

11-2005-116

На правах рукописи  
УДК 519.615.5

ЗЕМЛЯНАЯ  
Елена Валериевна

МЕТОДЫ ПРОДОЛЖЕНИЯ ПО ПАРАМЕТРАМ  
И КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ  
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ  
НЕЛИНЕЙНЫХ МОДЕЛЕЙ МИКРОПРОЦЕССОВ,  
ОПИСЫВАЕМЫХ ВОЛНОВЫМИ УРАВНЕНИЯМИ

Специальность: 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Тверь 2005

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий  
Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна

Научный консультант:  
доктор физико-математических наук Пузынина Т. П.

Официальные оппоненты:

Доктор физико-математических наук, профессор Гриднев К. А.  
Доктор физико-математических наук, профессор Зингерман К. М.  
Доктор физико-математических наук, профессор Севастьянов Л.А.

Ведущая организация:

Вычислительный центр им. А.А.Дородницына Российской  
академии наук.

Защита диссертации состоится «28 октября 2005г. в 14<sup>00</sup> час.  
на заседании диссертационного совета Д212.263.04 при Тверском  
государственном университете по адресу: г. Тверь, ул. Желябова,  
д. 33.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке  
Тверского государственного университета.

Автореферат разослан «\_\_\_» 2005г.

Ученый секретарь совета  
Доктор технических наук, профессор



Михно В. Н.

# 1 Общая характеристика работы

## 1.1 Актуальность темы

Диссертация посвящена разработке новых методов продолжения по параметрам и комплексов программ для численного исследования ряда нелинейных математических моделей современной теоретической физики, позволяющих изучить зависимость характеристик моделей от параметров, включая анализ бифуркаций. Разработанные методы дают возможность повысить эффективность применения итерационных ньютоновских схем при решении нелинейных уравнений.

*Первый* круг задач связан с изучением моделей волновых процессов в нелинейных средах. В диссертации проведено численное исследование различных постановок нелинейного уравнения Шрёдингера, которое в качестве амплитудного уравнения имеет множество приложений в теориях конденсированных состояний, нелинейной оптики и физики плазмы. К данному кругу моделей относятся также модель оптического волокна с периодически меняющимся показателем преломления и модель двух- и трехмерных осциллонов в нелинейном фарадеевском резонансе, в которых нелинейное уравнение Шрёдингера выступает как частный случай более общих математических постановок. Численное исследование направлено на решение одной из актуальных проблем современной синергетики – получение новой информации об устойчивых локализованных структурах, возникающих в открытых диссипативных системах в результате уравновешивания диссипативных потерь за счет поступающей извне энергии, а также на анализ бифуркаций и эволюции неустойчивых состояний. В рассматриваемых математических постановках лишь отдельные классы локализованных решений известны в явном виде. Вопрос о существовании других решений (солитонные комплексы, движущиеся солитоны) удается решить только численно. Поэтому разработка эффективных математических методов и программ для исследования новых классов локализованных решений в нелинейных волновых уравнениях является актуальной задачей как для конкретных физических приложений, так и в рамках общей теории солитонов в неинтегрируемых системах.

*Второй* круг задач направлен на исследование наблюдаемых физических характеристик в рамках ряда актуальных моделей ядерной физики и физики частиц. Эти исследования вызваны необходимостью правильной интерпретации имеющихся экспериментальных данных и проведения надежных предсказательных расчетов, важных для планирования новых экспериментов и для ряда прикладных задач. Это, во-первых, квантово-полевая модель бинуклона в пределе сильной связи; во-вторых, – релятивистское обобщение уравнения Шрёдингера в модели связанных состояний кварков; и, в-третьих, модель ядро-ядерных взаимодействий при промежуточных энергиях в рамках высокозенергетического приближения. Учет в квантовых и квантово-полевых моделях микроскопической структуры квантовых объектов в рамках соответствующего волнового уравнения Шрёдингера приводит к нелинейным математическим постановкам задачи рассеяния и задачи на связанные состояния.

Актуальность представленных в диссертации исследований обусловлена потребностями российских и международных научных программ и проектов. Все они выполнялись автором в соответствии с Тематическим планом ОИЯИ и научными проектами РФФИ. Ряд исследований проводился в рамках Программы

сотрудничества с Польшей "Боголюбов – Инфельд", Программы сотрудничества с болгарскими научными центрами "ОИЯИ – Болгария" и международного Соглашения о сотрудничестве между ОИЯИ и Университетом Кейптауна в области математики и прикладной математики.

Исследование микропроцессов в указанных моделях приводит к необходимости исследования нелинейных сингулярных граничных и спектральных задач для систем дифференциальных и интегральных уравнений, зависящих от параметров моделей. Исследование таких систем аналитическими методами удается провести лишь в отдельных частных случаях. Основным, а иногда и единственным, методом исследования является численный анализ, что предъявляет высокие требования к точности и надежности вычислительных алгоритмов. Наличие физических и (или) феноменологических параметров делает исследование по параметру неотъемлемым элементом численного анализа. Возможная неединственность решений и наличие бифуркаций требуют разработки специальных методов численного исследования.

Таким образом, создание новых эффективных методов продолжения по параметрам и комплексов программ для численного исследования различных классов нелинейных многопараметрических сингулярных граничных и спектральных задач является важной и актуальной проблемой современного компьютерного моделирования сложных микропроцессов.

Базовым инструментом решения этой проблемы в диссертации служат вычислительные схемы, реализующие концепцию объединения новых схем продолжения по параметрам с итерациями на основе обобщения непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН). Модифицированные схемы на основе НАМН<sup>1</sup> и его обобщения<sup>2</sup> известны как высокоэффективное средство численного решения различных классов нелинейных задач. Сочетание этого метода с различными схемами продолжения по параметрам существенно расширяет возможности численного исследования. Организованное с учетом особенностей конкретных задач численное продолжение позволяет эффективно решить такие проблемы, как расчет параметров в задачах подгонки (см. [1] и обзор [2]) и оптимизации<sup>3</sup>; выявление устойчивых локализованных структур в нелинейных дисперсионных средах [3, 4], анализ автомодельных тепловых структур в режимах с обострением<sup>4</sup> и др. Таким образом, объединение двух указанных подходов представляется перспективной основой разработки и компьютерной реализации новых эффективных методов численного исследования различных классов нелинейных многопараметрических задач.

## 1.2 Цели и задачи диссертации

Фундаментальная научно-практическая задача, на решение которой направлена данная диссертация – разработка методов численного

<sup>1</sup>Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ, Т.4, Вып.1 (1973) с.127.

<sup>2</sup>Пузынина Т.П. Дисс. на соиск. уч. ст. д.ф.м.н., Тверь, 2003.

<sup>3</sup>Жевнеров В.А., Родионов И.Д. Оптимальное проектирование информационных систем методом эволюции параметра. ЖВМиМФ, Т.26, Вып.3 (1986) с.449.

<sup>4</sup>Куркина Е.С., Курдюмов С.П. Спектр диссипативных структур, развивающихся в режиме с обострением. Доклады РАН, Т.395, Вып.6 (2004) с.743.

**продолжения по параметрам и комплексов программ для исследования многопараметрических процессов, описываемых нелинейными граничными и спектральными задачами в форме систем дифференциальных и интегральных уравнений, а также их численное исследование.**

*Конкретными целями диссертации являются:*

1. Разработка новых схем продолжения по параметру для численного исследования локализованных решений в нелинейных волновых уравнениях.
2. Построение эффективных вычислительных схем, объединяющих новые схемы продолжения по параметру с итерационными схемами на основе обобщения НАМН.
3. Разработка и программная реализация адекватных методов дискретной аппроксимации, обеспечивающих необходимую точность и достоверность численных результатов.
4. Создание комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения следующих вычислительных экспериментов:

- нахождение и исследование новых классов локализованных решений нелинейного уравнения Шредингера с диссинацией и накачкой в моделях нелинейных дисперсионных сред;
- численный анализ устойчивости щелевых солитонов в модели оптического волокна с периодически меняющимся показателем преломления;
- анализ устойчивости двух- и трехмерных осциллонов в модели нелинейного фарадеевского резонанса;
- численное исследование квантово-полевой модели бинуклона;
- исследование модели кваркonia на основе релятивистского обобщения уравнения Шредингера с реалистичными потенциалами взаимодействия;
- моделирование ядро-ядерных взаимодействий при промежуточных энергиях в высокоэнергетическом приближении.

5. Численный анализ физических моделей, описываемых нелинейными волновыми уравнениями, с целью получения новой информации о структуре, свойствах и эволюции нелинейных дисперсионных сред и квантовых микросистем, раскрытия их качественных свойств и количественной оценки наблюдаемых величин.

### **1.3 Научная новизна и значимость работы**

В диссертации развиты эффективные вычислительные схемы, объединяющие новые схемы численного продолжения по параметрам с итерациями на основе обобщения НАМН. Созданные проблемно-ориентированные программные комплексы позволили успешно провести численное исследование актуальных математических моделей сложных микропроцессов и получить новые важные результаты.

1. В диссертации разработаны новые схемы продолжения по параметрам – схема продолжения через точки поворота и схема продолжения на плоскости двух параметров, существенно повышающие эффективность ньютоновских итерационных схем, обеспечивающие высокую скорость численного продолжения и возможность устойчивого выхода на новые ветви

- решений в точках поворота, расширяя тем самым возможности численного исследования.
2. Созданы новые вычислительные схемы и программные комплексы, реализующие концепцию объединения разработанных схем численного продолжения с итерациями на основе НАМН.
  3. Впервые, и только за счет использования разработанных проблемно-ориентированных программных комплексов, получен ряд новых значимых прикладных результатов, а именно:
    - (a) В результате проведенного численного исследования нелинейного уравнения Шрёдингера получены новые классы устойчивых локализованных состояний в диссипативных системах с самофокусирующей и дефокусирующей нелинейностью для случаев прямой и параметрической накачки энергии.
    - (b) В модели оптического волокна с периодически меняющимся показателем преломления выявлены диапазоны значений параметров, где локализованные структуры (щелевые солитоны) неустойчивы, что в данной модели интерпретируется как искажение сигнала на линии и возможная потеря передаваемой информации.
    - (c) Проведенное численное исследование устойчивости двух- и трехмерных осциллонов в модели нелинейного фарадеевского резонанса позволило сделать теоретические заключения о механизме образования указанных локализованных структур на поверхности жидких и гранулированных сред.
    - (d) На основе численного анализа квантово-полевой модели сильной связи получено количественное описание основных характеристик бинуклона.
    - (e) В результате численного анализа найдены параметры функций, аппроксимирующих с заданной точностью реалистичные потенциалы в моделях кваркония, построенных на базе релятивистского уравнения Шрёдингера.
    - (f) Проведенное численное исследование характеристик ядерных взаимодействий в рамках модели высокогенеретического приближения показало, что в данном подходе возможно описание экспериментальных данных в широком диапазоне ядер при энергиях от 10 до 100 МэВ на нуклон падающего ядра без применения процедуры подгонки. Показано, что данный подход может быть адаптирован для моделирования взаимодействия нейтронизбыточных изотопов легких ядер со стабильными ядрами.
  4. Численное исследование квантово-полевой модели бинуклона и модели двух- и трехмерных осциллонов выполнено впервые.
  5. Исследование устойчивости локализованных структур в модели оптического волокна впервые проведено на основе численного анализа соответствующей задачи на собственные значения для линеаризованного оператора, что позволило впервые для данного класса моделей показать, что указанные структуры (щелевые солитоны) при определенных условиях могут быть неустойчивы.

6. В рамках высокоэнергетической модели впервые получены удобные приближенные аналитические выражения, существенно упрощающие вычисление основных характеристик ядро-ядерных взаимодействий при промежуточных энергиях.

## 1.4 Практическая ценность

Разработанные в диссертации вычислительные схемы и программные комплексы позволили получить конкретные результаты, касающиеся свойств моделируемых физических систем, установления области применимости исходных квантовых и полевых моделей, возможных приложений в целенаправленном планировании новых физических экспериментов.

Разработанные методы и программы имеют самостоятельную ценность, что подтверждается, в частности, успешным решением задач, выходящих за рамки данной диссертации<sup>5</sup>.

В числе исследований, которые ведутся в настоящее время с использованием разработанных программных продуктов – численный анализ солитонов в дискретном нелинейном уравнении Шрёдингера в колаборации с Дрезденским институтом сложных физических систем и моделирование энергетической зависимости полных сечений реакций легких нейтронизбыточных ядер со стабильными ядрами для обработки экспериментов, выполняемых в Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.

Часть программ для расчета характеристик ядерных взаимодействий передана в Институт ядерных исследований и ядерной энергии (София, Болгария).

