

Раздел I. Математическое моделирование

В.С. Лапонин, Н.П. Савенкова

ПОИСК 2-D СОЛИТОНОВ В УРАВНЕНИИ ГРОССА-ПИТАЕВСКОГО

Введение.

В данной работе исследуется взаимодействие Бозе-Эйнштейновского конденсата (БЭК) с препятствием (внешним потенциалом) [1]. Конденсат Бозе-Эйнштейна [2] – агрегатное состояние вещества, основу которого составляют бозоны, охлаждённые до температур, близких к абсолютному нулю (меньше миллионной доли градуса выше абсолютного нуля). В таком сильно охлаждённом состоянии достаточно большое число атомов оказывается в своих минимально возможных квантовых состояниях, и квантовые эффекты начинают проявляться на макроскопическом уровне.

В основе математической постановки задачи распространения БЭК находится двухмерное уравнение Гросса-Питаевского (ГП). Это классическое нелинейное уравнение, учитывающее эффекты межчастичного взаимодействия посредством эффективного среднего поля. Ввиду аналогичности уравнения ГП в теории БЭК и НУШ [3] в нелинейной оптике, многие явления, предсказанные и описанные в нелинейной оптике, можно ожидать и в макроскопических квантовых состояниях БЭК, несмотря на кардинальные различия физических систем.

В данной работе исследуется существование солитонных решений в уравнении ГП с помощью итерационного метода М1, разработанного в [4], и проводится сравнение полученных результатов с аналитическим решением [1].

Постановка задачи.

Рассмотрим двухмерное уравнение Гросса-Питаевского [1], описывающее взаимодействие БЭК с препятствием (внешним потенциалом)

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t u(t, x, y) = & -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}u(t, x, y) - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_{yy}u(t, x, y) + V_0V(t, x, y)u(t, x, y) + \\ & + NB_0 |u(t, x, y)|^2 u(t, x, y), \quad -\infty < x, y < +\infty, \quad t > 0, \\ u(t, \pm\infty, y) = & u(t, x, \pm\infty) = 0, \quad u(t = 0, x, y) = u^0, \end{aligned} \quad (1)$$

где x, y – пространственные координаты, t – время, $u(t, x, y)$ – комплексная макроскопическая волновая функция, m – масса атома, \hbar – постоянная Планка, N – число атомов в конденсате в выбранной области, V_0 описывает взаимодействие между атомами и имеет вид $V_0 = 4\pi\hbar^2 a / m$, где a – управляющий параметр. Функция $V(t, x, y)$ 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 обезразмеренные координаты $\eta_x = \frac{x}{x_c}$, $\eta_y = \frac{y}{y_c}$, где x_c, y_c характерные длины, относящиеся к конденсату, параметр $\varepsilon = \frac{\hbar}{2mx_c y_c}$ имеет размерность c^{-1} , обезразмеренное время $\tau = \varepsilon t$ и обезразмеренную волновую функцию $\tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y) = \sqrt{x_c y_c} u(\varepsilon t, x_c \eta_x, y_c \eta_y)$. Разделив уравнение (1) на $2mx_c y_c$, получим

$$i\hbar \partial_\tau \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y) = -\frac{y_c}{x_c} \partial_{\eta_x \eta_x} \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y) - \frac{x_c}{y_c} \partial_{\eta_y \eta_y} \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y) + \frac{2mx_c y_c V_0}{\hbar^2} \tilde{V}(\tau, \eta_x, \eta_y) \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y) + 8\pi N a |\tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y)|^2 \tilde{u}(\tau, \eta_x, \eta_y), \quad (2)$$

$$-\infty < \eta_x < \infty, \quad -\infty < \eta_y < \infty, \quad \tau > 0.$$

Введем новые обозначения

$$D_x = \frac{y_c}{x_c}, \quad D_y = \frac{x_c}{y_c}, \quad \alpha = N8\pi a, \quad \tilde{V}_0 = \frac{2mx_c y_c V_0}{\hbar^2}. \quad (3)$$

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

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

Временной интервал и значения коэффициентов возьмем из [1]. Будем рассматривать БЭК из $N=10^4$ атомов натрия, при следующих значениях коэффициентов:

$$m_{Na} = 3,81 \times 10^{-26} \text{ Kg}, \quad a_{Na} = 2,75 \times 10^{-9} \text{ m}, \quad \hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ Js}.$$

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

Таким образом, ниже численно исследуется обезразмеренное двухмерное уравнение Гросса-Питаевского вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} - iD_x \frac{d^2 u}{dx^2} - iD_y \frac{d^2 u}{dy^2} + iu(V(x, y) + \beta) + i\alpha |u|^2 u = 0, \quad (5)$$

$$-\infty < x < \infty, \quad -\infty < y < \infty, \quad t > 0.$$

Если $V(x, y) = 0$, то из уравнения (5) получается хорошо известное уравнение Шредингера для нелинейной оптики. Параметр β вместе с коэффициентом D_y описывают распространение БЭК вдоль y координаты, α – управляющий параметр, характеризующий фокусировку лазерного пучка. Величины D_y, β зависят от параметра χ и определяются по формулам $\beta = \pi\chi$, $D_y = \frac{1}{4\pi\chi}$. Известно, что существуют

такие значения α , при которых уравнение ГП может иметь не только обычное решение в виде нелинейной волновой функции, но и решение солитонного вида, которое может быть как основным солитоном, так и отраженным.

При этом под солитоном [5] подразумевается уединенное возбуждение в нелинейной бездиссипативной среде [6]. Слово «уединенное» означает, что величина возбуждения (его амплитуда) убывает при удалении от центра солитона. Слово «бездиссипативной» означает, что при распространении солитонов механическая энергия сохраняется, в частности, трение отсутствует.

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

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

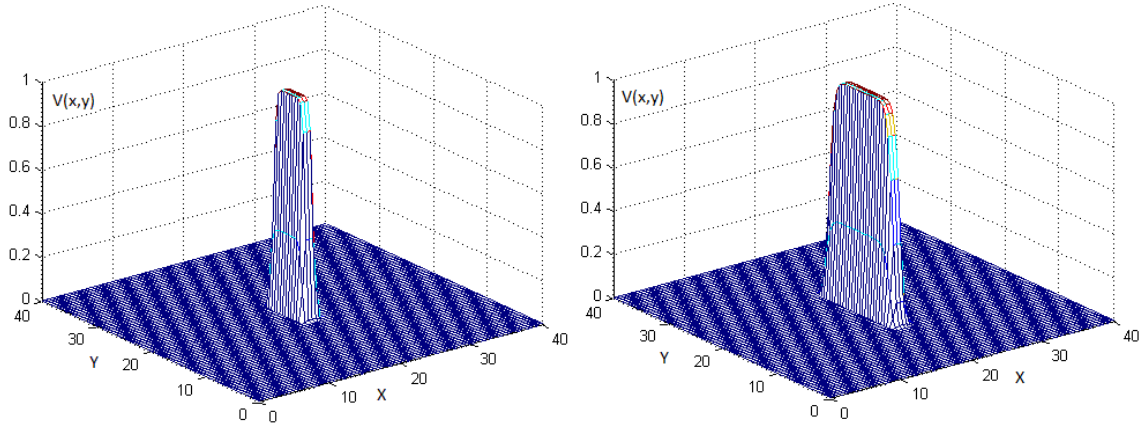


Рис. 1.

На рисунке 1 изображен потенциал $V(x, y)$ при следующих значениях коэффициентов $V_0 = 1$, $a_{v_x} = 1$, $L_x = L_y = 40$, $a_{v_y} = 3$ и $a_{v_y} = 6$ соответственно. Таким образом, параметры a_{v_x} , a_{v_y} характеризуют пространственное распределение потенциала. Если $V(x, y) = 0$, то внешнего воздействия нет. Фаза решения вычисляется по формуле (7).

$$\Phi(t, x, y) = -\arctg \left(\frac{\text{Im}(u(t, x, y))}{\text{Re}(u(t, x, y))} \right). \quad (7)$$

Применение итерационного метода М1 к уравнению Гросса-Питаевского.

Задачу (5) будем решать численно на области $G = \{-L_x \leq x \leq L_x, -L_y \leq y \leq L_y\}$, где L_x, L_y достаточно большие величины такие, что $u(t, \pm L_x, y) = u(t, x, \pm L_y) = 0$. Для применения итерационного метода М1 [12], в обезразмеренном уравнении Гросса-Питаевского (5) произведем замену переменных

$$\begin{cases} \xi_1 = x, \\ \xi_2 = y - ct. \end{cases}$$

Тогда уравнение (5) примет вид

$$cu'_{\xi_2} = -iD_{\xi_1} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_1^2} - iD_{\xi_2} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_2^2} + \\ + iuV_0 \exp \left(- \left(\frac{\xi_1 - L_1 / 2}{a_1} \right)^{10} - \left(\frac{\xi_2 + ct - L_2 / 2}{a_2} \right)^{10} \right) + i\alpha |u|^2 u,$$

Проинтегрировав по ξ_2 , получим уравнение

$$\begin{aligned}
cu = -iD_{\xi_1} \int_0^{\xi_2} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_1^2}(\xi_1, p) dp - iD_{\xi_2} \frac{\partial u}{\partial \xi_2} + i\alpha \int_0^{\xi_2} (|u|^2 u)(\xi_1, p) dp + \\
+iV_0 \exp\left(-\left(\frac{\xi_1 - L_1/2}{a_1}\right)^{10}\right) \int_0^{\xi_2} u(\xi_1, p) \cdot \exp\left(-\left(\frac{p + ct - L_2/2}{a_2}\right)^{10}\right) dp.
\end{aligned} \quad (8)$$

Таким образом, мы будем искать нетривиальное стационарное решение уравнения (8) в подвижной системе координат, движущейся со скоростью c . Требуется определить значения управляющего параметра α , для которых уравнение (8) имеет солитонное решение, и найти это солитонное решение. На области \tilde{G} введем равномерную сетку

$$\begin{aligned}
(\xi_1)_j = jh_1, \quad j = 0, \dots, N_1, \quad (\xi_2)_k = kh_2, \quad k = 0, \dots, N_2, \quad u((\xi_1)_j, (\xi_2)_k) = u_{j,k}, \\
u((\xi_1)_j, (\xi_2)_0) = u((\xi_1)_j, (\xi_2)_{N_2}) = u((\xi_1)_0, (\xi_2)_k) = u((\xi_1)_{N_1}, (\xi_2)_k) = 0.
\end{aligned}$$

Используя вышеуказанную пространственную сетку, запишем итерационный метод

$$\begin{aligned}
\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\tau} = -iD_{\xi_1} \sum_{m=1}^k \frac{u_{j+1,m}^n - 2u_{j,m}^n + u_{j-1,m}^n}{h_1^2} h_2 - iD_{\xi_2} \frac{u_{j,k+1}^n - u_{j,k}^n}{h_2} + \\
+iV_0 \exp\left(-\left(\frac{(\xi_1)_j - L_1/2}{a_1}\right)^{10}\right) \sum_{m=1}^k u_{j,m}^n \exp\left(-\left(\frac{(\xi_2)_m - L_2/2 + c^n t^*}{a_2}\right)^{10}\right) h_2 + \\
+i\alpha \sum_{m=1}^k |u_{j,m}^n|^2 u_{j,m}^n h_2 - c^n u_{j,k} = A^h(u_{j,k}^n),
\end{aligned} \quad (9)$$

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

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

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

$$\left| \frac{c^{n+1} - c^n}{c^n} \right| < \varepsilon. \quad (11)$$

Далее приводятся результаты численных экспериментов.

Результаты численного моделирования.

Ниже приводятся результаты работы метода М1 при следующих значениях параметров: $L_x = L_y = 40$, $a_{v_x} = 1$, $a_{v_y} = 3$, $D_x = 1$, $\chi = 1$, $V_0 = 1$.

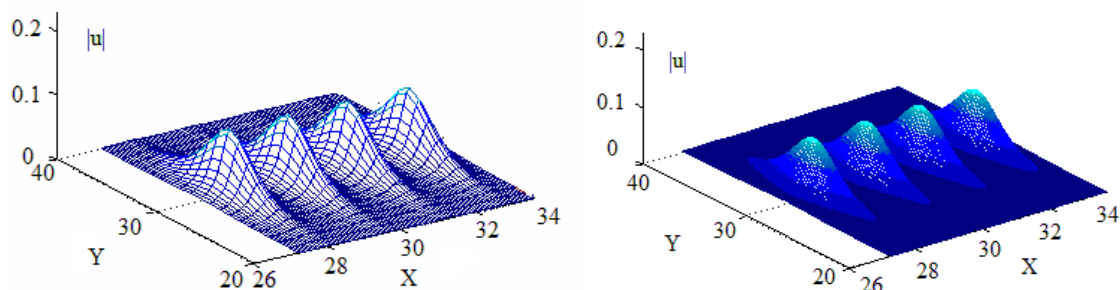


Рис.2.

На рисунке 2 приведено солитонное решение четвертой моды при $N_1 = N_2 = 80$ слева и при $N_1 = N_2 = 400$ справа. На рисунке 3 изображена трехмерная фаза этого решения (слева) и решение первой моды (справа). Уравнение (5) имеет аналитическое решение [1], которое имеет вид

$$u_{an}(t, x, y) = U_0 ch^{-1} \left(\frac{x - x_0}{\tilde{a}_x} \right) ch^{-1} \left(\frac{y - y_0 - vt}{\tilde{a}_y} \right) \times \exp \left(i \left(C_2 t - \frac{v}{2D_y} (y - y_0 - vt) + C_1 \right) \right). \quad (12)$$

В таблице 1 приводится сравнение численного решения, полученного методом М1, с аналитическим решением (12), построенного по точкам при заданных значениях параметров, также приводится значение невязки численного решения ψ . Введем две нормы φ_C и φ_L , которые вычисляются по формулам (13).

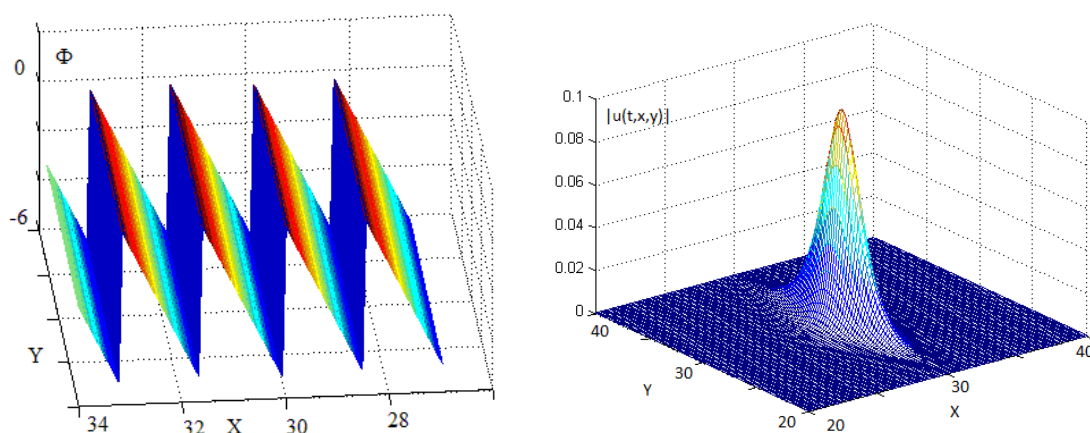


Рис.3.

$$\varphi_C = \max_{x,y} |u_{an}(t,x,y) - u_{num}|, \quad \varphi_L = \int_{Lx_2}^{Lx_1} \int_{Ly_2}^{Ly_1} |u_{an}(t,x,y) - u_{num}| dx dy. \quad (13)$$

Таблица 1.

	φ_C	φ_L	ψ
$N_1 = N_2 = 50$	$5 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-4}$
$N_1 = N_2 = 100$	$2 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-4}$
$N_1 = N_2 = 200$	$9 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$7 \cdot 10^{-5}$
$N_1 = N_2 = 400$	$4 \cdot 10^{-3}$	$9 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-5}$

Отраженный солитон.

Сделав в уравнении (5) замену переменных

$$\begin{cases} \xi_1 = x, \\ \xi_2 = y + ct, \end{cases}$$

произведем все преобразования по аналогии с пунктом 3 и получим уравнение (14)

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\tau} = -iD_{\xi_1} \sum_{m=1}^k \frac{u_{j+1,m}^n - 2u_{j,m}^n + u_{j-1,m}^n}{h_1^2} h_2 - iD_{\xi_2} \frac{u_{j,k+1}^n - u_{j,k}^n}{h_2} +$$

$$+ iV_0 \exp\left(-\left(\frac{(\xi_1)_j - L_1/2}{a_1}\right)^{10}\right) \sum_{m=1}^k u_{j,m}^n \exp\left(-\left(\frac{(\xi_2)_m - L_2/2 - c^n t^*}{a_2}\right)^{10}\right) h_2 + (14)$$

$$+ i\alpha \sum_{m=1}^k |u_{j,m}^n|^2 u_{j,m}^n h_2 - c^n u_{j,k} = A^h(u_{j,k}^n),$$

где c^{n+1} вычисляется по формуле (10). Далее приводятся результаты численных экспериментов при следующих значениях параметров: $L_x = L_y = 40$, $a_{v_x} = 1$, $a_{v_y} = 6$, $D_x = 1$, $\chi = 1$, $V_0 = 10$. На рисунке 4 приведен отраженный солитон первой моды (слева) и отраженный солитон четвертой моды (справа).

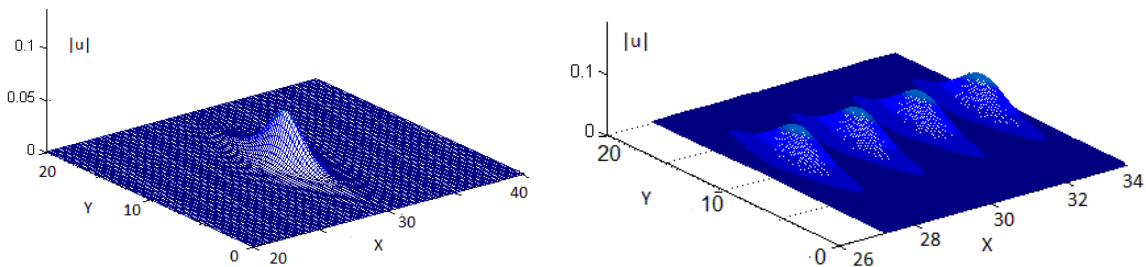


Рис. 4.

В таблице 2 приводится сравнение численного решения (отраженного солитона), полученного методом М1, с аналитическим решением (12), построенного по точкам при заданных значениях параметров, также приводится значение невязки численного решения ψ . Нормы φ_C и φ_L вычисляются по формулам (13).

Таблица 2.

	φ_C	φ_L	ψ
$N_1 = N_2 = 50$	$3 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-4}$
$N_1 = N_2 = 100$	$1 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-4}$
$N_1 = N_2 = 200$	$5 \cdot 10^{-3}$	$9 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-5}$
$N_1 = N_2 = 400$	$2 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-5}$

Использование параллельных вычислительных систем.

Итерационный метод М1 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 М1 был реализован на многопроцессорных компьютерах с использованием программного средства MPI. Решение исходной задачи методом М1 при $N_1 = N_2 = 400$ на различных машинах дало следующие результаты :

ПК (1 процессор(1 ядро), общая память) 110 мин.

ПК (2 процессора(4 ядра), общая память) 35 мин.

Кластер (16 процессоров(32 ядра), разделенная память) 6 мин.

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 двумерному нелинейному уравнению Гросса-Питаевского, описывающего взаимодействие БЭК с препятствием (внешним потенциалом). Метод М1 не требует никаких дополнительных преобразований и может быть применен по стандартной схеме, описанной в [4], 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 [4], что

позволяет обойти проблему выбора начального приближения, которую не удается так легко избежать в работе [1].

В заключение отметим, что предлагаемый итерационный метод M1 позволяет находить солитонные решения различных мод, а также позволяет найти отраженные решения солитонного вида. Исходя из сравнений полученных результатов с аналитическим решением (12), итерационный метод M1 можно эффективно использовать для поиска солитонных решений в трехмерном уравнении Гросса-Питаевского.

Список литературы.

1. 2D soliton formation of BEC at its interaction with external potential// V.A. Trofimov, A.V. Rozantsev, Proceedings of SPIE, V.8497, P., 2012.
2. Кившарь Ю.С., Агравал Г.П. Оптические солитоны. Физматлит, 2005, с. 622-634.
3. Tereshin, E.B., Trofimov, V.A., and Fedotov, M.V., "Conservative finite difference scheme for the problem of propagation of a femtosecond pulse in a nonlinear photonic crystal with non-reflecting boundary conditions," *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 46 (1), 154-164 (2006).
4. 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.
5. Ньюэлл А. Солитоны в математике и физике. М.: Мир, 1989.
6. Захаров В.Е., Манаков С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П. Теория солитонов: Метод обратной задачи. М.: Наука, 1980.