

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P5-87-232

**В.А.Касчиева, М.С.Касчиев, Л.И.Меньшиков*,
И.В.Пузынин**

**МОЛЕКУЛА ИЗ ДВУХ КВАНТОВЫХ ВИХРЕЙ
В ДВУМЕРНОМ БОЗЕ-ГАЗЕ**

Численное исследование задачи. Результаты

* Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова,
Москва

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В первой части данной работы ^{/1/} получено с учетом квантовых поправок выражение для энергии молекулы, составленной из двух квантовых вихрей с противоположными направлениями вращения сверхтекучей компоненты двумерного бозе-газа при $T=0$. Для того чтобы вычислить энергию неоднородности (см. формулы (45)₁ - (50)₁^{*}), необходимо найти волновую функцию бозе-конденсата ϕ_0 , волновые функции ϕ_n и энергии ϵ_n связанных состояний атомов газа, движущихся в поле вихревой молекулы. В работе ^{/1/} показано, что функция ϕ_0 удовлетворяет уравнению

$$-\Delta \phi_0 + |\phi_0|^2 \phi_0 - \phi_0 = 0, \quad (1)$$

а ϵ_n, ϕ_n являются соответственно собственными значениями и собственными функциями уравнения

$$-\Delta \phi + |\phi_0|^2 \phi = \epsilon \phi. \quad (2)$$

Здесь ϕ_0, ϕ являются функциями декартовых независимых переменных x, y и зависят от расстояния R между центрами вихрей как от параметра.

Успешное решение задач квантовой механики во многом определяется правильным выбором системы координат, в которой задаются пространственные переменные. Обычно в двух центровых задачах выбирают сфероидальные координаты, которые определяются как ^{/2/}

$$\zeta = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad \Theta,$$

$$(\zeta, \eta) \in \Omega = \{1 \leq \zeta < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1\},$$

где r_1 и r_2 — соответственно расстояния от рассматриваемой точки до центров вихрей, а Θ — угол вращения вокруг прямой, соединяющей центры. В рассматриваемом нами случае имеем вращательную симмет-

^{*}Нижний индекс 1 указывает на соответствующую формулу из работы ^{/1/}.

рию относительно прямой, соединяющей центры, то есть ϕ_0, ϕ не зависят от Θ .

Искомую функцию ϕ_0 представим в виде

$$\phi_0(\zeta, \eta; R) = F(\zeta, \eta; R) e^{i\Phi(\zeta, \eta; R)}, \quad (3)$$

где F и Φ — действительные функции.

Из уравнения (1), записанного в сфероидальных координатах, и (3) получаем систему уравнений для определения амплитуды F и фазы Φ :

$$\mathcal{L}(F, \Phi) = 0, \quad (4)$$

где

$$\mathcal{L}(F, \Phi) = \begin{cases} \frac{1}{\rho} [-L + M(F, \Phi)] F, \\ -\frac{1}{\rho} K(F) \Phi. \end{cases}$$

Здесь операторы L , $K(F)$ и функция $M(F, \Phi)$ имеют вид

$$L = \frac{\partial}{\partial \zeta} k_1(\zeta; R) \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial}{\partial \eta} k_2(\eta; R) \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad (5)$$

$$K(F) = \frac{\partial}{\partial \zeta} k_1(\zeta; R) F^2 \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial}{\partial \eta} k_2(\eta; R) F^2 \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad (6)$$

$$M(F, \Phi) = k_1(\zeta; R) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \zeta}\right)^2 + k_2(\eta; R) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \eta}\right)^2 + \rho(\zeta, \eta; R) (F^2 - 1), \quad (7)$$

$$k_1(\zeta; R) = \frac{R}{2}(\zeta^2 - 1), \quad k_2(\eta; R) = \frac{R}{2}(1 - \eta^2), \quad \rho(\zeta, \eta; R) = \frac{R^3}{8}(\zeta^2 - \eta^2). \quad (8)$$

Поставим граничные условия для функций F и Φ . Как было показано в ^{1/}, на бесконечности $F \rightarrow 1$, $\Phi \rightarrow 0$, то есть

$$\lim_{\zeta \rightarrow \infty} F = 1, \quad \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \Phi = 0. \quad (9)$$

Функция F должна быть ограниченной во всей области. Ввиду того, что при $\zeta = 1$, $\eta = \pm 1$ коэффициенты операторов L , $K(F)$ обращаются в нуль, ограниченность F выделяется условиями ^{3/}

$$\lim_{\zeta \rightarrow 1} (\zeta^2 - 1) \frac{\partial F}{\partial \zeta} = 0, \quad \lim_{\eta \rightarrow \pm 1} (1 - \eta^2) \frac{\partial F}{\partial \eta} = 0. \quad (10)$$

В точках ($\zeta = 1$, $\eta = \pm 1$), где расположены центры вихрей, как показано в ^{1/}, имеем

$$F(1, -1; R) = 0, \quad F(1, 1; R) = 0. \quad (11)$$

Краевые условия для фазы Φ на этих же границах следующие:

$$\Phi(1, \eta; R) = \pi, \quad \Phi(\zeta, \pm 1; R) = 0. \quad (12)$$

Таким образом, сформулирована нелинейная краевая задача (4), (9)–(12), решением которой являются искомые функции F и Φ . Отметим, что эта задача параметрическая, так как F и Φ зависят от параметра R .

