



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

98-44

P11-98-44

С.И.Виницкий, И.В.Пузынин, А.В.Селин

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО
УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
С ПОВЫШЕННОЙ ТОЧНОСТЬЮ

Направлено в журнал «Computer Physics Communications»

1998

Введение

Ряд задач численного моделирования связан с изучением динамики взаимодействия квантовых систем и внешних полей, изменяющихся во времени. Динамика таких систем обычно описывается нестационарным уравнением Шредингера с самосопряженным оператором, зависящим от времени. Полное квантово-механическое описание системы во времени можно получить также в терминах унитарного оператора эволюции, сохраняющего норму вектора состояния в гильбертовом пространстве [1].

Одной из распространенных численных схем нахождения приближенного решения нестационарного уравнения Шредингера является двухслойная неявная схема Кранка-Николсона, которая обеспечивает второй порядок аппроксимации уравнения по времени, сохраняет норму приближенного решения при переходе со слоя на слой и всегда устойчива [2, 3]. Фактически, эта схема строится с помощью преобразования Кэли самосопряженного оператора, что соответствует реконструкции оператора эволюции на каждом временном слое с точностью до $O(\tau^3)$. Несмотря на известные достоинства этой схемы, в практических расчетах для получения приближенного решения с заданной точностью, как правило, требуется проводить вычисления с достаточно малым шагом τ по временной переменной t , что требует значительных вычислительных затрат. Таким образом, представляет интерес построение сохраняющих норму схем, имеющих более высокий порядок аппроксимации, что позволит эффективней использовать вычислительные ресурсы.

В настоящей работе рассмотрен метод повышения точности нахождения приближенных решений для линейных нестационарных уравнений типа Шредингера с самосопряженным оператором, зависящим от времени t . Повышение точности приближенного решения достигается за счет замены исходного уравнения неявной разностной схемой, полученной на основе разложения Магнуса [4] и использовании Паде-аппроксимации [7] для приближенного оператора эволюции. Отметим, что приближение оператора эволюции с помощью усечения разложения Магнуса, которое можно рассматривать как непрерывное обобщение формулы Бейкера-Кэмпбелла-Хаусдорфа [5], сохраняет унитарность в каждом порядке. Полученные схемы требуют введения некоторого числа, зависящего от требуемого порядка аппроксимации, дополнительных временных слоев, например, для $O(\tau^4)$ – один промежуточный слой, для $O(\tau^6)$ – два слоя и т. д. При этом аппроксимация операторной схемой уравнения по временной переменной имеет характер суммарной аппроксимации [3]. Процесс нахождения решения разностной схемы состоит в последовательном переходе от одного временного слоя к следующему через дополнительные слои, причем для определения решения на следующем слое необходимо знать его лишь на одном предыдущем. Показано, что полученные схемы являются устойчивыми по начальным данным и сохраняют норму приближенного решения. Эти схемы можно рассматривать как обобщение схемы Кранка-Николсона [3], дающие более высокий порядок аппроксимации по времени.

В первой части данной работы рассматривается процедура построения операторно-разностных схем с перечисленными выше свойствами на примере схемы с аппроксимацией $O(\tau^4)$. Во второй части – применение этой схемы к одномерному уравнению Шредингера. В третьей части приводится численный пример для осциллятора с переменной частотой.

1. Операторно-разностная схема

Уравнение Шредингера, описывающее эволюцию квантовой системы во времени, имеет вид

$$i \frac{d\psi}{dt} = H(t)\psi(t), \quad (1)$$

где $H(t)$ - линейный самосопряженный оператор, действующий в подходящем гильбертовом пространстве \mathcal{H} , зависящий от параметра t , ($t \in [0, T]$), и удовлетворяющий дополнительным условиям [2], гарантирующим однозначную разрешимость задачи Коши, $\psi(t)$ - функции t со значениями в \mathcal{H} . Поставим начальное условие в виде

$$\psi(0) = \psi_0. \quad (2)$$

Формально решение (1) в момент времени t можно выразить через решение в момент времени t_0 с помощью унитарного оператора эволюции $U(t, t_0)$

$$\psi(t) = U(t, t_0)\psi(t_0), \quad (3)$$

причем $U(t, t_0)$ удовлетворяет уравнению (1) для любого t_0 :

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0), \\ U(t_0, t_0) = I, \end{cases} \quad (4)$$

I - единичный оператор.

