过下式计算：

$$\begin{aligned}\mu &= \int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{2}|\nabla\phi|^2 + V(\mathbf{x})|\phi|^2 + \beta|\phi|^4 + \lambda\left(U_{\mathrm{dip}} * |\phi|^2\right)|\phi|^2 - \Omega\bar{\phi}L_z\phi\right)\mathrm{d}\mathbf{x}\\ &= E(\phi) + \int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{\beta}{2}|\phi|^4 + \frac{\lambda}{2}\left(U_{\mathrm{dip}} * |\phi|^2\right)|\phi|^2\right)\mathrm{d}\mathbf{x}.\end{aligned}$$

等价地，定态 ϕ 是单位球面 $\mathcal{S}$上能量泛函 $E(\phi)$ 的临界点：$=\{\phi(\mathbf{x})\,|\,\|\phi\|_{L^2}^2=1,\ E(\phi)<\infty\}$。基态 ϕ_g定义为能量泛函 $E(\phi)$ 的极小值点：

$$\phi_g = \arg\min_{\phi\in\mathcal{S}} E(\phi). \tag{1.10}$$

旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体中基态的存在性已经得到了充分的理论研究 [8]。当囚禁势具有强各向异性时，例如呈煎饼形或雪茄形，三维系统可以近似为二维或一维模型 [11]。然而，这类低维近似与物理系统之间仍存在差距，尤其是在中等各向异性区域。重要的是，某些物理现象，例如旋转玻色-爱因斯坦凝聚中的涡旋线，只能在三维空间中观测到。因此，尽管计算成本不可避免地很高，仍有必要采用原始的三维模型。迄今为止，针对强各向异性区域中的旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体，能够用于计算其基态的数值方法仍然很少。

数值研究各向异性旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体的基态面临三项挑战：(i) 强各向异性阱会使各个方向上的变化尺度大不相同，因此所有方向都需要足够高的分辨率，才能捕捉精细结构。(ii) 奇异核和各向异性密度给兼顾精度与效率地计算偶极势带来了重大挑战。(iii) 快速旋转会诱发量子涡旋的形成，并产生包含许多局部极小值的复杂能量景观 [35], ，从而使基态的计算更加复杂。

在限制性各向异性势 $V(\mathbf{x})$的作用下，波函数 ψ （密度ρ）光滑、快速衰减且具有各向异性。因此，只需将整个空间截断为一个各向异性矩形区域

$$\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} := \prod\nolimits_{\alpha}[-L\xi_\alpha, L\xi_\alpha], \qquad 0<\xi_\alpha\le 1, \qquad \alpha = x,y,z, \tag{1.11}$$

在 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$的最长边上设有 $\xi_\alpha=1$。随后，在每个空间方向上以均匀网格对截断区域进行离散化。各向异性向量及其强度定义如下：

$$\boldsymbol{\xi} = (\xi_x,\xi_y,\xi_z)^T, \qquad \xi_f = 1/(\xi_x\xi_y\xi_z) \tag{1.12}$$

分别。为方便读者，我们给出了各向异性计算区域的图示，其中 $\boldsymbol{\xi} = (1\,10, 1\,10, 1)^T$（雪茄形）以及 $\boldsymbol{\xi} = (1, 1, 1\,10)^T$（煎饼形）见图1。一波函数（密度）可由.....很好地近似



图1：雪茄形与煎饼形区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$ 的示意图，其中 $\boldsymbol{\xi} = (1\,10, 1\,10, 1)^T$（左）以及 $\boldsymbol{\xi} = (1, 1, 1\,10)^T$（右）。

傅里叶谱方法[8, 34], 借助离散快速傅里叶变换（快速傅里叶变换），以 $\mathcal{O}(N\log N)$的效率实现谱精度。为捕捉涡旋晶格等精细结构，网格尺寸必须足够小，这通常会导致大规模系统，进而带来严重的内存与计算成本。

由于核奇异性、卷积非局域性与密度各向异性，在保持类似快速傅里叶变换效率的同时以谱精度计算偶极势颇具挑战。近十年来，已提出若干快速谱方法，包括非均匀快速傅里叶变换方法（非均匀快速傅里叶变换）[26], 高斯求和方法（高斯求和）[20], 核截断方法（KTM）[39] 以及各向异性截断核方法（ATKM）[24]。这些方法均能达到相近的谱精度，但效率有所不同，尤其是在密度呈强各向异性的情形下。对于非均匀快速傅里叶变换与KTM，内存需求与效率表现随各向异性强度线性变化，因此它们几乎难以处理强各向异性情形。高斯求和方法将势分为一个正则积分与一个奇异积分，其计算时间高于ATKM。本文采用ATKM，该方法由Greengard等人 [24] 提出，专门通过将计算区域作矩形而非圆形延拓来处理各向异性密度 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$ （1.11）。ATKM的内存需求与效率不依赖于各向异性强度，从而即使密度函数呈强各向异性时也能保证优异性能。

对于基态的计算，已有许多基于虚时间演化的方法被提出 [8, 10, 9, 12]。对于快速旋转的玻色-爱因斯坦凝聚，这些方法往往收敛缓慢，因此难以在可接受的计算时间内获得基态。另一种方法是通过求解约束非线性特征值问题来获得基态，而这实际上对应于定义在黎曼流形上的优化问题 [3, 19]。因此，自然可以应用最先进的黎曼优化技术 [1, 15] 。例如，针对旋转玻色-爱因斯坦凝聚提出的预条件共轭梯度算法（PCG） [5] ，大幅加快了收敛速度并显著提高了效率。对于常规各向同性俘获势中的旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体，已有研究将 PCG 与 KTM 结合来考察其基态 [6] 。对于处于强各向异性势阱中的玻色-爱因斯坦凝聚，由于使用 KTM 计算偶极势会带来巨大的内存负担和较长的计算时间，上述方法几乎难以实际应用。

针对上述各方面，本文旨在提出一种预条件化

共轭梯度算法，并结合 ATKM 计算偶极势。通过设计适当的步长控制策略，并解决 PCG 与 ATKM 集成所带来的挑战，我们的方法以高效率实现了谱精度；更重要的是，内存需求与各向异性强度无关。随后，我们研究了不同参数设置下偶极玻色-爱因斯坦凝聚体中的弯曲涡旋（第 3.2 小节），研究结果证实了我们的算法在处理此类强各向异性偶极系统时的重要性和必要性。此外，我们利用该算法发现了新的基态图样，并全面研究了模型参数对临界旋转频率和能量的影响。

本文其余部分安排如下：第 2 节介绍傅里叶谱方法的空间离散，并简要回顾用于计算偶极势的 ATKM，随后提出一种将 PCG 与 ATKM 相结合的准确高效数值算法。第 3 节给出大量数值结果，以验证该方法的准确性和效率，并通过应用研究模型参数对临界旋转频率、能量及化学势的影响。此外，我们还识别出若干基态图样，并研究偶极玻色-爱因斯坦凝聚体中的弯曲涡旋。最后，第 4 节给出结论。

2. 数值算法。

首先，我们采用傅里叶谱方法 [34]对区域 ϕ 上的波函数 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$ (1.11) 进行离散。然后，我们详细介绍用于计算偶极势的 ATKM，并提出一种准确高效的数值方法，用于计算各向异性陷阱中旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体的基态。

2.1. 空间离散。

计算区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$ 沿各空间方向以网格尺寸 $h_\alpha = 2L\xi_\alpha/N_\alpha$进行离散，其中 $N_\alpha(\alpha = x, y, z)$ 为偶正整数，总网格数记为 $N = N_x N_y N_z$。为简便起见，记网格尺寸向量 $\mathbf{h}:= (h_x, h_y, h_z)$、网格数向量 $\boldsymbol{N}:=(N_x, N_y, N_z)$，以及网格 $\mathbf{x}_{\boldsymbol{j}}:= (x_{j_x}, y_{j_y}, z_{j_z})$。网格集合定义为

$$\mathcal{T} := \{\mathbf{x}_{\boldsymbol{j}} = (-L\xi_x + j_x h_x, -L\xi_y + j_y h_y, -L\xi_z + j_z h_z),\ \boldsymbol{j} \in \mathcal{I}_{\boldsymbol{N}}\},$$

其指标集为

$$\mathcal{I}_{\boldsymbol{N}} := \{\boldsymbol{j} = (j_x, j_y, j_z) \in \mathbb{N}^3 \,\big|\, 0 \le j_\alpha \le N_\alpha - 1,\ \alpha = x, y, z\}.$$

记 $f_{\boldsymbol{j}}$ 为 $f(\mathbf{x}_{\boldsymbol{j}})$ 的数值近似，$\mathbf{x}_{\boldsymbol{j}} \in \mathcal{T}$，并将 f 记为向量
其分量为 $\{f_{\boldsymbol{j}}\}_{\boldsymbol{j}\in\mathcal{I}_{\boldsymbol{N}}}$。此外，引入傅里叶指标集

$$\Lambda_{\boldsymbol{N}} := \{\boldsymbol{k} := (k_x, k_y, k_z) \in \mathbb{Z}^3 \mid -N_\alpha/2 \le k_\alpha \le N_\alpha/2 - 1,\ \alpha = x, y, z\},$$

并将傅里叶基函数定义为

$$W^L_{\boldsymbol{k}}(\mathbf{x}) := e^{i\nu_{k_x}(x+L\xi_x)}\, e^{i\nu_{k_y}(y+L\xi_y)}\, e^{i\nu_{k_z}(z+L\xi_z)}, \quad \nu_{k_\alpha} = \pi k_\alpha/(L\xi_\alpha), \quad \boldsymbol{k} \in \Lambda_{\boldsymbol{N}}.$$

波函数 ϕ 在区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$ 上的傅里叶谱近似为

$$\phi(\mathbf{x}) \approx \sum_{\boldsymbol{k}\in\Lambda_{\boldsymbol{N}}} \widehat{\phi}_{\boldsymbol{k}}\, W^L_{\boldsymbol{k}}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in \mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}, \tag{2.1}$$

其中，$\widehat{\phi}_{\boldsymbol{k}}$（离散傅里叶系数）由下式给出

$$\widehat{\phi}_{\boldsymbol{k}} := \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{j}\in\mathcal{I}_{\boldsymbol{N}}} \phi_{\boldsymbol{j}}\, \overline{W^L_{\boldsymbol{k}}}(\mathbf{x}_{\boldsymbol{j}}). \tag{2.2}$$