В дальнейшем функцию F представим в виде $F = \tilde{F} + 1$, где

$$\lim_{\zeta \rightarrow \infty} \tilde{F}(\zeta, \eta; R) = 0, \quad \tilde{F}(1, \pm 1; R) = -1.$$

Определив \tilde{F} из уравнений

$$\mathcal{L}(\tilde{F} + 1, \Phi) = 0,$$

мы легко восстановим функцию F .

Уравнение (2) в сфероидальных координатах принимает вид

$$-\frac{1}{\rho} L \phi + F^2 \phi = \epsilon \phi, \quad (13)$$

$$\epsilon = \epsilon(R), \quad \phi = \phi(\zeta, \eta; R), \quad (\zeta, \eta) \in \Omega,$$

а функция ϕ удовлетворяет граничным условиям

$$\lim_{\zeta \rightarrow 1} (\zeta^2 - 1) \frac{\partial \phi}{\partial \zeta} = 0, \quad \lim_{\eta \rightarrow \pm 1} (1 - \eta^2) \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = 0, \quad \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \phi = 0. \quad (14)$$

Из формулы (8) видно, что коэффициенты k_1 , k_2 и ρ являются четными функциями относительно η . Ввиду этого и краевых условий (10), (11), (12), (14) мы можем утверждать, что функции F , Φ и

ϕ четные по переменной η . Это нам позволяет сузить область изменения этой переменной в пределах $0 \leq \eta \leq 1$, поставив при $\eta = 0$ условия симметрии:

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} = 0.$$

МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

С целью единообразия записи положим

$$u_1 = \tilde{F}, \quad u_2 = \Phi, \quad u = (u_1, u_2).$$

Для решения уравнения $\mathcal{L}(u) = 0$ применим непрерывный аналог метода Ньютона^{/4/} (НАМН).

Введем непрерывный параметр $0 \leq t < \infty$, от которого зависит неизвестная вектор-функция $u(\zeta, \eta; R; t)$, и запишем эволюционные уравнения НАМН:

$$\mathcal{L}'(u) \frac{\partial u}{\partial t} = -\mathcal{L}(u), \quad (15)$$

$$u(\zeta, \eta; R; 0) = u^0(\zeta, \eta; R),$$

где u^0 — заданная вектор-функция, компоненты которой $u_1^0 + 1$ и u_2 удовлетворяют краевым условиям (9)-(12). Здесь $\mathcal{L}'(u)$ означает производную Фреше оператора \mathcal{L} в точке u .

Тогда при выполнении условия теоремы^{/5/} имеет место соотношение

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|u(\zeta, \eta; R; t) - u(\zeta, \eta; R)\| = 0.$$

Положим $\frac{\partial}{\partial t} u_i(\zeta, \eta; R; t) = v_i(\zeta, \eta; R; t)$, $i = 1, 2$, $v^T = (v_1, v_2)$. Применяя к задаче Коши (15) метод Эйлера, получаем итерационную схему для ее решения:

$$\mathcal{L}'(u^n) v^n = -\mathcal{L}(u^n), \quad u^{n+1} = u^n + \tau_n v^n, \quad 0 < \tau_n \leq 1. \quad (16)$$

При $\tau_n = 1$ она совпадает с классическим методом Ньютона — Канторовича. Выбор $\tau_n < 1$ позволяет существенно расширить область опре-

деления начального приближения $u^0(\zeta, \eta; R)$. По мере уменьшения некоторой нормы невязки $\delta_n = \|\mathcal{L}(u^n)\|$ "временной" шаг $\tau_n \rightarrow 1$.