1.1. Аппроксимация оператора эволюции

Разобьем отрезок $[0, T]$ на части узлами $t_k = k\tau$, $k = 0, 1, 2, \dots, K$, $K\tau = T$ (для простоты - разбиение равномерное). Тогда решение на временном слое t_{k+1} выражается через решение на слое t_k с помощью

$$\psi(t_{k+1}) = U(t_{k+1}, t_k)\psi(t_k). \quad (5)$$

Для получения разностной схемы заменим точный эволюционный оператор $U(t, t_0)$ на приближенный. Поскольку самосопряженность $H(t)$ приводит к тому, что норма решения (1) не зависит от времени, $\|\psi(t)\| = \text{const}$, то весьма желательно, чтобы и разностная схема, с помощью которой ищется приближенное решение (1), также обладала этим свойством. В качестве приближения для $U(t, t_0)$ мы выберем усеченное разложение Магнуса [4, 6]. Привлекательность именно такого способа заключается в том, что усечение в любом порядке этого разложения позволяет получить унитарные приближенные операторы эволюции. Таким образом, нормы приближенных решений в пространстве \mathcal{H} для различных временных слоев t_k будут равны между собой. Это означает устойчивость, и, следовательно, сходимость соответствующей разностной схемы к точному решению уравнения (1).

Согласно [6] оператор $U(t_{k+1}, t_k)$ может быть представлен в виде

$$U(t_{k+1}, t_k) = \lim_{N \rightarrow \infty} U^{(N)}(t_{k+1}, t_k), \quad U^{(N)}(t_{k+1}, t_k) = \exp\left\{\sum_{n=1}^N \tau^n A_n\right\}, \quad (6)$$

где A_n - антиэрмитовы операторы, содержащие интегралы от коммутаторов гамильтониана $H(t)$ в различные моменты времени (см. приложение 1). Выпишем первые три члена A_n для $n = 1, 2, 3$:

$$A_1 = -i \int_0^1 d\xi H(t_k + \xi\tau), \quad (7)$$

$$A_2 = -\frac{1}{2}i^2 \int_0^1 d\xi_1 \int_0^{\xi_1} d\xi_2 [H_2, H_1], \quad (8)$$

$$A_3 = -\frac{1}{6}i^3 \int_0^1 d\xi_1 \int_0^{\xi_1} d\xi_2 \int_0^{\xi_2} d\xi_3 \{[H_3, [H_2, H_1] + [[H_3, H_2], H_1]]\}, \quad (9)$$

$$H_i = H(t_k + \xi_i\tau).$$

Заметим, что для независимого от времени гамильтониана ($\dot{H} \equiv 0$) единственное ненулевое слагаемое в (6) есть A_1 , как и должно быть, поскольку в этом случае оператор эволюции есть просто $\exp\{-i(t - t_0)H\}$.

1.2. Первое приближение (схема Кранка-Николсона)

Предположим, что $H(t)$ имеет вторую производную, тогда с точностью до $O(\tau^3)$ оператор эволюции есть

$$U^{(1)}(t_{k+1}, t_k) = \exp\{-i\tau H(t_k + \tau/2)\} + O(\tau^3), \quad (10)$$

что с той же точностью (аппроксимация Паде [1/1] для экспоненты [7]) можно записать

$$U^{(1)}(t_{k+1}, t_k) = \left(I + i\frac{\tau}{2}H(t_k + \tau/2)\right)^{-1} \left(I - i\frac{\tau}{2}H(t_k + \tau/2)\right). \quad (11)$$

Эта формула имеет смысл, поскольку $(I + i\frac{\tau}{2}H(t_k + \tau/2))$ непрерывно обратим в силу самосопряженности $H(t_k + \tau/2)$, и следовательно имеет ограниченный обратный оператор $(I + i\frac{\tau}{2}H(t_k + \tau/2))^{-1}$.