上述求和可通过快速傅里叶变换在 $\mathcal{O}(N\log N)$ 次运算内加速完成。事实上，近似式（2.1）实际上是网格点$\mathbf{x_j} \in \mathcal{T}$处的一个插值函数。我们通过对网格 $\partial_x\phi$， $\Delta\phi$ 和 $L_z\phi$ 上的相应有限傅里叶级数（2.1）求导，来近似 $\mathcal{T}$，如下所示：

$$
\begin{aligned}
(\partial_x\phi)_{\boldsymbol{j}} &\approx (\llbracket\partial_x\rrbracket\phi)_{\boldsymbol{j}} = \sum_{\boldsymbol{k}\in\Lambda_{\boldsymbol{N}}} (i\nu_{k_x})\ \widehat{\phi}_{\boldsymbol{k}}\ W_{\boldsymbol{k}}^{L}(\mathbf{x_j}),\\
(\Delta\phi)_{\boldsymbol{j}} &\approx (\llbracket\Delta\rrbracket\phi)_{\boldsymbol{j}} = \sum_{\boldsymbol{k}\in\Lambda_{\boldsymbol{N}}} \left(-\sum_{\alpha=x,y,z} (\nu_{k_\alpha})^2\right) \widehat{\phi}_{\boldsymbol{k}}\ W_{\boldsymbol{k}}^{L}(\mathbf{x_j}),\\
(L_z\phi)_{\boldsymbol{j}} &\approx (\llbracket L_z\rrbracket\phi)_{\boldsymbol{j}} = -i(x\llbracket\partial_y\rrbracket\phi - y\llbracket\partial_x\rrbracket\phi)_{\boldsymbol{j}}.
\end{aligned}
\tag{2.3}
$$

2.2. 各向异性截断核方法。计算偶极势时，显然，当源点与目标点重合时，卷积积分的直接离散化可能会发散，因此需要对由奇异但可积的卷积核函数引起的奇异性进行特殊处理。基于直接积分离散化的数值格式，其计算复杂度约为 $\mathcal{O}(N^2)$ 次浮点运算，通常耗时过长；对于高维问题，由于总网格数 N 很容易飙升至数百万甚至数十亿，这类方法甚至变得不切实际。此外，在强各向异性阱下，密度函数呈现出显著的空间各向异性。也就是说，其紧支撑在一个或两个空间方向上的跨度远小于其他方向上的跨度。这种各向异性密度会加剧计算难度。这里我们选择快速谱求解器 ATKM [24], ，它专为计算各向异性密度对应的卷积型非局域势而设计。如式（1.6）所示，偶极势可以改写为密度与由 $\partial_{\boldsymbol{nn}}\rho(\mathbf{x})$产生的库仑势之和。

由于密度 ρ 光滑、具有各向异性且呈指数衰减，因此合理地假设 ρ 在各向异性矩形区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$内具有紧支撑。此时， $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$ 上的势为

$$
\begin{aligned}
\Phi(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathrm{d}\mathbf{y} = \int_{\mathbf{x}+\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathrm{d}\mathbf{y},\\
&= \int_{\mathcal{D}_{2L\boldsymbol{\xi}}} U(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y})\mathrm{d}\mathbf{y}, \qquad \mathbf{x}\in\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}.
\end{aligned}
\tag{2.4}
$$

第三个等式成立是因为，对于任意的 $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$、$\mathbf{y} \in \mathcal{D}_{2L\boldsymbol{\xi}}\backslash(\mathbf{x}+\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}})$，都有 $\mathbf{x}-\mathbf{y} \notin \mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$，因此 $\rho(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = 0$。为了计算式 (2.4) 中的积分，我们需要在区域 $\mathcal{D}_{3L\boldsymbol{\xi}}$上近似密度 ρ，因为对于任意的 $\mathbf{x} \in \mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$ 和 $\mathbf{y} \in \mathcal{D}_{2L\boldsymbol{\xi}}$，都有 $\mathbf{x}-\mathbf{y} \in \mathcal{D}_{3L\boldsymbol{\xi}}$。一种自然的做法是通过零填充将密度延拓至 $\mathcal{D}_{3L\boldsymbol{\xi}}$，并在该区域上应用傅里叶谱方法。幸运的是，得益于傅里叶级数的周期性，只需在一个两倍大小的区域 $\mathcal{D}_{2L\boldsymbol{\xi}}$ 上近似密度即可；更多细节请参见[24, 20] 。

密度 ρ 通过以下傅里叶谱方法得到了很好的分辨

$$
\rho(\mathbf{z}) \approx \sum_{\boldsymbol{k}\in\Lambda_{2\boldsymbol{N}}} \widehat{\rho}_{\boldsymbol{k}}\ W_{\boldsymbol{k}}^{2L}(\mathbf{z}), \qquad \mathbf{z}\in\mathcal{D}_{2L\boldsymbol{\xi}},
\tag{2.5}
$$

其中离散傅里叶系数 $\widehat{\rho}_{\boldsymbol{k}}$ 如下给出

$$
\widehat{\rho}_{\boldsymbol{k}} := \frac{1}{8N} \sum_{\boldsymbol{j}\in\mathcal{I}_{2\boldsymbol{N}}} \rho_{\boldsymbol{j}}\ \overline{W_{\boldsymbol{k}}^{2L}}(\mathbf{z_j}).
\tag{2.6}
$$

将（2.5）代入（2.4），我们得到

$$\Phi(\mathbf{x}) \approx \sum_{\boldsymbol{k}\in\Lambda_{2\boldsymbol{N}}} \widehat{U}_{\boldsymbol{k}}\, \widehat{\rho}_{\boldsymbol{k}}\; W_{\boldsymbol{k}}^{2L}(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x}\in\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}, \tag{2.7}$$

其中，定义域 $\mathcal{D}_{2L\boldsymbol{\xi}}$ 上核函数 $U(\mathbf{y})$ 的傅里叶系数 $U_{\boldsymbol{k}}$ 定义如下

$$\widehat{U}_{\boldsymbol{k}} := \int_{\mathcal{D}_{2L\boldsymbol{\xi}}} U(\mathbf{y})\, \overline{W_{\boldsymbol{k}}^{2L}}(\mathbf{y})\, \mathrm{d}\mathbf{y}. \tag{2.8}$$

上述奇异傅里叶积分实际上是有明确定义的，Greengard 等人提出了一种高效且准确的算法，通过对对称核函数 $U(\mathbf{y})$ [24] 进行黑箱式高斯和近似来计算该积分。利用高斯函数的可分离结构，傅里叶系数 $U_{\boldsymbol{k}}$ 可在 $\mathcal{O}(N)$ 次运算内计算得出。显然，一旦获得 $U_{\boldsymbol{k}}$，非局部势的计算（2.7）便可通过以下三个简单步骤完成：(1) 通过快速傅里叶变换计算离散傅里叶系数 $\widehat{\rho}_{\boldsymbol{k}}$ (2.6)；(2) 通过逐点函数乘法计算 $U_{\boldsymbol{k}}\,\widehat{\rho}_{\boldsymbol{k}}$；(3) 通过逆快速傅里叶变换计算 $\Phi(\mathbf{x}_j)$。总计算成本为 $\mathcal{O}(2^3 N \log(2^3 N))$。

如上所述，我们在一开始就通过采用各向异性矩形区域并进行两次各向异性延拓，考虑了密度各向异性这一性质。一旦获得了 $U_{\boldsymbol{k}}$ (2.8的计算结果——它也是定义在各向异性区域上的傅里叶积分——便可通过在每个空间方向上长度加倍的向量进行一对快速傅里叶变换/逆快速傅里叶变换来计算势。因此，计算时间和内存需求均不受各向异性强度 ξ_f (1.12的影响。相比之下，对于 KTM，总最优零填充因子与各向异性强度 [28], 呈线性关系，而且在高维情形下，预计算傅里叶系数会受到高得令人望而却步的内存需求和计算成本的严重制约。

Remark 1。为了直观地比较 KTM 和 ATKM，我们考虑一个各向异性向量为 $\boldsymbol{\xi} = (1, 1, 1)^T$的双精度计算。这里我们比较傅里叶系数所需的内存 $\widehat{U}_{\boldsymbol{k}}$。对于网格数为 $N = 256^3$的均匀网格，ATKM 仅需 $256^3 \times 2^3 \times 8/2^{30}\text{Gb} = 1$ Gb 内存。相比之下，KTM 的总最优零填充因子*[39]* 达到 432，内存需求高达 54 Gb，远超大多数个人计算机的容量。换言之，内存需求的降低比例为 $1 - \frac{8}{432} \approx 98\%$。

Remark 2。在模拟中，非局域势通常会在相同的数值设置下被多次调用，也就是说，计算区域和网格均固定不变。因此，$U_{\boldsymbol{k}}$ 的计算会在预计算步骤中一次性完成。

2.3. 基态计算。预条件共轭梯度法已被用于计算有偶极势或无偶极势的旋转玻色-爱因斯坦凝聚的基态 [5, 6, 43]。尽管其效率已得到充分验证，现有方法都是针对各向同性阱或弱各向异性阱设计的。针对最具挑战性的强各向异性区域，我们提出一种结合 ATKM 计算偶极势的预条件共轭梯度法，以计算基态，并解决强各向异性阱下由快速旋转、归一化约束和偶极势所导致的精细涡旋结构基态带来的难题。

基于小节 2.1 中的傅里叶伪谱空间离散方法，我们将能量 $E(\phi)$ 在网格 $\mathcal{T}$ 上离散如下

$$E(\phi) \approx \mathcal{E}(\phi) = \left\langle -\frac{1}{2}[\![\Delta]\!]\phi + V \odot \phi + \frac{\beta}{2}|\phi|^2 \odot \phi + \frac{\lambda}{2}[\![\Phi]\!] \odot \phi - \Omega[\![L_z]\!]\phi,\ \phi \right\rangle, \tag{2.9}$$

其中，$[\![\Phi]\!]$ 是 Φ的数值近似，$\odot$ 表示阿达马积，并且

$$\langle U, V\rangle := \Re\left(h_x h_y h_z \sum_{\boldsymbol{j}\in\mathcal{I}_{\boldsymbol{N}}} U_{\boldsymbol{j}}\overline{V}_{\boldsymbol{j}}\right), \qquad \forall\, U, V \in \mathbb{C}^N, \tag{2.10}$$

是定义在 $\mathbb{C}^N$ 上的内积，其中 $\Re(\cdot)$表示复数的实部。于是，最小化问题（1.10）被离散化为有限维最小化问题

$$\phi_g = \arg\min_{\phi\in\mathbb{S}} \mathcal{E}(\phi), \quad \mathbb{S} := \{\phi \in \mathbb{C}^N |\ \|\phi\| = 1\}, \tag{2.11}$$

其范数为 $\|U\| = \langle U,\ U\rangle^{\frac{1}{2}}$。

能量 $\mathcal{E}(\phi)$在 $\mathbb{C}^N$ 上的（欧几里得）梯度为

$$\begin{aligned} &\nabla\mathcal{E}(\phi) = 2H_\phi\phi, \\ &H_\phi\phi = -\frac{1}{2}[\![\Delta]\!]\phi + V \odot \phi + \beta|\phi|^2 \odot \phi + \lambda[\![\Phi]\!] \odot \phi - \Omega[\![L_z]\!]\phi. \end{aligned} \tag{2.12}$$