Оператор \mathcal{L}' имеет вид

$$\mathcal{L}'(u^n) = \frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} \tilde{L}(u^n) & M(u^n) \\ M^*(u^n) & \tilde{K}(u_1^n) \end{pmatrix},$$

где

$$\tilde{L}(u^n) = -L + M(u_1^n + 1, u_2^n) + 2\rho(u_1^n + 1)^2,$$

$$\tilde{M}(u^n) = 2(u_1^n + 1) [k_1(\zeta; R) \frac{\partial u_2^n}{\partial \zeta} \frac{\partial}{\partial \zeta} + k_2(\eta; R) \frac{\partial u_2^n}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \eta}],$$

$$\tilde{K}(u_1^n) = K(u_1^n + 1).$$

Итерационные поправки $v^n = v^n(\zeta, \eta; R; t_n)$ удовлетворяют краевым условиям:

$$\lim_{\zeta \rightarrow \infty} v_1^n = 0, \quad i = 1, 2, \quad (17)$$

$$\lim_{\zeta \rightarrow 1} (\zeta^2 - 1) \frac{\partial v_1^n}{\partial \zeta} = 0, \quad \lim_{\eta \rightarrow \pm 1} (1 - \eta^2) \frac{\partial v_1^n}{\partial \eta} = 0, \quad (18)$$

$$v_2^n \Big|_{\zeta=1} = 0, \quad v_2^n \Big|_{\eta=\pm 1} = 0. \quad (19)$$

Дискретную схему решения задачи (16), (17)-(19) выводим при помощи метода конечных элементов (МКЭ). Для этого сформулируем слабую постановку задачи (форма Галеркина).

Требуется найти функцию v^n , такую, что

$$(\mathcal{L}'(u^n) v^n, \gamma) = -(\mathcal{L}(u^n), \gamma) \quad (20)$$

для любой вектор-функции $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2)$, $\gamma_1 \in W_2^1(\Omega)$, удовлетворяющей краевым условиям Дирихле (17), (19), u^n — заданная функция. Соотношение (20) следует понимать как интегральное тождество. Скалярное произведение в (20) определяется как

$$(z^1, z^2) = \int_{\Omega} \rho (z_1^1 z_1^2 + z_2^1 z_2^2) d\zeta d\eta, \quad (21)$$

где для вектор-функции z^1 выполняется условие

$$\int_{\Omega} \rho [(z_1^1)^2 + (z_2^1)^2] d\zeta d\eta < \infty, \quad i = 1, 2.$$

ДИСКРЕТИЗАЦИЯ

Отметим, что если функция v удовлетворяет условиям (17)-(19) и имеет необходимые производные, оператор $\mathcal{L}(w)$ является самосопряженным относительно скалярного произведения (21).

Дискретную задачу, соответствующую (21), получим, используя восьмиузловые изопараметрические элементы e_k . В области Ω построим конечномерную сетку ω , состоящую из N_e элементов e_k , $k = 1, 2, \dots, N_e$, $\Omega = \bigcup_{k=1}^{N_e} e_k$ и содержащую N узлов (ζ_i, η_i) , $i = 1, 2, \dots, N$.

Сетка ω строится при помощи ППП MULTIMODE^{8/9}, на рис. 1 показана часть одной из используемых сеток. Известно^{8/9}, что МКЭ позволяет выполнить аппроксимацию тождества (20) на каждом элементе и потом сформировать дискретную задачу во всей области Ω . Укажем способ построения дискретной задачи на некотором элементе e_k , $1 \leq k \leq N_e$. Пусть (ζ_i^k, η_i^k) , $i = 1, 2, \dots, 8$ — координаты узлов элемента e_k .

Обозначим через $[v_1^k]^T = (v_{11}^k, v_{12}^k, \dots, v_{18}^k)$, $[v_2^k]^T = (v_{21}^k, v_{22}^k, \dots, v_{28}^k)$ значения итерационных поправок v_1 и v_2 в узлах элемента e_k , а через $[u_1^k]$ и $[u_2^k]$ — вектор-столбцы из значений заданных функций u_1 и u_2 в тех же узлах. В дальнейшем индекс k будем опускать.

Рассмотрим однозначно обратимое преобразование квадрата G в элементе e_k

$$\zeta = \sum_{i=1}^8 \zeta_i^k h_i(r, s), \quad \eta = \sum_{i=1}^8 \eta_i^k h_i(r, s), \quad (22)$$

где $H^T = (h_1(r, s), h_2(r, s), \dots, h_8(r, s))$ — базисные изопараметрические функции в квадрате $G^{8/8}$. Обозначим через $\bar{v}_1^k = [v_1^k]^T H$, $\bar{v}_2^k = [v_2^k]^T H$, $\bar{u}_1^k = [u_1^k]^T H$, $\bar{u}_2^k = [u_2^k]^T H$ интерполянт-вектор-функции v и u на элементе e_k .

Подставим эти выражения в тождество (20), записанные на элементе e_k , и потребуем, чтобы оно выполнялось при $\gamma = (h_1, 0), (0, h_1), \dots, (h_8, 0), (0, h_8)$.

В результате получаем, что неизвестные значения $[v_1^k]$, $[v_2^k]$ удовлетворяют соотношению

$$\begin{pmatrix} a_1^k & a_2^k \\ (a_2^k)^T & a_3^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [v_1^k] \\ [v_2^k] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [b_1^k] \\ [b_2^k] \end{pmatrix} \quad (23)$$

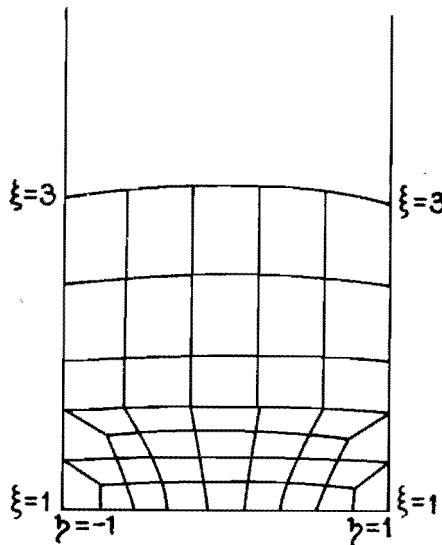


Рис. 1

Здесь a_i^k , $i = 1, 2, 3$, — локальные матрицы жесткости в элементе e_k , которые определяются как

$$a_1^k = a_4^k + a_5^k + a_6^k,$$

где

$$a_4^k = \int_G B^T D_1 B |J_k| dr ds, \quad a_5^k = \int_G f_1 H H^T |J_k| dr ds, \quad a_6^k = \int_G f_2 H H^T |J_k| dr ds,$$

$$a_2^k = \int_G B^T D_2 H^T |J_k| dr ds, \quad a_3^k = \int_G B^T D_3 B |J_k| dr ds,$$

$$G = \{-1 \leq r \leq 1, -1 \leq s \leq 1\}.$$

В этих формулах использованы следующие обозначения:

$$[DH] = \begin{pmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial r} & \frac{\partial h_2}{\partial r} & \dots & \frac{\partial h_8}{\partial r} \\ \frac{\partial h_1}{\partial s} & \frac{\partial h_2}{\partial s} & \dots & \frac{\partial h_8}{\partial s} \end{pmatrix},$$

J_k — якобиан преобразования (22), $B = J_k^{-1} [DH]$,

$$D_1 = \begin{pmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{pmatrix}, \quad D_3 = f_3^2 D_1, \quad f_3 = [u_1^k]^T H + 1,$$

$$D_2^T = (2k_1(\bar{u}_1^k + 1) \frac{\partial \bar{u}_2^k}{\partial \zeta}, \quad 2k_2(\bar{u}_1^k + 1) \frac{\partial \bar{u}_2^k}{\partial \eta}),$$

$$\left(\frac{\partial \bar{u}_2^k}{\partial \zeta}, \frac{\partial \bar{u}_2^k}{\partial \eta} \right)^T = B [u_2^k], \quad f_1 = M(\bar{u}^k), \quad f_2 = 2\rho(\bar{u}_1^k + 1)^2.$$

Вектор-столбцы $[b_1^k]$ и $[b_2^k]$ в правой части (23) получаются по формулам

$$[b_1^k] = -(a_4^k + a_5^k) [u_1^k + 1], \quad [b_2^k] = -a_3^k [u_2^k].$$

Пусть узлы, принадлежащие элементу e_k , имеют глобальные номера $\ell_1^k, \ell_2^k, \dots, \ell_8^k$, где $1 \leq \ell_i^k \leq N$, $\ell_i^k \neq \ell_j^k$, $i \neq j$, $i, j = 1, 2, \dots, 8$. Построим матрицы \bar{a}_p^k , $p = 1, \dots, 6$ с элементами

$$(a_p^k)_{\ell, m} = \delta_{\ell 1}^k \delta_{m j}^k (a_p^k)_{1j},$$

$$\ell, m = 1, 2, \dots, N, \quad 1, j = 1, 2, \dots, 8, \quad p = 1, 2, \dots, 8.$$

Тогда дискретная задача, аппроксимирующая уравнение (16) на сетке ω , имеет вид

$$\begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_2^T & A_3 \\ & N_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [v_1] \\ [v_2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [b_1] \\ [b_2] \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где $A_p = \sum_{k=1}^{N_0} \bar{a}_p^k$, $p=1,2,3$, — матрицы размерности $N \times N$, вектор-столбцы

$[v_1]$ и $[v_2]$ состоят из значений искомых функции v_1 и v_2 в узлах сетки ω , $[b_1]$ и $[b_2]$ — известные вектор-столбцы, которые вычисляются по формулам

$$[b_1] = -\bar{A}_1[u_1 + 1], \quad [b_2] = -A_3[u_2].$$

Здесь матрица $\bar{A}_1 = \sum_{k=1}^{N_0} (\bar{a}_1^k + \bar{a}_2^k)$, а $[u_1]$ и $[u_2]$ — вектор-столбцы из

значений известных функций u_1 и u_2 в узлах сетки ω . Естественно, что все полученные матрицы A_1, A_2, A_3, \bar{A}_1 зависят от функции u^n .

Решение дискретной задачи (24) позволяет найти значения итерационных поправок $(v^n)^T = (v_1^n, v_2^n)$ в узлах сетки.

Итерационный процесс (16) заканчивается при выполнении критерия точности $\delta_n < \bar{\epsilon}$, где $\bar{\epsilon}$ выбиралось равным 10^{-6} .

Дискретная аппроксимация спектральной задачи (13)-(14) выводится на основе минимизации функционала Рэлея-Ритца:

$$R(w) = \int_{\Omega} [k_1 \left(\frac{\partial w}{\partial \zeta}\right)^2 + k_2 \left(\frac{\partial w}{\partial \eta}\right)^2 + \rho F^2 w^2] d\zeta d\eta / \int_{\Omega} \rho w^2 d\zeta d\eta,$$

при помощи рассмотренных конечных элементов^{/8/}. Стационарные точки ϕ дискретного аналога этого функционала являются решениями обобщенной алгебраической проблемы собственных значений

$$P\phi = \epsilon Q\phi, \quad (25)$$

где для матрицы жесткости P и матрицы массы Q имеем $P = P^T > 0$, $Q = Q^T > 0$. Их построение сводится к построению локальных матриц на элементе e_k :

$$p_k = \int_{\Omega} (B^T D_1 B + \rho F^2 N N^T) |J_k| dr ds, \quad q_k = \int_{\Omega} \rho N N^T |J_k| dr ds.$$

Тогда $P = \sum_{k=1}^{N_0} p_k$, $Q = \sum_{k=1}^{N_0} q_k$, а суммирование понимается в указанном выше смысле.

Частичная проблема собственных значений (25) решается при помощи метода итераций подпространств^{/7/}.

ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Разработанный метод решения задач (4), (9)-(12) и (13)-(14) реализован в виде пакета программ, имеющего системное и функциональное наполнение. Системная часть пакета выполнена в виде стандартной процедуры языка ОС ЕС. Функциональная часть пакета содержит в себе программу автоматического построения конечно-элементарной сетки, программу для перенумерации узлов с целью выявления связанных графов минимальной длины и программы, реализующие предложенные алгоритмы. Первые две программы входят в стандартное математическое обеспечение ППП MULTIMODE^{/9/}.

Рассмотрим некоторые характерные моменты реализации итерационного процесса (16) при решении нелинейной задачи (4), (9)-(12). С помощью векторов $[u_1^n]^T = (u_{11}^n, u_{12}^n, \dots, u_{1N}^n)$, $i=1,2$, компоненты которых составлены из значений известных функций u_1^n и u_2^n в узлах сетки, формируем вектор $[u^n]^T = (u_{11}^n, u_{21}^n, u_{12}^n, u_{22}^n, \dots, u_{1N}^n, u_{2N}^n)$. Тогда систему (24) можно переписать в виде

$$A^n [v^n] = [b^n], \quad (26)$$

где $[v^n]^T = (v_{11}^n, v_{21}^n, v_{12}^n, v_{22}^n, \dots, v_{1N}^n, v_{2N}^n)$, $[b^n]^T = (b_{11}^n, b_{21}^n, \dots, b_{1N}^n, b_{2N}^n)$, а симметричная матрица A^n имеет ленточную структуру и получается из (24).

Решение системы (26) проводится путем первоначальной декомпозиции матрицы A в виде

$$A = UVU^T,$$

где U — нижняя треугольная матрица с единицами на диагонали, V — диагональная матрица. В процессе вычислений в оперативной памяти ЭВМ хранится только профиль матрицы A .

Численное решение задачи (4), (9)-(12) проводилось для значений параметра $R = \{R_1, R_2, \dots, R_8\}$, которые представлены в таблицах. При этом решение задачи в точке R_i использовалось в качестве начального приближения в следующей точке R_{i+1} . Для того чтобы осуществить этот процесс, необходимо решить задачу в некоторой начальной точке R_H , которая в работе выбиралась равной 1,5. В этой точке начальные приближения к функциям u_1 и u_2 задавались по формулам

$$u_1^0 = \frac{1}{2}(1 - \eta^2 e^{-(\zeta^2 - 1)}) + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg}(\zeta^2 - 1) - 1, \quad u_2^0 = \pi e^{-4(\zeta^2 - 1)}, \quad (27)$$

краевые условия (9), (11), (12) учитывались при помощи штрафного члена $/8/$, а "временной" шаг выбирался в процессе итераций, как указано в работе $/10/$.

Вычисления проводились в конечной области $\Omega_R = \{1 \leq \zeta \leq \zeta_{\max}, |\eta| \leq 1\}$, где $\zeta_{\max} \gg 1$. Значение ζ_{\max} выбиралось так, чтобы в ци-

линдрических координатах $r = \frac{R}{2} \sqrt{(\zeta^2 - 1)(1 - \eta^2)}$, $z = \frac{R}{2} \zeta \eta$ выполня-

лись неравенства $r_{\max} \geq 3$ и $z_{\max} \geq 3$. Это необходимо для корректного учета характерных размеров вихрей.

