

*В.С. Лапонин*

## **ПОИСК СОЛИТОННЫХ РЕШЕНИЙ В ТРЕХМЕРНОМ УРАВНЕНИИ ГРОССА-ПИТАЕВСКОГО.**

**Введение.**

В данной работе исследуется существование солитонных решений в трехмерном уравнении Гросса-Питаевского с помощью итерационного метода М1, разработанного в [1]. При этом под солитоном [2] подразумевается уединенное возбуждение в нелинейной бездиссипативной среде [3]. Слово «уединенное» означает, что величина возбуждения (его амплитуда) убывает при удалении от центра солитона. Слово «бездиссипативной» означает, что при распространении солитонов механическая энергия сохраняется и трение отсутствует.

В работе [4] исследуется возможность формирования предельно узких квазидвумерных (атомных «игл») и трехмерных (атомных «пуль») солитонных состояний конденсата на примере атомов  ${}^7\text{Li}$  в состоянии (2,2) (где первое число – полный спин атома, а второе – его проекция) в рамках модифицированного уравнения Гросса-Питаевского с нелокальной нелинейностью. Выбор состояния (2,2) атомов лития обусловлен тем, что для этого состояния хорошо изучены параметры столкновения атомов. Авторам удается численно получить стационарные решения солитонного вида и привести параметрическую зависимость, подтверждающую устойчивость двумерного солитона, и показать, что нелокальность стабилизирует трехмерные сферически симметричные солитоны.

В работе [5] показано, что для конденсата Бозе-Эйнштейна, моделируемого уравнением Гросса-Питаевского с притягивающей нелинейностью при специальной конфигурации внешнего поля магнитной ловушки, возможны неколлапсирующие солитоноподобные волновые функции. На основе численных результатов можно сделать вывод, что в магнитооптической ловушке, моделируемой потенциалом, описанным выше, можно создать долгоживущий конденсат с большим числом атомов, изменив конфигурацию и параметры ловушки.

В работах [6], [7] приводятся различные результаты поиска солитонных решений (темных, светлых, отраженных солитонов) в задаче взаимодействия БЭК с внешним потенциалом (препятствием, магнитной ловушкой и т.д.) при помощи различных разностных схем и исследуется

влияние пространственного распределения потенциала внешних сил на формирование солитонных решений.

### Постановка задачи.

Рассмотрим трехмерное уравнение Гросса-Питаевского, описывающее взаимодействие конденсата Бозе-Эйнштейна (БЭК) с препятствием (внешним потенциалом).

$$\begin{aligned}
 i\hbar\partial_t u(t, x, y, z) = & -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx} u(t, x, y, z) - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_{yy} u(t, x, y, z) - \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{zz} u(t, x, y, z) + V_0 V(t, x, y, z) u(t, x, y, z) + \\
 & + NB_0 |u(t, x, y, z)|^2 u(t, x, y, z), \quad -\infty < x, y, z < +\infty, \quad t > 0, \\
 u(t, \pm\infty, y, z) = & u(t, x, \pm\infty, z) = u(t, x, y, \pm\infty) = 0, \quad u(t=0, x, y, z) = u^0,
 \end{aligned} \tag{1}$$

где  $x, y, z$  – пространственные координаты,  $t$  – время,  $u(t, x, y, z)$  – комплексная макроскопическая волновая функция,  $m$  – масса атома,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $N$  – число атомов в конденсате в выбранной области,  $B_0$  описывает взаимодействие между атомами и имеет вид  $B_0 = 4\pi\hbar^2 a / m$ , где  $a$  – управляющий параметр, который положителен для отражения и отрицательный для притяжения. Положительное значение параметра  $B_0$  отражает расфокусировку лазерного пучка, а отрицательное значение означает самофокусировку лазерного пучка. Функция  $V(t, x, y, z)$  обозначает пространственно-временной потенциал внешних сил, действующих на конденсат (например, удерживающий потенциал ловушки), или потенциал, возникающий в связи с наличием препятствия внутри БЭК.  $V_0$  обозначает амплитуду потенциала.

