УДК 517.9

Світлана Майданюк,
студентка факультету математики, фізики
і комп'ютерних наук
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського

МЕТОДИКА ПОБУДОВИ ДИСКРЕТНИХ АНАЛОГІВ РІВНЯННЯ КЛЕЙНА-ҐОРДОНА

Анотація. *У статті розглянуто методику побудови дискретних аналогів рівняння Клейна-Ґордона, які наслідують трансляційну інваріантність континуального рівняння і не мають потенціал Паєрлса-Набарро.*

Ключові слова: *дискретизація, Гамільтоніан, потенціал Паєрлса-Набарро.*

Abstract. *The article discusses the method of constructing discrete analogues of the Klein-Gordon equation, which imitate the translational invariance of the continuum equation and do not have the Peierls-Nabarro potential.*

Keywords: *discretization, Hamiltonian, Peierls-Nabarro potential.*

Розглянемо методику побудови дискретних аналогів рівняння Клейна-Ґордона, які наслідують трансляційну інваріантність континуального рівняння і не мають потенціал Паєрлса-Набарро. Для цього використаємо дискретизований перший інтеграл статичного континуального рівняння [4].

Отож, континуальний Гамільтоніан Клейна-Ґордона,

$$H = E_k + E_p,$$

буде задаватися наступними функціоналами кінетичної енергії

$$E_k = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_t^2 dx \tag{1}$$

та потенціальної енергії

$$E_p = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\phi_x^2 + 2V(\phi)\right] dx, \tag{2}$$

де $\phi(x,t) -$ це невідома функція просторової та тимчасової координат;

$V(\phi)-$ це заданий потенціал.

Тоді, відповідне рівняння руху матиме наступний вигляд:

$$\phi_{tt}=\phi_{xx}-V'(\phi)\equiv D\big(\phi(x;t)\big), \tag{3}$$

де $V'(\phi)=\dfrac{dV}{d\phi}$.

Рівняння (3) буде дискретизовано на ґратці $x=nh$, де $n=0,\pm1,\pm2,...$ та $h>0-$ це параметр ґратки.

Оскільки ми розглядаємо метод, який базується на застосуванні дискретизованого першого інтеграла, то випишемо перший інтеграл статичного рівняння (3):

$$U(x)\equiv\phi_x^2-2V(\phi)+C=0, \tag{4}$$

де $C-$ це стала інтегрування. Перший інтеграл може бути і в модифікованій формі, тобто:

$$\nu(x)\equiv p\Big[g\big(\phi_x^2\big)-g\big(2V-C\big)\Big]=0, \tag{5}$$

де p та $g-$ це деякі неперервні функції, а також $p(0)=0$.

Розглянемо випадок $p(\xi)=\xi,\ p(\xi)=\xi$, тобто немодифікований перший інтеграл, і, крім того, випадок $p(\xi)=\xi,\ p(\xi)=\sqrt{\xi}$, для якого будемо мати

$$\nu(x)\equiv\pm\phi_x-\sqrt{2V(\phi)-C}=0. \tag{6}$$

Побудуємо дискретизовані перші інтеграли, які відповідають рівнянням (4) та (6):

$$U\big(h,\phi_{n-1},\phi_n\big)\equiv\frac{1}{h^2}\left(\phi_n-\phi_{n-1}\right)^2-2V\big(\phi_{n-1},\phi_n\big)+C=0, \tag{7}$$

$$\nu\big(h,\phi_{n-1},\phi_n\big)\equiv\pm\frac{1}{h}\left(\phi_n-\phi_{n-1}\right)-\sqrt{2V\big(\phi_{n-1},\phi_n\big)-C}=0, \tag{8}$$

де ми припускаємо, що в континуальній границі $V\big(\phi_{n-1},\phi_n\big)\to V(\phi)$.

