

# Bases mixtes ondelettes-gaussiennes pour le calcul des structures électroniques : exploration préliminaire 1-D

QUANG HUY TRAN

Dinh Huong Pham (IFPEN)  
Valérie Perrier (LJK)  
Luigi Genovese (CEA)



# Sommaire

## 1 Contexte et motivation

- Calcul des structures électroniques
- Propriétés de la fonction d'onde
- Bases usuelles

## 2 Un modèle réduit de chimie quantique

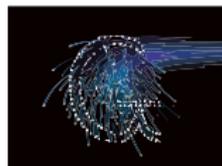
## 3 Deux bases “pures” et une base “mixte”

## 4 Extensions

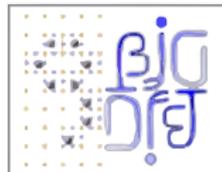
## 5 Conclusion

# Calcul des structures électroniques

- Déterminer la distribution microscopique des électrons d'un système moléculaire au moyen d'une simulation *ab initio* (n'utilisant que les lois **fondamentales** de la mécanique quantique)
- Dédire, à partir de la fonction d'onde des électrons, les propriétés macroscopiques du système
- Nombreux logiciels ( $\geq 70$ ) qui se diffèrent, entre autres, par les fonctions de **base** choisies. BigDFT, développé par le CEA Grenoble, utilise les **ondelettes** de Daubechies [CHAUVIN 2005], notamment pour des raisons de performance

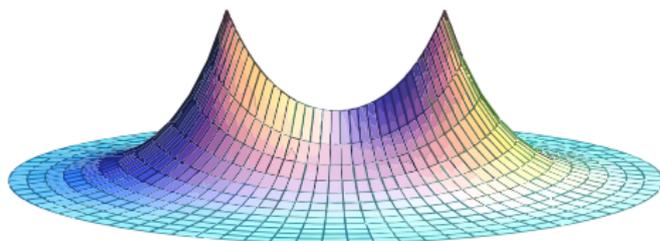


*abinit*



# Propriétés de la fonction d'onde

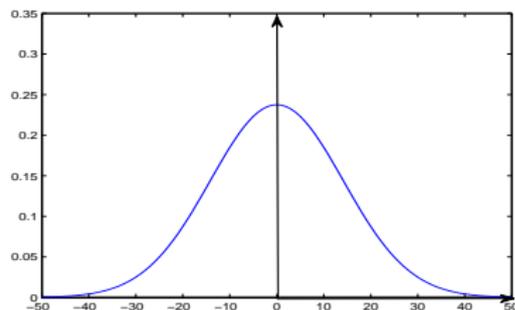
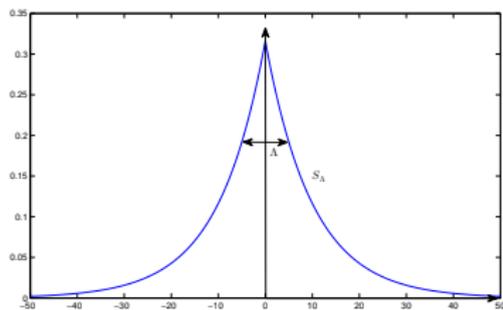
- On démontre que la fonction d'onde présente un point de **rebroussement** à chaque position de noyau (ensemble proton-neutron d'un atome). En dehors de ces singularités, elle est bornée et infiniment **régulière**



- Il est important de bien choisir la base de discrétisation pour capter l'effet physique désiré (valeur au point de rebroussement ou variations dans la région inter-nucléaire, par exemple)
- Ce choix repose sur l'intuition et le **savoir-faire** de l'utilisateur

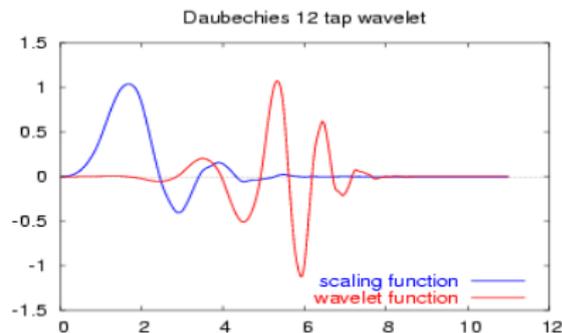
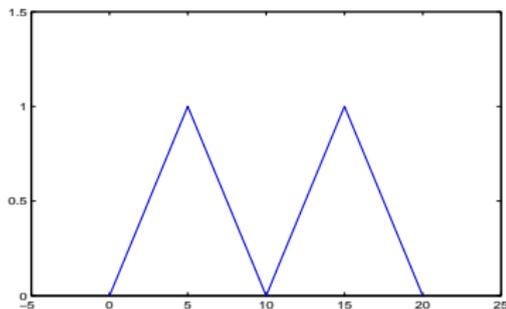
# Bases sans maillage

- LCAO (Linear Combinations of Atomic Orbitals) et STO (Slater Type Orbitals) : une ou plusieurs fonctions de **Slater** par noyau ; précis pour le point de rebroussement mais très coûteux en CPU
- GTO (Gaussian Type Orbitals) : une ou plusieurs **gaussiennes** par noyau ; peu précis pour le point de rebroussement mais très économique
- CGTO (Contracted Gaussian Type Orbitals) : une ou plusieurs **gaussiennes contractées** par noyau, compromis entre STO et GTO