Зависимость потенциала от времени означает движение потенциала в соответствующем направлении. Для упрощения дальнейших исследований будем считать, что потенциал не движется (не зависит от времени), а движется БЭК в направлении потенциала.

Введем безразмерные координаты  $\eta_x = \frac{x}{x_c}, \eta_y = \frac{y}{y_c}, \eta_z = \frac{z}{z_c}$ , где  $x_c, y_c, z_c$  – характерные длины, относящиеся к конденсату, параметр  $\varepsilon = \frac{\hbar}{2mx_c y_c z_c}$  имеет размерность  $c^{-1}$ , безразмерное время  $\tau = \varepsilon t$  и безразмерная волновая функция

$$\tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z) = \sqrt{x_c y_c z_c} u(\varepsilon t, x_c \eta_x, y_c \eta_y, z_c \eta_z).$$

Разделив уравнение (1) на  $2mx_c y_c z_c$ , получим

$$\begin{aligned}
i\partial_\tau \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z) &= \frac{2m x_c y_c z_c V_0}{\hbar^2} \tilde{V}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z) \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z) - \\
&- \frac{y_c}{x_c} \partial_{\eta_x} \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z) - \frac{x_c}{y_c} \partial_{\eta_y} \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z) - \frac{y_c}{z_c} \partial_{\eta_z} \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z) + \\
&+ 8\pi N a |\tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z)|^2 \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y, \eta_z), \\
-\infty < \eta_x < \infty, \quad -\infty < \eta_y < \infty, \quad -\infty < \eta_z < \infty, \quad \tau > 0.
\end{aligned} \quad (2)$$

Введем новые обозначения

$$D_x = \frac{y_c}{x_c}, \quad D_y = \frac{x_c}{y_c}, \quad D_z = \frac{y_c}{z_c}, \quad \alpha = N 8\pi a, \quad \tilde{V}_0 = \frac{2m x_c y_c z_c V_0}{\hbar^2}. \quad (3)$$

Для простоты изложения вернемся в уравнении (2) к первоначальным обозначениям координат, времени, потенциала и волновой функции. Таким образом, обезразмеренное уравнение (2) примет вид

$$\begin{aligned}
i\partial_t u(t, x, y, z) &= -D_x \partial_{xx} u(t, x, y, z) - D_y \partial_{yy} u(t, x, y, z) - D_z \partial_{zz} u(t, x, y, z) + \\
&+ V_0 V(x, y, z) u(t, x, y, z) + \alpha |u(t, x, y, z)|^2 u(t, x, y, z), \quad -\infty < x, y, z < \infty, t > 0.
\end{aligned} \quad (4)$$

Временной интервал и значения коэффициентов возьмем из [4]. Будем рассматривать БЭК из  $N = 10^4$  атомов натрия (Na) при следующих значениях коэффициентов:

$$m_{Na} = 3,81 \times 10^{-26} \text{ кг}, \quad a_{Na} = 2,75 \times 10^{-9} \text{ м}, \quad \hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Для пространственных коэффициентов возьмем следующие значения  $x_c = y_c = z_c = 10^{-6} \text{ м}$ . Обезразмеренная единица времени соответствует  $3,63 \times 10^{-4} \text{ с}$ .

Таким образом, ниже численно исследуется обезразмеренное трехмерное уравнение Гросса-Питаевского следующего вида:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} - iD_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - iD_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - iD_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + iuV(x, y, z) + i\alpha |u|^2 u &= 0, \\
u(t, \pm\infty, y, z) = u(t, x, \pm\infty, z) = u(t, x, y, \pm\infty) &= 0, \quad u(t=0, x, y, z) = u^0, \\
-\infty < x, y, z < \infty, t > 0.
\end{aligned} \quad (5)$$

Если  $V(x, y, z) = 0$ , то из уравнения (5) получается хорошо известное уравнение Шредингера для нелинейной оптики. Параметр  $\alpha$  – управляющий параметр, характеризующий фокусировку лазерного пучка.

