

12/III-84



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P11-83-871

1289/84

А.Б.Швачка, Е.Ю.Панова

АЛГОРИТМ
И ПРОГРАММА ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
С $U(1,1)$ -СИММЕТРИЕЙ

1983

1. Введение

В настоящее время большое число работ посвящено нелинейному уравнению Шредингера (НУШ)

$$i \Psi_t + \Psi_{xx} + 2 |\Psi|^2 \Psi = 0 \quad (1)$$

(см. работы /1/-/3/ и ссылки, приведенные в них).

В случае $U(1,1)$ изотопической группы симметрии рассматривается система из двух уравнений с кубической нелинейностью для комплексных функций $\Psi^{(\alpha)}(x,t)$ ($\alpha = 1,2$) в области $-\infty < x < +\infty$

$$i \Psi_t^{(\alpha)} + \Psi_{xx}^{(\alpha)} + 2 (|\Psi^{(1)}|^2 - |\Psi^{(2)}|^2) \Psi^{(\alpha)} = 0, \quad (2)$$

$\alpha = 1,2.$

Интегрируемость такой системы и другие ее свойства подробно рассмотрены в работах /1,2/.

В настоящей работе приведено описание программы для численного решения системы уравнений (2) с различными начальными и граничными условиями.

На основе этой программы была исследована динамика солитоноподобных решений в рамках системы уравнений (2).

2. Разностная схема

Для численного интегрирования системы уравнений (2) использован разностный метод, при котором линейная часть уравнений аппроксимируется разностной схемой с коэффициентом невязности σ , а для аппроксимации нелинейного члена используется явное выражение ("implicit - explicit" метод /5/).

Запишем систему уравнений (2) в виде

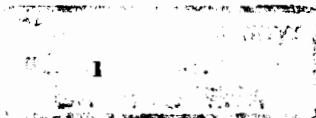
$$i \Psi_t + \Psi_{xx} + 2 (\bar{\Psi} \Psi) = 0, \quad (2a)$$

где

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \end{pmatrix},$$

$$(\bar{\Psi} \Psi) = |\Psi^{(1)}|^2 - |\Psi^{(2)}|^2.$$

Поставим в соответствие функции Ψ непрерывных аргументов x, t сеточную функцию Ψ_k^j , где j - индекс, отвечающий слову по времени, k - слово по координате. Дифференциальным уравнениям (2a) поставим в соответствие разностные уравнения



$$i \frac{\Psi_k^{j+1} - \Psi_k^j}{\tau} + \sigma \Lambda \Psi_k^{j+1} + (1-\sigma) \Lambda \Psi_k^j + 2(\bar{\Psi}\Psi)_k^j \Psi_k^j = 0, \quad (3)$$

$k=2, \dots, N-1,$

где Λ - оператор вида

$$\Lambda \Psi_k^j = \frac{\Psi_{k+2}^j - 2\Psi_k^j + \Psi_{k-1}^j}{h^2}, \quad (4)$$

τ, h - шаги равномерной разностной сетки по времени и координате соответственно.

Для исследования устойчивости линеаризованной разностной схемы представим ее решение $\Psi_s^j = \Psi^j(x_s)$ в виде^{/4/}

$$\Psi^j(x_s) = \sum_{k=1}^N c_k^j X_k(x_s), \quad (5)$$

где $X_k(x_s)$ - собственные функции оператора Λ , которым соответствуют собственные значения $\alpha_k = -\lambda_k$.

Подставив (5) в разностное уравнение (3), получим

$$c_k^{j+1} = q_k c_k^j, \quad (6)$$

где

$$q_k = \frac{i + \tau(1-\sigma)\lambda_k}{i - \tau\lambda_k\sigma}.$$

Оценим квадрат нормы сеточной функции для слоя с номером $j+1$:

$$\|\Psi^{j+1}\|^2 = \left\| \sum_{k=1}^N c_k^{j+1} X_k \right\|^2 = \left\| \sum_{k=1}^N q_k c_k^j X_k \right\|^2 \leq \max_{1 \leq k \leq N} |q_k|^2 \|\Psi^j\|^2. \quad (8)$$

Разностная схема устойчива, если $|q_k| \leq 1$. Из (7) следует, что

$$|q_k|^2 = 1 + \frac{\tau^2 \lambda_k^2 (1-2\sigma)}{1 + \tau^2 \sigma^2 \lambda_k^2}. \quad (9)$$

Следовательно, схема устойчива при

$$\sigma \geq 0,5, \quad (10)$$

и притом безусловно устойчива.

Порядок аппроксимации разностной схемы

$$O(\tau^2 + h^2) \quad \text{при} \quad \sigma = 0,5$$

и

$$O(\tau + h^2) \quad \text{при} \quad \sigma > 0,5.$$

Численные эксперименты показали, что нелинейная разностная схема устойчива при выполнении условия (10) для систем с изогруппами симметрии $\mathcal{U}(0,1)$ и $\mathcal{U}(1,0)$; для систем с $\mathcal{U}(1,1)$ симметрией устойчива полностью неявная разностная схема ($\sigma=1$).