点 $\phi \in \mathbb{S}$ 处的切空间定义为 $T_\phi\mathbb{S} := \{f \in \mathbb{C}^N \mid \langle f, \phi\rangle = 0\}$。从 $\mathbb{C}^N$ 到切空间 $T_\phi\mathbb{S}$ 的正交投影 $J_\phi(f)$为

$$J_\phi(f) := f - \langle f, \phi\rangle\, \phi. \tag{2.13}$$

$\mathbb{S}$ 上的能量黎曼梯度为

$$\nabla_{\mathbb{S}}\mathcal{E}(\phi) = J_\phi(\nabla\mathcal{E}(\phi)) = 2(H_\phi\phi - \mu_\phi\phi) \quad \text{with} \quad \mu_\phi = \langle H_\phi\phi, \phi\rangle. \tag{2.14}$$

一阶必要最优性条件指出，在最小值点 $\phi \in \mathbb{S}$处，能量的梯度在约束流形 $\mathbb{S}$上为零，即 $\nabla_{\mathbb{S}}\mathcal{E}(\phi) = 0$。该条件实际上就是与问题（2.11）对应的欧拉-拉格朗日方程：

$$H_\phi\phi = \mu_\phi\, \phi. \tag{2.15}$$

此外，本文提出了流形 $\mathbb{S}$ 上的预条件共轭梯度法。

为数值求解最小化问题（2.11），我们将 f 的第 n步抽象网格函数记为 f_n。从 ϕ_n 沿流形 $\mathbb{S}$上的下降方向 p_n移动时，我们采用回缩

$$\phi_{n+1} = R_{\phi_n}(t_n p_n) := \cos(t_n\|p_n\|)\phi_n + \sin(t_n\|p_n\|)\ p_n/\|p_n\|, \tag{2.16}$$

其中 $p_n \in T_{\phi_n}\mathbb{S}$，步长为 $t_n > 0$（稍后确定）。关于方向p_n，我们首先将 $\mathbb{S}$ 的切丛定义为 $T\mathbb{S} := \cup_{\phi\in\mathbb{S}} T_\phi\mathbb{S}$。传输算子 $\mathcal{V}$: $T\mathbb{S} \times T\mathbb{S} \longrightarrow T\mathbb{S}$，其具体形式如下

$$\mathcal{V}_u(v) := J_{R_\phi(u)}(v) = v - \langle v, R_\phi(u)\rangle R_\phi(u), \quad \forall\, u \in T_\phi\mathbb{S},\ v \in T_\varphi\mathbb{S},$$

将点 φ 处的向量 $v \in T_{\varphi}\mathbb{S}$ 映射到点 R_{ϕ}的切空间（u） $\in \mathbb{S}$。具体而言，对于$p_{n-1} \in T_{\phi_{n-1}}\mathbb{S}$ 和 $v \in T_{\phi_{n-1}}\mathbb{S}$，有 $\mathcal{V}_{t_{n-1}p_{n-1}}(v) = J_{\phi_n}(v)$。然后，将共轭梯度法的方向选为

$$p_n = \begin{cases} J_{\phi_n}(-Pr_n), & n = 0, \\ J_{\phi_n}(-Pr_n) + \beta_n^{cg}\mathcal{V}_{t_{n-1}p_{n-1}}(p_{n-1}) = J_{\phi_n}(-Pr_n) + \beta_n^{cg} J_{\phi_n}(p_{n-1}), & n > 0, \end{cases} \tag{2.17}$$

残差为 $r_n = \nabla_{\mathbb{S}}\mathcal{E}(\phi_n)/2 = H_{\phi_n}\phi_n - \mu_{\phi_n}\phi_n$。参数 β_n^{cg}采用 Polak-Ribi`ere 选取方式 [1]

$$\begin{aligned} &\beta_n^{cg} = \max(\beta_n^{PR}, 0), \\ &\beta_n^{PR} = \langle r_n - J_{\phi_n}(r_{n-1}), J_{\phi_n}(Pr_n)\rangle / \langle r_{n-1}, J_{\phi_{n-1}}(Pr_{n-1})\rangle. \end{aligned} \tag{2.18}$$

预条件子 P 是一个对称正定算子，用于加速迭代收敛，其定义为 [6]

$$P = P_V^{1/2} P_{\Delta} P_V^{1/2}, \tag{2.19}$$

其中， P_{Δ} 和 P_V 分别表示

$$\begin{aligned} &P_{\Delta} = (\alpha_{\Delta} - [\![\Delta]\!]/2)^{-1}, \\ &P_V = \left(\alpha_V + V + \beta|\phi_n|^2 + |\lambda|(1 + \mathrm{sign}([\![\Phi_n]\!]))[\![\Phi_n]\!]/2\right)^{-1}, \end{aligned} \tag{2.20}$$

其中 α_{Δ} 和 α_V 为正移位常数，此处取

$$\alpha_{\Delta} = \alpha_V = \langle -\frac{1}{2}[\![\Delta]\!]\phi_n + V \odot \phi_n + \beta|\phi_n|^2 \odot \phi_n, \phi_n\rangle + |\lambda\langle [\![\Phi_n]\!] \odot \phi_n, \phi_n\rangle| > 0. \tag{2.21}$$

该组合预条件子具有近乎最优的收敛性能，其迭代次数与计算区域和网格尺寸无关。更多详情请参阅 [5, 6]。

为了求得 t_n 在方程（2.16）中的值，我们求解以下非线性极小化问题

$$t_n = \arg\min_{t>0} Q(t), \qquad Q(t) := \mathcal{E}\left(R_{\phi_n}(t\, p_n)\right), \tag{2.22}$$

采用标准的一维极小化算法。由于精确线搜索耗时较长，我们引入以下近似方法，以获得 t_n的简单且成本低得多的近似值。鉴于回缩（2.16）具有二阶精度，我们将 Q（t）展开如下

$$Q(t) \approx \mathcal{E}(\phi_n) + 2t\,\langle H_{\phi_n}\phi_n,\ p_n\rangle + t^2\big(\langle H_{\phi_n}p_n,\ p_n\rangle + \langle g_n,\ p_n\rangle - \mu_{\phi_n}\|p_n\|^2\big), \tag{2.23}$$

其中 $g_n = 2\phi_n\left(\beta\Re(\bar{\phi}_n p_n) + \lambda U * \Re(\bar{\phi}_n p_n)\right)$。注意， $\langle H_{\phi_n}\phi_n,\ \ p_n\rangle$可能为负，因此方向 p_n 可能不是下降方向，能量也可能不会降低。为选择合适的步长 t_n，我们采用以下步骤：(i) 检查一阶项的系数是否为负。若是，则选择共轭梯度方向，并保持 β_n^{cg}不变；否则，采用预条件化最速下降（PSD）方法 [5], ，即设定 $\beta_n^{cg} = 0$ ，以确保 $\langle H_{\phi_n}\phi_n,\ \ p_n\rangle < 0$ 鉴于预条件子 P 是正定的。(ii) 进一步检查二阶项的系数是否为正。若是，对 2.23) 关于 t 求极小值可得

$$t_n^{\mathrm{app}} = -\langle H_{\phi_n}\phi_n,\ p_n\rangle \,/\, \big(\langle H_{\phi_n}p_n,\ p_n\rangle + \langle g_n,\ p_n\rangle - \mu_{\phi_n}\|p_n\|^2\big)\,. \tag{2.24}$$

若不是，则将步长设为默认值，即 $t_n = 0.3$。(iii) 随后检查 ϕ_{n+1} 的能量是否降低。若降低，则接受该步长；否则，将步长减半，直至能量降低。上述过程保证了能量衰减性质。

为方便读者，求解最小化问题 (1.10) 的方法总结于 算法 2.1中，我们将其称为 PCG-ATKM。本文采用以下停止准则

$$\|\boldsymbol{\phi}_{n+1} - \boldsymbol{\phi}_n\|_{l^\infty} \le \varepsilon. \tag{2.25}$$

算法 2.1 PCG-ATKM

预计算系数 $U_{\boldsymbol{k}}$。

设置迭代计数器 $n = 0$ 和初始数据 ϕ_0。

当尚未收敛时执行

Step 1: *Compute* Φ_n *via ATKM.*

Step 2: $r_n = H_{\phi_n}\phi_n - \mu_{\phi_n}\phi_n$ *with* $\mu_{\phi_n} = \langle H_{\phi_n}\phi_n, \phi_n\rangle$.

Step 3: $p_n = \begin{cases} J_{\phi_n}(-Pr_n), & n = 0, \\ J_{\phi_n}(-Pr_n) + \beta_n^{cg} J_{\phi_n}(p_{n-1}), & others. \end{cases}$

步骤4：校正方向 p_n 并选择步长 t_n:

- *If* $\langle H_{\phi_n}\phi_n,\ p_n\rangle < 0$, *keep* p_n *unchanged; otherwise, set* $p_n = J_{\phi_n}(-Pr_n)$.
- *If* $\langle H_{\phi_n}p_n,\ p_n\rangle + \langle g_n,\ p_n\rangle - \mu_{\phi_n}\|p_n\|^2 > 0$, *take* t_n *as* (2.24)*; otherwise, set* $t_n = 0.3$.
- *If* $\mathcal{E}(\phi_{n+1}) \ge \mathcal{E}(\phi_n)$, *decrease* t_n *by half until the energy decreases.*

步骤5： $\phi_{n+1} = \cos(t_n\|p_n\|)\phi_n + \sin(t_n\|p_n\|)$ $p_n/\|p_n\|$。步骤6： $n = n + 1$。结束 while

在每次迭代中，下降方向的确定与步长近似都涉及偶极势的求值。鉴于波函数（密度）在各向异性陷阱中所表现出的空间各向异性，采用ATKM在内存需求与计算成本方面最适合强各向异性情形。在同一区域上使用相同的均匀网格时，预条件共轭梯度法与ATKM的结合十分自然，且无需额外工作。

直接在固定细网格上求解最小化问题（1.10）需要计算高维泛函，因此即使大部分计算都能通过快速傅里叶变换加速，仍然十分耗时，尤其对于三维各向异性系统。初始猜测通常无法准确近似基态，这会显著延缓收敛过程，尤其是在涉及快速旋转和强各向异性的情况下。为缓解这种低效问题，我们采用级联多重网格技术 [6]。通过较粗网格解插值得到的数值解通常比常用的初始猜测更准确，因此预计能够更快收敛，而实际计算也确实观察到了这一点。这种级联多重网格方法总结于 算法2.2。下文为方便起见，将其称为 PCG-ATKM-MG。