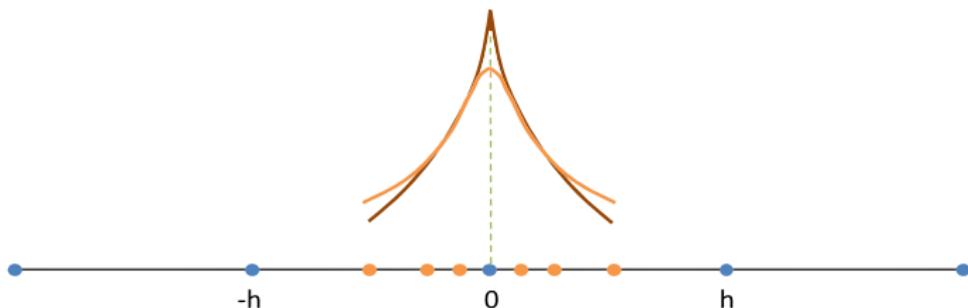
# Bases avec maillage

- Éléments finis, e.g., fonctions **chapeaux**  $P_1$  : bien adaptées à la région inter-nucléaire avec une taille de maillage “raisonnable” ; nécessité de raffiner le maillage au voisinage du point de rebroussement
- Ondelettes de **Daubechies**, orthogonales et à support compact : nécessité d’augmenter le nombre de niveaux (actuellement limité dans BigDFT)



## Bases plus sophistiquées

- LONGO (2011) a proposé de combiner ces deux types de bases afin de tirer le meilleur parti de chacun. L'objectif de la collaboration IFPEN-CEA-LJK est de continuer à explorer cette voie **originale**
- Par rapport aux approches plus **traditionnelles** comme l'AMR [HARRISON et al. 2004], [NAGY et PIPEK 2010], on espère gagner en nombre de degrés de liberté par noyau (1 au lieu de 6, par exemple)



# Sommaire

- 1 Contexte et motivation
- 2 Un modèle réduit de chimie quantique
  - Schrödinger avec potentiel delta
  - Approximation de Galerkin
- 3 Deux bases “pures” et une base “mixte”
- 4 Extensions
- 5 Conclusion

# Schrödinger avec potentiel delta

- Un électron est soumis à l'attraction d'un noyau de charge  $Z$  placé en  $x = 0$ . Son état est décrit par une **fonction d'onde**  $\psi \in H^1(\mathbb{R})$  et un **niveau d'énergie**  $E \in \mathbb{R}$  tels que

$$-\frac{1}{2}\psi'' + \left(-\frac{1}{\Lambda}\delta_0\right)\psi = E\psi \quad \text{problème de valeur propre} \quad (1a)$$

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{norme du vecteur propre} \quad (1b)$$

où  $\Lambda = Z^{-1}$  est une longueur caractéristique

- L'unique solution, au signe de  $\psi$  près, de ce problème est

$$\psi_*(x) = \frac{1}{\sqrt{\Lambda}} \exp\left(-\frac{|x|}{\Lambda}\right) \quad [\text{Slater}], \quad E_* = -\frac{1}{2\Lambda^2} \quad (2)$$

C'est aussi l'état **fondamental** du système (plus petit  $E$  possible)

# Formulation en énergie

- Le problème (1a)–(1b) s'interprète comme la recherche des points critiques de la fonctionnelle d'énergie

$$\mathfrak{E}(\psi) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi'(x)|^2 dx - \frac{1}{\Lambda} |\psi(0)|^2 \quad (3)$$

sur le sous-ensemble  $\{\psi \in H^1(\mathbb{R}), \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = 1\}$

- La solution  $(\psi_*, E_*)$  donnée en (2) réalise

$$E_* = \inf_{\psi \in H^1(\mathbb{R}), \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = 1} \mathfrak{E}(\psi) \quad (4)$$

- Cette interprétation est à l'origine de la stratégie d'approximation de Galerkin

# Approximation de Galerkin

- Soit  $\mathcal{V}_M \subset H^1(\mathbb{R})$  est un sous-espace de dimension **finie**  $M$ . Pour le calcul de l'état fondamental, on remplace la minimisation (4) par

$$\inf_{\psi \in \mathcal{V}_M, \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}=1} \mathfrak{E}(\psi) \quad (5)$$

- La solution  $\psi_{\mathcal{V}_M}$  ainsi obtenue a une énergie **supérieure** à celle de la vraie solution

$$E_{\mathcal{V}_M} = \mathfrak{E}(\psi_{\mathcal{V}_M}) \geq \mathfrak{E}(\psi_*) = E_* \quad (6)$$

- L'énergie apparaît ainsi comme un critère **naturel** de comparaison entre solutions approchées, même plus “naturel” que l'erreur, même si on a l'équivalence

$$C_b \|\psi_{\mathcal{V}_M} - \psi_*\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq \mathfrak{E}(\psi_{\mathcal{V}_M}) - \mathfrak{E}(\psi_*) \leq C_{\#} \|\psi_{\mathcal{V}_M} - \psi_*\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \quad (7)$$