Поскольку $U^{(1)}(t_{k+1}, t_k)$ является преобразованием Кэли самосопряженного $H(t_k + \tau/2)$, то он изометричен. Это означает то, что разностная схема, соответствующая такому приближению, сохраняет норму.

$$\begin{aligned} \left(I + i\frac{\tau}{2}H(t_k + \tau/2)\right) \psi^{k+1} &= \left(I - i\frac{\tau}{2}H(t_k + \tau/2)\right) \psi^k, \\ \|\psi^{k+1}\| &= \|\psi^k\|, \quad k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (12)$$

Порядок аппроксимации схемой (12) уравнения (1) есть $O(\tau^2)$.

1.3. Второе приближение (схема $O(\tau^4)$)

Обозначим $F_k = i(A_1 + A_2)$. Предполагая существование у $H(t)$ производных до четвертого порядка, получим

$$U^{(2)}(t_{k+1}, t_k) = \exp\{-i\tau F_k\} + O(\tau^5), \quad (13)$$

$$F_k = H(t_{k+1/2}) + \frac{\tau^2}{24}\ddot{H}(t_{k+1/2}) - i\frac{\tau^2}{12}[\dot{H}(t_{k+1/2}), H(t_{k+1/2})], \quad (14)$$

где $t_{k+1/2} = t_k + \tau/2$, а точка над оператором $H(t)$ обозначает его производную по времени в момент t ($\dot{H}(t) \equiv (\partial/\partial t)H(t)$). Разложение экспоненты $\exp\{-i\tau F_k\}$ до $O(\tau^5)$, сохраняющее унитарность (аппроксимация Паде [2/2] для экспоненты), имеет вид

$$\exp\{-i\tau F_k\} = (I - \frac{\tau^2}{12}F_k^2 + i\frac{\tau}{2}F_k)^{-1}(I - \frac{\tau^2}{12}F_k^2 - i\frac{\tau}{2}F_k) + O(\tau^5). \quad (15)$$

Факторизуем выражения в скобках

$$(I - \frac{\tau^2}{12}F_k^2 - i\frac{\tau}{2}F_k) = (I + \frac{\tau}{4}\alpha F_k)(I - \frac{\tau}{4}\bar{\alpha}F_k), \quad (16)$$

$$(I - \frac{\tau^2}{12}F_k^2 + i\frac{\tau}{2}F_k) = (I + \frac{\tau}{4}\bar{\alpha}F_k)(I - \frac{\tau}{4}\alpha F_k), \quad (17)$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}} - i, \quad |\alpha|^2 = 4/3. \quad (18)$$

Т. к. $\text{Im } \alpha \neq 0$, а F_k - самосопряжен, то оператор $I + \frac{\tau}{4}\alpha F_k$ имеет ограниченный обратный оператор. Подставляя (16), (17) в (15) и изменяя порядок сомножителей, получаем $U^{(2)}(t_{k+1}, t_k)$ (с точностью до $O(\tau^5)$)

$$U^{(2)}(t_{k+1}, t_k) = (I + \frac{\tau}{4}\bar{\alpha}F_k)^{-1}(I + \frac{\tau}{4}\alpha F_k)(I - \frac{\tau}{4}\alpha F_k)^{-1}(I - \frac{\tau}{4}\bar{\alpha}F_k). \quad (19)$$

Вводя промежуточный временной слой $\psi^{k+1/2}$, получаем следующую операторно-разностную схему с четвертым порядком аппроксимации уравнения (1):

$$\begin{cases} (I + \frac{\tau}{4}\bar{\alpha}F_k)\psi^{k+1} = (I + \frac{\tau}{4}\alpha F_k)\psi^{k+1/2}, \\ (I - \frac{\tau}{4}\alpha F_k)\psi^{k+1/2} = (I - \frac{\tau}{4}\bar{\alpha}F_k)\psi^k, \\ \psi^0 = \psi_0, \quad k = 0, 1, 2, \dots, K. \end{cases} \quad (20)$$

Покажем, что схема (20) сохраняет норму разностного решения.

