2670/84

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р11-84-150

А.Б.Швачка, Е.Ю.Панова

МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ ВИДА $f(|u|)u$

1984

I. Введение

Рассмотрим нелинейное уравнение Шредингера (НУШ)

$$iu_t + Lu = f(|u|)u,$$
$$x \in G = \{(x_1, x_2), 0 < x_\alpha < l_\alpha, \alpha = 1,2\}, \qquad (I)$$
$$0 < t < t_0,$$

где

$$Lu = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}u + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}u, \qquad (2)$$

с граничным условием на границе Γ области G

$$u|_\Gamma = 0 \qquad (3)$$

и начальным условием

$$u(0,x) = u_0(x). \qquad (4)$$

В качестве функции $f(|u|)$ можно рассматривать одну из следующих функций:

$$f(|u|) = \begin{cases} \alpha|u|^2, & (5а) \\ a|u|^2 + b|u|^4 + \alpha, & (5б) \\ (1 - exp[-\alpha|u|^2])/\alpha, & (5в) \\ \dfrac{|u|^2}{1+|u|^2}, & (5г) \\ ln(a^2|u|^2). & (5д) \end{cases}$$

Уравнения (I) с функциями (5а)-(5д) в правых частях описывают модели разнообразных физических систем, изучаемых в нелинейной оптике, физике конденсированного состояния, физике плазмы и ядерной физике /1/.

Так, НУШ с функцией $f(|u|)$ вида (5а) в правой части описывает распространение электромагнитной волны в нелинейной среде /2/, трехчастотное взаимодействие волн в среде с квадратичной нелинейностью /3/.

НУШ с функцией (5б) в правой части используют для описания рассеяния α -частиц друг на друге[4].

Динамика пакетов ленгмюровских волн вблизи стационарных состояний описывается НУШ с функцией (5в) в правой части[1].

Поведение огибающей электрического поля светового пучка, распространяющегося в среде с нелинейной диэлектрической проницаемостью, описывается НУШ с функцией (5г) в правой части[5].

Исследование столкновений гауссонов[6] проводилось в рамках НУШ с функцией (5д) в правой части.

2. Построение локально-одномерной схемы для решения НУШ

Для численного решения многомерного нелинейного уравнения Шредингера используем метод суммарной аппроксимации[7].

Для построения локально-одномерной схемы (ЛОС) введем сетку

$$\omega = \omega_\tau \times \omega_h ,$$

$$\omega_\tau = \{ t_j : t_j = j\tau , \ j = 0,1,\dots,N_t , \ \tau = \frac{t_0}{N_t} \},$$

$$\omega_h = \{ (x_1,x_2) : \ x_\alpha = i_\alpha h_\alpha , \ i_\alpha = 0,1,\dots,N_\alpha , \ h_\alpha = \frac{l_\alpha}{N_\alpha} , \alpha = 1,2 \}.$$

Перепишем уравнение (I) в виде

$$i u_t + \hat{A} u = 0, \qquad (6)$$

где линейный оператор $\hat{A}$, нелинейно зависящий от u , определяется по формуле

$$\hat{A}(u(x,t)) = L - f(|u(x,t)|) . \qquad (7)$$

Задачу (6) с граничным условием (3) и начальным условием (4) заменим цепочкой одномерных уравнений

$$\frac{1}{2} i \frac{\partial v_\alpha}{\partial t} + \hat{A}_\alpha v_\alpha = 0 \qquad (8)$$

при $t_{j+(\alpha-1)/2} < t \le t_{j+\alpha/2}$, $\alpha = 1,2$, $j = 0,\dots,N_t$,

где

$$\hat{A}_\alpha = L_\alpha - \frac{1}{2} f(|v_\alpha(x,t_j)|) ,$$

$$L_\alpha = \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} .$$

При этом выполняется условие

$$\hat{A} u - (\hat{A}_1 + \hat{A}_2) u = O(\tau) . \qquad (9)$$

К (8) присоединим начальные условия

$$v_1(x,0) = u_0(x),$$
$$v_2(x,t_{j+1/2}) = v_1(x,t_{j+1/2}),$$
$$v_1(x,t_{j+1}) = v_2(x,t_{j+1}) \qquad (10)$$

и граничное условие

$$v_\alpha |_{\Gamma_\alpha} = 0 , \qquad (11)$$

где Γ_α состоит из граней $x_\alpha = 0$ и $x_\alpha = l_\alpha$, $\alpha = 1,2$.

Аппроксимируем каждое уравнение (8) с номером α на интервале $t_{j+(\alpha-1)/2} < t \le t_{j+\alpha/2}$ полунеявной разностной схемой

$$i \frac{y^{j+\alpha/2} - y^{j+(\alpha-1)/2}}{\tau} + \frac{1}{2} \hat{a}_\alpha (y^j)(y^{j+\alpha/2} + y^{j+(\alpha-1)/2}) = 0, \qquad (12)$$

$$\alpha = 1,2 ; \ x \in \omega_h ,$$

где

$$\hat{a}_\alpha (y^j) = \Lambda_\alpha - \frac{1}{2} f(|y^j|) ,$$

$\Lambda_\alpha y = y_{\bar{x}_\alpha x_\alpha}$ – разностная аппроксимация дифференциального выражения $L_\alpha v_\alpha$.