# Problème matriciel

- On décompose

$$\psi(x) = \sum_{j=1}^M \Psi_j \xi_j(x) \quad (8)$$

dans une base  $\{\xi_j\}_{1 \leq j \leq M}$  de  $\mathcal{V}_M$ . La formulation variationnelle de (5) conduit à la recherche de la plus **petite** valeur propre de

$$\mathbf{A}\Psi = 2E\mathbf{B}\Psi, \quad \Psi^T \mathbf{B}\Psi = 1 \quad (9)$$

- Les matrices  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  d'ordre  $M$  sont données par

$$\mathbf{A} = \{\mathbf{a}(\xi_j, \xi_i)\}_{1 \leq i, j \leq M}, \quad \mathbf{B} = \{\mathbf{b}(\xi_j, \xi_i)\}_{1 \leq i, j \leq M} \quad (10)$$

avec les formes bilinéaires symétriques

$$\mathbf{a}(\psi, \phi) = \int_{\mathbb{R}} \psi'(x) \phi'(x) dx - \frac{2}{\Lambda} \psi(0) \phi(0) \quad (11a)$$

$$\mathbf{b}(\psi, \phi) = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) \phi(x) dx \quad (11b)$$

# Sommaire

- 1 Contexte et motivation
- 2 Un modèle réduit de chimie quantique
- 3 Deux bases “pures” et une base “mixte”
  - Résultats en base de gaussiennes
  - Résultats en base de fonctions chapeaux
  - Résultats en base mixte
- 4 Extensions
- 5 Conclusion

## Base de gaussiennes

- Pour  $a > 0$ , on définit la **gaussienne** unitaire en norme  $L^2$

$$g_a(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) \quad (12)$$

- Pour  $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_Q) \in \mathbb{R}_+^Q$ , on considère le sous-espace

$$\mathcal{V}_Q(\mathbf{a}) = \text{Vect}\{g_{a_q}(\cdot), 1 \leq q \leq Q\} \quad (13)$$

Tout élément  $\psi \in \mathcal{V}_Q(\mathbf{a})$  prend la forme **contractée**

$$\psi(x) = \sum_{q=1}^Q d_q g_{a_q}(x) =: CG(\mathbf{a}, \mathbf{d}, x) \quad (14)$$

- L'approximation sur ce sous-espace conduit au problème matriciel

$$\mathbf{A}\Psi = 2E\mathbf{B}\Psi, \quad \Psi^T\mathbf{B}\Psi = 1$$

où les matrices  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ , d'ordre  $Q$ , peuvent être calculées analytiquement.

# Longueurs caractéristiques optimales

- Pour  $\mathbf{a} \in \mathbb{R}_+^Q$  fixé, la solution approchée est notée

$$\psi_{\gamma_Q(\mathbf{a})} = CG(\mathbf{a}, \mathbf{d}(\mathbf{a}), \cdot) \quad \text{et} \quad E_{\gamma_Q(\mathbf{a})} \quad (15)$$

- Les longueurs  $a_q$  sont à optimiser par critère d'énergie. On cherche

$$\mathbf{a}_* = \arg \min_{\mathbf{a} \in \mathbb{R}_+^Q} E_{\gamma_Q(\mathbf{a})} \quad (16)$$

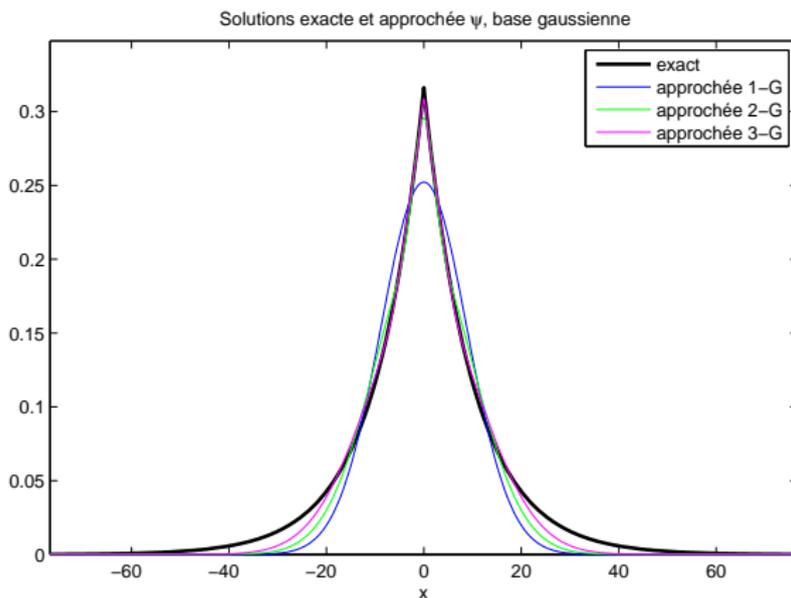
Dans cette étape, la fonction objectif n'est pas quadratique

- Solutions pour  $Q = 1, 2, 3$

$Q$	$\mathbf{a}_*/\Lambda$	$\mathbf{d}(\mathbf{a}_*)$
1	$\sqrt{\pi}/2$	1
2	(0.202009, 1.013952)	(0.891491, 0.162129)
3	(0.063854, 0.323840, 1.156697)	(0.030546, 0.253729, 0.788039)

On sauvegarde, pour usage ultérieur, ces solutions

$$\psi_{\gamma_Q(\mathbf{a}_*)} = CG(\mathbf{a}_*, \mathbf{d}_* = \mathbf{d}(\mathbf{a}_*), \cdot) \quad (17)$$



- La pointe en  $x = 0$  est mieux approchée, mais pas les autres régions
- Erreurs relatives sur  $E$  :