Для того, щоб побудувати дискретизації, які зберігають імпульс, порахуємо $\frac{dU}{dx}$ та помножимо результат на $\frac{1}{2}\frac{dx}{d\phi}$. В результаті отримаємо

$$\frac{1}{2}\frac{dU}{d\phi}=D\left(\phi(x)\right). \tag{9}$$

Дискретизуючи ліву частину рівності (9), перейдемо до дискретизації рівняння Клейна-Ґордона (3), яка матиме наступний вигляд:

$$\ddot{\phi}_n=\frac{U\left(h,\phi_n,\phi_{n+1}\right)-U\left(h,\phi_{n-1},\phi_n\right)}{\phi_{n+1}-\phi_{n-1}}, \tag{10}$$

де статичні розв'язки, можуть бути знайдені із двоточкового рівняння (7). Оскільки статична різницева задача (10) зводиться до різницевого рівняння першого порядку (7), то її розв'язки можуть бути отримані рекурентно, якщо розв'язати алгебричне рівняння вигляду (7), починаючи з будь-якого допустимого початкового значення ϕ_0. Можливість вибрати будь-яке початкове значення ϕ_0 дає нам, у свою чергу, можливість довільного розміщення рівноважних когерентних структур відносно решітки, або, інакше кажучи, означає відсутність потенціалу Паєрлса-Набарро. Потрібно відзначити, що зазвичай дискретні системи володіють потенціалом Паєрлса-Набарро та допускають лише дискретний набір рівноважних станів. Ці стани відповідають екстремумам даного потенціалу. Крім того, в трансляційних інваріантних дискретизаціях є континуальна множина рівноважних станів. Також відмітимо, що стала інтегрування C, яка входить в рівність (7), скоротиться в кінцевій трьохточковій дискретизації (10). Звідки, всі статичні розв'язки рівняння (7), які ми отримаємо для будь-яких значеннях C, будуть розв'язками одного і того ж трьохточкового рівняння (10), оскільки дане рівняння не буде залежати від значення C. Також, варто зауважити, що дискретизація вигляду (10) вперше була побудована Кеврекидисом [3]. Ним було показано, що модель вигляду (10) зберігає імпульс

$$P = \sum_n \dot{\phi}_n \left(\phi_{n+1} - \phi_{n-1}\right). \tag{11}$$

Для того, щоб побудувати дискретизації, які мають Гамільтоніан, надалі будемо дискретизувати Гамільтоніан (1), (2), а не рівняння руху (3). Для цього використаємо модифікований перший інтеграл у формі (8), де візьмемо саме верхній знак. Перепишемо функціонал потенціальної енергії вигляду (2) із врахуванням рівності (8). В результаті отримаємо:

$$E_p = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\left[\nu(x)\right]^2 + 2\phi_x\sqrt{2V(\phi) - C}\right\}dx, \tag{12}$$

де буде відкинутий неіснуюча стала. Коли ми дискретизуємо кінетичну енергію (1) та потенціальну енергію (12), то отримуємо дискретний Гамільтоніан вигляду:

$$H = \frac{1}{2}\sum_n\left\{\dot{\phi}_n + \left[\nu\left(h,\phi_{n-1},\phi_n\right)\right]^2 + \frac{2}{h}(\phi_n - \phi_{n-1})\sqrt{2V\left(\phi_{n-1},\phi_n\right) - C}\right\}. \tag{13}$$

Якщо потенціал дискретизувати так, як запропонував Шпейт [5-6]

$$\sqrt{2V\left(\phi_{n-1},\phi_n\right) - C} = \frac{G\left(\phi_n\right) - G\left(\phi_{n-1}\right)}{\phi_n - \phi_{n-1}},$$

$$G'(\phi) = \sqrt{2V(\phi) - C}, \tag{14}$$

то останній член Гамільтоніана (13) буде зводитися до

$$\left(\frac{2}{h}\right)\left[G(\phi_n) - G(\phi_{n-1})\right]$$

і він зникне під час телескопічної суми. Врахувавши рівність (14), дискретизований перший інтеграл вигляду (8) набуде наступного вигляду:

$$\varsigma\left(h,\phi_{n-1},\phi_n\right) \equiv \pm\frac{1}{h}(\phi_n - \phi_{n-1}) - \frac{G(\phi_n) - G(\phi_{n-1})}{\phi_n - \phi_{n-1}} = 0, \tag{15}$$