Как говорилось ранее, функция  $V(x, y, z)$  обозначает пространственно-временной потенциал внешних сил, действующих на конденсат, и определяется формулой (6).

$$V(x, y, z) = V_0 \exp \left( - \left( \frac{x - L_x / 2}{a_{v_x}} \right)^{10} - \left( \frac{y - L_y / 2}{a_{v_y}} \right)^{10} - \left( \frac{z - L_z / 2}{a_{v_z}} \right)^{10} \right). \quad (6)$$

Таким образом, параметры  $a_{v_x}$ ,  $a_{v_y}$ ,  $a_{v_z}$  характеризуют пространственное распределение потенциала. Если  $V(x, y, z) = 0$ , то внешнего воздействия нет.

Применение итерационного метода М1 к трехмерному уравнению Гросса-Питаевского.

Для применения итерационного метода М1 [12] в обезразмеренном уравнении Гросса-Питаевского (5) произведем замену переменных  $\xi = y - ct$ . Тогда  $L_x \rightarrow L_1, L_y \rightarrow L_2, L_z \rightarrow L_3, a_{v_x} \rightarrow a_1, a_{v_y} \rightarrow a_2, a_{v_z} \rightarrow a_3, D_x \rightarrow D_1, D_y \rightarrow D_2, D_z \rightarrow D_3$ , а уравнение (5) примет вид

$$cu'_{\xi} = -iD_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - iD_2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} - iD_3 \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + i\alpha |u|^2 u + iuV_0 \exp \left( - \left( \frac{x - L_1 / 2}{a_1} \right)^{10} - \left( \frac{\xi + ct - L_2 / 2}{a_2} \right)^{10} - \left( \frac{z - L_3 / 2}{a_3} \right)^{10} \right), \quad (7)$$

Проинтегрировав по  $\xi$ , получим уравнение

$$cu = -iD_1 \int_0^{\xi} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, p, z) dp - iD_2 \frac{\partial u}{\partial \xi} - iD_3 \int_0^{\xi} \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x, p, z) dp + i\alpha \int_0^{\xi} (|u|^2 u)(x, p, z) dp + iV_0 \exp \left( - \left( \frac{x - L_1 / 2}{a_1} \right)^{10} - \left( \frac{z - L_3 / 2}{a_3} \right)^{10} \right) \times \int_0^{\xi} u(x, p, z) \cdot \exp \left( - \left( \frac{p + ct - L_2 / 2}{a_2} \right)^{10} \right) dp. \quad (8)$$

Таким образом, мы будем искать нетривиальное стационарное решение уравнения (8) в подвижной системе координат, движущейся со скоростью  $c$ . На области  $\tilde{G} = \{-L_1 \leq x \leq L_1, -L_2 \leq \xi \leq L_2, -L_3 \leq z \leq L_3\}$  введем равномерную сетку  $x_j = jh_1, j = 0, \dots, N_1, \xi_k = kh_2, k = 0, \dots, N_2, z_l = lh_3, l = 0, \dots, N_3, u(x_j, \xi_k, z_l) = u_{j,k,l}$ , тогда  $u(x_j, \xi_k, z_0) = u(x_j, \xi_k, z_{N_3}) = 0, u(x_j, \xi_0, z_l) = u(x_j, \xi_{N_2}, z_l) = u(x_0, \xi_k, z_l) = u(x_{N_1}, \xi_k, z_l) = 0$ .

Запишем итерационный метод

$$\begin{aligned}
\frac{u_{j,k,l}^{n+1} - u_{j,k,l}^n}{\tau} = & -iD_1 \sum_{m=1}^k \frac{u_{j+1,m,l}^n - 2u_{j,m,l}^n + u_{j-1,m,l}^n}{h_1^2} h_2 - iD_2 \frac{u_{j,k+1,l}^n - u_{j,k,l}^n}{h_2} - \\
& -iD_3 \sum_{m=1}^k \frac{u_{j,m,l+1}^n - 2u_{j,m,l}^n + u_{j,m,l-1}^n}{h_3^2} h_2 + i\alpha \sum_{m=1}^k |u_{j,m,l}^n|^2 u_{j,m,l}^n h_2 + \\
& + iV_0 \exp \left( - \left( \frac{x_j - L_1 / 2}{a_1} \right)^{10} - \left( \frac{z_l - L_3 / 2}{a_3} \right)^{10} \right) \times \\
& \times \sum_{m=1}^k u_{j,m,l}^n \exp \left( - \left( \frac{\xi_m - L_2 / 2 + c^n t^*}{a_2} \right)^{10} \right) h_2 - c^n u_{j,k,l} = A^h(u_{j,k,l}^n),
\end{aligned} \tag{9}$$