算法 2.2 PCG-ATKM-MG

给定初始网格 $\mathcal{T}^i$，网格数为 $N_\alpha^i = k_\alpha \times 2^i$、 $\alpha = x$、 y、 z。
给定 $\mathcal{T}^i$ 上的初始数据 ϕ_0^i。

当尚未达到最细网格时
步骤 1：计算基态 ϕ_g^i，利用算法2.1。
步骤 2：在细化网格 $\mathcal{T}^{i+1}$ 上对 ϕ_g^i 进行插值，从而设定 ϕ_0^{i+1}。
步骤 3： $i = i + 1$。
结束 while

REMARK 3。在各向同性阱下，算法 PCG-KTM *[6]* 是计算旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体基态的一种合适、准确且高效的数值方法。而在各向异性陷阱下，由于非局域势求解器 KTM 采用各向同性截断技术，该方法需要大量存储空间和更多计算时间。如 *[28],* 所示，KTM 的总最优零填充因子随各向异性强度线性增加。这意味着在极强各向异性陷阱下，内存需求将大到难以承受。值得注意的是，
PCG-ATKM-MG 的内存需求与各向异性强度无关。

REMARK 4。经过适当修改后，PCG-ATKM-MG 可以推广到其他相关的玻色–爱因斯坦凝聚体模型，例如多组分玻色–爱因斯坦凝聚体 *[37]* 以及液滴偶极玻色-爱因斯坦凝聚体 *[33],*，后者涉及著名的 Lee-Huang-Yang 项 *[27]*，用以描述量子涨落机制。本文不给出相关细节，留待今后的工作。

3. 数值结果。在本节中，我们检验 PCG-ATKM-MG 的精度与效率，然后将其用于研究各种涡旋图样，例如旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体中的弯曲涡旋。此外，我们考察模型参数对临界旋转频率的影响，并详细研究能量与化学势的变化。

在以下实验中，我们考虑谐势（1.4），选取矩形区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}$ 并沿每个空间方向进行均匀离散。我们在每个空间方向上取相同数量的网格点，并从 $N/4^3$ 个总点开始，使用三级多重网格运行算法，直至达到 N 个点。对于初始猜测，我们有以下 10 种选择 [6]:

$(a)\ \phi_a(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi^3}} e^{\frac{-|\mathbf{x}|^2}{2}}$, $(b)\ \phi_b(\mathbf{x}) = \frac{(x+iy)\phi_a(\mathbf{x})}{\|(x+iy)\phi_a(\mathbf{x})\|_{L^2}}$, $(\bar{b})\ \phi_{\bar{b}}(\mathbf{x}) = \bar{\phi}_b(\mathbf{x})$,
$(c)\ \phi_c(\mathbf{x}) = \frac{\phi_a(\mathbf{x})+\phi_b(\mathbf{x})}{\|\phi_a(\mathbf{x})+\phi_b(\mathbf{x})\|_{L^2}}$, $(\bar{c})\ \phi_{\bar{c}}(\mathbf{x}) = \bar{\phi}_c(\mathbf{x})$,
$(d)\ \phi_d(\mathbf{x}) = \frac{(1-\Omega)\phi_a(\mathbf{x})+\Omega\phi_b(\mathbf{x})}{\|(1-\Omega)\phi_a(\mathbf{x})+\Omega\phi_b(\mathbf{x})\|_{L^2}}$, $(\bar{d})\ \phi_{\bar{d}}(\mathbf{x}) = \bar{\phi}_d(\mathbf{x})$,
$(e)\ \phi_e(\mathbf{x}) = \frac{\Omega\phi_a(\mathbf{x})+(1-\Omega)\phi_b(\mathbf{x})}{\|\Omega\phi_a(\mathbf{x})+(1-\Omega)\phi_b(\mathbf{x})\|_{L^2}}$, $(\bar{e})\ \phi_{\bar{e}}(\mathbf{x}) = \bar{\phi}_e(\mathbf{x})$, $(f)\ \phi_f(\mathbf{x}) = \frac{\phi_g^{\mathrm{TF}}(\mathbf{x})}{\|\phi_g^{\mathrm{TF}}(\mathbf{x})\|_{L^2}}$,

其中

$$\phi_g^{\mathrm{TF}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sqrt{(\mu_g^{\mathrm{TF}} - V(\mathbf{x}))/\beta}, & V(\mathbf{x}) < \mu_g^{\mathrm{TF}}, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \quad \text{with} \quad \mu_g^{\mathrm{TF}} = \frac{1}{2}\left(\frac{15\beta\gamma_x\gamma_y\gamma_z}{4\pi}\right)^{2/5}.$$

在实际计算中，我们选择停止准则（2.25），并取 $\varepsilon = 10^{-10}$ 除非另有说明，否则选择能量最低的数值解作为基态，以下记为 $\phi_g^{\mathbf{h}}$。当陷阱选为谐势时

（1.4），与定态 ϕ （1.9）相关的能量满足以下维里恒等式 [8]

$$0 = I(\phi) := 2E_{\rm kin}(\phi) - 2E_{\rm pot}(\phi) + 3\ E_{\rm int}(\phi) + 3E_{\rm dip}(\phi), \tag{3.1}$$

with

$$E_{\rm kin}(\phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}|\nabla\phi|^2 {\rm d}\mathbf{x}, \quad E_{\rm pot}(\phi) = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})|\phi|^2 {\rm d}\mathbf{x},$$
$$E_{\rm int}(\phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\beta}{2}|\phi|^4 {\rm d}\mathbf{x}, \quad E_{\rm dip}(\phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\lambda}{2}\Phi\,|\phi|^2 {\rm d}\mathbf{x}.$$

上述维里恒等式的数值近似（3.1）记为 $I^{\mathbf{h}}$，并采用其绝对值 $|I^{\mathbf{h}}|$ 作为维里恒等式残差，以衡量其近似精度。该算法采用 Fortran 实现，所有报告的计时结果均在 Ubuntu GNU/Linux 系统上，使用配备 36 MB 缓存的 Intel(R) Xeon(R) Gold6248R CPU 3.00GHz、Intel ifort 编译器及 -O3 优化级别获得。

3.1. 精度验证与效率表现。本小节将介绍我们的方法在不同物理参数下处理各向同性和各向异性陷阱时的谱空间精度与效率表现。

注意，对于任意满足 $|\kappa| = 1$ 的 $\kappa \in \mathbb{C}$，等式 $E(\phi) = E(\kappa\phi)$ 均成立。因此，数值误差按相对 l^2-范数衡量，如下所示

$$E_2 := \|\phi_g^{\mathbf{h}} - \kappa\,\phi_g\|_{\mathbf{h}}/\|\phi_g\|_{\mathbf{h}}, \qquad \kappa = \langle\phi_g^{\mathbf{h}}, \phi_g\rangle_{\mathbf{h}}/\langle\phi_g, \phi_g\rangle_{\mathbf{h}},$$

其中 $\langle f, g\rangle_{\mathbf{h}} := h_x h_y h_z \sum_{\boldsymbol{j}\in\mathcal{I}_{\boldsymbol{N}}} f_{\boldsymbol{j}}\ \overline{g}_{\boldsymbol{j}}$ 是两个复值网格函数的内积，‘精确’基态 ϕ_g 是在非常精细的网格（$N = 512^3$）上数值求得的，而 $\phi_g^{\mathbf{h}}$ 是网格尺寸为 h 时计算得到的数值解。

值得指出的是，在各向同性阱中，能量具有旋转不变性，即对于任意旋转矩阵，$E(\phi(R_\alpha \mathbf{x})) = E(\kappa\phi(\mathbf{x}))$ 均成立

$$R_\alpha = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}, \qquad \forall\ \alpha \in [0, 2\pi].$$

当旋转频率超过临界值时，基态会形成多个涡旋。在这种情况下，使用 E_2 衡量数值近似误差并不恰当。因此，我们引入如下修正误差定义：

$$\widetilde{E_2} := \min_{\alpha} \|\phi_g^{\mathbf{h}}(R_\alpha\mathbf{x}) - \kappa_\alpha\phi_g(\mathbf{x})\|_{\mathbf{h}}/\|\phi_g(\mathbf{x})\|_{\mathbf{h}},\ \kappa_\alpha = \langle\phi_g^{\mathbf{h}}(R_\alpha\mathbf{x}), \phi_g(\mathbf{x})\rangle_{\mathbf{h}}/\langle\phi_g(\mathbf{x}), \phi_g(\mathbf{x})\rangle_{\mathbf{h}}.$$

上述优化问题采用内点法 [30]，求解，该方法已在 Matlab 的内置函数 ’fmincon’ 中实现。借助基于剪切分解 [29, 40] 的快速旋转算法，通过快速傅里叶变换高效且准确地实现了从 $\phi(\mathbf{x})$ 到 $\phi(R_\alpha\mathbf{x})$ 的函数旋转映射。

Example 3.1.（精度与效率测试）给定偶极取向 $\boldsymbol{n} = (0, 0, 1)^T$、$\beta = 100$ 和 $\lambda = 0.8\beta$，我们针对以下两种情形，计算不同旋转频率 Ω 下的基态：

Case I*(Isotropic trap):* $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 1$*;*
Case II*(Anisotropic trap):* $\gamma_x = 1$, $\gamma_y = 2$, $\gamma_z = 10$.

我们将停止准则 (2.25) 设为 $\varepsilon = 10^{-12}$，并针对 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} = [-16, 16]^3$情形 I 和 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} = [-16, 16]^2 \times [-10, 10]$ 情形 II 选择计算区域，这是由于其各向异性陷阱。

表1展示了情形 I-II 的相对误差 l^2 $E_2, \widetilde{E_2}$ 以及维里恒等式残差 $|I^{\mathbf{h}}|$；图1给出了 $\Omega = 0.85$ 时情形 I 中“精确”基态 $|\phi_g(x,y,z=0)|^2$ 和数值基态 $|\phi_g^{\mathbf{h}}(x,y,z=0)|^2$（$N = 256^3$）的等高线图。可以观察到，对于所有情形，误差 $E_2, \widetilde{E_2}$ 和 $|I^{\mathbf{h}}|$ 均随空间网格尺寸减小而呈谱精度收敛。图2展示了计算时间（以秒为单位），由此可知，其效率呈现与快速傅里叶变换类似的典型复杂度 $\mathcal{O}(N\log N)$。这一表现与预期相符，因为每次计算的迭代次数显著小于网格数 N。总之，PCG-ATKM-MG 是一种准确且高效的数值求解器，可用于计算各向同性和各向异性情形下的基态。

表1：各向同性和各向异性陷阱的数值误差例3.1 .