0.36 (base 1-G) ; 0.12 (base 2-G) ; 0.05 (base 3-G)

## Reformulation en domaine borné

- Si le domaine spatial est limité à  $\Omega = ] - L, L[$ , on doit faire intervenir les conditions aux limites **transparentes**

$$\psi'(-L) - \sqrt{-2E}\psi(-L) = 0, \quad \psi'(L) + \sqrt{-2E}\psi(L) = 0 \quad (18)$$

- Ces CL conduisent à une formulation variationnelle **non-linéaire** en  $\nu = 2E$  : chercher  $(\psi, \nu) \in H^1(\Omega) \times \mathbb{R}$  tels que pour tout  $\phi \in H^1(\Omega)$ ,

$$\int_{\Omega} \psi' \phi' + \sqrt{-\nu} [\psi(-L)\phi(-L) + \psi(L)\phi(L)] - 2\psi(0)\phi(0) = \nu \int_{\Omega} \psi \phi \quad (19)$$

- La renormalisation correcte pour  $\psi$  est donnée par

$$\int_{\Omega} |\psi|^2 + \frac{1}{\sqrt{-\nu}} \left[ \frac{|\psi(-L)|^2}{2} + \frac{|\psi(L)|^2}{2} \right] = 1 \quad (20)$$

# Équivalence avec le problème en domaine infini

- Le système (19)–(20) s'interprète un **point-selle** du lagrangien

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}(\psi, \nu) = & \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\psi'|^2 + \sqrt{-\nu} \left[ \frac{|\psi(-L)|^2}{2} + \frac{|\psi(L)|^2}{2} \right] \\ & - \frac{1}{\Lambda} |\psi(0)|^2 - \frac{\nu}{2} \left( \int_{\Omega} |\psi|^2 - 1 \right) \end{aligned} \quad (21)$$

- La solution  $(\psi_*, E_*)$  du problème sur  $\mathbb{R}$  est **aussi** solution de (19)–(20), problème sur  $\Omega$ . De plus,

$$E_* = \mathfrak{L}(\psi_*, \nu_*) = \min_{\psi \in H^1(\Omega)} \max_{\nu \in \mathbb{R}_-} \mathfrak{L}(\psi, \nu) \quad (22)$$

- Si  $\mathcal{V}$  est un sous-espace de  $H^1(\Omega)$  alors

$$E_{\mathcal{V}} := \mathfrak{L}(\psi_{\mathcal{V}}, \nu_{\mathcal{V}}) = \min_{\psi \in \mathcal{V}} \max_{\nu \in \mathbb{R}_-} \mathfrak{L}(\psi, \nu) \geq E_* \quad (23)$$

On préserve ainsi le **principe d'énergie** de Galerkin

## Base $P_1$

- On découpe  $\Omega$  en  $M_h - 1$  intervalles de longueur  $h$ , avec  $M_h$  impair, de sorte que la singularité  $x = 0$  coïncide avec un nœud. On considère les  $M_h$  fonctions **chapeaux**  $\hat{\phi}_{i,h}$  associées aux nœuds et le sous-espace

$$\mathcal{V}_h = \text{Vect}\{\hat{\phi}_{i,h}, 1 \leq i \leq M_h\} \quad (24)$$

- La discrétisation de (19)–(20) sur  $\mathcal{V}_h$  donne lieu à un problème matriciel **non-linéaire** de la forme

$$(\mathbf{A} + \sqrt{-\nu} \mathbf{C}) \Psi = \nu \mathbf{B} \Psi \quad (25a)$$

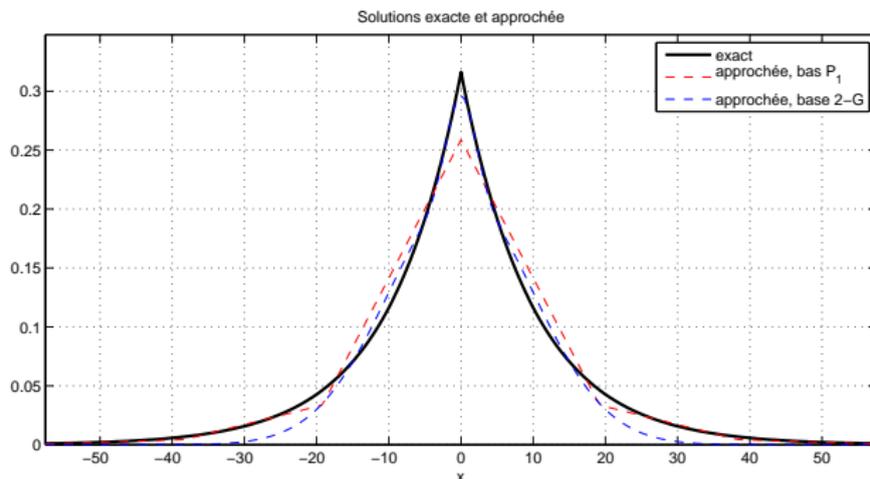
$$\Psi^T \left( \mathbf{B} + \frac{1}{2\sqrt{-\nu}} \mathbf{C} \right) \Psi = 1 \quad (25b)$$

- On résout itérativement ce problème par un **point fixe**

$$(\mathbf{A} + \sqrt{-\nu^{(k)}} \mathbf{C}) \Psi_{(k+1)} = \nu^{(k+1)} \mathbf{B} \Psi_{(k+1)} \quad (26a)$$

$$\Psi_{(k+1)}^T \left( \mathbf{B} + \frac{1}{2\sqrt{-\nu^{(k)}}} \mathbf{C} \right) \Psi_{(k+1)} = 1 \quad (26b)$$