где  $c^{n+1}$  вычисляется по формуле (10)

$$c^{n+1} = \frac{1}{\tau} \left( \frac{(A^h(u^n), u^n)}{(u^n, u^n)} \right). \tag{10}$$

$t^*$  – значение параметра, начиная с которого итерационный процесс (9) сходится к солитонному решению. Итерационный процесс останавливается, когда выполнено условие

$$\left| \frac{c^{n+1} - c^n}{c^n} \right| < \varepsilon,$$

где  $\tau$  – параметр метода, подбирается экспериментально,  $\varepsilon$  – задается изначально.

**Отраженный солитон.**

Для поиска отраженного солитона сделаем в уравнении (5) замену переменных  $\xi = y + ct$  и произведем все преобразования, как и в случае основного солитона, получим уравнение (11)

$$\begin{aligned}
\frac{u_{j,k,l}^{n+1} - u_{j,k,l}^n}{\tau} = & -iD_1 \sum_{m=1}^k \frac{u_{j+1,m,l}^n - 2u_{j,m,l}^n + u_{j-1,m,l}^n}{h_1^2} h_2 - iD_2 \frac{u_{j,k+1,l}^n - u_{j,k,l}^n}{h_2} - \\
& -iD_3 \sum_{m=1}^k \frac{u_{j,m,l+1}^n - 2u_{j,m,l}^n + u_{j,m,l-1}^n}{h_3^2} h_2 + i\alpha \sum_{m=1}^k |u_{j,m,l}^n|^2 u_{j,m,l}^n h_2 + \\
& + iV_0 \exp \left( - \left( \frac{x_j - L_1 / 2}{a_1} \right)^{10} - \left( \frac{z_l - L_3 / 2}{a_3} \right)^{10} \right) \times \\
& \times \sum_{m=1}^k u_{j,m,l}^n \exp \left( - \left( \frac{\xi_m - L_2 / 2 - c^n t^*}{a_2} \right)^{10} \right) h_2 - c^n u_{j,k,l} = A^h(u_{j,k,l}^n),
\end{aligned} \tag{11}$$

где  $c^{n+1}$  вычисляется по формуле (10).

## Результаты численных экспериментов.

Ниже приводятся результаты применения итерационного метода М1 к трехмерному уравнению Гросса-Питаевского (5) при следующих значениях параметров  $L_1 = L_2 = L_3 = 100$ ,  $a_1 = 1$ ,  $a_2 = 6$ ,  $a_3 = 1$ ,  $D_1 = D_2 = D_3 = 1$ ,  $V_0 = 1$ ,  $t^* = 20$ ,  $\tau = 10^{-5}$ ,  $\varepsilon = 10^{-6}$ . Параметр  $\alpha = -1$  для поиска основного солитона и  $\alpha = 1$  для поиска отраженного солитона. На рисунке 1 справа, изображены три среза полученного основного солитонного решения в плоскостях  $OXY$ ,  $OXZ$ ,  $OYZ$  соответственно, а слева изображены три среза отраженного солитонного решения в плоскостях  $OXY$ ,  $OXZ$ ,  $OYZ$ .

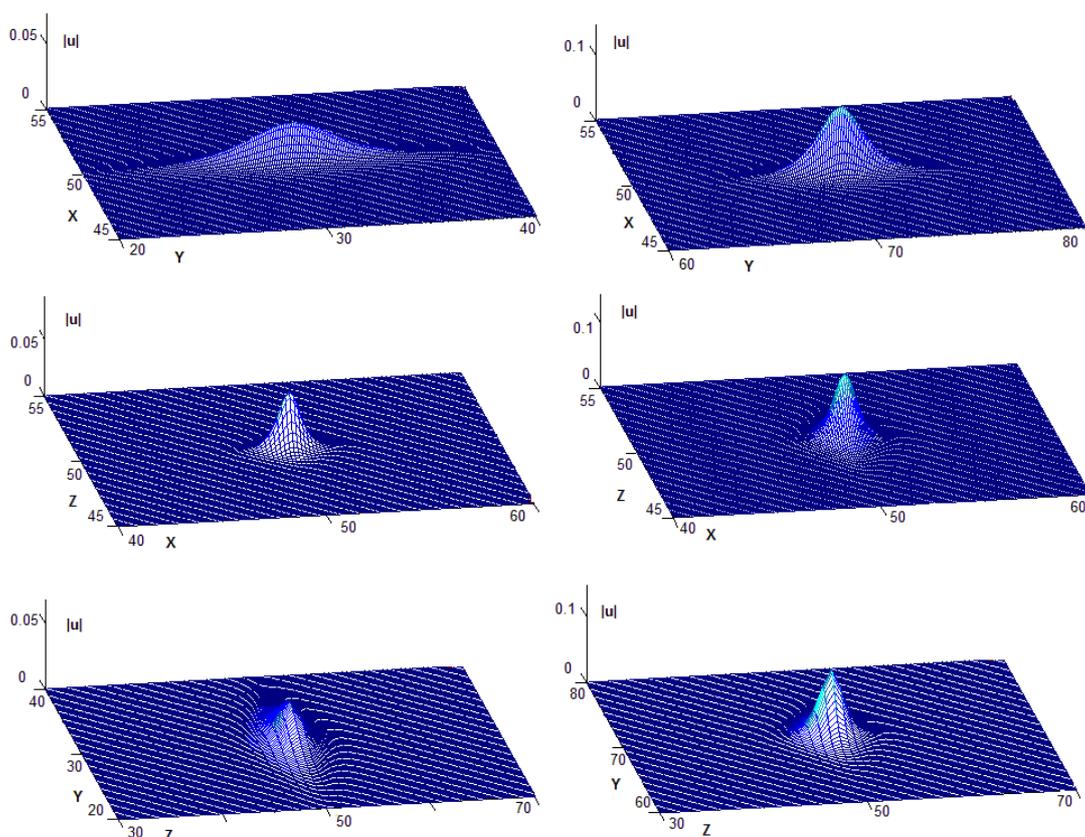


Рис. 1.

На рисунках 2,3,4 приведены результаты подстановки полученных с помощью метода М1 численных решений в исходное нестационарное уравнение в различные моменты времени. Слева изображено распространение отраженного солитона, а справа обычного.

На рисунке 2 изображены результаты в моменты времени  $t = 16$ ,  $t = 20$ ,  $t = 24$  в плоскости  $OXY$ , а на рисунках 3, 4 изображены результаты в те же моменты времени в плоскостях  $OXZ$ ,  $OYZ$  соответственно.

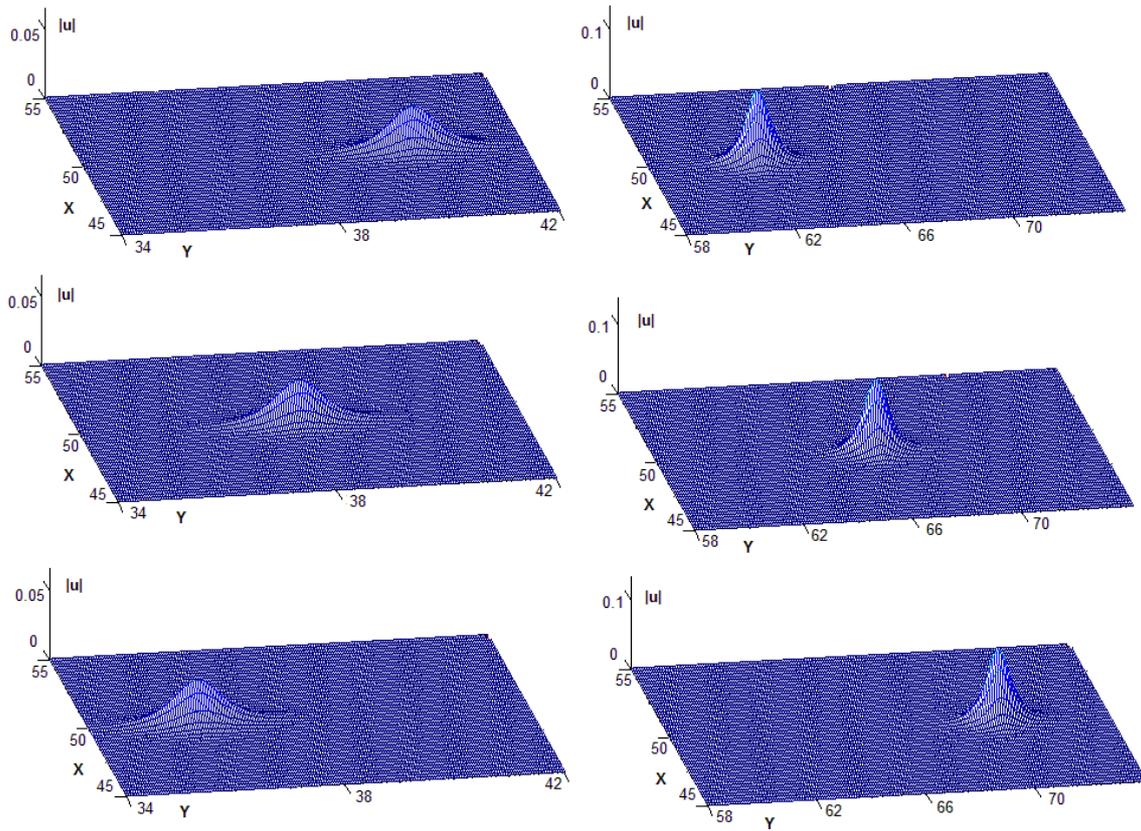


Рис. 2.