情形 I: $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 1$					
Ω	N	32^3	64^3	128^3	256^3
0.2	E_2	4.1267E-03	2.3477E-05	2.1482E-09	2.2755E-12
	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	2.1743E-02	2.5129E-05	1.6822E-11	1.3450E-12
0.4	E_2	4.2588E-03	2.3483E-05	2.1482E-09	4.3439E-12
	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	2.1810E-02	2.5129E-05	1.5696E-11	2.0317E-13
0.6	E_2	4.6460E-03	2.3493E-05	2.1482E-09	6.9024E-12
	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	2.1959E-02	2.5129E-05	1.5724E-11	4.8439E-13
0.8	E_2	1.0000	8.5676E-05	4.9185E-09	3.7105E-11
（1 个涡旋）	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	9.3167E-02	1.2527E-04	2.7377E-11	1.1491E-13
0.85	$\widetilde{E_2}$	1.1340E-01	7.9153E-04	1.4546E-07	3.4234E-09
（2 个涡旋）	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	1.0275E-01	5.6180E-05	4.3209E-11	6.9289E-12
情形 II: $\gamma_x = 1, \gamma_y = 2, \gamma_z = 10$					
Ω	N	32^3	64^3	128^3	256^3
0.2	E_2	1.0737E-01	2.5143E-03	2.4725E-06	1.0235E-11
	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	4.3461	5.4160E-02	3.7568E-06	4.4853E-12
0.4	E_2	1.1212E-01	2.5217E-03	2.4340E-06	3.3305E-11
	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	4.4398	5.5158E-02	3.5739E-06	2.2435E-12
0.6	E_2	3.1052E-01	2.5985E-03	2.3537E-06	9.1651E-11
	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	4.6578	5.6558E-02	2.9120E-06	3.7419E-12
0.8	E_2	7.8085E-01	4.7745E-02	8.7262E-06	3.5937E-10
(2 个涡旋)	$\lvert I^{\mathbf{h}}\rvert$	4.5065	2.8864E-02	5.6266E-06	1.1440E-11

3.2. 偶极玻色-爱因斯坦凝聚体中的弯曲涡旋。已知在局域相互作用较强的细长旋转BEC中会出现弯曲涡旋，其在不存在偶极势时的行为已在先前研究中得到充分阐明[2, 21, 22]。在此基础上，本小节研究存在.....时的弯曲涡旋

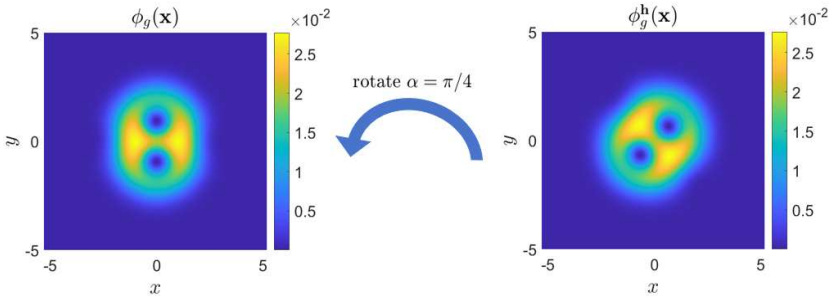


图1：等高线图 $|\phi_g(x,\ y,\ z=0)|^2$ 和 $|\phi_g^{\mathbf{h}}(x,\ y,\ z=0)|^2$，其中 $N = 256^3$ 对应 $\Omega = 0.85$，取自 情形 I 中的 例 **3.1**。

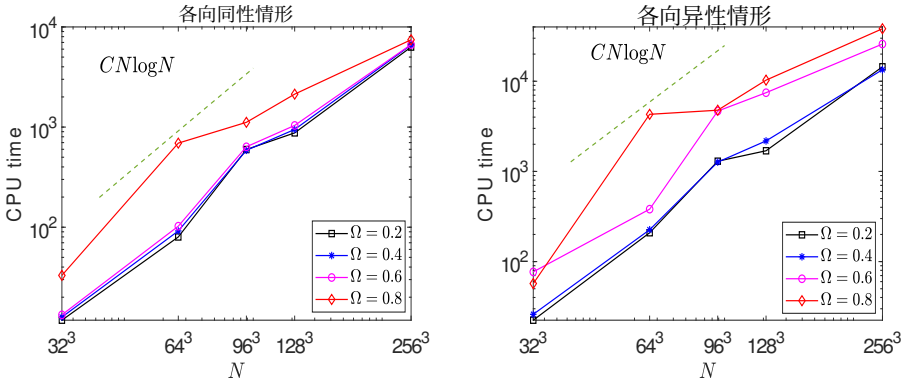


图2：情形 I （左）和 情形 II （右）在 例 3.1中的计算时间 .

偶极势。此后，若未明确说明，为了表述简便，我们将混用 $\phi_g^{\mathbf{h}}$ 和 ϕ_g 。

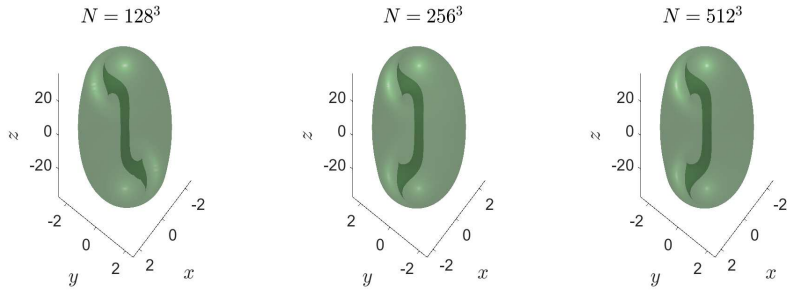
EXAMPLE 3.2.（U 形涡旋线）给定 $\gamma_x = \gamma_y = 1$、$\gamma_z = 0.05$、$\beta = 1000$、$\lambda = -300$，$\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ 以及 $\Omega = 0.75$，我们选取区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} = [-10, 10]^2 \times [-100, 100]$，并分别取网格数 $N = 128^3$、256^3、512^3 来计算基态。

表2 给出了能量 E、维里恒等式残差 $|I^{\mathbf{h}}|$ 和哈密顿量残差 $\|r_n\|$ 在不同 N下的结果，图3 展示了$|\phi_g(\mathbf{x})|^2 = 3 \times 10^{-4}$的相应等值面图。这些结果表明，U 形涡旋态更有可能是基态。相反，采用$N = 128^3$ 计算得到的 S 形涡旋态并非基态，因为其相应的维里恒等式残差 $|I^{\mathbf{h}}|$ 相对较大，精度仅有 5 位（ 9.0018×10^{-6} 如表2所示），这是由于网格数不足所致。涡旋结构相当精细，其计算对网格尺寸十分敏感，因此网格应尽可能取得精细，这当然构成了巨大的数值挑战，尤其是在各向异性陷阱和强偶极势情形下。

EXAMPLE 3.3.（不同偶极势下的弯曲涡旋）给定$\gamma_x = \gamma_y = 1$、$\gamma_z = 0.1$ 和 $\beta = 9000$，我们计算以下两种情况下的基态：$\Omega = 0.41$

表 2：能量 E， $|I^{\mathbf{h}}|$ 和 $\|r_n\|$ 对于不同的 N 在 示例 **3.2**。

N	E	$\|I^{\mathbf{h}}\|$	$\|r_n\|$
128^3	2.276210347750	9.0018E-06	5.1475E-09
256^3	2.276210390179	2.8555E-11	7.8405E-09
512^3	2.276210390179	3.0787E-12	7.4651E-09



(a) S形 (b) U形 (c) U形

图3：等值面图 $|\phi_g(\mathbf{x})|^2 = 3 \times 10^{-4}$ 采用不同的 N 在示例**3.2**。

以及 $\Omega = 0.49$

Case I: $\lambda = 0$; ***Case II***: $\lambda = 4000$, $\boldsymbol{n} = (0, 0, 1)^T$;

Case III: $\lambda = 4000$, $\boldsymbol{n} = (1, 0, 0)^T$; ***Case IV***: $\lambda = -4000$, $\boldsymbol{n} = (0, 0, 1)^T$.

计算在 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} = [-10, 10]^2 \times [-100, 100]$ 条件下进行，其中 $N = 384^3$。图4 展示了密度的等值面 $|\phi_g(\mathbf{x})|^2$，由此可知，偶极势会影响涡旋图案，包括涡旋数量和中心涡旋线的长度。此外，对于 $\boldsymbol{n} = (0, 0, 1)^T$，负 λ 值对应的基态中涡旋数量多于其正值对应的情况（参见图 4的第二列和第四列）。

3.3. 临界旋转频率。 在旋转玻色-爱因斯坦凝聚中，只有当旋转频率 Ω 超过某个临界值 Ω_c时，基态中才会出现涡旋。在本小节中，我们将分别考察临界旋转频率 Ω_c 如何随谐势的囚禁频率（1.4）、局域相互作用强度β、偶极势强度 λ 以及偶极取向 $\boldsymbol{n}$而变化。除非另有说明，我们取 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} = [-10, 10]^3$ 和 $N = 128^3$。

EXAMPLE 3.4.（外势和局域相互作用的影响）在没有偶极势的情况下，即 $\lambda = 0$, 我们研究以下情形中 Ω_c 的变化：

情形 I：令 $\beta = 2000$、 $\gamma_x = \gamma_z = 1$ ，并改变 γ_y；情
形 II：令 $\beta = 2000$、 $\gamma_x = \gamma_y = 1$ ，并改变 γ_z；案例
III：令 $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 1$ ，并改变 β。

对于情形 I-II，计算区域选为 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} = [-16, 16]^3$ ，网格数为 $N = 256^3$。图5 展示了临界旋转频率的变化