Ряд программных продуктов: CONTIN-NLIN, PROGS2H4, PROGON4, MATPROG(CMATPROG), HEA-CRS, HEA-TOTAL (в общей сложности около 7000 операторов фортранного кода), которые использовались при решении рассматриваемых в диссертации задач и представляют интерес для широкого круга пользователей, переданы в библиотеку JNRLIB и доступны для пользователей через интернет.

## 1.5 Результаты и положения, выносимые на защиту

I. Разработаны эффективные вычислительные схемы, реализующие концепцию объединения новых схем продолжения по параметрам с итерациями на основе обобщения непрерывного аналога метода Ньютона: (1) схема продолжения по параметру в точках поворота и (2) схема продолжения на плоскости двух параметров с одновременным вычислением одного из них.

Разработанный подход существенно расширяет возможности численного исследования, обеспечивая устойчивую сходимость ньютоновских итераций в

<sup>5</sup> Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. Численное исследование релятивистских уравнений на связанные состояния с кулоновским и линейным потенциалами. Математическое моделирование, Т.12, Вып.12 (2000) с.79; Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сархадов И. Неявная схема второго порядка для исследования термоупругих эффектов в металлах при их облучении импульсными пучками ионов. Сообщение ОИЯИ Р17-2002-24, Дубна, 2002; Земляная Е.В., Лукьянов В.К., Лукьянов К.В. Ядро-ядерное рассеяние и оптический потенциал фондлинга. Препринт ОИЯИ Р4-2004-115, Дубна, 2004 (принято в ЯФ); I.V.Barashenkov, S.R.Woodford, E.V.Zemlyanaya. Interactions of Parametrically Driven Dark Solitons. Accepted to Phys. Rev. E, 2005.

ходе численного продолжения, высокую скорость численного продолжения и возможность выхода на новые ветви решений в точках поворота.

II. С использованием развитых алгоритмов разработаны проблемно-ориентированные комплексы программ для численного исследования сложных микропроцессов, описываемых нелинейными волновыми уравнениями.

III. Проведено численное исследование ряда актуальных математических моделей многопараметрических микропроцессов и получены новые значимые результаты.

IV. Разработанные вычислительные схемы и программы используются при решении других задач, возникающих в современных моделях сложных физических систем. Ряд программных продуктов передан в библиотеку JINRLIB. Они доступны для пользователей через интернет.

В развернутом виде полученные в диссертации результаты представлены в разделе 3.

## 1.6 Достоверность результатов

Достоверность представленных в диссертации результатов обеспечивается проведением численных экспериментов на последовательности сгущающихся сеток, расширяющихся интервалов и увеличивающегося числа участвующих в разложении базисных функций, а также сравнением с имеющимися данными экспериментов, с теоретическими оценками, с аналитическими и численными результатами других авторов. Полученные в диссертации новые результаты инициировали численные и теоретические исследования ряда других авторов, в которых эти результаты нашли независимое подтверждение.<sup>6</sup>

## 1.7 Публикации

Основное содержание диссертации опубликовано в 47 работах, в числе которых

- 15 публикаций в российских журналах, рекомендуемых ВАК [1-15]: *Математическое Моделирование, Физика Элементарных Частиц и Атомного Ядра, Письма в ЭЧАЯ, Ядерная Физика, Известия РАН* (серия физическая);
- 11 публикаций в трудах конференций [16-26];
- 17 работ в зарубежных журналах [27-43]: *Physical Review Letters, Physical Review E, Journal of Physics G, International Journal of Modern Physics E, Nuclear Physics B, Computer Physics Communications, SIAM Journal on Applied Mathematics, Progress of Theoretical Physics Supplement, Physica D*;
- 2 Сообщения ОИЯИ и 2 статьи в научных сборниках [44-47].

## 1.8 Апробация результатов

Основные результаты диссертации докладывались на семинарах ОИЯИ и на следующих международных конференциях:

<sup>6</sup>К таким работам относится, в частности, J.Schöllmann, R.Scheibenzuber, A.S.Kovalev, A.P.Mayer, and A.A. Maradudin, *Phys. Rev. E* **59** 4 (1999) p.4818, где в численном исследовании нашли подтверждение эффекты колебательной неустойчивости щелевых солитонов, обнаруженные в [29] (к настоящему времени на работу [29] сделано более 70 ссылок).

- III Международный Симпозиум "Дубна – Дейтрон – 95" (июль 1995) Дубна, Россия
- I Workshop on Numerical Analysis and Application (June 1996) Rousse, Bulgaria
- Международная Конференция "Computational Modelling and Computing in Physics" (сентябрь 1996) Дубна, Россия
- VI Международный Семинар по Физике Тяжелых Ионов (сентябрь 1997) Дубна, Россия
- 22nd Symposium of South African Society for Numerical Mathematics SANUM'98 (April 1998) Cape Town, South Africa
- I Международная Конференция "Modern Trends in Computational Physics" (июнь 1998) Дубна, Россия
- 32nd Symposium on Mathematical Physics (May 1999) Torun, Poland
- II Международная Конференция "Modern Trends in Computational Physics" (июль 2000) Дубна, Россия
- XVI Международный Балдинский Семинар по Проблемам Физики Высоких Энергий "Релятивистская Ядерная Физика и Квантовая Хромодинамика" (июнь 2002) Дубна, Россия
- 52-е Международное Совещание по Ядерной Спектроскопии и Структуре Атомного Ядра "Ядро-2002" (июнь 2002) Москва, Россия
- V Международный Конгресс по Математическому Моделированию (октябрь 2002) Дубна, Россия
- 53-е Международное Совещание по Ядерной Спектроскопии и Структуре Атомного Ядра "Ядро-2003" (октябрь 2003) Москва, Россия
- III Workshop on Numerical Analysis and Application (June 2004) Rousse, Bulgaria.

## **1.9 Структура и объем диссертации**

Диссертация содержит 243 страницы, 50 рисунков, 19 таблиц и состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы, включающего 47 основных публикаций автора по теме диссертации и 221 наименование цитируемой литературы. Нумерация формул, таблиц и рисунков сквозная в пределах каждой главы.

## **1.10 Личный вклад автора**

Автор диссертации в сотрудничестве с коллегами и соавторами из ОИЯИ и других (российских и зарубежных) научных центров участвовал в математической постановке рассматриваемых в диссертации задач, в создании, проверке и улучшении соответствующих математических моделей, в разработке методов их численного исследования, в анализе и интерпретации получаемых численных результатов.

В разработку представленных в диссертации вычислительных схем и комплексов программ, в получение численных результатов, в анализ их точности и достоверности автором внесен определяющий вклад. Конкретно, работы [1, 3, 4, 17, 18, 19, 45] выполнены с определяющим вкладом автора; все численные результаты в работах [15, 20, 22, 23, 24, 29, 30, 31, 33, 35, 42, 46] получены автором на основе составленных им алгоритмов и программ; а в работах [5, 6, 7, 11, 13, 21, 25, 26, 34, 37, 39, 40, 43, 44] – с определяющим вкладом автора в разработку вычислительных схем и программ

и в проведение численного анализа. В работах [8, 10, 16, 27, 28, 38, 41, 47] вклад автора – существенный. В работах [9, 12, 14, 32, 36], помимо представленных в них численных результатов, автор внес существенный вклад в получение приближенных аналитических выражений, упрощающих расчет характеристик ядерных взаимодействий в рамках высоконергетического приближения.

## 2 Краткое содержание диссертации

Во ВВЕДЕНИИ дана общая характеристика работы, обоснованы ее актуальность и научная новизна, описаны цели диссертации, ее структура и объем, представлено краткое содержание диссертации по главам.

В Главе 1 "Основные методы численного исследования" дается общая характеристика задач в диссертации и обсуждаются методы численного анализа. В том числе, представлены новые схемы продолжения по параметрам. Глава состоит из трех разделов.

В разделе 1.1 дается общая характеристика задач, которые являются объектом численного исследования в данной диссертации.

Моделирование сложных систем в современной физике приводит, как правило, к нестационарным, пространственно неодномерным, многопараметрическим, нелинейным, сингулярным системам интегральных, интегродифференциальных или дифференциальных уравнений. При численном и теоретическом исследовании таких систем обычно ставится задача осуществить переход к более простым постановкам [2]. При этом используются следующие приемы, требующие, вообще говоря, своего анализа:

1. Пространственно неодномерные системы сводятся путем разложения по базисным функциям к бесконечным системам одномерных уравнений. Далее производится переход от бесконечных систем к конечным.

2. Осуществляется переход от бесконечных интервалов интегрирования к конечным.

3. Исследование некоторых классов нелинейных нестационарных задач в ходе исследования удается свести к последовательному решению систем нелинейных стационарных задач и линеаризованных задач на собственные значения.

4. В рамках обоснованных физических приближений при решении ряда задач отдельные члены исходного уравнения (потенциалы, подынтегральные выражения и т.д.) аппроксимируются специальными функциями. Подбор параметров в таких функциях представляет специальную проблему.

В некоторых, относительно немногих, случаях удается сделать теоретические оценки точности для упомянутых упрощений. В других же случаях для оценки точности и достоверности получаемых численных результатов приходится проводить сравнительные расчеты на последовательностях расширяющихся интервалов, сгущающихся сеток, увеличивающегося числа базисных функций и т.д.

Таким образом, в рамках рассматриваемых в диссертации моделей объектами численного исследования оказываются, в основном, стационарные системы уравнений и задачи на собственные значения для таких систем. Характерной их особенностью остается нелинейность (а значит, возможная неединственность решения и наличие бифуркаций), а также многопараметричность.

Рассматриваемые задачи можно свести к единообразной постановке в виде уравнения

$$F(\mathbf{a}, \Psi) = 0, \quad (1)$$

где  $\mathbf{a} \in R_l$  – вектор параметров,  $\Psi$  – элемент из некоторой области  $B$ -пространства  $Y$ ,  $R_l$  – евклидово пространство размерности  $l$ . Нелинейная функция  $F$  при заданном векторе параметров  $\mathbf{a}$  переводит элементы  $\Psi$  из области пространства  $Y$  в пространство  $U$ , где  $U$  является  $B$ -пространством, причем  $U \supseteq Y$ .<sup>7</sup>

Для численного решения большинства изучаемых задач при заданном векторе параметров  $\mathbf{a}$  используются модифицированные схемы на основе НАМН и его обобщения. Этот метод, сохраняя квадратичную сходимость итераций в близкой окрестности локального корня, позволяет за счет выбора итерационного параметра расширить область сходимости ньютоновских итераций по сравнению с "классическим" методом Ньютона. Простая логика построения схем на основе обобщения НАМН с одной стороны, и, с другой стороны, гибкость этого подхода, позволяющая сочетать его с другими современными вычислительными методами, учитывая тем самым специфику конкретной задачи и особенности архитектуры современных вычислительных систем, делают его эффективным инструментом численного решения широкого круга задач.

Как уже сказано, многопараметричность является характерной особенностью изучаемых задач, что делает актуальной проблему разработки методов продолжения по параметрам с учетом особенностей конкретных задач и целей исследования. Организация счета в современных схемах продолжения, обеспечивая устойчивую сходимость ньютоновских итераций, открывает возможности численного исследования, связанные с анализом бифуркаций и выходом на новые ветви решений. Таким образом, объединение НАМН с новыми эффективными схемами продолжения является перспективной основой успешного численного исследования широкого круга задач.

Отметим также, что поскольку при численном решении используется какая-либо дискретная аппроксимация исходной постановки, вектор физических параметров фактически дополняется параметрами вычислительной схемы. Поэтому численное исследование всегда включает проверку адекватности выбранных параметров дискретной аппроксимации и проверку соответствия теоретической и реальной точности вычислительной схемы.

В разделе 1.2 дан обзор итерационных схем на основе обобщения НАМН, которые используются в диссертации для численного решения задачи (1) при заданном векторе параметров  $\mathbf{a}$ . В этом разделе излагается общая концепция построения схем на основе НАМН и его обобщения. Обсуждаются вопросы точности, способы выбора итерационных параметров, построения начального приближения, приводятся теоретические оценки. Представлены конкретные модифицированные ньютоновские схемы.

Согласно подходу, определяемому обобщением НАМН для нелинейного функционального уравнения (1) при фиксированном наборе параметров  $\mathbf{a}$ <sup>8</sup>, строится

<sup>7</sup> В спектральных задачах  $\Psi = \{\tilde{\lambda}, y\}$ , где  $y$  – элемент из некоторой области  $B$ -пространства  $Y$ ,  $\tilde{\lambda} \in R_m$  – вектор собственных значений,  $R_m$  – евклидово пространство размерности  $m$ , нелинейная функция  $F$  переводит элементы  $\Psi$  из области пространства  $R_m \times Y$  в пространство  $R_m \times U$ .

<sup>8</sup> В тех формулах, где это несущественно, зависимость функции  $F$  от  $\mathbf{a}$  опущена.