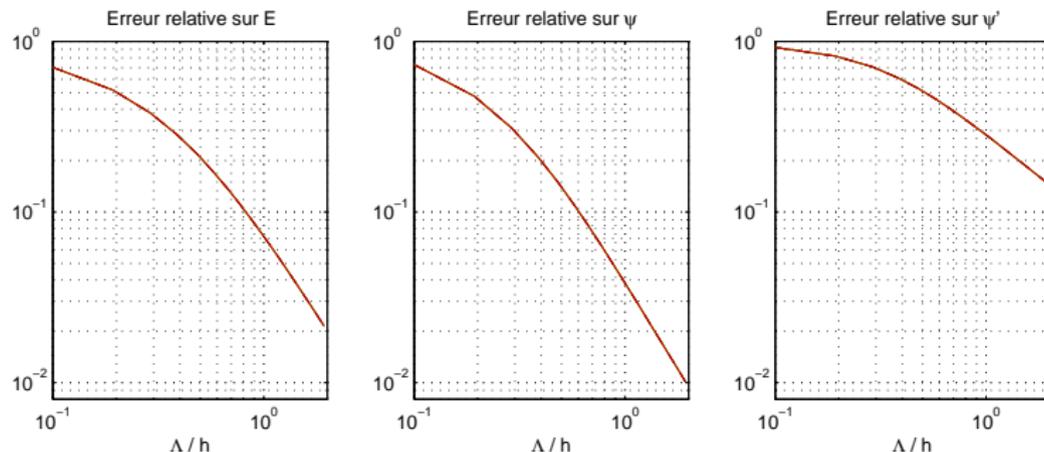
# Solution calculée



- Erreur relative sur  $E = 0.19$  pour  $\Lambda/h = 0.5$  (rappel : 0.12 en 2-G)
- Les solutions  $Q$ -G sont meilleures autour de la pointe  $x = 0$ , mais la solution  $P_1$  est meilleure dans le reste du domaine.

# Mesures d'erreurs

- Les erreurs relatives sur  $E$ ,  $\psi$  et  $\psi'$  ne dépendent que du rapport  $\Lambda/h$



- Quand  $\Lambda/h \rightarrow \infty$  (maillage fin),

$$E_{V_h} - E_* \sim h^2, \quad \|\psi_{V_h} - \psi_*\|_{L^2} \sim h^2, \quad \|\psi'_{V_h} - \psi'_*\|_{L^2} \sim h$$

- Quand  $\Lambda/h \rightarrow 0$  (maillage grossier), les erreurs relatives  $\rightarrow 1$

## Base mixte $P_1$ -CG

- Dans la définition (14) d’une gaussienne contractée

$$CG(\mathbf{a}, \mathbf{d}, x) = \sum_{q=1}^Q d_q g_{a_q}(x), \quad (27)$$

les  $g_{a_q}$  sont appelées les **primitives** de  $CG(\mathbf{a}, \mathbf{d}, \cdot)$ .

- La solution  $\psi_{\mathcal{V}_Q(\mathbf{a}_*)} = CG(\mathbf{a}_*, \mathbf{d}_*, \cdot)$  dans une base optimisée

$$\mathcal{V}_Q(\mathbf{a}_*) = \text{Vect}\{g_{a_q^*}, 1 \leq q \leq Q\} \quad (28)$$

est la “meilleure” possible avec  $Q$  primitives. On souhaite l’**ajouter** à la base  $P_1$ .

- Rien n’assure que les longueurs “optimales”  $\mathbf{a}^*$  restent optimales en présence des fonctions chapeaux. On se donne donc un taux de **dilatation**  $r > 0$  pour définir

$$CG_r^r(x) := CG(r\mathbf{a}_*, \mathbf{d}_*, x) = \sum_{q=1}^Q d_q^* g_{ra_q^*}(x) \quad (29)$$

- En base **mixte**  $Q$ -G, l'approximation de Galerkin sur le sous-espace

$$\mathcal{V}_{h,Q}^r = \mathcal{V}_h \oplus \mathbb{R} CG_Q^r(\cdot) \quad (30)$$

conduit à la solution  $(\psi_{\mathcal{V}_{h,Q}^r}, E_{\mathcal{V}_{h,Q}^r})$

- Pour  $h$  fixé, la **meilleure** gaussienne contractée supplémentaire correspond à