Пусть выполнено соотношение

$$(I + \beta F)u = (I + \bar{\beta}F)v, \quad F = F^*, \quad u, v \in \mathcal{D}(F), \quad \text{Im } \beta \neq 0. \quad (21)$$

Умножая (21) скалярно слева и справа на u и v соответственно и вычитая полученные равенства друг из друга с учетом самосопряженности F , находим

$$\|u\|^2 - \|v\|^2 = \bar{\beta} \{(Fv, v) - (u, Fu)\}. \quad (22)$$

Выражение в фигурных скобках в последнем выражении есть разность квадратичных форм оператора F на элементах u и v и, значит, представляет собой действительную величину. Но, поскольку $\text{Im } \beta \neq 0$, то из (22) с необходимостью вытекает равенство

$$(Fv, v) = (u, Fu), \quad (23)$$

и, следовательно,

$$\|u\|^2 = \|v\|^2. \quad (24)$$

Полагая $\beta = \pm \tau \bar{\alpha}/4$, а u и v соответственно ψ^k , $\psi^{k+1/2}$, ψ^{k+1} , получаем

$$\|\psi^{k+1}\| = \|\psi^{k+1/2}\| = \|\psi^k\|. \quad (25)$$

Смысл $\psi^{k+1/2}$ можно легко проследить, если сложить уравнения (20) друг с другом, выражая $\psi^{k+1/2}$ через ψ^k и ψ^{k+1} :

$$\psi^{k+1/2} = \frac{\psi^{k+1} + \psi^k}{2} + \frac{\tau}{8}F_k(\psi^{k+1} - \psi^k), \quad (26)$$

откуда ясно, что $\psi^{k+1/2}$ соответствует решению исходного уравнения (1) в момент времени $t_{k+1/2}$ с точностью $O(\tau^2)$.

Докажем непосредственно, что схема (20) имеет четвертый порядок аппроксимации. Вычитая в (20) уравнения друг из друга, имеем

$$\alpha \frac{\tau}{4}F_k\psi^{k+1/2} = \frac{\psi^{k+1} - \psi^k}{2} + \frac{\tau}{8}F_k(\psi^{k+1} + \psi^k). \quad (27)$$

Подставляя сюда $\psi^{k+1/2}$ из (26), мы фактически возвращаемся к соотношению между ψ^k и ψ^{k+1} , даваемому приближенным оператором эволюции (15):

$$(I - \frac{\tau^2}{12}F_k^2 + i\frac{\tau}{2}F_k)\psi^{k+1} - (I - \frac{\tau^2}{12}F_k^2 - i\frac{\tau}{2}F_k)\psi^k = 0. \quad (28)$$

Согласно общему правилу определения порядка аппроксимации, подставляем сюда в качестве ψ^{k+1} и ψ^k функцию $\psi(t)$ в точках t_{k+1} и t_k соответственно и, после несложных преобразований, находим

$$(I - \frac{\tau^2}{12}F_k^2 + i\frac{\tau}{2}F_k)\psi(t_{k+1/2} + \frac{\tau}{2}) - (I - \frac{\tau^2}{12}F_k^2 - i\frac{\tau}{2}F_k)\psi(t_{k+1/2} - \frac{\tau}{2}) = \tau \left(I + \frac{\tau^2}{24}(\frac{d^2}{dt^2} + 4iH(t_{k+1/2})\frac{d}{dt} - 2i\frac{d}{dt}H(t_{k+1/2})) \right) \left(iH(t_{k+1/2}) + \frac{d}{dt} \right) \psi(t_{k+1/2}) + O(\tau^5).$$

Таким образом, оба уравнения схемы (20) вместе имеют суммарную аппроксимацию (1) $O(\tau^4)$, в то время как каждое из них по-отдельности - только $O(\tau)$.