эволюционное уравнение по непрерывному параметру  $t$

$$\frac{d}{dt} F(t, \Psi(t)) = -F(t, \Psi(t)), \quad 0 \leq t < \infty, \quad (2)$$

с начальным условием  $\Psi(0) = \Psi_0$ . Из уравнения (2), обозначив  $A(t) = F'_\Psi(t, \Psi(t))$ , получаем:

$$\frac{d\Psi}{dt} = -A(t)^{-1}[F(t, \Psi(t)) + F'_t(t, \Psi(t))]. \quad (3)$$

Поскольку интеграл уравнения (2) есть  $F(t, \Psi(t)) = e^{-t}F(0, \Psi_0)$ , то  $\|F(t, \Psi(t))\| \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow \infty$ , и следует ожидать асимптотически устойчивую сходимость  $\Psi(t)$  к искомому решению  $\Psi^*$ .

При аппроксимации уравнения (3) в соответствии с одношаговой схемой Эйлера производится дискретизация непрерывного параметра  $t : (t_0, t_1, \dots, t_k); t_0 = 0, t_{k+1} = t_k$  и получается последовательность итераций

$$\Psi_{k+1} = \Psi_k + \tau_k V_k, \quad (4)$$

$$V_k = -B_k[F(t_k, \Psi_k) + F'_t(t_k, \Psi_k)], \quad B_k = A(t_k)^{-1}. \quad (5)$$

Вычисляя для каждого значения  $t_k$  итерационную поправку  $V_k$  и шаг  $\tau_k$ , получаем новое приближение  $\Psi_{k+1}$  к решению  $\Psi^*$ .<sup>9</sup> Критерием сходимости итераций (4)-(5) является выполнение неравенства

$$\delta_k = \|F(t_k, \Psi_k)\| < \epsilon, \quad (6)$$

где  $\epsilon$  – заданное малое положительное число,  $\delta_k$  – невязка, которая может вычисляться различными способами.

Итерационная схема дополняется алгоритмом вычисления итерационного параметра  $\tau_k$  и выбором начального приближения. В результате многолетнего практического опыта (в основном сотрудников ЛИТ ОИЯИ) и теоретических исследований разных авторов<sup>10</sup> разработан набор алгоритмов расчета итерационного параметра, расширяющих область сходимости НАМН и уменьшающих число ньютоновских итераций.

С точки зрения компьютерной реализации основные затраты представляет вычисление обратного оператора производной Фреше. С другой стороны, точность аппроксимации этого оператора фактически определяет точность получаемых численных результатов и обеспечивает сходимость итерационного процесса. Поэтому большое значение для эффективности разрабатываемых схем имеет сохранение относительно простой структуры этого оператора при высокой точности аппроксимации. Это достигается за счет различных модификаций в рамках обобщения НАМН, а также комбинации итерационных ньютоновских схем с другими методами. В качестве примера можно привести итерационные схемы с

<sup>9</sup>Сходимость итераций на основе обобщения НАМН доказана в работе Жанлава Т. и Пузынина И.В. Эволюционный ньютоновский процесс решения нелинейных уравнений. ЖВМиМФ, Т.32, Вып.1 (1992) с.3.

<sup>10</sup>Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. Оптимальный шаг и регуляризация метода Ньютона. ЖВМиМФ, Т.21, Вып.2 (1981) с.491; Жанлав Т., Пузынин И.В. О сходимости итераций на основе непрерывного аналога метода Ньютона. ЖВМиМФ, Т.32, Вып.6 (1992) с.846; Лебедев К.А. Об одном способе нахождения начального приближения для метода Ньютона. ЖВМиМФ, Т.36, Вып.3 (1996) с.6.

запаздыванием для интегродифференциальных уравнений. Итерационные схемы повышенной точности на основе обобщения НАМН также являются примерами модифицированных схем, сохраняющих трехдиагональную структуру матрицы, аппроксимирующей оператор производной Фреше в ньютоновских итерациях.

НАМН зарекомендовал себя как высокоэффективное средство решения всевозможных задач на собственные значения. Итерационный процесс в этом случае строится на основе различных вариантов сочетания НАМН с методом обратных итераций. Обобщением данного подхода можно считать итерационные схемы для численного решения нелинейных задач с неизвестным параметром.

Построение начального приближения, обеспечивающего сходимость ньютоновских итераций, представляет собой специальную проблему, которая, вообще говоря, не алгоритмизируется и в каждом случае решается, исходя из особенностей конкретной задачи.

Конструктивное решение этой проблемы за счет использования результатов, уже полученных для предыдущих значений параметра, достигается в рамках метода продолжения по параметру, которому посвящен раздел 1.3.

В разделе 1.3 излагается общая концепция численного продолжения по параметру и представлены две схемы продолжения по параметру, открывающие дополнительные возможности численного исследования.

Любая схема численного продолжения включает в том или ином виде три обязательных компоненты<sup>11</sup>:

(1) выбор начального приближения,

(2) метод решения задачи для данного значения параметра (как уже сказано, в качестве метода решения для каждого заданного шага в настоящей диссертации используются ньютоновские итерационные схемы),

(3) алгоритм движения по параметру.

*Начальное приближение* строится обычно с использованием численных результатов, полученных на предыдущих шагах. Простейшим, наиболее распространенным и во многих случаях вполне эффективным вариантом схемы продолжения является такая организация вычислений, при которой решение с предыдущего шага используется как начальное приближение для следующего значения параметра. Для того, чтобы обеспечить более высокую устойчивость и быструю сходимость ньютоновских итераций, начальное приближение строится по результатам, рассчитанным для 2-3 предыдущих значений параметра. Так, в диссертации для начального приближения используется схема Эйлеровского типа:

$$\Psi^{(0)}(\alpha_{i+1}) = \Psi(\alpha_i) + (\alpha_{i+1} - \alpha_i) \frac{\Psi(\alpha_i) - \Psi(\alpha_{i-1})}{\alpha_i - \alpha_{i-1}}. \quad (7)$$

Здесь  $\alpha_i$  – элемент вектора параметров а на  $i$ -м шаге продолжения.

При построении начального приближения на стартовой точке численного продолжения ( $i = 0$ ) используется известный для каких-либо предельных значений параметров аналитический вид решения либо качественная информация о его форме, которая имеется в большинстве физических задач. В рамках обобщения НАМН в

<sup>11</sup>Существуют алгоритмы, объединяющие в единой итерационной схеме некоторые из указанных компонент, например, метод эволюции параметра (см. Родионов И.Д. Автореф. дисс. на соиск. уч. степ. д.ф.м.н., Дубна, ОИЯИ, 1987).

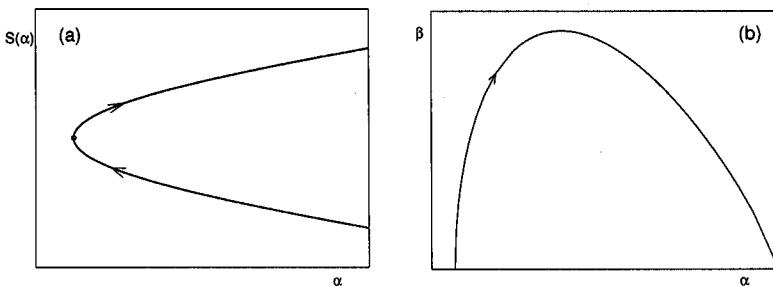


Рис.1. (а) продолжение по параметру через точку поворота; (б) численное продолжение на плоскости двух параметров  $(\alpha, \beta)$ .

определенных случаях эта проблема решается на основе представления функции  $F(t, \Psi(t))$  в эволюционной задаче (2) в виде суммы

$$F(t, \Psi(t)) = F_0(\Psi(t)) + g(t)[F(\Psi(t)) - F_0(\Psi(t))],$$

где оператор  $F'_0(\Psi)$  легко обратим, для уравнения  $F_0(\Psi) = 0$  легко найти решение, а функция включения  $g(t)$  такая, что  $g(0) = 0, g(\infty) = 1$ .

Методы выбора *шага движения по параметру* определяются спецификой конкретных задач и целей исследования. Одним из критериев выбора является устойчивая сходимость ньютоновских итераций. Если шаг по параметру достаточно мал, то, как показывают соответствующие теоретические оценки<sup>12</sup>, начальное приближение будет находиться в области сходимости ньютоновских итераций. В определенной мере увеличить шаг движения по параметру и тем самым ускорить процедуру продолжения можно за счет выбора итерационного параметра  $\tau_k$  в ньютоновской итерационной схеме.

Возможная неединственность решений и наличие бифуркаций требуют разработки специальных методов численного исследования. Так, одной из проблем численного продолжения по параметру решений нелинейных задач, связанной с неединственностью решения, является организация *продолжения по параметру в точках поворота*, где необходимо поменять направление движения по параметру с выходом на новую, неизвестную ветвь решений (Рис.1а).

Алгоритм продолжения, который представлен в данном разделе и используется в Главах 3 и 4, позволяет решить эту проблему. Идея предлагаемого подхода состоит в следующем.

При продолжении по параметру  $\alpha$  решения  $\Psi$  стационарной граничной задачи

$$F(\Psi, \alpha) = 0 \quad (8)$$

(здесь  $F$  – нелинейный оператор;  $\alpha$  – элемент вектора параметров  $\mathbf{a}$ , по которому ведется продолжение; остальные элементы вектора  $\mathbf{a}$  фиксированы) обычно вычисляется норма или какая-либо другая скалярная характеристика решения  $S(\Psi)$  (так называемая "бифуркационная мера") и строится ее зависимость от параметра,

<sup>12</sup>Орtega Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем со многими неизвестными. М.: Мир, 1975.

$S(\alpha)$ . В диссертации в качестве такой скалярной характеристики используются величины, имеющие физический смысл в рассматриваемых моделях, а именно, интегралы энергии и импульса.

В предложенной схеме продолжения используется тот факт, что производная  $d\alpha/dS(\Psi)$  в точке поворота равна нулю. Численно аппроксимируя значение этой производной и проверяя на каждом шаге по параметру выполнение соотношения

$$\frac{\Delta\alpha_i}{\Delta S_i} < \epsilon, \quad (9)$$

где  $\epsilon > 0$  – заранее заданное малое число,  $\Delta\alpha_i = \alpha_i - \alpha_{i-1}$  – шаг по параметру, а  $\Delta S_i = S(\Psi(\alpha_i)) - S(\Psi(\alpha_{i-1}))$ , можно с необходимой точностью установить положение точки поворота, в которой движение вдоль бифуркационной кривой должно поменять направление. Это означает, что при выполнении условия (9) следует поменять знак шага продолжения по параметру. При этом построение начального приближения по формуле (7) с использованием результатов, полученных для двух предыдущих значений параметра, исключает возврат на ветку с уже известными решениями.

Шаг по параметру вычисляется по формуле

$$\Delta\alpha_{i+1} = \Delta\alpha_i \cdot \frac{\Delta S_{i-1}}{\Delta S_i}, \quad (10)$$

которая обеспечивает его уменьшение вблизи точки поворота (где решение меняется быстро) и увеличение на "пологом" участке бифуркационной кривой. При этом начальный ( $i = 0$ ) шаг по параметру должен быть достаточно малым, чтобы обеспечивать устойчивую и быструю (за 3-5 итераций) сходимость ньютоновской итерационной схемы. Отметим здесь, что при движении на "пологих" участках бифуркационной кривой эффективными являются "классические" ньютоновские итерации, в то время как на участках вблизи точек поворота необходим переход к итерациям на основе НАМН, что обеспечивается путем соответствующего выбора итерационного параметра  $\tau$ .

Таким образом, представленный подход обеспечивает возможность выхода на новые ветви решений в точках поворота, сохраняя при этом структуру матрицы, аппроксимирующую оператор производной Фреше, и не усложняя, в отличие от других известных в литературе рецептов<sup>13</sup>, ньютоновскую итерационную схему.

С другой стороны, предложенный алгоритм выбора шага по параметру позволяет регулировать его величину, обеспечивая тем самым быструю сходимость ньютоновских итераций и высокую скорость движения по параметру.

В этом же разделе представлена еще одна схема продолжения. *Модифицированная схема продолжения по параметру с одновременным вычислением другого параметра* предназначена для организации численного продолжения на плоскости двух параметров, один из которых неизвестен (см. Рис.1b). Схема объединяет представленную выше процедуру продолжения с ньютоновскими итерациями для нелинейного функционального уравнения

$$\Phi(z) \equiv \begin{cases} F(\Psi, \mathbf{a}) \\ \Gamma(\Psi, \mathbf{a}) \end{cases} = 0, \quad (11)$$

<sup>13</sup>R.Seydel. From equilibrium to chaos. Practical bifurcation and stability analysis. Elsevier Science Publishing Co., 1988; E.L.Allgower and K.Georg. Numerical continuation methods. Elsevier Science Publishing Co., 1990.