К этому уравнению присоединим краевые условия вида

$$y^{j+\alpha/2} = 0 \quad \text{при} \quad x \in \gamma_{h,\alpha} , \qquad (13)$$

где узлы $x \in \gamma_{h,\alpha}$ лежат на Γ_α , а также начальные условия

$$y(0,x) = u_0(x), \qquad (14)$$

$$y^{j+\alpha/2}(t_{j+\alpha/2}, x) = y^{j+(\alpha-1)/2}(t_{j+\alpha/2}, x) .$$

Полученная цепочка одномерных уравнений называется локально-одномерной схемой (ЛОС)[7].

3. Погрешность аппроксимации ЛОС

Для погрешности метода $z^j = y^j - u^j$ имеем следующую задачу:

$$i \frac{z^{j+\alpha/2} - z^{j+(\alpha-1)/2}}{\tau} + \frac{1}{2} \hat{a}_\alpha (u^j + z^j)(z^{j+\alpha/2} + z^{j+(\alpha-1)/2}) +$$
$$+ \frac{1}{2} [\hat{a}_\alpha (u^j + z^j) - \hat{a}_\alpha (u^j)](u^{j+\alpha/2} + u^{j+(\alpha-1)/2}) + \psi_\alpha^j = 0 , \qquad (15)$$

где ψ_α^j – невязка, определяемая по формуле

$$\psi_\alpha^j = i \frac{u^{j+\alpha/2} - u^{j+(\alpha-1)/2}}{\tau} + \frac{1}{2} \hat{a}_\alpha (u^j)(u^{j+\alpha/2} + u^{j+(\alpha-1)/2}) . \qquad (16)$$

Граничное условие имеет вид

$$z^{j+\alpha/2} = 0, \ x \in \gamma_{h,\alpha} , \ \alpha = 1,2 , \qquad (17)$$

начальное условие –

$$z(x,0) = 0. \qquad (18)$$

Следуя[7], представим невязку ψ_α^j в виде суммы

$$\psi_\alpha^j = \overset{\circ}{\psi}{}_\alpha^j + \overset{*}{\psi}{}_\alpha^j , \tag{I9}$$

где

$$\overset{\circ}{\psi}{}_\alpha^j = \left(L_\alpha u + \tfrac{1}{2} i \frac{\partial u}{\partial t} - \tfrac{1}{2} f(|u^j|)\,u\right)^{j+1/2} . \tag{20}$$

Для суммы $\overset{\circ}{\psi}{}_1^j + \overset{\circ}{\psi}{}_2^j$, учитывая (I), имеем

$$\overset{\circ}{\psi}_1 + \overset{\circ}{\psi}_2 = O(\tau) . \tag{2I}$$

Оценим невязку $\overset{*}{\psi}{}_\alpha^j$.

$$\overset{*}{\psi}{}_\alpha^j = \left\{\tfrac{1}{2} \Lambda_\alpha \left(u^{j+\alpha/2} + u^{j+(\alpha-1)/2}\right) - (L_\alpha u)^{j+1/2}\right\} - \left\{\tfrac{1}{4} f(|u^j|)\left(u^{j+(\alpha-1)/2} + u^{j+\alpha/2}\right) + \tfrac{1}{2} f(|u^j|)\, u^{j+1/2}\right\} = O(\tau + h_\alpha^2) . \tag{22}$$

Таким образом, суммарная аппроксимация ЛОС

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = (\overset{\circ}{\psi}_1 + \overset{\circ}{\psi}_2) + (\overset{*}{\psi}_1 + \overset{*}{\psi}_2) = O(\tau + h_1^2 + h_2^2) . \tag{23}$$

4. Устойчивость ЛОС

Оценим устойчивость ЛОС по начальным данным. Введем скалярное произведение и норму вида

$$(u, v) = \sum_{i_1=1}^{N_1-1} \sum_{i_2=1}^{N_2-1} u(x_{i_1}, x_{i_2})\, \overset{*}{v}(x_{i_1}, x_{i_2})\, h_1 h_2 , \tag{24}$$

$$\|u\| = \sqrt{(u,u)} . \tag{25}$$

При этом оператор $\hat{a}(y^j)$ будет самосопряженным.