$$r_* = \arg \min_{r>0} E_{\mathcal{V}_{h,Q}^r} \quad (31)$$

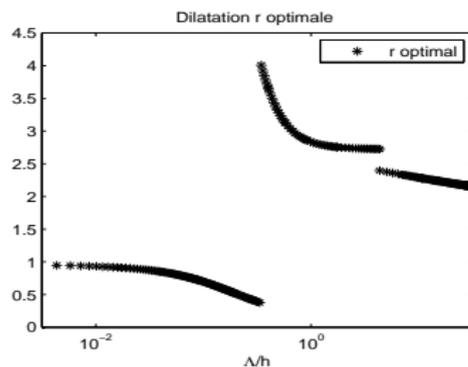
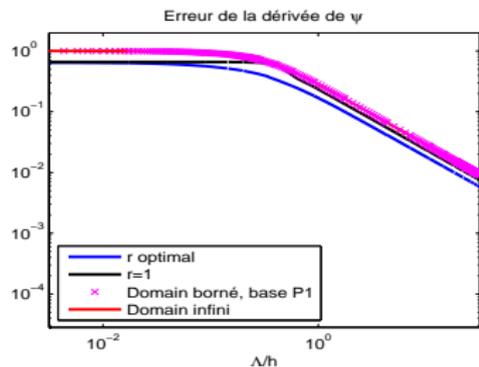
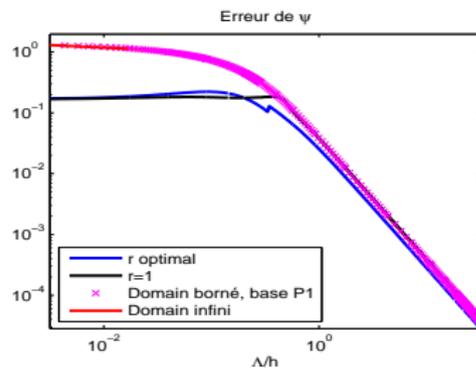
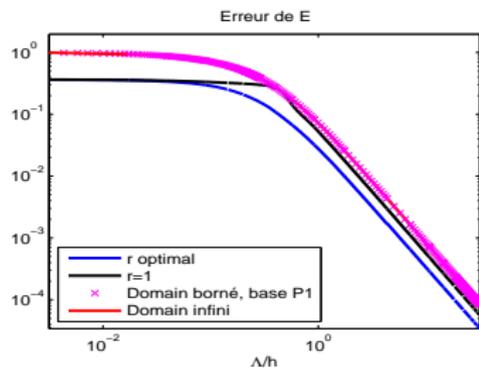
- Les matrices **A**, **B** et **C** du problème matriciel

$$(\mathbf{A} + \sqrt{-\nu} \mathbf{C}) \Psi = \nu \mathbf{B} \Psi \quad (32a)$$

$$\Psi^T \left( \mathbf{B} + \frac{1}{2\sqrt{-\nu}} \mathbf{C} \right) \Psi = 1 \quad (32b)$$

ont une nouvelle ligne et une nouvelle colonne. Elles peuvent toutes être calculées **analytiquement**

# Erreurs en base mixte 1-G



# Observations

- Quand  $\Lambda/h \rightarrow \infty$  (maillage fin), les fonctions chapeaux dominant et on a

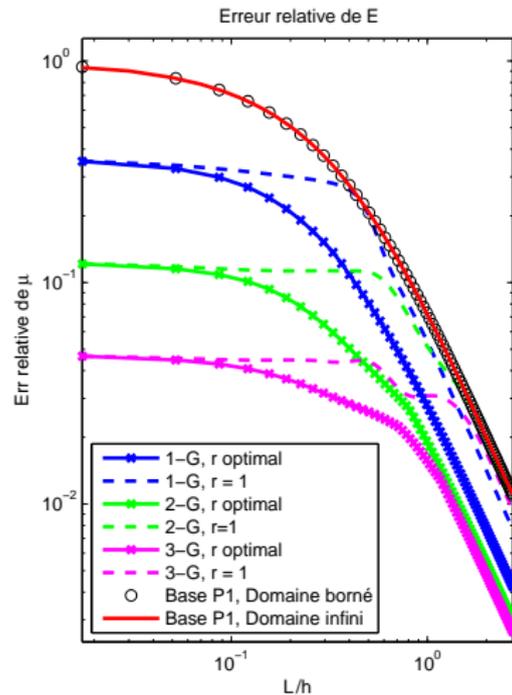
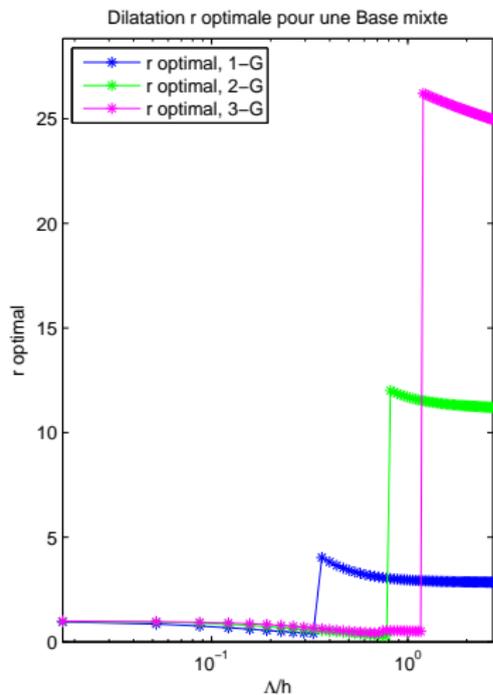
$$E_{\mathcal{V}_{h,Q}^r} - E_* \sim h^2, \quad \|\psi_{\mathcal{V}_{h,Q}^r} - \psi_*\|_{L^2} \sim h^2, \quad \|\psi'_{\mathcal{V}_{h,Q}^r} - \psi'_*\|_{L^2} \sim h$$

La dilatation optimale  $r_*$  peut monter jusqu'à 4

- Quand  $\Lambda/h \rightarrow 0$  (maillage grossier), la gaussienne supplémentaire contribue à réduire significativement l'erreur. Tout se passe comme si elle était seule dans la base. La dilatation optimale  $r_*$  est proche de 1
- La diminution de l'erreur sur l'énergie  $E$  se quantifie par un facteur entre 3 et 10. Pour atteindre le même facteur diminution d'erreur en base  $P_1$ , il faudrait raffiner le maillage entre 2 et 100 fois !