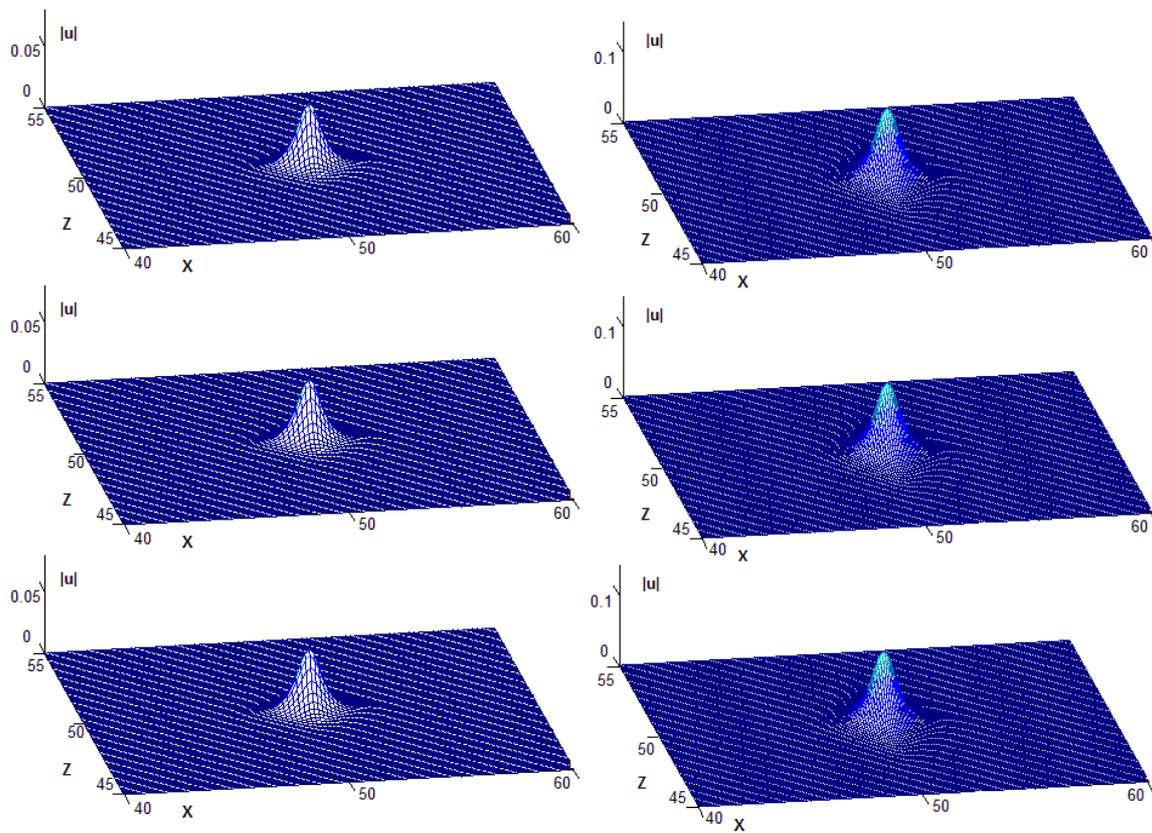


Рис. 3.

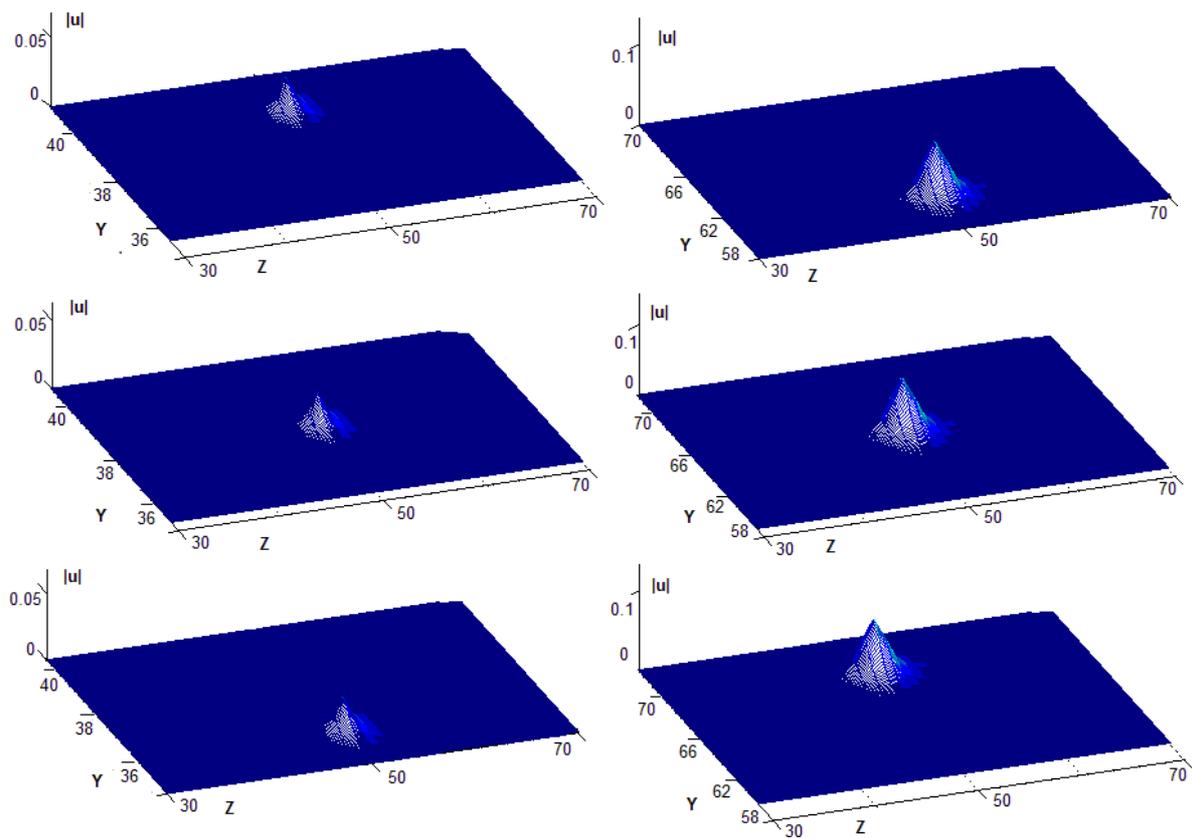


Рис. 4.