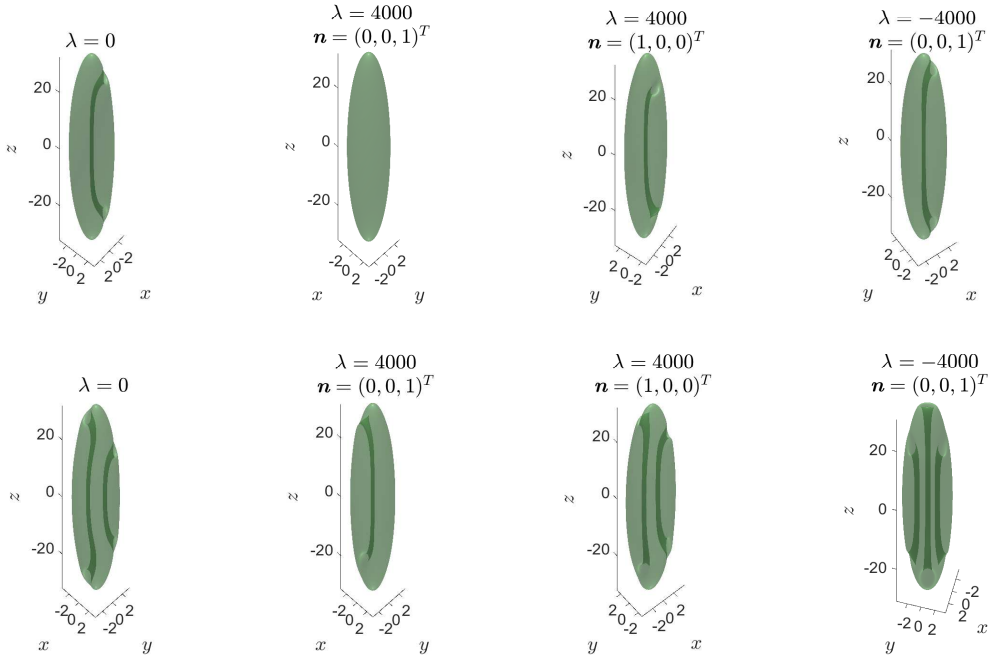


图 4：$|\phi_g(\mathbf{x})|^2 = 3\times10^{-4}$ 的等值面，对应于 $\Omega = 0.41$（上排）和 $\Omega = 0.49$（下排），案例 I-IV（从左到右），示例 **3.3**。

Ω_c 分别随囚禁频率 γ_y、γ_z 和局域相互作用强度 β的变化情况。从图中可以清楚地观察到：（i）临界旋转频率 Ω_c 随 γ_y增加而升高，而随 γ_z增加则呈下降趋势。（ii）临界旋转频率 Ω_c 随 β 增加而降低，且 β越小，下降越快。此外，根据此处未展示的大量数值结果，可以合理推测，当 β 趋于零时，Ω_c 趋于 1。

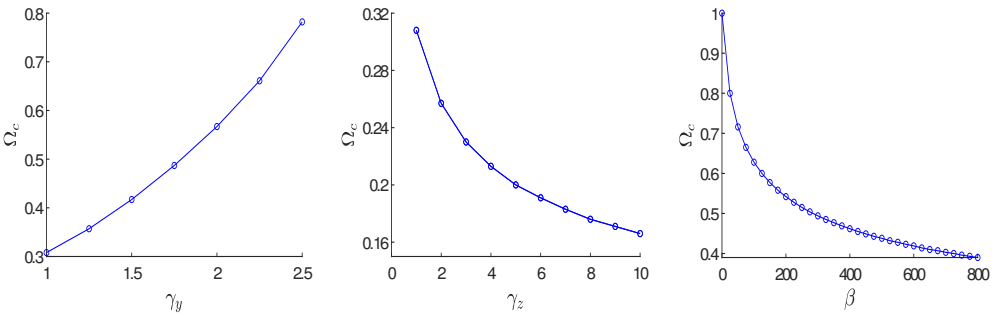


图 5：Ω_c 的变化，情形 I–III，示例 **3.4**。

EXAMPLE 3.5.（偶极势的影响）给定各向同性谐振子势，即 $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}|\mathbf{x}|^2$，我们研究以下情形中 Ω_c 的变化：

情形 I：令 $\mathrm{n}=(0,0,1)^T$，取 $\beta=200$、300、400 并改变 λ；

情形 II：除 $\mathrm{n}=(1,0,0)^T$ 外，与情形 I 相同；

情形 III：令 $\beta=400$，$\mathrm{n}=(\sin\theta,0,\cos\theta)^T$，其中 $\theta\in[0,\pi]$变化，并分别取$\lambda=0$、±50、±100、±200。

图 6 展示了情形 I-II 中临界旋转频率 Ω_c 随偶极势强度 λ 的变化，以及情形 III 中其随角度 θ 的变化。从图中可以清楚地看出，当偶极取向为$\boldsymbol{n}=(0,0,1)^T$时，随着 λ 增大，Ω_c 也增大。对于取向 $\boldsymbol{n}=(1,0,0)^T$，当 $\lambda<0$时，随着 $|\lambda|$ 增大，Ω_c 也增大。而当 λ为正时，随着 λ 增大，Ω先减小后增大。根据此处未列出的数值结果，考虑各向同性谐势$V(\mathrm{x})$，我们得出以下结论：(i) 当偶极取向 $\boldsymbol{n}$ 位于 x-y 平面内时，Ω_c的变化规律与取向为 $\boldsymbol{n}=(1,0,0)^T$的情形相同。(ii) Ω_c 不受取向的方位角 $\boldsymbol{n}$影响。

在图6的第三幅图中，θ 表示偶极取向$\boldsymbol{n}$ 与旋转轴（z轴）的夹角。对于正的 λ，Ω_c 随着偶极取向相对于旋转轴从平行（$\theta=0$，π）转为垂直（$\theta=\pi/2$）排列而减小；而对于负的 λ，则会增大。此外，对于给定的正c，Ω $\lambda=\alpha$ 的变化幅度小于对应负值时的变化幅度$\lambda=-\alpha$。

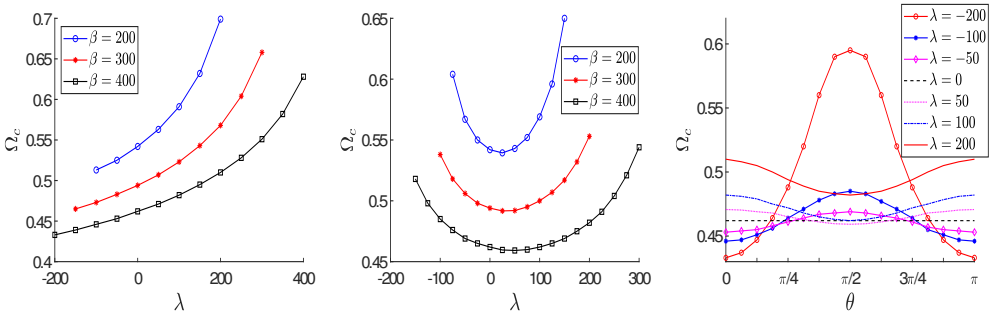


图 6：Ω_c随 λ变化的情况，其中 $\boldsymbol{n}=(0,0,1)^T$、$(1,0,0)^T$，以及 θ在$\boldsymbol{n}=(\sin\theta,\ 0,\ \cos\theta)^T$中的变化（从左至右），对应于例**3.5**。

3.4. 对能量和化学势的影响。本小节研究化学势 μ 和能量 E、E_{kin}、E_{pot}、E_{int}、E_{dip}、E_{rot}：$=-\Omega\int_{\mathbb{R}^3}\bar{\psi}L_z\psi\mathrm{d}\mathbf{x}$ 随不同物理参数的变化趋势，包括谐势的因禁频率（1.4）、局域相互作用强度 β、偶极势强度 λ 以及旋转频率 Ω。我们选取计算区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}}=[-20,20]^3$，并采用网格数 $N=256^3$，除非另有说明。

Example 3.6.（外势的影响）在此，我们研究能量和化学势对外势的依赖关系。为此，我们选取谐势，其中 $\gamma_y=1$、$\beta=600$、$\Omega=0.6$、$\lambda=-200$、$\mathrm{n}=(0,0,1)^T$，并考虑以下情形：

情形 I：令 $\gamma_z=1$ 并改变 γ_x；

情形 II：令 $\gamma_x=1$ 并改变 γ_z。

图 7 描绘了 情形 I-II 中能量和化学势的变化，由此可见：(i) 只有能量 E 和 E_{dip} 连续变化，而

化学势 μ 和 E_{kin}、E_{pot}、E_{int}、E_{rot} 在涡旋数发生变化的相变点处呈现“跳跃”。(ii) 能量 E 随着 γ_x 和 γ_z的增加均单调增加。(iii) 能量 E_{dip} 随着 γ_x 单调增加（随着 γ_z单调减少）。

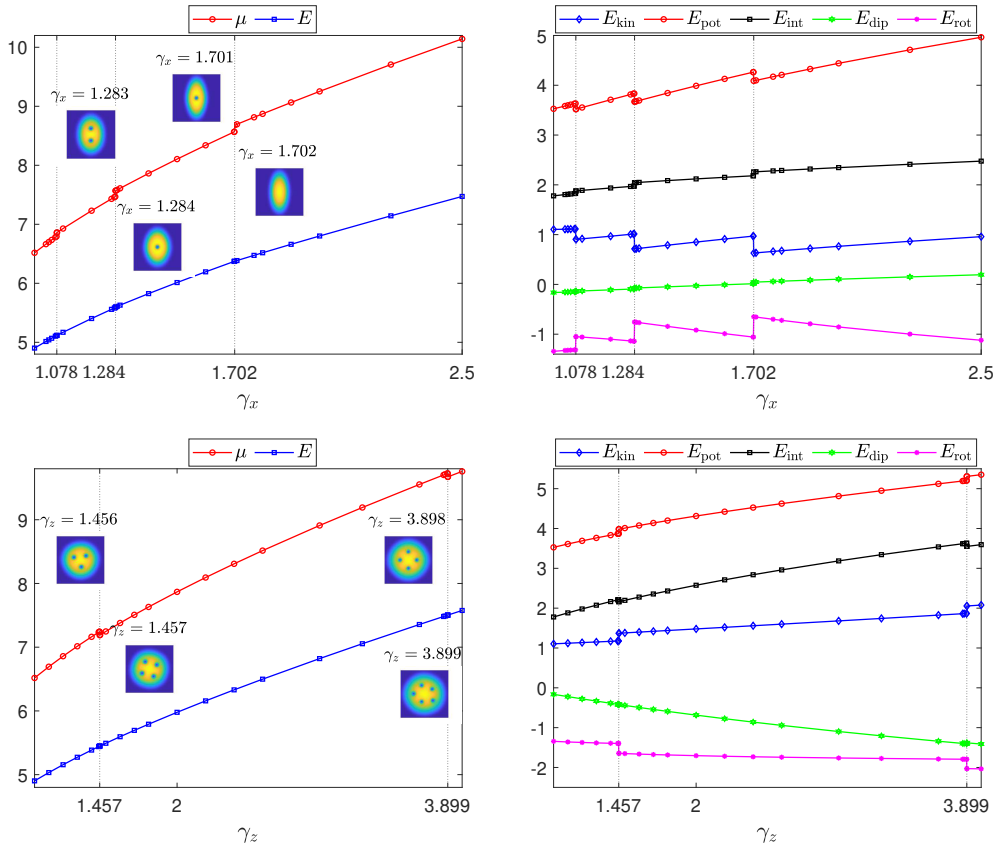


图 7：能量和 μ 在 情形 I-II （从上到下）中的变化例 3.6。

EXAMPLE 3.7.（短程/长程相互作用和旋转频率的影响）给定偶极取向 $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ 以及各向同性谐振势，即 $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}|\mathbf{x}|^2$，我们研究以下情形下能量和化学势的变化：