# Bases mixtes 1-G, 2-G et 3-G

- Comparaisons de base  $P_1$  et base mixte  $P_1$ -gaussienne 1-G, 2-G, 3-G



## Observations

- En augmentant le nombre de primitives  $Q$ , on réduit l'erreur relative de presque 3 fois. Par exemple, quand  $\Lambda/h = 0.04$ , les erreurs relatives sur  $E$  correspondantes sont

$$0.33 \rightarrow 0.12 \rightarrow 0.04$$

- En base mixte, les courbes d'erreurs ont le même ordre de convergence, i.e.,

$$E_{\mathcal{Y}_{h,Q}^r} - E_* \sim h^2, \quad \|\psi_{\mathcal{Y}_{h,Q}^r} - \psi_*\|_{L^2} \sim h^2, \quad \|\psi'_{\mathcal{Y}_{h,Q}^r} - \psi'_*\|_{L^2} \sim h$$

quand  $\Lambda/h \rightarrow \infty$

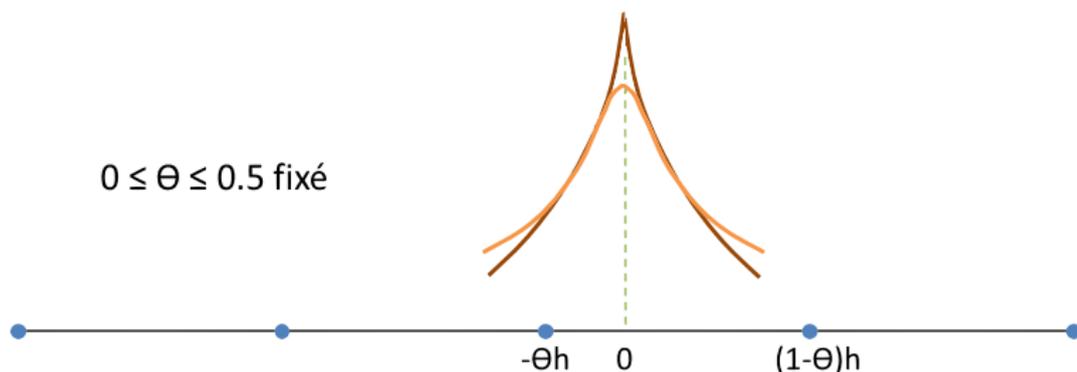
- Plus on augmente le nombre de primitives  $Q$ , plus la dilatation optimale  $r$  varie. Sa courbe commence à 1, et peut atteindre 25 en certain points.

# Sommaire

- 1 Contexte et motivation
- 2 Un modèle réduit de chimie quantique
- 3 Deux bases “pures” et une base “mixte”
- 4 Extensions
  - Potentiel delta en maillage décalé
  - Potentiel double-delta
- 5 Conclusion

# Potentiel delta en maillage décalé

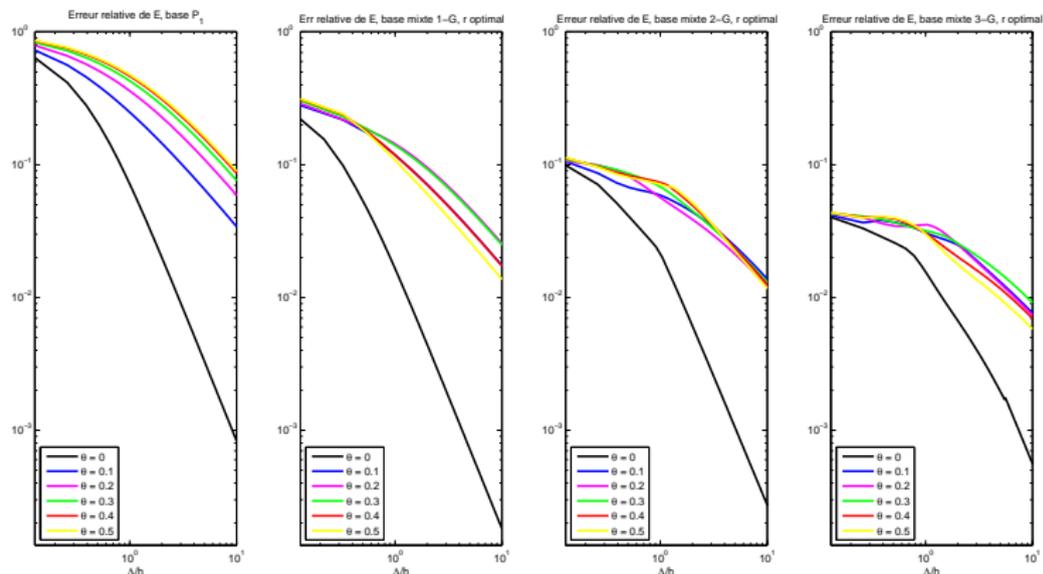
- On décale le maillage de sorte que la pointe en  $x = 0$  ne coïncide plus avec un nœud du maillage. Néanmoins, la gaussienne contractée supplémentaire reste centrée en  $x = 0$