Для решения системы разностных уравнений (3) используется метод матричной прогонки^{/4/}. Устойчивость этого метода можно показать способом, аналогичным рассмотренному в работе^{/6/}.

Сеточные функции Ψ_k^j ищем в виде

$$\Psi_k^j = A_k \Psi_{k-1}^j + B_k, \quad (11)$$

где для коэффициентов прогонки получены следующие выражения

$$A_k = -\frac{\sigma \xi}{\sigma \xi A_{k+1} + i - 2\sigma \xi}, \quad (12)$$

$$B_k = \frac{F_k^{j-1} - \sigma \xi B_{k+1}^j}{i - 2\sigma \xi + \sigma \xi A_{k+1}},$$

где

$$\xi = \frac{\tau}{h^2}, \quad (13)$$

$$F_k^j = i \Psi_k^j - (1-\sigma)\xi(\Psi_{k+1}^j - 2\Psi_k^j + \Psi_{k-1}^j) - 2\tau(\bar{\Psi}\Psi)_k^j \Psi_k^j. \quad (14)$$

Коэффициенты A_k одинаковы для всех временных слоев; коэффициенты B_k необходимо вычислять на каждом слое по времени.

В программе вычисления производятся с действительными величинами, при этом полагаем

$$A_k = \alpha_k + i\beta_k, \quad B_k = \gamma_k + i\delta_k, \quad (15)$$

$$F_k = \theta_k + i\varphi_k, \quad \Psi_k = u_k + iV_k.$$

Тогда прогоночные коэффициенты $\alpha_k, \beta_k, \gamma_k, \delta_k$ принимают вид

$$\alpha_k = \frac{-\sigma^2 \xi^2 (\alpha_{k+1} - 2)}{\sigma^2 \xi^2 (\alpha_{k+1} - 2)^2 + (1 + \sigma \xi \beta_{k+1})^2},$$

$$\beta_k = \frac{\sigma \xi (1 + \sigma \xi \beta_{k+1})}{\sigma^2 \xi^2 (\alpha_{k+1} - 2)^2 + (1 + \sigma \xi \beta_{k+1})^2}, \quad (16)$$

$$\gamma_k = \frac{\sigma \xi (\theta_k - \sigma \xi \gamma_{k+1})(\alpha_{k+1} - 2) + (\varphi_k - \sigma \xi \delta_{k+1})(1 + \sigma \xi \beta_{k+1})}{\sigma^2 \xi^2 (\alpha_{k+1} - 2)^2 + (1 + \sigma \xi \beta_{k+1})^2},$$

$$\delta_k = \frac{-(\theta_k - \sigma \xi \gamma_{k+1})(1 + \sigma \xi \beta_{k+1}) + \sigma \xi (\varphi_k - \sigma \xi \delta_{k+1})(\alpha_{k+1} - 2)}{\sigma^2 \xi^2 (\alpha_{k+1} - 2)^2 + (1 + \sigma \xi \beta_{k+1})^2}.$$

Коэффициенты $\alpha_N, \beta_N, \gamma_N, \delta_N$ известны из граничного условия на правом конце, с учетом этого решения системы разностных уравнений запишем в виде

$$\begin{aligned} U_k &= \alpha_k U_{k-1} - \beta_k V_{k-1} + \gamma_k, \\ V_k &= \alpha_k V_{k-1} + \beta_k U_{k-1} + \delta_k. \end{aligned} \quad (17)$$

Для контроля точности расчетов в программе проверяется выполнение первых пяти законов сохранения, которые имеют вид [2,3/

$$I_1 = - \int_{-\infty}^{\infty} \{ |\Psi|^2 + \mu \} dx,$$

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right\} dx,$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \{ |\Psi|^4 + |\Psi_x|^2 + \mu \} dx,$$

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \Psi^* \frac{d}{dx} \left(|\Psi|^2 \Psi - \frac{d^2}{dx^2} \Psi \right) + 2 |\Psi|^2 \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right\} dx,$$

$$I_5 = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ |2\Psi|^6 + 6 |\Psi|^2 |\Psi_x|^2 + \left(\frac{d}{dx} |\Psi|^2 \right)^2 + |\Psi_{xx}|^2 + 2\mu \right\} dx$$

для систем с изотопической группой $\mathcal{U}(0,1)$ и

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} (\bar{\Psi} \Psi) dx,$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} (\bar{\Psi} \Psi_x) dx,$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} ((\bar{\Psi} \Psi_{xx}) + (\bar{\Psi} \Psi)^2) dx,$$

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} ((\bar{\Psi} \Psi_{xxx}) + 3(\bar{\Psi} \Psi)(\bar{\Psi} \Psi_x)) dx,$$

$$I_5 = \int_{-\infty}^{\infty} ((\bar{\Psi} \Psi_{xxxx}) + (\bar{\Psi} \Psi)^3 - \left(\frac{d}{dx} (\bar{\Psi} \Psi) \right)^2 - 6(\bar{\Psi} \Psi_x)(\bar{\Psi} \Psi)) dx$$

для систем с изотопической группой $\mathcal{U}(1,1)$.