ТЕСТОВЫЙ ПРИМЕР

Для проверки правильности работы программ была рассмотрена задача об определении волновой функции одиночного вихря Питаевского $/11/$. В этом случае удобно использовать декартовы координаты точки (x, y) . Коэффициенты оператора \mathcal{L} имеют вид $k_1 = 1, k_2 = 1, \rho = 1$. Переменные x, y изменяются в области $\Omega_1 = \{x \geq 0, y \geq 0, x^2 + y^2 \leq \ell^2, \ell \gg 1\}$, а искомые функции F и Φ удовлетворяют граничным условиям:

$$\frac{\partial F}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0, \quad F(0,0) = 0, \quad F \Big|_{x^2 + y^2 = \ell^2} = 1, \quad (28)$$

$$\Phi \Big|_{x=0} = \frac{\pi}{2}, \quad \Phi \Big|_{y=0} = 0, \quad \Phi \Big|_{x^2 + y^2 = \ell^2} = \operatorname{arctg} \frac{y}{x}.$$

На основе разработанных методов и программ было проведено численное решение задачи (4), (28). Известно $/11/$, что в этом случае амплитуда F зависит только от величины $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $F(x, y) = f(r)$, а фаза Φ равняется полярному углу точки. Функция $f(r)$ является решением нелинейной задачи

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{df}{dr} + (f^2 - 1 + \frac{1}{r^2})f = 0, \quad (29)$$

$$f(0) = 0, \quad f(\ell) = 1.$$

Задача (29) решалась при помощи НАМН, а аппроксимация проводилась методом конечных разностей $/12/$.

В табл. 1 приведены значения решения $F(x, 0)$ задачи (4), (28) и значения решения $f(r)$ задачи (29), где $r = x$. Конечно-элементная

сетка для решения задачи (4), (28) содержала 45 элементов и 164 узла, а разностная сетка содержала 100 узлов ($h = 0,1$).

Таблица 1

x	F(x, 0)	f(x)	x	F(x, 0)	f(x)
0,1	0,05624	0,05819	5,05	0,97716	0,97721
0,65	0,36129	0,36002	5,6	0,98210	0,98217
1,2	0,59739	0,59687	6,15	0,98558	0,98563
1,75	0,75480	0,75479	6,70	0,98811	0,98817
2,3	0,85121	0,85109	7,25	0,99006	0,99010
2,85	0,90688	0,90682	7,8	0,99165	0,99169
3,4	0,93913	0,93919	8,35	0,99311	0,99313
3,95	0,95816	0,95818	8,9	0,99465	0,99465
4,5	0,96974	0,96982	9,45	0,99660	0,99668

Хорошее совпадение результатов указывает на правильную реализацию итерационного процесса и на возможность получения достаточной точности решения задачи (4), (9)-(12) при использовании относительно небольшого числа узлов конечно-элементной сетки.

ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В этом разделе приведены результаты численного исследования задачи (4), (9)-(12). В табл. 2 показана сходимость НАМН при решении (16) с $R_H = 1,5$. Начальное приближение выбиралось при помощи формул (27). Сетка ω содержит 78 элементов, 273 узла. Число неизвестных равно 546. В таблице приведены значения "временного" шага τ_n , значения $\delta_1^n = \max_{\omega} |v_1^n|$, $\delta_2^n = \max_{\omega} |v_2^n|$, $\delta = \max_{\omega} |\mathcal{L}(u_1^n, u_2^n)|$. Время реше-

ния задачи при использовании ЭВМ ЕС-1061 составило 2 мин 14 с.

Решение, полученное при $R_H = 1,5$, использовалось как начальное приближение для решения задачи при других значениях R . В табл. 3, в обозначениях из табл. 2 показана сходимость НАМН при $R = 0,1$. Время решения составило 36 с.

На рис. 2, 3 даны графики функции $F(+z, 0; R)$ в зависимости от R . Вид функции F указывает на то, что при $R \rightarrow 0$ волновая функция $\phi_0 \rightarrow \text{const}$.

В табл. 4 показана зависимость классического вклада y_0 в энергию неоднородности (формулы (46)₁) от значения параметра R .