где  $z = \{\Psi, \beta\}$ ,  $\beta$  – неизвестный элемент вектора параметров  $a$ . Предполагается, что продолжение ведется по параметру  $\alpha$ , в то время как остальные элементы вектора  $a$  фиксированы. Дополнительное условие  $\Gamma$  формулируется с учетом особенностей конкретной задачи, например, на основе вариационного подхода<sup>14</sup>, с использованием параметрической зависимости решений на асимптотике<sup>15</sup>, с учетом трансляционной инвариантности решений [4].

После перехода к эволюционному уравнению (2) и последующей дискретизации по непрерывному параметру  $t$  получаем итерационную схему, которая на каждом  $i$ -том шаге численного продолжения по параметру  $\alpha$  имеет вид

$$\Psi_{s+1} = \Psi_s + \tau_s \phi_s, \quad \beta_{s+1} = \beta_s + \tau_s \mu_s. \quad (12)$$

Здесь  $s$  – номер ньютоновской итерации,  $\tau_s$  ( $0 < \tau_s \leq 1$ ) – итерационный параметр ньютоновской схемы,  $\phi_s$  определяется как линейная комбинация

$$\phi_s = \phi_s^{(1)} + \mu_s \phi_s^{(2)},$$

где

$$\phi_s^{(1)} = -[\partial F / \partial \Psi]_s^{-1} F(\Psi_s, \alpha_i, \beta_s), \quad \phi_s^{(2)} = -[\partial F / \partial \Psi]_s^{-1} \partial F / \partial \beta, \quad (13)$$

а итерационная поправка  $\mu_s$  вычисляется по формуле

$$\mu_s = \frac{-\Gamma(\psi_s, \alpha_i, \beta_s) - [\partial \Gamma / \partial \Psi]_s \phi_s^{(1)}}{[\partial \Gamma / \partial \Psi]_s \phi_s^{(2)} + [\partial \Gamma / \partial \beta]_s}.$$

В качестве бифуркационной меры при численном продолжении выступает значение параметра  $\beta$ . Движение через точки поворота осуществляется по описанному выше алгоритму. Начальное приближение и шаг по параметру вычисляются соответственно по формулам (7) и (10).

В Главе 2 *"Описание комплексов программ"* представлены комплексы программ, разработанные для численного исследования задач в диссертации (см. Таблицу 1). В том числе, дано подробное описание тех программных продуктов, которые нашли широкое применение и переданы в библиотеку JINRLIB для свободного доступа через интернет (соответствующие названия выделены жирным).

В разделе 2.1 дана общая характеристика разработанных комплексов программ. Большинство программ построено на основе различных вариантов метода продолжения по параметру в сочетании с итерациями на основе НАМН и его обобщения.

В комплексах CONTIN-NLIN и OSCILLON реализована процедура продолжения по параметру через точки поворота. Комплекс CONTIN-NLIN-MOD составлен с использованием модифицированной схемы продолжения на плоскости двух параметров. Сочетание в этих комплексах предложенных новых алгоритмов продолжения по параметрам с итерациями на основе обобщения НАМН обеспечило высокую эффективность разработанных программ и позволило получить ряд новых результатов при исследовании задач в Главах 3 и 4.

Комплекс GAP-EV предназначен для продолжения по параметру собственных значений системы дифференциальных уравнений первого порядка в комплексных переменных.

<sup>14</sup> Виницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. ЯФ Т.52, Вып.4(10) (1990) с.1176.

<sup>15</sup> Амирханов И.Е., Пузынин И.В., Стриж Т.А. Сообщение ОИЯИ Р11-91-454, Дубна, 1991.

Таблица 1. Комплексы программ для численного исследования задач в диссертации.  
Жирным выделены программы, переданные в библиотеку JINRLIB.

Комплекс (программа)	Задача (модель)	Организация
<b>CONTIN-NLIN</b> <b>CONTIN-NLIN-MOD</b> <b>PROGS2H4</b>	нелинейное уравнение Шрёдингера (Гл.3)	ОИЯИ (Дубна) Ун-т Кейптауна (ЮАР)
<b>GAP-EV</b> <b>CMATPROG</b>	устойчивость щелевых солитонов (Гл.4)	ОИЯИ (Дубна) Ун-т Кейптауна (ЮАР)
<b>OSCILLON</b> <b>PROGON4</b>	осциллоны в модели нелинейного фараадеевского резонанса (Гл.4)	ОИЯИ (Дубна) Ун-т Кейптауна (ЮАР)
<b>DEUTERON</b> <b>MATPROG</b> <i>SLIP1</i>	квантово-полевая модель бинуклона (Гл.5)	ОИЯИ (Дубна) ИМПБ РАН (Пущино)
<b>REL-SCHR</b> <i>SLIPH4; SYSINT</i>	релятивистская модель кваркония (Гл.5)	ОИЯИ (Дубна)
<b>HEA-CRS</b> <b>HEA-TOTAL</b>	расчет характеристик ядерных взаимодействий в рамках ВЭП (Гл.6)	ОИЯИ (Дубна) ИАЭ (Польша) НЦИАЭ (Египет)
<b>DIRAC</b>	расчет характеристик электронного упругого рассеяния (Гл.6)	ОИЯИ (Дубна) ИЯИАЭ (Болгария)

В состав комплексов DEUTERON и REL-SCHR для исследования квантово-полевых моделей в Главе 5 входят известные программы SLIP1<sup>16</sup>, SLIPH4<sup>17</sup> и SYSINT<sup>18</sup>, реализующие НАМН для различных постановок задач на собственные значения (эти названия выделены в таблице 1 курсивом).

В комплексе DEUTERON, на каждом шаге численного продолжения, для решения задачи на собственные значения для нелинейной самосогласованной системы дифференциальных уравнений при фиксированном наборе параметров реализован итерационный процесс, представляющий комбинацию ньютоновских итераций и метода последовательных приближений. Комплекс REL-SCHR составлен для продолжения решений задачи на собственные значения для системы интегральных уравнений по параметрам феноменологического потенциала.

Комплекс программ HEA-CRS и HEA-TOTAL предназначен для расчета характеристик ядро-ядерного взаимодействия в рамках высокоэнергетического приближения. Комплекс DIRAC разработан для расчета сечений упругого электрон-ядерного рассеяния на основе соответствующей системы уравнений Дирака с использованием технологии Message Passing Interface для организации расчетов в

<sup>16</sup>Пузынин И.В., Пузынина Т.П. В сборнике "Алгоритмы и программы для решения некоторых задач физики". Изд-во KFKI-74-34, Будапешт (1974) с.93; <http://www.jinr.ru/programs/slip/#slip1>.

<sup>17</sup>Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. Сообщение ОИЯИ, Р11-87-332, Дубна, 1987; <http://www.jinr.ru/programs/slip/#sliph4>.

<sup>18</sup>Земляная Е.В. SYSINT(SYSINTM) – комплекс программ для численного решения задачи на собственные значения для системы интегральных уравнений. Сообщение ОИЯИ Р11-94-120, Дубна, 1994; <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/syint>.

параллельном режиме.

В разделе 2.2 представлен комплекс программ CONTIN-NLIN<sup>19</sup>, который реализует предложенную в диссертации схему продолжения по параметру через точки поворота применительно к следующей системе нелинейных уравнений:

$$\begin{cases} u_1''(x) + F_{11}(u_1, u_2, x, \vec{\alpha})u_1'(x) + F_{12}(u_1, u_2, x, \vec{\alpha})u_2'(x) + G_1(u_1, u_2, x, \vec{\alpha}) = 0, \\ u_2''(x) + F_{21}(u_1, u_2, x, \vec{\alpha})u_1'(x) + F_{22}(u_1, u_2, x, \vec{\alpha})u_2'(x) + G_2(u_1, u_2, x, \vec{\alpha}) = 0, \end{cases} \quad (14)$$

где  $a \leq x \leq b$ ,  $\vec{\alpha}$  – вектор параметров, функции  $F_{ij}$  и  $G_i$  ( $i, j = 1, 2$ ) задаются пользователем, продолжение ведется по параметру  $\alpha^*$ , одному из элементов вектора  $\vec{\alpha}$ . Краевые условия на функции  $u_1$  и  $u_2$  имеют вид:

$$D_i u_i'(a) + E_i u_i(a) = 0, \quad \tilde{D}_i u_i'(b) + \tilde{E}_i u_i(b) = 0. \quad (15)$$

Здесь  $i = 1, 2$ ;  $D_i^2 + E_i^2 > 0$ ,  $\tilde{D}_i^2 + \tilde{E}_i^2 > 0$ .

В диссертации дано полное описание алгоритмов и программ комплекса, представлена блок-схема (Рис. 2). Численные примеры демонстрируют его работу в различных режимах. Представлены также результаты расчетов на последовательности стущающихся сеток, подтверждающие соответствие порядка точности численных результатов теоретическим оценкам порядка дискретной аппроксимации.

Для дискретной аппроксимации системы (14) используются трехточечные конечно-разностные схемы на основе обобщения метода Нумерова, обеспечивающие четвертый порядок точности. В диссертацию включен подробный вывод соответствующих формул, поскольку данный подход является в диссертации основным методом дискретной аппроксимации.

В разделе 2.3 представлены программы PROGS2H4<sup>20</sup>, PROGON4<sup>21</sup> и MATPROG(CMATPROG)<sup>22</sup>, которые используются в диссертации для численного решения линейных задач при вычислении ньютоновских итерационных поправок. Подобные задачи сами могут выступать объектом исследования в различных моделях. Кроме того, необходимость их решения возникает, например, в рамках неявных схем при решении уравнений в частных производных.

Программы PROGON4 и PROGS2H4 [45] предназначены для решения соответственно одного и двух обыкновенных дифференциальных уравнений с краевыми условиями третьего рода. В обеих программах используется конечно-разностная нумеровская аппроксимация четвертого порядка.

Программы MATPROG и CMATPROG реализуют метод матричной прогонки соответственно для случаев вещественных и комплексных переменных.

В разделе 2.4 дано описание комплекса программ<sup>23</sup>, реализующего подход, определяемый высокоэнергетическим приближением (ВЭП), для расчета характеристик ядро-ядерных взаимодействий при промежуточных энергиях. Программа HEA-CRS предназначена для расчета дифференциальных сечений упругого рассеяния. Программа HEA-TOTAL рассчитывает полное сечение реакции, а также фазу и потенциал ядро-ядерного взаимодействия.

<sup>19</sup><http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/contin-nlin>

<sup>20</sup><http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/progs2h4>

<sup>21</sup><http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/progon4>

<sup>22</sup><http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/matprog>

<sup>23</sup><http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/heas>

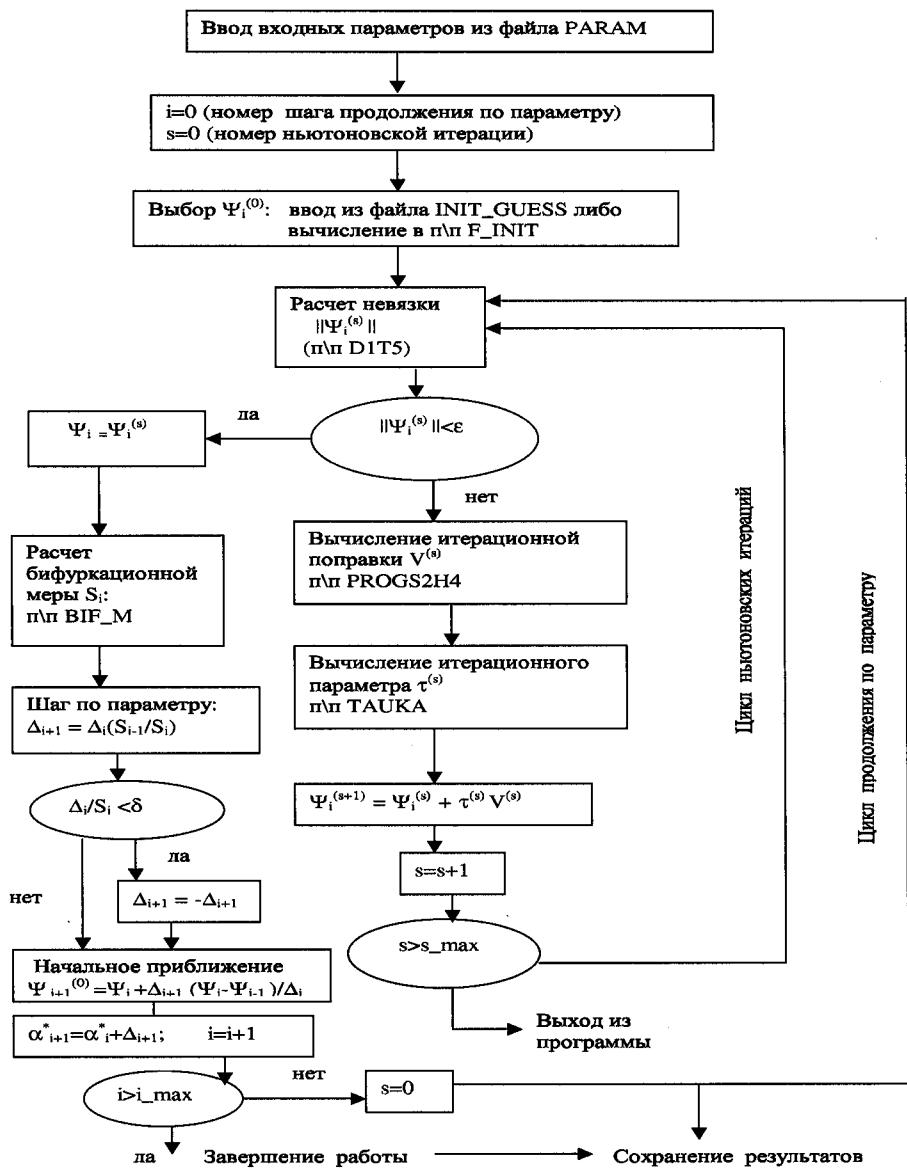


Рис. 2. Блок-схема программного комплекса CONTIN-NLIN.  $\Psi = \{u_1, u_2\}$ ,  $\Delta_i = \alpha_i^* - \alpha_{i-1}^*$ .

В Главе 3 "Численное исследование нелинейного уравнения Шрёдингера с диссипацией и накачкой" представлены результаты численного анализа различных классов солитонных решений указанного уравнения.

Нелинейное уравнение Шрёдингера описывает амплитуду квази-монохроматической волны, распространяющейся в нелинейной дисперсионной среде, и в этом качестве (в различных вариантах постановки) имеет множество физических приложений в самых разных моделях теории конденсированных состояний и нелинейной оптики<sup>24</sup>. В рамках этих моделей актуальной проблемой является получение новой информации о существовании устойчивых частицеподобных состояний (солитонов) в изучаемых системах, об условиях возникновения бифуркаций, критических режимов, о механизмах возникновения неустойчивости.

Постановка задачи представляет различные варианты комплекснозначного уравнения в частных производных с кубической нелинейностью и с членами, моделирующими диссипативные потери энергии и накачку энергии в систему извне.

В диссертации рассматриваются следующие уравнения.

Нелинейное уравнение Шрёдингера с параметрической накачкой и диссипацией

$$i\Psi_t + \Psi_{xx} + 2|\Psi|^2\Psi - \Psi = h\bar{\Psi} - i\gamma\Psi, \quad \Psi(x = \pm\infty) = 0. \quad (16)$$

Здесь и далее  $\Psi$  – амплитуда квази-гармонической стационарной волны,  $h$  – амплитуда накачки,  $\gamma$  – коэффициент диссипации, черта над  $\Psi$  означает комплексное сопряжение. Это уравнение используется при описании магнетиков во вращающемся магнитном поле, в теории джозефсоновских контактов, в моделях гидродинамики, а также при анализе распространения СВЧ-волны в плазме.

В случае прямой (внешней) накачки уравнение Шрёдингера имеет вид

$$i\Psi_t + \Psi_{xx} + 2|\Psi|^2\Psi - \Psi = -h - i\gamma\Psi, \quad \Psi_x(x = \pm\infty) = 0. \quad (17)$$

Данное уравнение описывает эффект фазового усиления в оптических волокнах; конвекцию в бинарных смесях и жидких кристаллах; волны намагничивания в ферромагнетиках под действием комбинации статического и СВЧ полей и имеет ряд других приложений.

Наконец, для случая нелинейности дефокусирующего типа рассматривается следующее уравнение:

$$i\Psi_t + \frac{1}{2}\Psi_{xx} - |\Psi|^2\Psi + \Psi = h\bar{\Psi} - i\gamma\Psi, \quad \Psi_x(x = \pm\infty) = 0, \quad (18)$$

которое, в частности, моделирует волны намагничивания в легкоосных ферромагнетиках с дополнительной слабой анизотропией. В газовой динамике оно известно как уравнение амплитуды колебаний поверхности жидкости в вертикально выбирающем канале с большой шириной и малой глубиной. В нелинейной оптике уравнение (18) получено в модели оптического параметрического осциллятора в квадратичной среде в пределе большой отстройки второй гармоники.

Численное исследование каждого из этих трех уравнений включало в себя (1) продолжение по параметру стационарных решений; (2) численное решение линеаризованной задачи на собственные значения для исследования свойств устойчивости стационарных решений (для рассматриваемых уравнений эта задача

---

<sup>24</sup>Ньюэл. А. Солитоны в математике и физике. М: Мир, 1989.

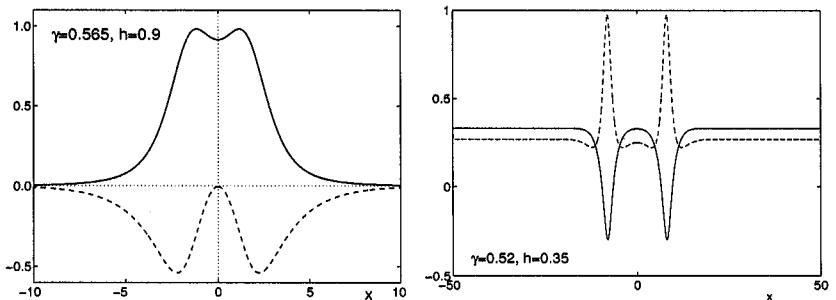


Рис. 3. Устойчивые двухсолитонные комплексы уравнения (16) (слева) и уравнения (17) (справа). Сплошные линии – вещественная часть, штриховые – мнимая часть.

представляет собой систему двух дифференциальных уравнений второго порядка в комплексных переменных); и, наконец, (3) численное решение исходной задачи в частных производных для определенных значений параметров.

Численное продолжение по параметру стационарных решений проводилось с помощью программы CONTIN-NLIN. В большинстве случаев численные эксперименты проводились на интервале  $x = [-100, 100]$  с шагом конечно-разностной аппроксимации 0.005. Для решения линеаризованной задачи на собственные значения использовалась стандартная программа из библиотеки EISPACK<sup>25</sup>. При необходимости собственные значения уточнялись с помощью ньютоновских итераций. Численное решение исходной задачи в частных производных осуществлялось на основе двухшагового условно устойчивого алгоритма с Фурье аппроксимацией по пространственной переменной.<sup>26</sup>

Цель исследования состояла в поиске новых классов локализованных решений в виде многосолитонных комплексов и движущихся солитонов, изучении границ области существования локализованных состояний, исследовании точек бифуркации, численном анализе устойчивости солитонных решений.

В разделе 3.1 представлены результаты численного исследования многосолитонных комплексов уравнений (16) и (17). Для каждого из указанных уравнений в литературе известны по два односолитонных решения: для уравнения (16) они известны в явном виде, а для уравнения (17) – найдены численно.

В диссертации получены новые решения, представляющие собой комплексы двух и более солитонов. Так, на Рис. 3 представлены устойчивые двухсолитонные комплексы, впервые найденные для уравнений (16) и (17).

Раздел 3.2 посвящен исследованию решений уравнения (16), описывающих движущиеся с равномерной скоростью  $V$  солитоны. Исходное уравнение в частных производных в этом случае с использованием движущейся системы координат преобразуется в стационарное, в котором скорость движения солитона  $V$  играет роль дополнительного параметра. Анализ устойчивости движущихся солитонов проводится путем численного решения соответствующей линеаризованной задачи на собственные значения.

<sup>25</sup><http://www.netlib.org/eispack>

<sup>26</sup>J.A. Weideman and B.M.Herbst. SIAM J Numer. Anal. **23** (1986) p.485.

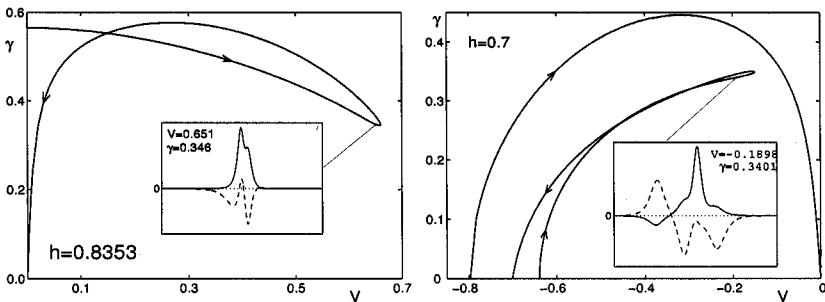


Рис. 4. Результаты численного продолжения диссипативных движущихся солитонов уравнения (16) на плоскости параметров  $(V, \gamma)$ . Вставки иллюстрируют решение на одной из внутренних точек кривой. (Сплошная линия: вещественная часть; штриховая линия: мнимая часть.) Стрелки указывают направление численного продолжения.

В случае нулевой диссипации численное исследование движущихся солитонов осуществляется по той же схеме, которая используется для неподвижных солитонов, с помощью комплекса CONTIN-NLIN.

Случай ненулевой скорости и ненулевой диссипации более сложный. Для него формулируются необходимые и достаточные условия на точки бифуркации, где берут начало ветви движущихся диссипативных солитонов. Проверка этих условий осуществляется численно. Из найденных точек бифуркации выполнялось численное продолжение солитонных решений на плоскости параметров  $(\gamma, V)$  и  $(h, V)$ , которое проводилось с помощью комплекса CONTIN-NLIN-MOD. Показано, что в присутствии параметрической накачки два и более диссипативных солитона могут образовать комплекс, движущийся с нулевым импульсом, но с ненулевой скоростью (Рис. 4).

Раздел 3.3 посвящен численному исследованию уравнения (18). Локализованные состояния этого уравнения носят название "темных солитонов" в моделях нелинейной оптики и "доменных стенок" в моделях теории ферромагнетизма. Как и в предыдущих случаях, в литературе уже известны в явном виде локализованные решения этого уравнения, имеющие кинкообразную форму.

В результате проведенного численного исследования уравнения (18) получены новые устойчивые диссипативные многосолитонные комплексы, а также ветви устойчивых движущихся темных солитонов для случая нулевой диссипации. Обнаружен эффект "мультистабильности", т.е. существование различных типов устойчивых состояний для одних и тех же наборов параметров. Пример устойчивого комплекса двух темных солитонов представлен на Рис.5(а). Рис.5(б) демонстрирует область существования и устойчивости таких решений на плоскости параметров  $(h, \gamma)$ .

Глава 4 "Численное исследование устойчивости щелевых солитонов и двух- и трехмерных осциллонов" посвящена численному анализу устойчивости локализованных состояний в рамках двух нелинейных моделей.

Первая модель, рассмотренная в разделе 4.1, описывает распространение бегущей волны в оптических волокнах с периодически меняющимся коэффициентом

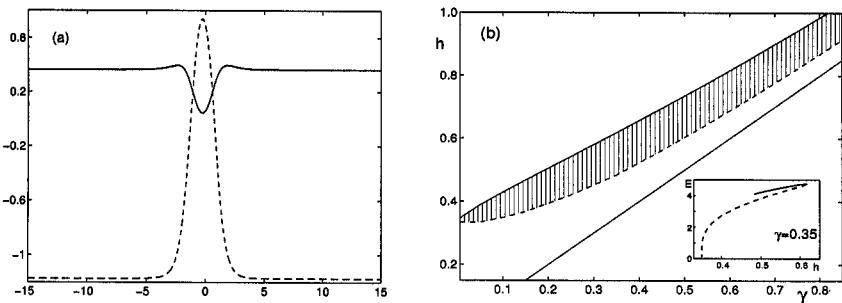


Рис.5. (а) Пример устойчивого связанных состояния двух темных солитонов при  $\gamma = 0.35$ ,  $h = 0.617$ . Сплошная линия – вещественная часть, штрихи – мнимая часть. (б) Диаграмма области существования диссипативных двухсолитонных решений (основной рисунок). Заштрихованная часть соответствует устойчивым решениям. На вставке представлена энергия  $E$  как функция  $h$  для фиксированного значения  $\gamma$ . Сплошная и штриховая линии на вставке показывают устойчивую и неустойчивую ветви, соответственно.

преломления. Соответствующая система амплитудных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} i(u_t + u_x) + v + (|v|^2 + \rho|u|^2)u &= 0, \\ i(v_t - v_x) + u + (|u|^2 + \rho|v|^2)v &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь  $x$  – координата вдоль решетки,  $t$  – время и  $\rho$  – параметр, который в рамках различных моделей может принимать значения от 0 до  $\infty$ . (Отметим, что система (19) имеет множество других приложений в различных моделях физики элементарных частиц и конденсированных состояний.)

Рассматриваются стационарные солитонные решения этой системы (щелевые солитоны) с граничными условиями  $u(x = \pm\infty) = v(x = \pm\infty) = 0$ , имеющие явный вид и зависящие от параметра скорости  $V$  и угла  $\theta$  ( $0 < \theta < \pi$ ).

Проблема устойчивости локализованных решений системы (19) долгое время оставалась открытой, хотя этому вопросу посвящено значительное число публикаций, начиная с конца семидесятых годов. С середины девяностых годов интерес к этому вопросу возрос в связи с развитием новых технологий передачи информации и исследованием соответствующих нелинейно-оптических моделей<sup>27</sup>. Ответ на него получен в работах [29, 20, 33], которые легли в основу данного раздела диссертации.

Для исследования устойчивости щелевых солитонов путем линеаризации исходной системы (19) формулируется задача на собственные значения для системы четырех дифференциальных уравнений первого порядка в комплексных переменных. Для численного исследования использовались следующие методы:

(1) Разложение решений по базису Фурье и решение полученной задачи на собственные значения с помощью стандартных программ из библиотеки EISPACK.

<sup>27</sup>C.M. de Sterke and J.E. Sipe, in: *Progress in Optics*, XXXIII, ed. E.Wolf, (Elsevier Science, Amsterdam, 1994), p.203; Yu.S. Kivshar, O.A. Chubykalo, O.V. Usatenko, and D.V. Grinyoff, *Int. J. Mod. Phys. A* 9 (1995) p.2963.

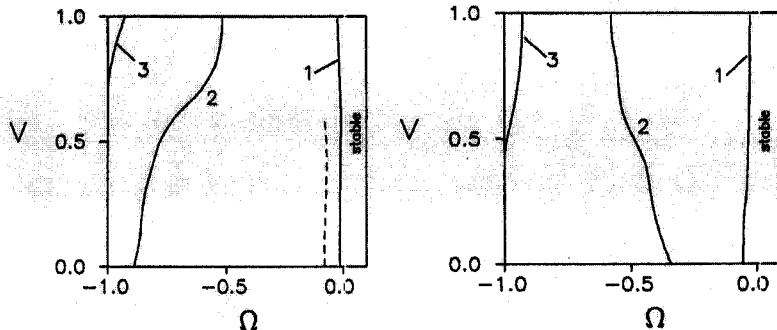


Рис.6. Диаграмма устойчивости для  $\rho = 1/2$  (слева) и  $\rho \rightarrow \infty$  (справа) на плоскости параметров  $(V, \Omega = \cos \theta)$ . Кривые 1, 2, 3 соответствуют появлению в дискретном спектре "неустойчивых" собственных значений с положительной мнимой частью. Штриховая линия - асимптотическая аппроксимация для первичной колебательной неустойчивости.

(2) Уточнение и продолжение по параметру наиболее интересных с точки зрения свойств устойчивости собственных значений. Для этой цели в диссертации разработан комплекс программ GAP-EV, в котором реализована, в рамках продолжения по параметру, ньютоновская итерационная схема с использованием конечно-разностной нумеровской аппроксимации четвертого порядка.

(3) Численное решение, с помощью ньютоновских итераций, нелинейной алгебраической системы, сформулированной в рамках теории возмущений, для анализа колебательной неустойчивости в определенной окрестности параметров.

В результате численного исследования построена диаграмма областей неустойчивости в полном диапазоне значений параметров модели (Рис.6). Показано, что полученные результаты согласуются с теоретическим анализом и результатами компьютерного моделирования, сделанного другими авторами для отдельных значений параметра.

В разделе 4.2 рассматривается решеточная модель нелинейного фарадеевского резонанса. В рамках этой модели формулируется нелинейное уравнение с параметрической накачкой и диссипацией для амплитуды осциллирующих объектов (осциллонов), экспериментально наблюдающихся в жидких и гранулированных средах. Уравнение имеет вид:

$$i\psi_t + \nabla^2\psi + 2|\psi|^2\psi - \psi = h\bar{\psi} - i\gamma\psi. \quad (20)$$

Здесь  $\gamma$  и  $h$  – соответственно коэффициент диссипации и амплитуда накачки.

Рассматриваются радиально симметричные локализованные решения (осциллоны) этого уравнения в двумерном и трехмерном случаях. Формулируются две линеаризованные задачи на собственные значения для исследования устойчивости радиально симметричных стационарных осциллонов к радиальным и азимутальным возмущениям амплитуды. Численное исследование проводилось с использованием комплекса OSCILLON, имеющего структуру, аналогичную CONTIN-NLIN.

В результате численного анализа [37] найдена область значений параметров, где двумерные осциллоны устойчивы, и построена соответствующая диаграмма. Показано, что трехмерные осциллоны всегда неустойчивы. Результаты численного анализа согласуются с теоретическими исследованиями в рамках вариационного подхода и с результатами прямого компьютерного моделирования исходного уравнения (20) в частных производных [25].

В Главе 5 "Численное исследование моделей бинуклона и кваркония" рассматриваются две квантово-полевые модели.

Первая из них, представленная в разделе 5.1, – квантово-полевая модель бинуклона в пределе сильной связи. Целью исследования была проверка применимости модели путем сравнения рассчитанных на ее основе физических характеристик с известными экспериментальными данными. Из условия минимума функционала энергии формулируется постановка задачи на собственные значения для нелинейной самосогласованной системы дифференциальных уравнений [16]:

$$\begin{cases} \Delta\varphi - \lambda\varphi + (V_1 + BV_3)\varphi = 0, \\ \Delta V_1 - k_1^2 V_1 = -|\varphi|^2, \\ \Delta V_3 - k_2^2 V_3 = -(\sigma\nabla_r)^2 |\varphi|^2, \end{cases} \quad (21)$$

где  $\sigma$  – единичный вектор,  $B$ ,  $k_1$ ,  $k_2$  – параметры модели. Решая систему (21) на классе функций  $\varphi(\vec{r})$ , ограниченных в области  $\Omega : 0 < |\vec{r}| < \infty$ , удовлетворяющих условию нормировки

$$\int_{\Omega} d\vec{r} |\varphi(\vec{r})|^2 = 1, \quad (22)$$

можно определить уровни энергии и волновые функции бинуклона. Для перехода от трехмерной постановки к одномерной используется разложение по двум базисам, а именно, сферическим функциям и цилиндрическим функциям Бесселя.

В разработанном комплексе программ DEUTERON для решения данной задачи при фиксированном наборе параметров применяется итерационный процесс, который представляет собой комбинацию метода последовательных приближений с ньютоновскими итерациями и сводится к последовательному решению задачи на собственные значения и краевой задачи для линейных систем дифференциальных уравнений.

Численное продолжение в области физически обоснованных значений параметров показало [1], что основные численные результаты согласуются с известными экспериментальными данными (радиус, квадрупольный момент, энергия связи); выявлены пути дальнейшего развития и уточнения модели.

В разделе 5.2 представлены результаты численного исследования релятивистского уравнения в рамках модели кваркония<sup>28</sup>, которое в сферически симметричном случае имеет вид задачи на собственные значения для интегрального уравнения в импульсном пространстве

$$[2\sqrt{p^2 + m^2} - (2m + E_{nl})]\phi_{nl}(p) = - \int_0^\infty dq V_l(p, q) \phi_{nl}(q), \quad (23)$$

$$V_l(p, q) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dx V(x) g_l(px) g_l(qx), \quad V(x) = \sigma x, \quad (24)$$

---

<sup>28</sup>R.H.Thompson, Phys. Rev. D 1 (1970) c.110.

$\sigma$  – параметр потенциала,  $g_l$  – функции Риккати – Бесселя,  $t$  – параметр модели,  $E_{nl}$  и  $\phi_{nl}$  определяют соответственно уровни энергии и волновые функции связанных состояний кварка и антикварка.

При численном исследовании подобных задач возникает ряд проблем, выходящих за рамки конкретной модели и связанных с особенностями их формулировки в импульсном представлении. В частности, использование кулоновского и линейного потенциалов, считающихся реалистичными в релятивистских моделях связанных состояний кварков, приводит к расходимостям в соответствующих математических постановках. Один из способов решения этой проблемы – использование аппроксимирующих функций, которые обеспечивают корректную математическую постановку задачи. На примере нерелятивистского уравнения Шредингера были проведены расчеты для ряда функций, которые типично используются для аппроксимации кулоновского и линейного потенциалов. Результаты этого исследования были использованы в численном исследовании задачи (23) [5]. Получены приближенные оценки релятивистской поправки к спектру, которые позволяют, не решая уравнение, определить влияние релятивистских эффектов на изменение спектра уравнения в зависимости от параметра модели. Представлены сравнительные расчеты с теоретическими результатами других авторов.<sup>29</sup>

Глава 6 "Численное моделирование ядерных взаимодействий в рамках высокогенеретического приближения" посвящена численному моделированию характеристик ядро-ядерных и электрон-ядерных взаимодействий на основе высокогенеретического приближения (ВЭП).

Движение налетающего ядра с кинетической энергией  $E$  в поле комплексного ядро-ядерного потенциала  $U$  описывается волновым уравнением Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (E - U)\Psi = 0. \quad (25)$$

Здесь  $m$  – приведенная масса,  $\Psi(\vec{r})$  – волновая функция относительного движения ядер,  $\hbar$  – постоянная Планка. В микроскопических моделях потенциал  $U$  зависит от  $\Psi$ , и задача является нелинейной.

В рамках высокогенеретического приближения (ВЭП), когда  $E \gg |U|$  и движение налетающего ядра близко к свободному, решение  $\Psi$  аппроксимируется с использованием функций специального вида, называемых эйкональными. Это позволяет получить аналитические выражения для дифференциального сечения упругого ядро-ядерного рассеяния и полного сечения реакции

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(q)|^2, \quad \sigma_r = 2\pi \int_0^\infty db b \left[ 1 - e^{-2i\text{Im}\Phi(b)} \right], \quad (26)$$

где амплитуда упругого рассеяния  $f(q)$  и фаза  $\Phi(b)$  имеют вид

$$f(q) = ik \int_0^\infty db b J_0(qb) \left[ 1 - e^{i\Phi(b)} \right], \quad \Phi(b) = -\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^\infty dz U(\sqrt{b^2 + z^2}). \quad (27)$$

Здесь  $q = 2k \sin(\theta/2)$  – переданный импульс,  $\theta$  – угол рассеяния,  $k$  – импульс,  $v$  – скорость падающего ядра,  $J_0$  – цилиндрическая функция Бесселя,  $U(r) = U_c(r) +$

<sup>29</sup>K.H.Maung, D.E.Kahana and J.W.Norbury, Phys. Rev. D **47** 3 (1993) p.1183.

$U_N(r)$  – потенциал, включающий кулоновскую  $U_c(r)$  и ядерную  $U_N(r) = V(r) + iW(r)$  составляющие.

Таким образом, расчет основных физических характеристик сводится либо к численному решению уравнения (25), либо к численному или аналитическому интегрированию выражений (27), конкретная форма которых зависит от способа построения потенциала  $U$ .

Модель на основе высокоэнергетического приближения с использованием полученных в диссертации приближенных аналитических выражений, понижающих размерность исходных интегралов и существенно упрощающих расчеты, реализована в комплексе программ НЕА-CRS и НЕА-TOTAL. Проведенное численное исследование подтвердило применимость данного подхода для моделирования ядерно-ядерных взаимодействий при энергиях от 10 до 100 МэВ на нуклон налетающего ядра.

В разделе 6.1 предложен приближенный аналитический метод [32], на основе которого получено явное выражение для фазы  $\Phi(b)$  для типичного в ядерной физике феноменологического потенциала в симметризованной форме Вудса – Саксона

$$U_N(r) = (V_0 + iW_0)u_{sf}, \quad u_{sf} = \frac{\sinh(R/a)}{\cosh(R/a) + \cosh(r/a)} \quad (28)$$

с заданными параметрами  $R$  и  $a$ . Путем замены типичных интегралов специально подогнанными параметрическими выражениями получены явные выражения для дифференциального сечения упругого рассеяния с учетом кулоновского искажения траектории. Показано, что полученные в данном подходе численные результаты согласуются, в области применимости ВЭП, с расчетами на основе численного интегрирования исходного уравнения (25), а также с экспериментальными результатами в широком диапазоне значений атомных масс и энергий.