Аналогично /8/ умножим (I2) справа и слева на $\frac{1}{2}(y^{j+\alpha/2} + y^{j+(\alpha-1)/2})$ и вычтем полученные равенства одно из другого, тогда получим

$$\|y^{j+\alpha/2}\| = \|y^{j+(\alpha-1)/2}\| .$$

Отсюда следует безусловная устойчивость по начальным данным

$$\|y^{j+1}\| = \|y^j\| = \|y^0\| = \|u_0\| . \tag{26}$$

При этом предложенная схема консервативна относительно закона сохранения

$$I = \iint |u(x,t)|^2 \, dx_1 dx_2 , \tag{27}$$

который в разностной записи имеет вид

$$I_h = \|y(t)\|^2 .$$

5. Сходимость метода

Линеаризуем уравнение (I5) по z^j , разрешим его относительно $z^{j+\alpha/2}$ u . Предполагая ограниченность функций $\frac{\partial f}{\partial |u|}$, $|u|$, получим следующую оценку:

$$\|z^{j+\alpha/2}\| \le \|\hat{b}\|\, \|z^{j+(\alpha-1)/2}\| + \frac{\tau}{2} c \|\hat{\mathfrak{a}}\| \cdot \|z^j\| + \tau \|\psi_\alpha^j\| , \tag{28}$$

где

$$\hat{\mathfrak{a}} = \left[I - i\frac{\tau \hat{a}(y^j)}{2}\right]^{-1} , \tag{29}$$

$$\hat{b} = \left[I + \frac{i\tau \hat{a}(y^j)}{2}\right] \times \hat{\mathfrak{a}} , \tag{30}$$

$c = const.$

Оператор $\hat{b}$ является унитарным, поэтому $\|\hat{b}\| = 1$. Для нормы оператора $\hat{\mathfrak{a}}$ нетрудно получить оценку

$$\|\hat{\mathfrak{a}}\| \le 1 .$$

Поэтому (28) примет вид

$$\|z^{j+\alpha/2}\| \le \|z^{j+(\alpha-1)/2}\| + \frac{c\tau}{2} \|z^j\| + \tau \|\psi_\alpha^j\| . \tag{3I}$$

Суммируя (3I) по α=I,2, получим

$$\|z^{j+1}\| \le (1 + O(\tau)) \|z^j\| + \tau \left(\|\psi_1^j\| + \|\psi_2^j\|\right) . \tag{32}$$

Отсюда, следуя /7/, получим оценку для точности метода

$$\|z^j\| \le M \cdot O(\tau + h_1^2 + h_2^2) ,$$

где

$$M = const.$$

Замечание I. Система уравнений (I2) для сеточных функций линейна относительно $y^{j+\alpha/2}$, матрица этой системы трехдиагональна, поэтому для решения системы можно использовать метод прогонки, алгоритм которого применительно к разностной схеме для НУШ детально рассмотрен в /9/. Предложенный разностный метод решения неодномерного НУШ является экономичным /7/.

Замечание 2. Предложенный метод численного решения нелинейного двумерного уравнения Шредингера нетрудно обобщить на случай большего числа пространственных переменных.

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность профессору Е.П.Жидкову и Л.А.Бордаг за стимулирующие дискуссии.

Литература

1. Маханьков В.Г. ЭЧАЯ, 1983, 14, с.123.
2. Ахманов С.А., Сухоруков А.П., Хохлов Р.В. УФН, 1967, 93, с.19.
3. Карамзин Ю.Н., Сухоруков А.П. ЖЭТФ, 1975, 68. № 3, с.564.
4. Sandhya Devi, Stayer M., Irvine J. J. Phys.G., 1979 , 5, p. 281.
5. Вахитов Н.Г., Колоколов А.А. Изв.вузов, Радиофизика , 1973, 16, № 7, с.1020.
6. Oficjalski J., Bialynicki-Birula I. Acta Phys. Pol. 1978, B9 , p. 759.
7. Самарский А.А. Теория разностных схем. "Наука", М., 1977.
8. Дриц В. Разностные схемы для решения нелинейных уравнений шредингерского типа. В сб."Дифференциальные уравнения и их применение". Вып.33, с.67. Институт математики и кибернетики АН Литовской ССР, Вильнюс, 1983.
9. Шварка А.Б., Панова Е.Ю. ОИЯИ, Р11-83-871, Дубна, 1983.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 марта 1984 года.

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. P11-84-150

Метод численного решения неоднomерного уравнения Шредингера с нелинейностью вида $f(|u|)u$.

Для численного решения неоднomерного уравнения Шредингера /НУШ/ с нелинейностью вида $f(|u|)u$ использован метод расщепления.

Построена локально-одномерная схема /ЛОС/, консервативная относительно закона сохранения $\iint |u(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2$. Изучены аппроксимация, сходимость и устойчивость этой схемы.

Предложен экономичный метод решения неоднomерного НУШ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Shvachka A.B., Panova E.Yu. P11-84-150

Numerical Method for Solving the Many-Dimensional Nonlinear Schrödinger Equation with Nonlinearity of $f(|u|)u$ Type

The spliting method for numerical solution of many-dimensional Shrödinger equation with nonlinearity of $f(|u|)u$ type is developed. It is shown that the local one-dimensional scheme is conservative under the conservation law $\iint |u(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2$. The approximation, convergence and stability conditions of the finite-difference scheme are studied. The number of operations required for solution of the given problem is proportional to the number of grid points.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984