Таблица 2

n	r_n	δ_1^n	δ_2^n	δ^n
1	0,1	0,4980 (-1)	0,6154 (-2)	0,2003 (-1)
2	0,1111	0,4507 (-1)	0,5445 (-2)	0,1803 (-1)
3	0,1249	0,4026 (-1)	0,4733 (-2)	0,1603 (-1)
4	0,1427	0,3540 (-1)	0,4022 (-2)	0,1404 (-1)
5	0,1663	0,3050 (-1)	0,3314 (-2)	0,1204 (-1)
6	0,1994	0,2556 (-1)	0,2698 (-2)	0,1004 (-1)
7	0,2489	0,2056 (-1)	0,2090 (-2)	0,8047 (-2)
8	0,3311	0,1523 (-1)	0,1492 (-2)	0,6049 (-2)
9	0,4943	0,1044 (-1)	0,9141 (-3)	0,4053 (-2)
10	0,9745	0,5319 (-2)	0,3771 (-3)	0,2055 (-2)
11	1	0,1478 (-3)	0,1987 (-3)	0,5825 (-4)
12	1	0,2613 (-6)	0,6305 (-5)	0,4375 (-6)

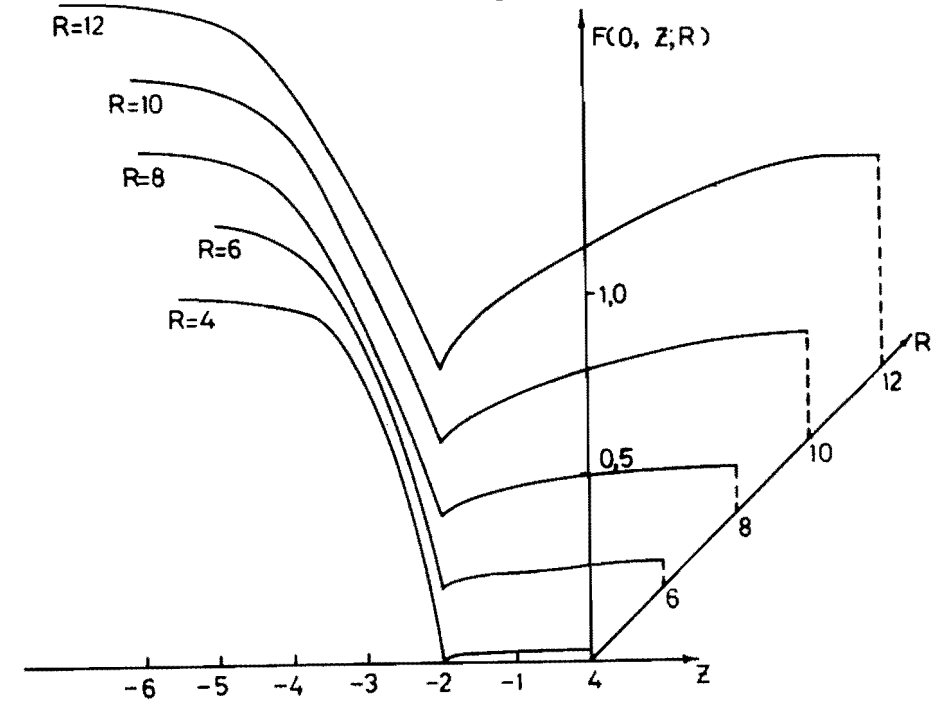
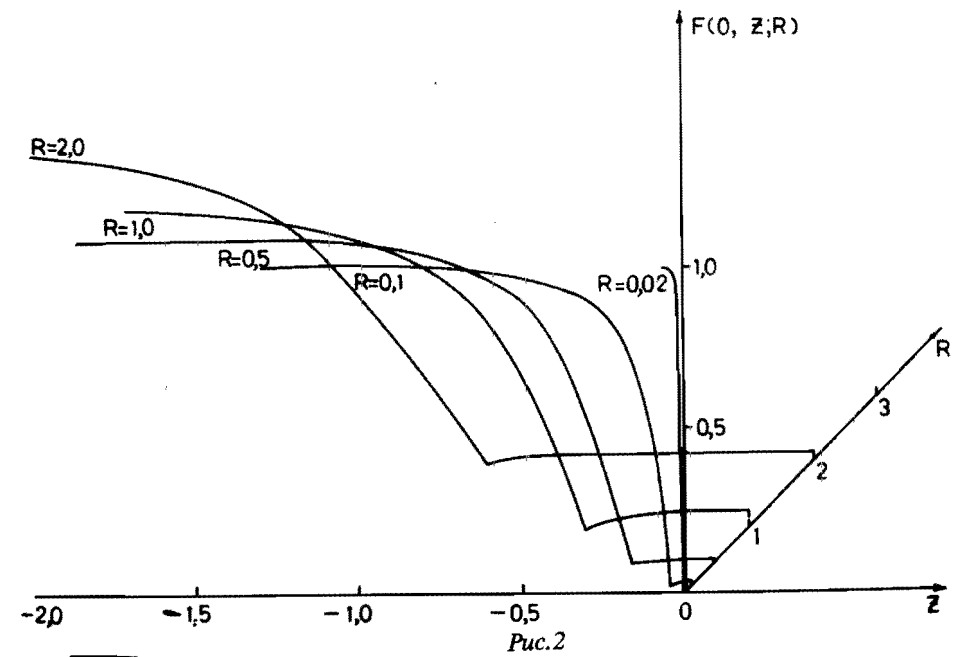
Таблица 3