Раздел 6.2 посвящен расчету полных сечений реакций. В рамках микроскопического подхода мнимая часть ядерной фазы  $\Phi_N(b)$  в формуле (26) определяется как [14, 15]

$$\text{Im}\Phi_N(b) = \frac{\bar{\sigma}_{NN}}{2} \int_0^\infty dq q J_0(qb) \tilde{\rho}_p^o(q) \tilde{\rho}_t^o(q) f_N(q). \quad (29)$$

Здесь  $\tilde{\rho}_i^o(q)$ , ( $i = p, t$ ) – фурье-образы точечных плотностей сталкивающихся ядер,  $f_N(q) = \exp(-q^2 r_0^2/6)$ ,  $r_0 = \sqrt{0.658}$  фм,  $\bar{\sigma}_{NN}$  – известная величина<sup>30</sup>. Показано, что при использовании реалистичной плотности распределения ядерной материи в виде симметризованной ферми-функции

$$\rho_{SF}(r) = \rho(0)u_{SF}(r), \quad \rho(0) = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi R^3} [1 + (\pi a/R)^2]^{-1}, \quad (30)$$

с известными из независимых экспериментов параметрами  $a$  и  $R$  разработанный подход обеспечивает адекватное описание экспериментальных данных по полным сечениям и не требует введения свободных параметров (Рис.7). При этом соответствующие фурье-образы можно получить в явном виде.

С целью проверки применимости данной модели выполнены также расчеты полных сечений реакций легких ядер  $^{6,8}\text{He}$  с избыtkом нейтронов на периферии со стабильным ядром  $^{28}\text{Si}$  (Рис.8) [43].

<sup>30</sup> Charagi S. and Gupta G. Phys. Rev. C 41 (1990) p.1610.

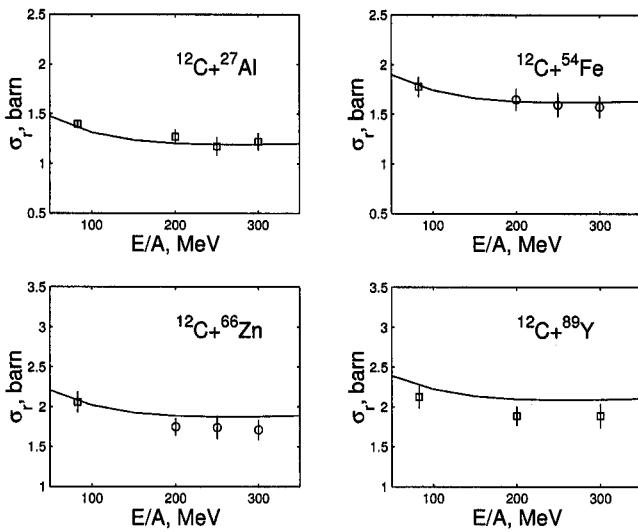


Рис.7. Сравнение расчетов полных сечений с экспериментальными данными из работы Кох S. et al. Phys. Rev. C 35 (1987) 1678. В качестве функций распределения плотностей ядер взяты известные данные анализа экспериментов по  $eA$ -рассеянию.

Раздел 6.3 посвящен методам восстановления ядро-ядерного потенциала в рамках ВЭП. В частности, мнимая часть потенциала  $W(r)$  в рамках микроскопического подхода восстанавливается из фазы (29) и имеет вид

$$W(r) = -\frac{E}{2k\pi^2} \bar{\sigma}_{NN} \int_0^\infty dq q^2 j_0(qb) \tilde{\rho}_p^o(q) \tilde{\rho}_t^o(q) f(q). \quad (31)$$

Вещественная часть потенциала может определяться по формуле  $V = \bar{\alpha}_{NN} W$ , где  $\bar{\alpha}_{NN}$  – известная величина<sup>31</sup>.

Таким образом, построенный микроскопический комплексный потенциал не содержит свободных параметров, и, как показывают расчеты, удовлетворительно описывает данные экспериментов по дифференциальным сечениям упругого рассеяния тяжелых ионов (Рис. 9) и по полным сечениям реакций.

Раздел 6.4 посвящен расчету формфакторов ядра  $^{12}\text{C}$  в альфа-кластерной модели. Рассчитанные в рамках микроскопического подхода на основе ВЭП формфакторы сравниваются как с данными экспериментов, так и с расчетами на основе численного решения системы уравнений Дирака. В последнем случае расчет формфакторов сводится к численному интегрированию системы дифференциальных уравнений на радиальные функции  $F_j$  и  $G_j$  с заданной асимптотикой

$$\frac{dG_j}{dx} - \frac{j + \frac{1}{2}}{x} G_j + \left[ 1 - \frac{V(x/E)}{E} \right] F_j = 0, \quad (32)$$

$$\frac{dF_j}{dx} - \frac{j + \frac{1}{2}}{x} F_j - \left[ 1 - \frac{V(x/E)}{E} \right] G_j = 0, \quad (33)$$

<sup>31</sup>P. Shukla. arXiv: nucl-th/0112039, 2001.

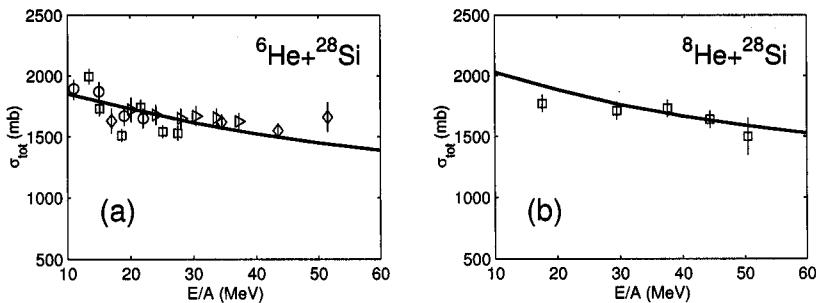


Рис.8. Полные сечения реакций  $^{6,8}\text{He}+^{28}\text{Si}$ . Функции распределения плотности протонов и нейтронов взяты из работы [43] (сплошная) и из работы I.Taniihata et al. Phys. Lett. B 289 (1992) 261 (пунктир).

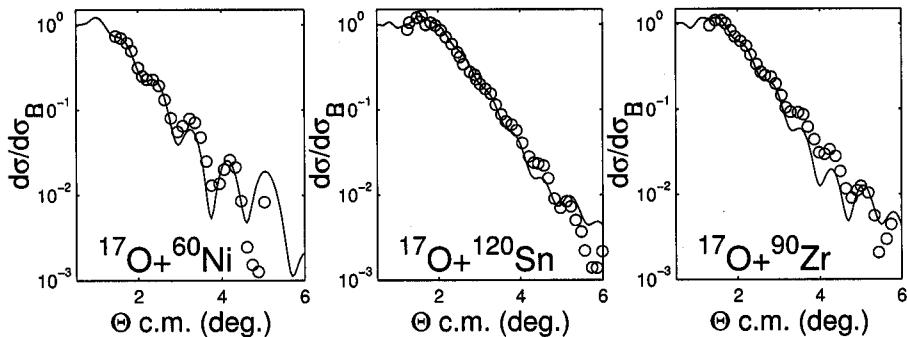


Рис.9. Сравнение дифференциальных сечений упругого рассеяния, рассчитанных в рамках ВЭП, с экспериментальными данными из работы R.Liquori Neto et al. Nucl. Phys. A560 (1993) 733.  $E_{lab}=1435$  МэВ.

где  $E$  – энергия налетающей частицы,  $V$  – заданный потенциал,  $0 \leq j \leq 50$ . Численное решение этой задачи реализовано в комплексе DIRAC. Расчеты проводились на мультипроцессорном компьютере SPP-2000. Для организации расчетов в параллельном режиме использовалась технология Message Passing Interface (MPI).

В ЗАКЛЮЧЕНИИ сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

### 3 Основные результаты, полученные в диссертации

В диссертации решена важная научно-практическая задача по разработке методов продолжения по параметрам и комплексов программ для численного исследования многопараметрических процессов, описываемых нелинейными граничными и спектральными задачами в форме систем дифференциальных и интегральных уравнений.

**Эффективность созданных методов и комплексов программ подтверждена успешным численным исследованием с их помощью ряда актуальных математических моделей из различных разделов теоретической физики и получением в рамках этих моделей новых значимых результатов.**

**Основные результаты диссертации следующие.**

**I.** Разработаны эффективные вычислительные схемы, реализующие концепцию объединения новых схем продолжения по параметрам с итерациями на основе обобщения непрерывного аналога метода Ньютона: (1) схема продолжения по параметру в точках поворота и (2) схема продолжения на плоскости двух параметров с одновременным вычислением одного из них. Предложенные алгоритмы существенно расширяют возможности численного исследования, открывая возможность выхода на новые ветви решений в точках поворота и обеспечивая при этом устойчивую сходимость ньютоновских итераций и высокую скорость численного продолжения.

**II.** На основе развитых схем созданы проблемно-ориентированные комплексы программ, с помощью которых успешно выполнено численное исследование ряда нелинейных многопараметрических процессов, описываемых волновыми уравнениями.

**III.** С использованием разработанных методов и комплексов программ получены следующие результаты.

1. Проведено численное исследование солитонных решений нелинейного уравнения Шрёдингера с диссиляцией и накачкой в широком диапазоне значений параметров.
  - (а) Для рассматриваемых уравнений впервые, и только за счет применения разработанных вычислительных методов и программ, получены новые классы решений: многосолитонные комплексы; солитоны, движущиеся с ненулевой постоянной скоростью; движущиеся диссилятивные структуры. Построены диаграммы областей их существования и устойчивости.
  - (б) Для темных солитонов с параметрической накачкой впервые обнаружен эффект "мультистабильности" – существование двух типов устойчивых темных солитонов и их устойчивых связанных состояний.
2. Выполнен численный анализ устойчивости щелевых солитонов в модели оптического волокна с периодически меняющимся показателем преломления. Впервые найдены области значений параметров, где эти решения неустойчивы. Построена диаграмма устойчивости в полном диапазоне значений параметров.
3. Проведено численное исследование двух- и трехмерных осциллонов в модели нелинейного фарадеевского резонанса. В двумерном случае найден диапазон значений параметров, при которых могут возникать локализованные осциллирующие структуры, устойчивые как к радиальным, так и к азимутальным возмущениям. Показано, что трехмерные осциллоны рассматриваемого уравнения всегда неустойчивы.
4. Впервые выполнено численное исследование квантово-полевой модели бинуклона в пределе сильной связи. Найдены параметры, обеспечивающие количественное описание основных физических характеристик бинуклона.
5. Проведено численное исследование релятивистского обобщения уравнения Шрёдингера в модели связанных состояний кварков. Получены параметры функций, с заданной точностью аппроксимирующих реалистичные потенциалы (линейный и кулоновский) в релятивистских моделях кваркония.

6. Проведено численное исследование модели ядерных взаимодействий в рамках высокогенергетического подхода при промежуточных энергиях.
  - (а) Показано, что данный подход без применения процедуры подгонки адекватно описывает экспериментальные данные в широком диапазоне ядер при энергиях от 10 до 100 МэВ на нуклон падающего ядра.
  - (б) Показано, что разработанный подход может быть адаптирован для моделирования взаимодействия нейтронизбыточных изотопов легких ядер со стабильными ядрами.
  - (в) Проведено численное исследование альфа-кластерной модели ядра  $^{12}\text{C}$ ; показано, что данная модель описывает экспериментальные данные по формфакторам для основного и возбужденных состояний ядра и, в области применимости, согласуется с результатами численного решения соответствующей системы уравнений Дирака.

**IV.** Разработанные вычислительные схемы и программы используются для решения других задач, возникающих в современных моделях сложных физических систем. Комплексы программ, представляющие интерес для широкого круга пользователей (CONTIN-NLIN, PROGS2H4, PROGON4, MATPROG(CMATPROG), HEA-CRS и HEA-TOTAL), переданы в библиотеку JINRLIB и доступны через интернет.

## Основные публикации по теме диссертации

- [1] Амирханов И.В., Земляная Е.В., Лахно В.Д., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. Численное исследование квантовополевой модели бинуклона сильной связи. Математическое моделирование, Т.9, вып.8, 1997, сс.51-59.
- [2] Пузынин И.В., Амирханов И.В., Земляная Е.В., Первушин В.Н., Пузынина Т.П., Стриж Т.А., Лахно В.Д. Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых нелинейных квантовополевых моделей. ЭЧАЯ, Т.30, вып.1, 1999, сс.210-265.
- [3] Земляная Е.В., Баращенков И.В. Численное исследование многосолитонных комплексов в нелинейном уравнении Шредингера с диссипацией и накачкой. Математическое моделирование, Т.16, вып.10, 2004, сс.3-14.
- [4] Земляная Е.В., Баращенков И.В. Численный анализ движущихся солитонов в нелинейном уравнении Шредингера с параметрической накачкой и диссипацией. Математическое моделирование, Т.17, вып.1, 2005, сс.65-78.
- [5] Амирханов И.В., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Стриж Т.А. О некоторых проблемах численного исследования задач на собственные значения в импульсном представлении. Математическое моделирование, Т.9, вып.10, 1997, сс.111-119.
- [6] Земляная Е.В., Лукьянов В.К., Пермяков В.П., Чубов Ю.В. Моделирование ядерных искаженных волн в задачах рассеяния тяжелых ионов. Изв. РАН, сер. физ., Т.61, вып.1, 1997, сс.132-138.
- [7] Ембулаев А.И., Земляная Е.В., Лукьянов В.К., Пермяков В.П., Чубов Ю.В. Изучение упругого рассеяния при промежуточных энергиях в высокогенергетическом приближении. Изв. РАН, сер. физ., Т.62, вып.11, 1998, сс.2136-2146.