- Les étapes de résolution sont similaires, même si les expressions des matrices **A**, **B** et **C** sont un peu plus compliquées (déjà en  $P_1$ )

# Comparaison entre base $P_1$ et base $P_1$ -CG

- Courbes d'erreurs relatives sur le niveau d'énergie



- Dans la base  $P_1$ , plus  $\theta$  s'approche de 0.5, plus l'erreur est élevée. Dans la base mixte, la maximum d'erreur est atteint autour de  $\theta = 0.3$

## Potentiel double-delta

- Un électron est soumis à l'attraction de 2 noyaux placés en  $\pm R/2$  et de charges identiques  $Z$ . Son état est décrit par la **fonction d'onde**  $\psi \in H^1(\mathbb{R})$  et l'**énergie**  $E \in \mathbb{R}$  vérifiant

$$-\frac{1}{2}\psi'' + \left( -\frac{1}{\Lambda} [\delta_{-R/2} + \delta_{R/2}] \right) \psi = E\psi \quad (33a)$$

$$\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = 1 \quad (33b)$$

où  $\Lambda = Z^{-1}$  est une longueur caractéristique

- Si  $R > \Lambda$ , deux solutions. L'état **fondamental** est donné par

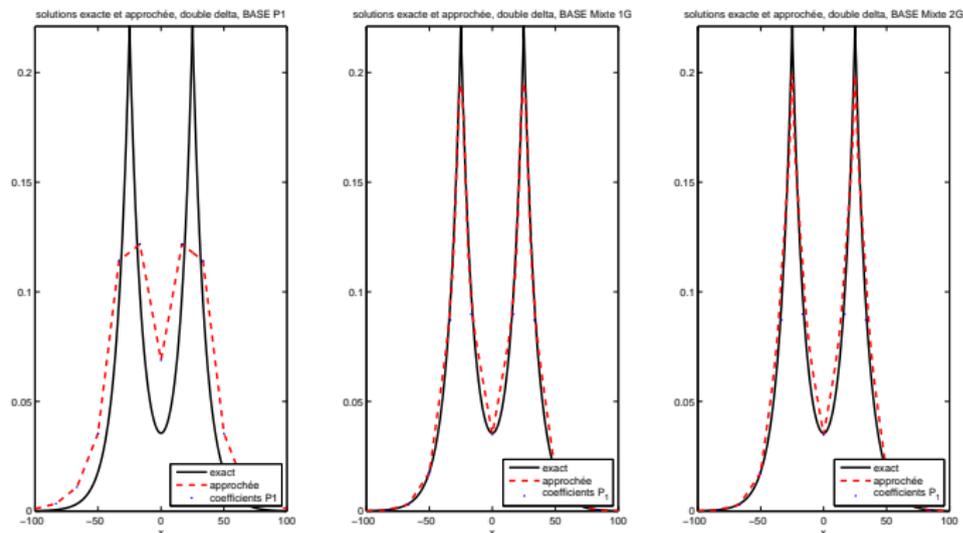
$$\psi_*(x) = \Gamma_* \left[ \exp\left(-\frac{|x + R/2|}{D_*}\right) + \exp\left(-\frac{|x - R/2|}{D_*}\right) \right], \quad (34a)$$

$$E_* = -\frac{1}{2D_*^2}, \quad (34b)$$

où  $D_* = D_*(\Lambda, R)$  et  $\Gamma_* = \Gamma_*(\Lambda, R)$  sont connus analytiquement

# Comparaison entre base $P_1$ et base $P_1$ -CG

- Solutions pour  $R/\Lambda = 5$ ,  $\Lambda/h = 0.5$



- Les gaussiennes contractées aident la solution à mieux approcher les deux points  $\pm R/2$ , ce que les fonctions chapeau ont du mal à faire.

# Sommaire

- 1 Contexte et motivation
- 2 Un modèle réduit de chimie quantique
- 3 Deux bases “pures” et une base “mixte”
- 4 Extensions
- 5 Conclusion
  - Bilan
  - Perspectives

# Bilan

- Faisabilité et **efficacité** de la méthode des bases mixtes sur un modèle de chimie quantique très simple
- L'ajout d'une gaussienne contractée dans une base  $P_1$  préexistante divise l'erreur sur l'énergie par un facteur entre 3 et 10. Pour avoir le même gain en base  $P_1$ , il faut raffiner le maillage entre 2 et 100 fois !
- Très **peu** de degrés de liberté supplémentaires, comparé à une méthode de raffinement local. Le **surcoût** réside en fait dans le réglage du paramètre de dilatation  $r$

# Perspectives

- Étudier la fonction objectif  $E[r]$  du problème de minimisation, afin d'en déduire des algorithmes mieux adaptés ou une meilleure **initialisation**
- Élaborer des **estimateurs** d'erreur a posteriori sur l'énergie afin d'arrêter à temps l'optimisation
- Tester la méthodes avec des “vraies” ondelettes de Daubechies à la place des fonctions  $P_1$ , pour voir si les mêmes conclusions restent valides
- Pour se rapprocher davantage des modèles de Hartree-Fock et de Kohn-Sham, passer au cas d'une équation de Schrödinger **non-linéaire**, notamment

$$-\frac{1}{2}\psi'' + \left(-\frac{1}{\Lambda}\delta_0\right)\psi + \beta|\psi|^2\psi = \mu\psi \quad (35)$$