Из анализа результатов, показанных на рисунках 2, 3, 4, видно, что и у обычного, и у отраженного солитонов сохраняются форма, область локализации и объем с течением времени.

#### Использование параллельных вычислительных систем.

Итерационный метод M1 обладает хорошими параллельными свойствами. Исходную дискретную область разбиваем на равные подобласти и рассылаем эти подобласти по процессорам, что позволяет получить почти 100% выигрыш в производительности. Метод M1 был реализован на многопроцессорных компьютерах с использованием программного средства MPI. Решение исходной задачи методом M1 при  $N_1 = N_2 = N_3 = 400$  на различных машинах дало следующие результаты:

- |   |         |
|---|---------|
| ПК (1 процессор(1 ядро), общая память)                | 7 дней  |
| ПК (2 процессора(4 ядра), общая память)               | 2 дня   |
| Кластер (16 процессоров(32 ядра), разделенная память) | 9 часов |

Одновременное решение задач поиска обычных и отраженных солитонов методом M1 дало следующие результаты :

- |   |           |
|---|-----------|
| ПК (1 процессор(1 ядро), общая память)                | 13 дней   |
| ПК (2 процессора(4 ядра), общая память)               | 4 дня     |
| Кластер (16 процессоров(32 ядра), разделенная память) | 17 часов. |

Из результатов видно, что 100% выигрыша в производительности не получается в силу неравномерной загрузки процессоров и времени на пересылки данных между процессорами.

## Заключение.

В настоящей работе демонстрируется применение итерационного метода М1 нахождения солитонных решений к трехмерному нелинейному уравнению Гросса-Питаевского [5], описывающего взаимодействие БЭК с препятствием (внешним потенциалом) [6], [7]. Метод М1 не требует никаких дополнительных преобразований и может быть применен по стандартной схеме, описанной в [1], что значительно упрощает решение задачи. Особенностью метода М1 является сходимость к солитонному решению для любого начального распределения волновой функции, схожего с начальными приближениями, описанными в [1].

Отметим, что при подстановке полученных солитонных решений (как обычных, так и отраженных) в исходное нестационарное уравнение солитонные решения распространялись, сохраняя форму, что подтверждает их устойчивость.

Из результатов видно, что метод позволяет эффективно использовать параллельные вычислительные комплексы, но для построения области значений управляющих параметров  $\alpha, t^*$ , в которой существуют солитонные решения (как это было сделано для двухмерного уравнения Гросса-Питаевского), требуется более мощный кластер.

## Список литературы.

1. Лапонин В.С., Савенкова Н.П., Ильютко В.П. Численный метод поиска солитонных решений // Прикладная математика и информатика, сборник факультета ВМК, № 38, год 2011. Стр. 69-80.
2. Ньюэлл А. Солитоны в математике и физике. М.: Мир, 1989.
3. Захаров В.Е., Манакон С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П. Теория солитонов: Метод обратной задачи. М.: Наука, 1980.
4. Н.Н. Розанов, Ю.В. Рождественский, В.А. Смирнов, С.В. Федоров, Атомные «иглы» и «пули» конденсата Бозе-Эйнштейна и формирование наноразмерных структур. // Письма в ЖЭТФ, 2003 г., том 77, вып. 2, с. 89-92.

5. А. В. Борисов, А. Ю. Трифонов, А. В. Шаповалов, Квазиклассические решения уравнения Гросса-Питаевского, локализованные в окрестности окружности. // Компьютерные исследования и моделирование 2009 Т. 1 № 4 С. 359–365.
6. Kamchatnov, A.M., and Korneev, S.V., “Dynamics of ring dark solitons in Bose-Einstein condensates and nonlinear optics,” *Phys. Lett. A* 374, 4625-4628 (2010).
7. Kamchatnov, A.M., and Salerno, M., “Dark soliton oscillations in Bose-Einstein condensates with multi-body interactions,” *J. Phys. B* 42, 185303 (2009).