Значения относительных погрешностей величин $I_1 \div I_5$ приведены в таблице.

Таблица

Относительные погрешности	$\mathcal{U}(0,1)$	$\mathcal{U}(1,1)$
$\frac{ \Delta I_1 }{I_1}$	0,0005	0,0005
$\frac{ \Delta I_2 }{I_2}$	0,0005	0,001
$\frac{ \Delta I_3 }{I_3}$	0,0005	0,001
$\frac{ \Delta I_4 }{I_4}$	0,001	0,003
$\frac{ \Delta I_5 }{I_5}$	0,001	0,003

При численном моделировании столкновений солитоноподобных объектов в рамках уравнения (2) в момент перекрытия квазисолитонов максимальные величины относительных погрешностей достигают 10-15%.

3. Описание программы

Программа реализована на алгоритмическом языке ФОРТРАН и имеет модульную структуру. Работа программы осуществляется по схеме, изображенной на рис.1. В главной программе SHRDGR задаются граничные условия, а также осуществляется вызов подпрограмм. В подпрограмме INCOND задаются начальные условия - действительная и мнимая части функций $\Psi^{(1)}, \Psi^{(2)}$ для первого слоя по времени. Подпрограмма FDIFSC вычисляет действительную и мнимую части сеточных функций $(\Psi^{(\alpha)})_k^j$ ($\alpha=1,2; k=1, \dots, N$) для слоя j по их известным значениям на предыдущем слое $j-1$. Подпрограмма ISOBR осуществляет вывод графиков величин $|\Psi^{(\alpha)}|^2$ в заданные в основной программе моменты времени. Подпрограмма HAMILT вычисляет гамильтониан в различные моменты времени по формуле

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{H} dx, \quad (18)$$

где

$$\mathcal{H} = |\Psi_x^{(1)}|^2 - |\Psi_x^{(2)}|^2 - (|\Psi^{(1)}|^2 - |\Psi^{(2)}|^2) + 2\mu_1 |\Psi^{(1)}|^2 - 2\mu_2 |\Psi^{(2)}|^2 \quad (19)$$

(см. [2/),

и осуществляет контроль выполнения закона сохранения энергии в процессе счета путем вычисления величины

$$\varepsilon = \left| \frac{H(t) - H_0}{H(t)} \right|,$$

где H_0 - значение энергии в начальный момент времени $t=0$, $H(t)$ - значение энергии в момент времени t .

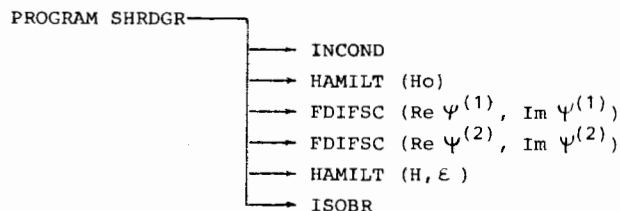


Рис. Схема работы пакета программ. Результаты численных экспериментов приведены в работе^{/7/}. В заключение авторы выражают глубокую благодарность профессору А.А.Абрамову за стимулирующие дискуссии.

Литература

1. Makhankov V., Pashaev O. JINR, E2-81-264, 1981.
2. Makhankov V., Pashaev O. JINR, E2-81-540, 1981.
3. Захаров В.Е., Шабат А.Б. ЖЭТФ, 1973, 67, с.1627.
4. Самарский А.А. Теория разностных схем. "Наука", М., 1974.
5. Taħa T.R., Ablowitz M.J. Clarkson College of Technology. I.F.N.S. preprint No.15, 1982, Potsdam, New York.
6. Душко А.Л. ЖВМ и МФ, 1968, 8, с.238.
7. Маханьков В.Г., Панова Е.Ю., Швачка А.Б. ОИЯИ, PII-83-870, Дубна, 1983.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 декабря 1983 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
D4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
D1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	5 р. 20 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D2,4-83-179	Труды XV Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Дубна, 1982.	4 р. 80 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Швачка А.Б., Панова Е.Ю.

P11-83-871

Алгоритм и программа численного решения нелинейного уравнения Шредингера с $U(1,1)$ -симметрией

Приведено описание алгоритма и программы численного интегрирования нелинейного уравнения Шредингера с изотопической группой $U(1,1)$ в 2-мерном пространстве-времени. Для численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений использован разностный метод с явной аппроксимацией нелинейного члена. Приведены оценки устойчивости линеаризованной разностной схемы и оценки для нелинейной разностной схемы, полученные с помощью численных экспериментов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Shvachka A.B., Panova E.Yu.

P11-83-871

The Numerical Algorithm and Code for Studying the $U(1,1)$ Nonlinear Schrödinger Equation

The numerical algorithm and code for studying the nonlinear Schrödinger equation with $U(1,1)$ isogroup in two space-time dimensions are described. The finite difference scheme with implicit approximation for the linear part of the differential operator and explicit approximation for the nonlinear term is presented. The stability requirements for linear and nonlinear scheme are considered.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой