Отчет о работе, выполненной на оборудовании Информационно-вычислительного центра НГУ

Название работы: Новые численные схемы для прямой задачи рассеяния в рамках нелинейного уравнения Шредингера.

Состав коллектива: Мулляджанов Р.И. (Институт теплофизики СО РАН, Новосибирский государственный университет), Гелаш А.А. (Институт автоматики и электрометрии СО РАН).

Должность в НГУ: Мулляджанов Р.И. – асс. преп.

Работа по гранту: РНФ №19-79-30075 “Эффективные методы интеллектуального управления физико-химическими процессами в современных энергетических технологиях” (2019-2022, рук. Д.М. Маркович).

Контактное лицо (ФИО, адрес электронной почты): Мулляджанов Рустам Илхамович, rustammul@gmail.com

Научное содержание работы.

1. *Постановка задачи*. Рассматривается система уравнений Захарова–Шабата (ЗШ), которая играет центральную роль при решении прямой задачи рассеяния в рамках нелинейного уравнения Шредингера (НУШ) (Zakharov, Shabat, 1972; Novikov et al. 1984). Система ЗШ представляет собой вспомогательную линейную систему из двух дифференциальных уравнений первого порядка $\Psi_\tau = Q(\zeta, q)\,\Psi$, где вектор $\Psi = (\psi_1, \psi_2)$, ζ – комплексный спектральный параметр, $q(\tau)$ – потенциал, удовлетворяющий НУШ. Если $q(\tau)$ – локализованный потенциал, см. Рис. 1, то помимо непрерывного спектра задачи ЗШ, существует также дискретный спектр с солитонными решениями. Рассматривается правая задача рассеяния с соответствующими граничными условиями на бесконечности. Численное решение системы ЗШ осуществляется на конечном интервале [-T, T], который разделяется на M бинов шириной $\Delta\tau_m$. , где индекс m обозначает m-ый бин с центром в точке τ_m. Предлагается использовать разложения Магнуса (Blanes et al. 2009) для того, чтобы формально написать общее решение в виде бексонечного ряда, используя матричные экспоненты.

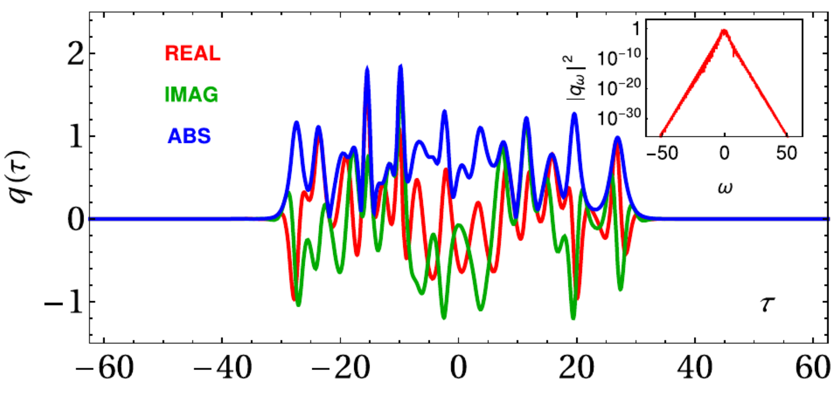

Рис. 1. Пример 16-ти солитонного решения $q(\tau)$ с равными амплитудами, равномерно распределенными скоростями и случайными фазами.

2. *Современное состояние проблемы*. Один из наиболее распространенных способов для численного решения прямой задачи рассеяния является метод Боффетта–Осборна (Boffetta, Osborne, 1992), который обладает вторым порядком точности дискретизации. Некоторые альтернативы основываются на конечно-разностных схемах (Burtsev et al. 1998; Medvedev et al. 2019), спектральных методах (García-Gómez, Aref, 2019), контурном интегрировании (Vasylchenkova et al. 2019) и прочее (Frumin et al. 2015). Для исследования больших волновых полей необходимо использовать методы высокого порядка. Предложенные недавно схемы четвертого порядка (Medvedev et al. 2019) позволяют аккуратно определять собственные значения солитонов, однако, идентификация фаз нетривиальных волновых полей до сих пор остается нерешенной проблемой.

3. *Описание работы, включая используемые алгоритмы*. В данной работе мы применяем разложение Магнуса к системе уравнений ЗШ, что позволяет систематически конструировать численные схемы высокого порядка для решения задачи рассеяния интегрируемого одномерного нелинейного уравнения Шредингера. Проведены численные расчеты волновых полей, включающих до 128 солитонов, при помощи алгоритмов второго, четвертого и шестого порядка, которые указали на необходимость использования схем высокого порядка для аккуратного определения параметров фаз солитонов.

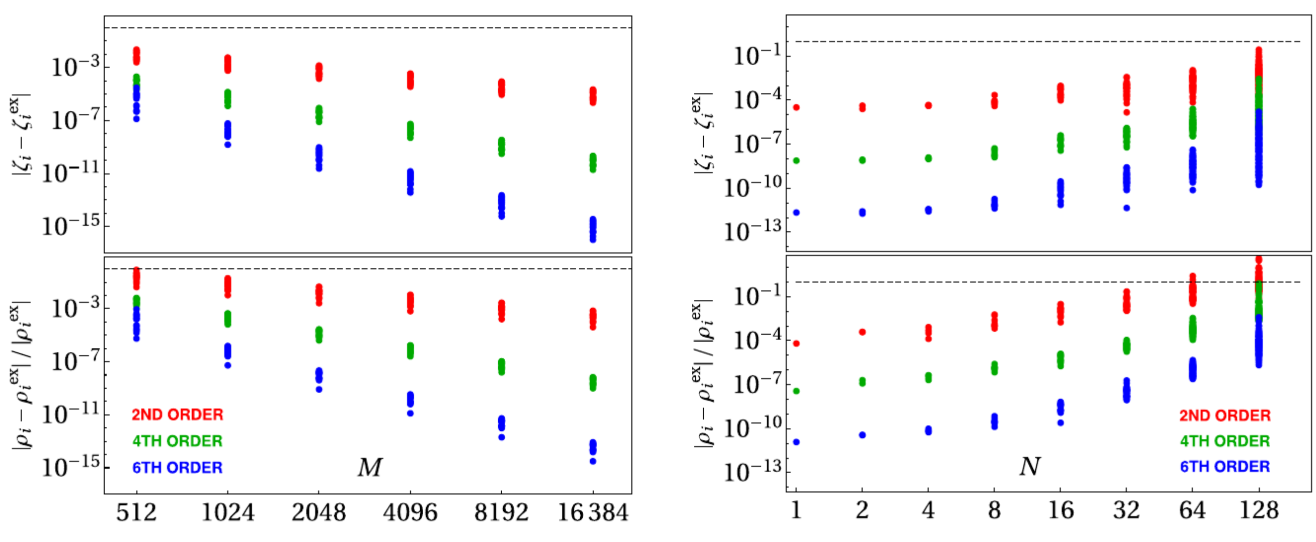

Рис. 2. Слева: влияние порядка численной схемы на величину ошибки в зависимости от M для 16-солитонного решения, показаного на Рис. 1. Справа: зависимость численной ошибки в зависимости от количества солитонов в волновом пакете N. Сверху показаны результаты для собственные значений, снизу – для фазовых коэффициентов.

4. *Результаты*. Проведен анализ сходимости для реализованных численных схем для различных значений M = 512-16384, используя 16-солитонное решение, показанное на Рис. 1. Ширина бина составляет $\Delta\tau_m = \Delta\tau = 2T/M$, при этом $T = 62.5$ для этого конкретного случая. Используя программу *Wolfram Mathematica* численно построена матрица S и найдены собственные значения солитонов $\{\zeta_n\}$, используя условие $a(\zeta_n) = 0$, где a – один из коэффициентов рассеяния. Далее рассчитаны фазы $\{\rho_n\}$. На Рис. 2 показаны результаты для всех использованных схем, при этом схемы высокого порядка демонстрируют хорошие результаты даже на грубых расчетных

сетках, в то время как метод Боффетта–Осборна не является удовлетворительным особенно для расчета фазовых коэффициентов. Аналогично схемы высокого порядка оказывают важны при последовательном увеличении количества солитонов в волновом пакете, см. Рис. 2.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.
Для расчета данной задачи использовались распараллеленные программы, написание при помощи пакета *Wolfram Mathematica*, которые эффективно работают на вычислительных машинах ИВЦ НГУ, что и позволило достигнуть описанных выше результатов.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы:
1. Mullyadzhanov R., Gelash A. Direct scattering transform of large wave packets. *Optics Letters*, 44 (21), 5298-5301, 2019.
2. Gelash A., Mullyadzhanov R. Anomalous errors of direct scattering transform. *Physical Review E* (accepted).