де Гамільтоніан (13) має вигляд:

$$\eta = \frac{1}{2}\sum_n\left\{\dot{\phi}_n^2 + \left[\varsigma\left(h,\phi_{n-1},\phi_n\right)\right]^2\right\}, \tag{16}$$

і відповідні рівняння руху наберуть наступного вигляду:

$$\ddot{\phi}_n = -\varsigma\left(h,\phi_{n-1},\phi_n\right)\frac{\partial}{\partial\phi_n}\varsigma\left(h,\phi_{n-1},\phi_n\right) - \varsigma\left(h,\phi_n,\phi_{n+1}\right)\frac{\partial}{\partial\phi_n}\xi\left(h,\phi_n,\phi_{n+1}\right), \tag{17}$$

звідки бачимо, що статичні розв'язки моделі вигляду (17) можна знайти з двохточкового дискретизованого першого інтеграла (15). Тому дана модель вільна від потенціалу Паєрлса-Набарро.

На відміну від моделей вигляду (10), які зберігають імпульс, Гамільтонова модель вигляду (17) містить сталу інтегрування C через функцію G [4].

Зауважимо, що важливими класами розв'язків дискретних рівнянь типу Клейна-Ґордона є біжучі і стоячі хвилі, достатні умови існування яких встановлено в працях [7-10].

Література:

1. Dmitriev S.V., Kevrekidis P.G., Yoshikawa N., Frantzeskakis D.J. Exact static solutions for discrete φ4 models free of the Peierls–Nabarro barrier: Discretized first–integral approach. Phys. Rev. E. 2006. V.74. P. 046609-046623.
2. Dmitriev S.V., Kevrekidis P.G., Yoshikawa N. Standard nearest neighbor discretizations of Klein–Gordon models cannot preserve both energy and linear momentum. J. Phys. A: Math. Gen. 2006. V.39. P. 7217-7226.
3. Kevrekidis P.G. On a class of discretizations of Hamiltonian nonlinear partial differential equations. Physica D. 2003. V. 183. P. 68-86.
4. Speight J.M., Zolotaryuk Y. Kinks in dipole chains. Nonlinearity. 2006. V. 19. P. 1365-1382.
5. Speight J.M. A discrete phi4 system without a PeierlsNabarro potential. Nonlinearity. 1997. V. 10. P. 1615-1625.
6. Speight J.M. Topological discrete kinks. Nonlinearity. 1999. V. 12. P. 1373-1387.
7. Бак С. М. Рівняння нескінченних ланцюгів нелінійних осциляторів: задача Коші, періодичні розв'язки, біжучі хвилі : дис. ... канд. фіз.-мат. наук : 01.01.02. Вінниця, 2007. 142 с.
8. Бак С. М. Стоячі хвилі в дискретних рівняннях типу Клейна-Ґордона зі степеневими нелінійностями. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія: математика та інформатика.* 2021. Том 39, № 2. С. 7-21.
9. Бак С. М. Стоячі хвилі в дискретних рівняннях типу Клейна-Ґордона із насичуваними нелінійностями. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: зб. наук. праць*. 2021. Вип. 22. С. 5-19.
10. Бак С., Ковтонюк Г., Майданюк С. Існування локалізованих стоячих хвиль в дискретному рівнянні Клейна-Ґордона із насичуваними нелінійностями. *Актуальні проблеми математики, фізики, комп'ютерних наук і технологій* : зб. наук. пр. / С. В. Подолянчук (голова) [та ін.] ; Вінницький державний педагогічний університет імені Михайла Коцюбинського [Електронне мережне наукове видання]. Вінниця, 2022. Вип. 19. С. 9-13.

Науковий керівник: докт. фіз.-мат. наук, професор Бак Сергій Миколайович.