- [8] Лукьянин В.К., Земляная Е.В., Кадрев Д.Н., Антонов А.Н., Спасова К., Анагностатос Г.С., Гинис П., Гияпидзакис Я. Структура альфа-кластеров и зарядовые формфакторы ядра  $^{12}\text{C}$ . Изв. РАН, сер. физ., Т.64, вып.5, 2000, сс.851-861.
- [9] Лукьянин В.К., Словинский Б., Земляная Е.В. О роли ядерной поверхности в формировании полного сечения ядро-ядерных реакций. ЯФ, Т.64, вып.7, 2001, сс.1349-1357.
- [10] Шебеко А.В., Земляная Е.В. Диракционное рассеяние в модели Эриксона для S-матрицы. ЯФ, Т.65, вып.8, 2002, сс.1479-1490.
- [11] Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V., Kadrev D.N., Antonov A.N., Spasova K., Anagnostatos G.S., Giapitzakis J. Role of the coulomb distortion in form-factor calculations for  $^{12}\text{C}$  accounting for the alpha-claster and nucleon-nucleon correlations. Письма в ЭЧАЯ, Т.2, вып.111, 2002, сс.5-12.
- [12] Лукьянин В.К., Земляная Е.В., Словинский Б., Ханна К. Подход Глаубера-Ситенко к рассеянию ядер с реалистическими плотностями и метод восстановления оптического потенциала. Изв. РАН, сер. физ., Т.67, вып.1, 2003, сс.55-61.
- [13] Лукьянин В.К., Земляная Е.В., Кадрев Д.Н., Антонов А.Н., Спасова К., Анагностатос Г.С., Гияпиззакис Я. Роль кулоновского искажения в расчетах формфактора ядра  $^{12}\text{C}$  с учетом альфа-кластеризации и нуклон-нуклонных корреляций . Изв. РАН, сер. физ., Т.67, вып.5, 2003, сс.717-721.
- [14] Лукьянин В.К., Земляная Е.В., Словинский Б. Полные сечения ядро-ядерных реакций в подходе Глаубера-Ситенко для реалистических распределений ядерной материи. ЯФ, Т.67, Вып.7, 2004, сс.1306-1321.
- [15] Лукьянин В.К., Земляная Е.В., Словинский Б. Расчет полных сечений ядро-ядерных реакций с использованием реалистических распределений ядерных плотностей. Изв. РАН, сер. физ., Т.68, вып.2, 2004, сс.163-167.
- [16] Amirkhanov I.V., Lakhno V.D., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V. Quantumfield model of strong-coupling binucleon. Proc: III International Symposium "Deuteron 95" (Dubna, 1995) E2-96-100, Dubna: JINR, 1996, pp.58-63.
- [17] Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V., Lakhno V.D. Numerical investigation of quantumfield model for strong-coupled binucleon. Proc: Int. Workshop "Autolocalized electron states in ordered and disordered systems" (Puschino, 1994) In: "Perspectives of Polarons" Ed. by G.N.Chuev and V.D.Lakhno, Singapore: World Sci., 1996, pp.229-250.
- [18] Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V., Lakhno V.D. Numerical study of quantumfield binucleon model. Proc: 9th International Conference "Computational Modelling and Computing in Physics" (Dubna, 1996) Ed. by E.P.Zhidkov, A.V.Fedorov and R.R.Shahbaghyan, D5,11-97-112, Dubna: JINR, 1997, pp.48-54.
- [19] Amirkhanov I.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V. On some problems of numerical investigation of eigenvalue problems in momentum space. Proc: 9th International Conference "Computational Modelling and Computing in Physics" (Dubna, 1996) Ed. by E.P.Zhidkov, A.V.Fedorov and R.R.Shahbaghyan, D5,11-97-112, Dubna: JINR, 1997, pp.40-47.

- [20] Barashenkov I.V., Pelinovsky D.E., Zemlyanaya E.V. Stability of Gap Solitons. Proc: 22nd Symposium of South African Society for Numerical Mathematics SANUM'98 (Cape Town, 1998), Cape Town: Natal Press, 1998, pp.88-99.
- [21] Chubov Yu.V., Lukyanov V.K., Permyakov V.P., Zemlyanaya E.V. Calculation of elastic scattering cross sections of heavy ions on nuclei at intermediate energies in the high-energy approximation. Proc: VI International School-Seminar on Heavy Ion Physics (Dubna, 1997) Ed. by Yu.Ts.Oganessian and R.Kalpakchieva, Singapore: World sci., 1998, pp.376-378.
- [22] Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V., Embulaev A.V. High-energy approximation for nucleus-nucleus scattering. Proc.: 2nd Conference on Nuclear and Particle Physics NUPPAC'99 (Cairo, 1999) Ed. by M.N.H.Comsan, K.M.Hanna, Cairo: Egypt Press, 2000, pp.180-187.
- [23] Hanna K.M., Lukyanov V.K., Slowinski B., Zemlyanaya E.V. On restoration of the optical potential at intermediate energies. Proc: 3rd Conference on Nuclear and Particle Physics NUPPAC'01 (Cairo, 1999) Ed. by M.N.H.Comsan, K.M.Hanna, Cairo: Egypt Press, 2002, pp.89-95.
- [24] Hanna K.M., Lukyanov V.K., Slowinski B., Zemlyanaya E.V. New method for nucleus-nucleus optical potential restoration at intermediate energies. Proc: XVI International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems (Dudna, 2002) In: "Relativistic Nuclear Physics and Quantum Chromodynamics" Ed. by A.N.Sissakian, V.V.Burov, A.I.Malakhov, Vol.1, Dubna: JINR, 2004, pp.307-314.
- [25] Alexeeva N.V., Zemlyanaya E.V. Nodal two-dimensional solitons in nonlinear parametric resonance. Proc: III Workshop on Numerical Analysis and Application (Rousse, Bulgaria, 2004) In: Lect. Notes in Comp. Sciences Ed. by Z. Li et al., Vol.3401, 2005, Berlin: Springer, pp.91-98.
- [26] Zemlyanaya E.V., Barashenkov I.V., Woodford S.R. Parametrically Driven Dark Solitons: a Numerical Study. Proc: III Workshop on Numerical Analysis and Application (Rousse, Bulgaria, 2004) In: Lect. Notes in Comp. Sciences Ed. by Z. Li et al., Vol.3401, 2005, Berlin: Springer, pp.590-598.
- [27] Arbuzov A.B., Astakhov V.A., Kuraev E.A., Merenkov N.P., Trentadue L., Zemlyanaya E.V. Emission of two hard protons in large-angle Bhabha Scattering. Nucl. Phys. B 483, 1997, pp.83-94.
- [28] Dimitrova S.S., Gaidarov M.K., Antonov A.N., Stoitsov M.V., Hodgson P.E., Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V., Krumova G.Z. One-nucleon removal reactions as a test of overlap functions from the one-body density matrix calculations. J. Phys. G 23, 1997, pp.1685-1695.
- [29] Barashenkov I.V., Pelinovsky D.E., Zemlyanaya E.V. Vibrations and oscillatory instabilities of gap solitons. Phys. Rev. Lett., Vol.80, 1998, pp.5117-5120.
- [30] Barashenkov I.V., Zemlyanaya E.V. Stable complexes of parametrically driven, damped Nonlinear Schrödinger solitons. Phys. Rev. Lett., Vol.83, 1999, pp.2568-2571.
- [31] Barashenkov I.V., Zemlyanaya E.V. Existence threshold for the ac-driven nonlinear Schrödinger solitons. Physica D, Vol.132, No.3, 1999, pp.363-373.
- [32] Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V. Eikonal phase for the symmetrized Woods-Saxon potential and its use for heavy ion scattering. J. Phys. G, Vol.26, No.4, 2000, pp.357-363.

- [33] Barashenkov I.V., Zemlyanaya E.V. Oscillatory instabilities of gap solitons: a numerical study. Proc: 1st Int. Conf. "Modern Trends in Computational Physics" (Dubna, 1998); Comp. Phys. Comm., Vol.126, No.1-2, 2000, pp.22-27.
- [34] Amirkhanov I.V., Machavariani A.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P., Strizh T.A., Zemlyanaya E.V. Numerical solution of two-body relativistic equations for the bound-state problem with confining and Coulomb potentials. Proc: 1st Int. Conf. "Modern Trends in Computational Physics" (Dubna, 1998); Comp. Phys. Comm., Vol.126, No.1-2, 2000, pp.16-21.
- [35] Barashenkov I.V., Zemlyanaya E.V., Bär M. Travelling solitons in the parametrically driven nonlinear Schrödinger equation. Phys. Rev. E, Vol.64, 2001, pp.016603(1-11).
- [36] Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V. High-Energy Approximation for Nucleus-Nucleus Scattering. Int. J. Mod. Phys. E, Vol.10, No.3, 2001, pp.163-183.
- [37] Barashenkov I.V., Alexeeva N.V., Zemlyanaya E.V. Two- and three-dimensional oscillons in nonlinear Faraday resonance. Phys. Rev. Lett., Vol.89, 2002, pp.104101(1-4).
- [38] Bartos E., Dubnickova A.-Z., Dubnicka S., Kuraev E.A., Zemlyanaya E.V. Scalar and pseudoscalar meson pole terms in the hadronic light-by-light contributions to  $a_\mu^{had}$ . Nucl. Phys. B, Vol.332, 2002, pp.330-342.
- [39] Barashenkov I.V., Woodford S.R., Zemlyanaya E.V. Parametrically driven dark solitons. Phys. Rev. Lett., Vol.90, No.5, 2003, pp.054103(1-4).
- [40] Barashenkov I.V., Woodford S.R., Zemlyanaya E.V. Dark solitons in parametrically driven NLS. Progress of Theoretical Physics Supplement, No.150, 2003, pp.317-320.
- [41] Ahmedov A., Antonov E.N., Bartos E., Kuraev E.A., Zemlyanaya E.V. Single-spin asymmetry in pion production in polarized proton-proton collisions and odderon. J.Phys.G, Vol. 29, No.3, 2003, pp.521-529.
- [42] Barashenkov I.V., Zemlyanaya E.V. Travelling solitons in the damped driven nonlinear Schrödinger equation. SIAM Journal of Applied Mathematics, Vol.64, No.3, 2004, pp.800-818.
- [43] Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V., Massen S.E., Moustakidis Ch.C., Antonov A.N., Krumova G.Z. Testing  $^{6,8}\text{He}$  density distributions by calculations of total reaction cross-sections of  $^{6,8}\text{He} + ^{28}\text{Si}$ . Int. J. Mod. Phys. E, Vol.13, No.3, 2004, pp.573-584.
- [44] Chubov Yu.V., Embulaev A.V., Lukyanov V.K., Permyakov V.P., Zemlyanaya E.V. Study of semi-classical scattering in a Woods-Saxon potential within the high-energy approximation. JINR Communication E7-97-271, Dubna, 1997, 9c.
- [45] Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. PROGS2H4 – программа для решения краевой задачи для системы дифференциальных уравнений. Сообщение ОИЯИ Р11-97-414, Дубна, 1997, 15с.
- [46] Лукьянов В.К., Земляная Е.В., Ембулаев А.В. Высокоэнергетическое приближение в задачах ядро-ядерного рассеяния. В сборнике "Проблемы современной физики. К 90-летию Саратовского Государственного Университета и 40-летию сотрудничества ОИЯИ-СГУ". Дубна: D2-99-263, 1999, сс.265-272.
- [47] Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V., Kadrev D.N., Antonov A.N., Spasova K., Anagnostatos G.S., Ginis P., Giapitzakis J. Charge form factors and alpha-claster internal structure of  $^{12}\text{C}$ . В сборнике: "Современные проблемы физики ядра и частиц. Памяти Р.А.Эрамжяна." (под ред. В.А.Матвеева) ИАЕ РАН, 1999, pp.137-145.

**Отпечатано методом прямого репродуцирования  
с оригинала, предоставленного автором.**

**Макет *T. E. Попеко***

**Подписано в печать 29.07.2005.**

**Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.  
Усл. печ. л. 2,18. Уч.-изд. л. 3,08. Тираж 100 экз. Заказ № 54976.**

**Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.**

**E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)  
[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)**