情形 I：令 $\Omega = 0.6, \lambda = -200$，并改变 β；情形 II：令 $\Omega = 0.6, \beta = 600$，并改变 λ；案例 III：令 $\beta = 600, \lambda = -200$，并改变 Ω。

对所有情形，我们均取计算区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} = [-16, 16]^3$。图 8 给出了能量与化学势的变化，从中可以清楚地看出：(i) 仅能量 E 与 E_{dip} 连续变化，而化学势 μ 与 E_{kin}、E_{pot}、E_{int}、E_{rot} 在基态发生相变时呈现突变不连续。(ii) E 与 E_{dip} 均随 β （Ω）单调增大（减小）。(iii) 在各向同性阱下，当不存在涡旋时，在基

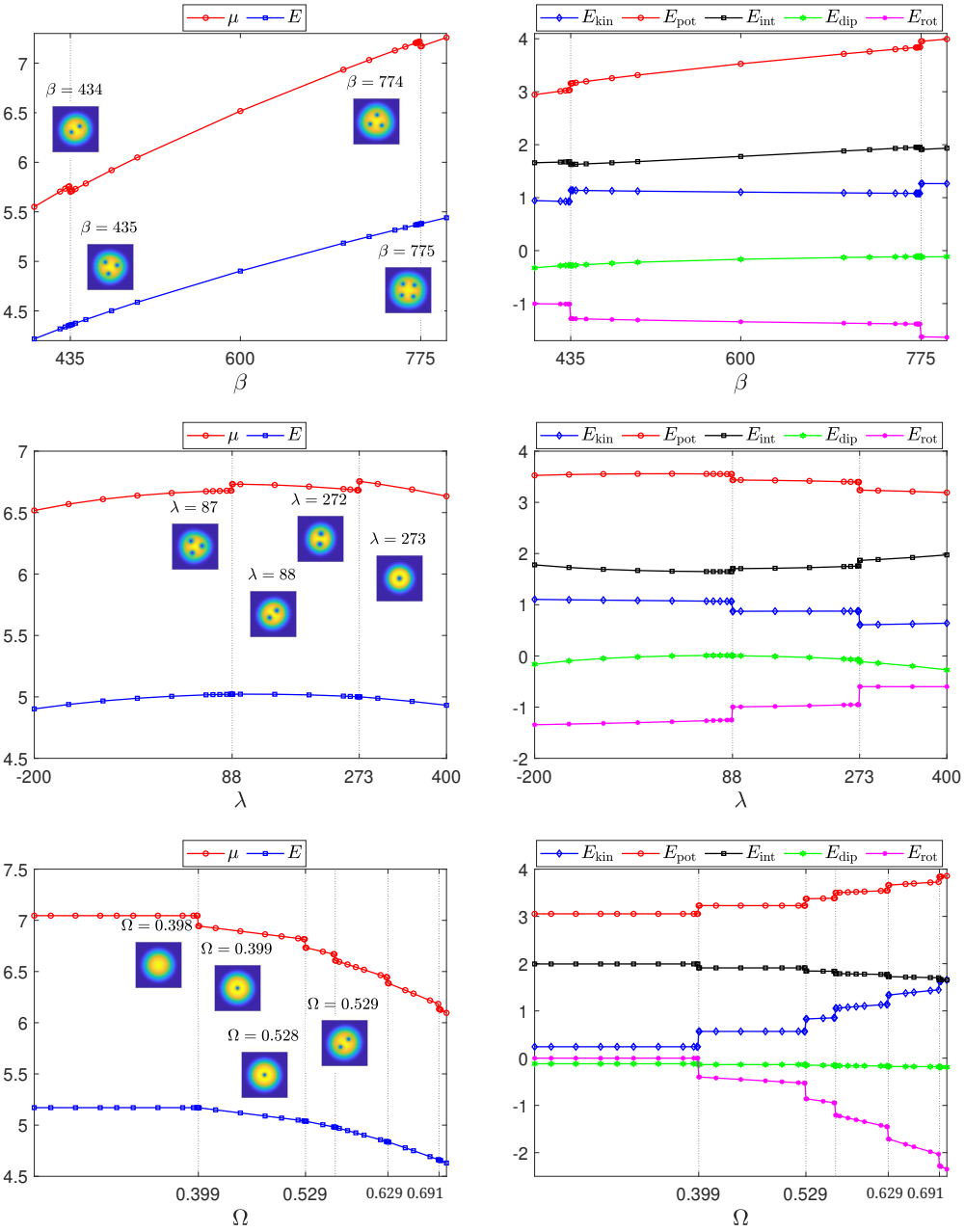


图 8：能量的变化以及 μ 对于 情形 I–III (从上到下)在例 **3.7**。

态中，所有能量与化学势 μ 均随 Ω 的增大而保持不变。

3.5. 各向异性陷阱中的基态图样。这里我们计算各向异性旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体的基态，并展示相应的基态图样。在以下数值测试中，我们取 $\beta = 5000$、$\Omega = 0.85$,

$\gamma_y = \gamma_z = 1$ 并选择计算区域 $\mathcal{D}_{L\boldsymbol{\xi}} = [-14, 14]^3$，网格数为$N = 256^3$。

EXAMPLE 3.8.（非偶极玻色-爱因斯坦凝聚）在没有偶极势的情况下，即$\lambda = 0$，我们分别取 $\gamma_x = 1$、1.5、2、3，并计算基态。

图 9 展示了 $|\phi_g(x, y, z = 0)|^2$ 的等高线图，以及 $|\phi_g(\mathbf{x})|^2 = 3\times10^{-4}$ 在不同 γ_x下对应的等值面图。从中可以看出：(i) 涡旋线平行于旋转轴。(ii) 在各向同性谐势下，涡旋晶格呈现阿布里科索夫晶格特有的三角形排列（参见图9第一列）。(iii) 随着 γ_x 增大，即各向异性强度增强，密度分布在 x方向上逐渐变窄，涡旋数量也随之减少。

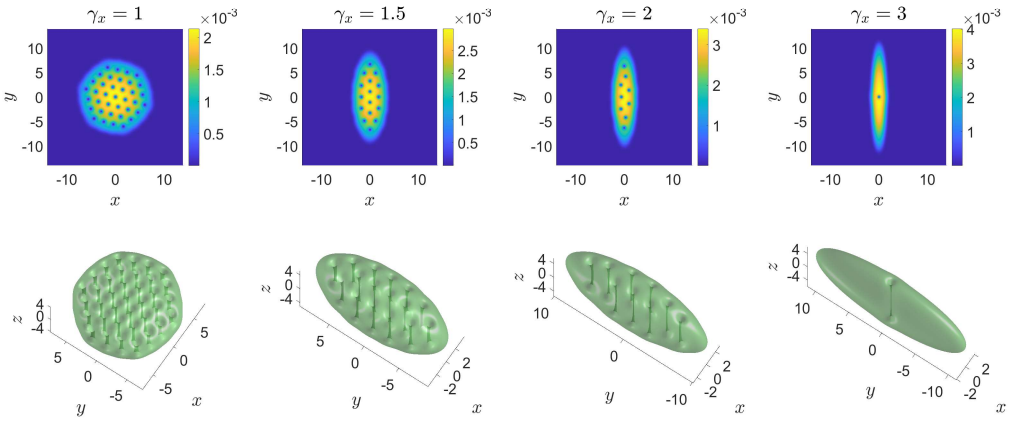


图 9：$(x,\ y,\ z = 0)|^2$（上排）的等高线图，以及 $|\phi_g(\mathbf{x})|^2 =3 \times 10^{-4}$（下排）的等值面图，见示例 **3.8**。

EXAMPLE 3.9.（偶极玻色-爱因斯坦凝聚体）分别取 $\gamma_x = 1$、1.5、2、3，计算以下情形中的基态：

情形 I：令 $\lambda = -2000$，并取不同的偶极取向：(a) $\mathbf{n} = (1, 0, 0)^T$；(b) $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$；情形 II：令 $\lambda = 2000$，并取不同的偶极取向：(c) $\mathbf{n} = (1, 0, 0)^T$；(d) $\mathbf{n} = (1/2, 1/2, \sqrt{2}/2)^T$。

图 10 展示了所有情形下 $|\phi_g(x, y, z = 0)|^2$ 的等高线图。显然，偶极取向会显著影响基态图样。涡旋的排列主要取决于 $\boldsymbol{n}_\perp$，即偶极取向 $\boldsymbol{n}$ 在 x-y 平面内的分量。当 $\lambda < 0$ 时，涡旋倾向于沿垂直于 $\boldsymbol{n}_\perp$ 的方向排列（情形 I）；当 $\lambda > 0$ 时，涡旋倾向于沿着 $\boldsymbol{n}_\perp$ 排列（情形 II）。对于 $\boldsymbol{n} = (0, 0, 1)^T$，涡旋的分布与非偶极玻色-爱因斯坦凝聚体的情形相似（参见图 9），但在 $\lambda < 0$ 时会产生更多涡旋。

4. 结论。我们提出了一种准确且高效的数值方法，用于计算强各向异性势阱中三维旋转偶极玻色-爱因斯坦凝聚体的基态。为应对快速旋转和强各向异性势阱带来的挑战，我们将各向异性截断核方法（ATKM）用于偶极势的计算，并将其融入预条件共轭梯度法（PCG）。该方法具有谱精度且高效，其