n	r_n	δ_1^n	δ_2^n	δ^n
1	0,4	0,7562 (-1)	0,3441 (-1)	0,2218 (-2)
2	0,6668	0,4510 (-1)	0,1579 (-1)	0,1331 (-2)
3	1,0000	0,1492 (-1)	0,3430 (-2)	0,4429 (-3)
4	1,0000	0,1212 (-4)	0,3419 (-3)	0,2863 (-5)

Таблица 4

R	γ_0	R	γ_0	R	γ_0
0,02	0,06347	0,5	1,486061	5	36,16095
0,04	0,126293	1	3,465786	6	49,51256
0,06	0,190693	2	8,727987	7	65,05536
0,08	0,256385	2,5	12,05305	8	82,74837
0,1	0,323271	3	15,85892	9	102,4354
0,2	0,35174	3,5	20,15968	10	123,7743
0,4	1,111639	4	24,96886	12	168,8411

Из полученных результатов следует, что γ_0 монотонно убывает и при $R \rightarrow 0$ $\gamma_0(R) \rightarrow 0$.



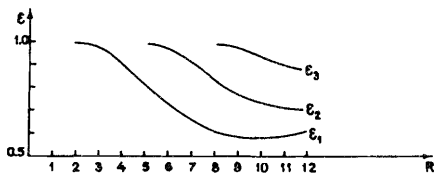


Рис. 4

Для проверки точности полученных результатов был проведен контрольный расчет на сетке, состоящей из 134 элементов и 453 узлов. В этом случае значение $\gamma_0(1,5) = 5,9576$ и относительная погрешность результата по сравнению с более крупной сеткой составляет 1,5%.

На рис. 4 показаны графики энергий $\epsilon_n(R)$, полученные при решении спектральной задачи (13)-(14). Одновременно вычислялись матричные элементы β_n и β_{nm} (формулы (48)).

В каждой точке R получалось, что коэффициенты $g_n = 1 - \epsilon_n - \beta_n$ отрицательны для всех связанных состояний $\phi_n(R)$. Это означает, что $\min \xi(\phi_0, X_n)$ из (50)₁ достигается только при $X_n = 0$ и равен нулю. Отсюда следует, что квантовомеханический выигрыш в энергии, возникающий при размещении атомов по связанным состояниям, всегда положителен и не может скомпенсировать энергию, затрачиваемую на создание неоднородности конденсата.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследован вопрос о виде волновой функции бозе-конденсата, соответствующей основному состоянию двумерного бозе-газа. Найдено общее выражение для энергии бозе-газа с неоднородным конденсатом, которое было применено при вычислении энергии молекулы, составленной из двух квантовых вихрей с противоположными направлениями вращения сверхтекучей компоненты. Прослежена эволюция вихрей при их сближении. Показано, что при любом расстоянии между центрами вихрей R эта энергия положительна $\xi_\mu(R) > 0$. Таким образом, наименьшая энергия двумерного бозе-газа достигается при однородном конденсате. При $R \rightarrow 0$ энергия монотонно стремится к нулю и неоднородность исчезает (вихри "аннигилируют"). Энергия $\xi_\mu(R)$ не имеет минимумов, то есть не существует равновесного расстояния между вихрями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Касчиева В.А. и др. ОИЯИ, P5-87-231, Дубна, 1987.
2. Морс Ф.М., Фешбах Г. Методы теоретической физики, т. II, М.: ИЛ, 1960.
3. Kaschiev M.S. et al. — Phys. Rev. A, 1980, No.2, p.22.
4. Гавурин М.К. — Изв. ВУЗов, Математика, 1958, 5 (6), с.18-31.
5. Жидков Е.П., Пузынин И.В. — ЖВМ и МФ, 1967, т.7, №5, с.1086.
6. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1977.

7. Bathe K.L., Wilson Ed. Numerical Methods in Finite Element Analysis, Prentice-Hall, Englewood, cliff, N.J., 1976.
8. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979.
9. Fedoseyev A.I. et al. — NIM Section A, 1984, v.227, No.3, p.411.
10. Пузынин И.В., Пузынина Т.П. — В сб.: Алгоритмы и программы для решения некоторых задач физики (совместный научный сборник ОИЯИ (Дубна) и ЦИФИ (Будапешт)), КФКИ-74-34, Будапешт, 1974, с.93.
11. Лифшиц Е.М., Питаевский П.П. Статистическая физика, ч.2. М.: Наука, 1978.
12. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 апреля 1987 года.