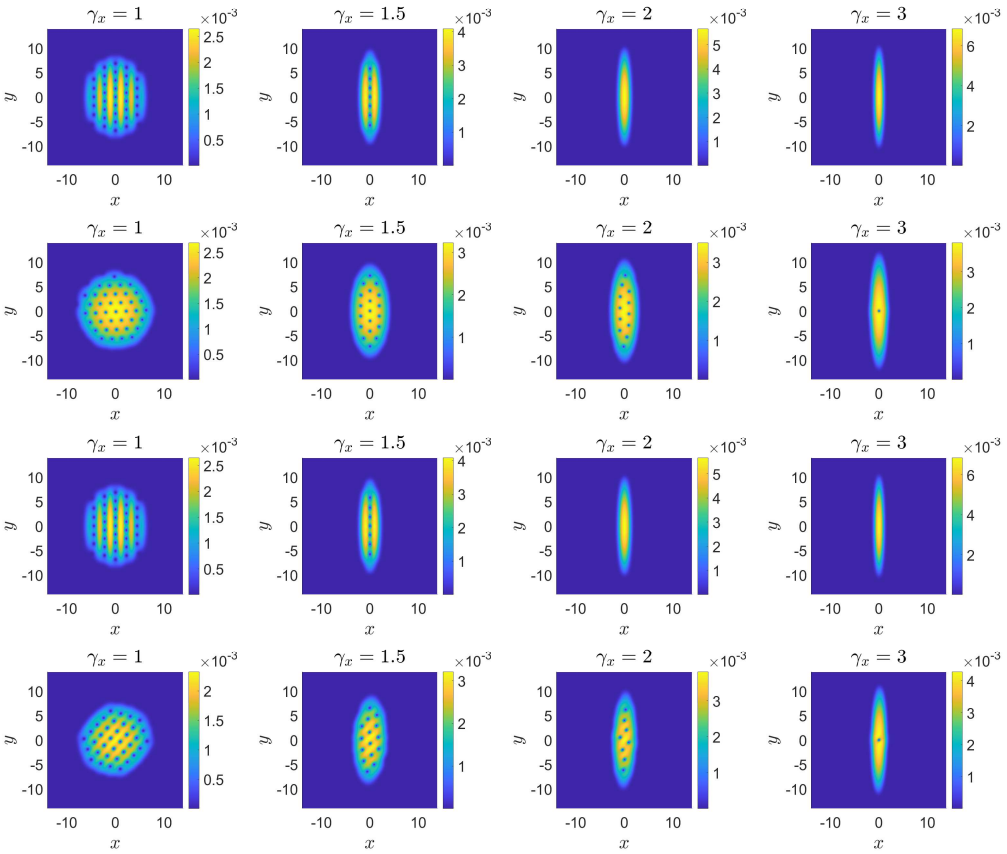


图 10： $|\phi_g(x, y, z = 0)|^2$ 的等高线图，情形 I（上两行）和情形 II（下两行），见例 **3.9**。

内存需求与各向异性强度无关。我们给出了大量数值结果，以验证该方法的准确性和效率，并展示了不同模型参数对临界旋转频率、能量和化学势的影响。此外，我们观察到偶极玻色-爱因斯坦凝聚体中的弯曲涡旋（U形），并进行了细致而全面的数值计算。我们通过数值方法识别出新颖的基态图样，并研究了各向异性强度和偶极势对涡旋数量及排列方式的影响。经过适当修改后，我们的方法还可推广至更一般的系统，例如多组分液滴偶极玻色-爱因斯坦凝聚体；相关结果将在后续工作中报告。

参考文献

[1] P.-A. Absil, R. Mahony and R. Sepulchre, *Optimization Algorithms on Matrix Manifolds* 2008 ,普林斯顿大学出版社, .

[2] A. Aftalion and I. Danaila,*Three-dimensional vortex configurations in a rotating Bose-Einstein condensate* **68** 2003 023603 ,物理评论A, ( ), article .

[3] R. Altmann, P. Henning and D. Peterseim, *The J-method for the Gross-Pitaevskii*

eigenvalue problem, Numer. Math., 148 (2021), 575–610. [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthewa, C. E. Wieman and E. A. Cor-nell, *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, Sci- ence, 269 (1995), 198–201. [5] X. Antoine, A Levitt and Q. Tang, *Efficient spectral computation of the stationary states of rotating Bose-Einstein condensates by preconditioned nonlinear conju- gate gradient methods* **343** 2017 92 109 , 《计算物理学杂志》, ( ), – [6] X. Antoine, Q. Tang and Y. Zhang, *A preconditioned conjugated gradient method for computing ground states of rotating dipolar Bose-Einstein condensates via kernel truncation method for dipole-dipole interaction evaluation* , Commun. Comput. Phys., 24(4) (2018), 966–988. [7] W. Bao, N. B. Abdallah and Y. Cai, *Gross-Pitaevskii-Poisson equations for dipolar Bose-Einstein condensate with anisotropic confinement* **44** , SIAM J. Math. Anal., (2012), 1713–1741. [8] W. Bao and Y. Cai, *Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensation* **6** 2013 1 135 , Kinet. Relat. Models, ( ), – . [9] W. Bao, Y. Cai and H. Wang, *Efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates* **229** , 《计算物理学杂志》, (2010), 7874–7892. [10] W. Bao and Q. Du, *Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow* **25** 2004 1674 1697 , SIAM J. Sci. Comput., ( ), – . [11] W. Bao, H. Jian, N. J. Mauser and Y. Zhang, *Dimension reduction of the Schrödinger equation with Coulomb and anisotropic confining potentials*, SIAM J. Appl. Math., 73 (6) (2013), 2100–2123. [12] W. Bao, S. Jiang, Q. Tang and Y. Zhang, *Computing the ground state and dy- namics of the nonlinear Schrödinger equation with nonlocal interactions via the nonuniform FFT* **296** 2015 72 89 , 《计算物理学杂志》, ( ), – . [13] M. A. Baranov, *Theoretical progress in many body physics of dipolar gases*, Phys. Rep., 464 (2008), 71–111. [14] N. Bigagli, W. Yuan S. Zhang B. Bulatovic T. Karman I. Stevenson and , , , , , S. Will *Observation of Bose-Einstein condensation of dipolar molecules*, 《自然》, 631 (2024), 289–293. [15] N. Boumal, *An introduction to optimization on smooth manifolds*, Cambridge Uni- versity Press, 2023. [16] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett and R. G. Hulet, *Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions* , Phys. Rev. Lett., 75 (1995), 1687–1690. [17] E. Casotti, E. Poli L. Klaus A. Litvinov C. Ulm C. Politi M. J. Mark T. , , , , , , , Bland and F. Ferlaino *Observation of vortices in a dipolar supersolid*, 《自然》, 635 (2024), 327–331. [18] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn and W. Ketterle *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms* **75** 1995 3969 3973 , Phys. Rev. Lett., ( ), – . [19] C. M. Dion and E. Cances, *Ground state of the time-independent Gross-Pitaevskii equation* **177** 2007 787 798 , Comput. Phys. Commun., ( ), – . [20] L. Exl, N. J. Mauser and Y. Zhang, *Accurate and efficient computation of nonlocal potentials based on Gaussian-sum approximation* **327** 2016 , 《计算物理学杂志》, ( ), 629–642. [21] J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García, *Vortex bending and tightly packed vortex lattices in Bose-Einstein condensates* **64** 2001 , 物理评论A, ( ), article 053611. [22] J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García, *Vortex nucleation and hysteresis phe- nomena in rotating Bose-Einstein condensates* **63** 2001 , 物理评论A, ( ), article 041603(R). [23] A. L. Gaunt, T. F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R. P. Smith and Z. Hadzibabic, *Bose-Einstein condensation of atoms in a uniform potential* , Phys. Rev. Lett., 110 (2013), article 200406. [24] L. Greengard, S. Jiang and Y. Zhang, *The anisotropic truncated kernel method for convolution with free-space Green's functions* **40** 2018 , SIAM J. Sci. Comput., ( ), A3733–A3754. [25] L. Jia, A. Wang and S. Yi, *Low-lying excitations of vortex lattices in condensates with anisotropic dipole-dipole interaction* **97** 2018 043614 , 物理评论A, ( ), article .

[26] S. Jiang, L. Greengard and W. Bao, *Fast and accurate evaluation of nonlocal Coulomb and dipole-dipole interactions via the nonuniform FFT*, 《SIAM 科学计算杂志》, 36 (2014), B777–B794. [27] T. Lee, K. Huang and C. Yang, *Eigenvalues and eigenfunctions of a Bose system of hard spheres and its low-temperature properties*, **106** 1957 1135, 物理评论, ( ), – 1145.

[28] X. Liu, Q. Tang, S. Zhang and Y. Zhang, *On optimal zero-padding of kernel truncation method*, **46** 2024 23 49, 《SIAM 科学计算杂志》, ( ), A –A. [29] X. Liu, Y. Yuan and Y. Zhang, *An efficient compact splitting Fourier spectral method for computing the dynamics of rotating spin-orbit coupled spin-1 Bose-Einstein condensates*, **529** 2025 113892, 《计算物理学杂志》, ( ), article . [30] J. Nocedal and S. J. Wright, *Numerical Optimization*, 施普林格, 2006. [31] M. Ö. Oktel, *Vortex lattice of a Bose-Einstein Condensate in a rotating anisotropic trap*, **69** 2002 023618, 物理评论A, ( ), article .

[32] E. Poli, A. Litvinov, E. Casotti, C. Ulm, L. Klaus, M. J. Mark, G. Lamporesi, T. Bland and F. Ferlaino, *Synchronization in rotating supersolids*, 《自然·物理》, 21 (2025), 1820–1825. [33] M. Schmitt, M. Wenzel, F. Böttcher, I. Ferrier-Barbut and T. Pfau, *Self-bound droplets of a dilute magnetic quantum liquid*, **539** 2016 259 262, 《自然》, ( ), – . [34] J. Shen, T. Tang and L.-L. Wang, *Spectral Methods: Algorithms Analysis and Applications*, , , 施普林格, 2011. [35] Q. Sun, Q. Tang, S. Zhang and Y. Zhang, *A preconditioned Riemannian conjugate gradient method for computing the ground states of arbitrary-angle rotating Bose-Einstein condensates*, **512** 2024 113130, 《计算物理学杂志》, ( ), article . [36] J. Stuhler, A. Griesmaier, T. Koch, M. Fattori and T. Pfau, *Magnetostriction in a degenerate quantum gas*, **316** 2007 429 432, 《磁学与磁性材料杂志》, ( ), – .

[37] Q. Tang, N. Mauser and Y. Zhang, *A robust and efficient numerical method to compute the dynamics of the rotating two-component dipolar Bose-Einstein condensates*, **219** 2017 223 235, 《计算物理通讯》, ( ), – .

[38] L. Tanzi, E. Lucioni F. Famà J. Catani A. Fioretti C. Gabbanini R. N. Bisset L. Santos and G. Modugno, *Observation of a Dipolar Quantum Gas with Metastable Supersolid Properties*, **122** 2019 130405, , , , , , , , , 物理评论快报, ( ), article .

[39] F. Vico, L. Greengard and M. Ferrando, *Fast convolution with free-space Green's functions*, **323** 2016 191 203, 《计算物理学杂志》, ( ), – .

[40] L. Wei and Y. Zhang, *Novel compact splitting Fourier spectral method to compute the dynamics of rotating spin-orbit coupled spinor Bose-Einstein condensates*, 预印本. [41] S. J. Woo, S. Choi and N. P. Bigelow, *Controlling quasiparticle excitations in a trapped Bose-Einstein condensate*, **72** 2005 021605, 物理评论A, ( ), article (R). [42] Y. Zhang, *Fast evaluation of convolution-type nonlocal potential*, 《数学数值学报》, 45(4) (2023), 385–400. [43] T. Zhang and F. Xue, *A new preconditioned nonlinear conjugate gradient method in real arithmetic for computing the ground states of rotational Bose-Einstein condensate*, **46** 2024 1764 1792, 《SIAM 科学计算杂志》, ( ), A –A .