Мы ограничимся здесь вторым приближением в разложении (6), хотя с помощью изложенного метода можно получать схемы и более высокого порядка суммарной аппроксимации по времени, соответственно, с большим числом промежуточных слоев. При этом для вычисления $U^{(N)}(t_{k+1}, t_k)$ можно использовать аппроксимацию Паде $[N/N]$ для экспоненты [7]

$$\exp z = [{}_1F_1(-N, -2N; -z)]^{-1} {}_1F_1(-N, -2N; z) + O(z^{2N+1}).$$

Здесь ${}_1F_1$ - вырожденная гипергеометрическая функция, сводящаяся в данном случае к полиному степени N . Свойства нулей и полюсов такой аппроксимации хорошо изучены [7]. В частности, известно, что $\text{Re } z_s \neq 0$, $s = 1, 2, \dots, N$, z_s - нуль или полюс диагональной Паде-аппроксимации для экспоненты. Поэтому утверждение о сохранении нормы справедливо и для схем, полученных вышеизложенным способом в произвольном порядке N .

2. Одномерное уравнение Шредингера

Рассмотрим задачу (1), где под $H(t)$ будем понимать оператор $H(t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + q(x, t)$, действующий на $\psi(x, t) \in L_2[a, b]$ для всех $t > 0$:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + q(x, t)\psi(x, t). \quad (29)$$

Для простоты будем считать, что на концах отрезка $[a, b]$ заданы краевые условия Дирихле:

$$\psi(a, t) = 0, \quad \psi(b, t) = 0. \quad (30)$$

В момент времени $t = 0$ задано начальное условие $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$. Будем считать начальное условие и потенциал q достаточно гладкими функциями, обеспечивающими требуемую гладкость решения ψ по переменной x , т. е. $\psi(x, t)$ для всех $t > 0$ принадлежит пространству Соболева $W_2^m[a, b]$.

С помощью метода Галеркина [8] перейдем от уравнения в частных производных (29) к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка по времени. Для этого представим приближение к $\psi(x, t)$ в виде ряда по некоторой системе действительных линейно-независимых функций $\{\varphi_j(x)\}_{j=1}^N$, $\varphi_j(x) \in W_2^m[a, b]$, удовлетворяющих краевым условиям (30), с коэффициентами, зависящими от времени:

$$\psi_N(x, t) = \sum_{j=1}^N u_j(t)\varphi_j(x). \quad (31)$$

Относительно системы функций $\{\varphi_j(x)\}_{j=1}^N$ мы будем предполагать, что

$$\|P_N f - f\|_C \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty, \quad \forall f(x) \in W_2^m[a, b], \quad (32)$$

где P_N обозначает оператор проектирования из $W_2^m[a, b]$ в пространство, натянутое на элементы $\{\varphi_j(x)\}_{j=1}^N$. Ядро $p_N(x, y)$ этого оператора имеет вид

$$p_N(x, y) = \sum_{j, j'=1}^N M_{jj'}^{-1} \varphi_j(x) \varphi_{j'}(y), \quad M_{jj'} = (\varphi_j, \varphi_{j'}). \quad (33)$$

Оно симметрично в силу симметрии матрицы M , которая, к тому же, является положительно-определенной матрицей. Кроме того, выполнено соотношение $P_N^2 = P_N$, а также $P_N \varphi_j = \varphi_j$, $j = 1, 2, \dots, N$.

Потребуем, чтобы невязка в (29) при подстановке (31) была ортогональна каждой функции $\varphi_j(x)$, $j = 1, 2, \dots, N$. В итоге приходим к системе дифференциальных уравнений

$$iM \frac{du}{dt} = \mathcal{H}(t)u, \quad (34)$$

где $\mathcal{H} = \{(H\varphi_j, \varphi_{j'})\}$ - матрица оператора H , которая является симметричной матрицей, поскольку мы выбрали систему действительных функций $\{\varphi_j(x)\}_{j=1}^N$. Компонентами вектора $u(t)$ являются коэффициенты $u_j(t)$, $j = 1, 2, \dots, N$.

Отметим, что в случае второй и третьей краевой задачи мы получим то же самое уравнение (34) с матрицей \mathcal{H} , которая будет включать в себя соответствующие граничные условия.

Преобразуя уравнение (34) с помощью линейной замены

$$\begin{aligned} u &\rightarrow \tilde{u} = M^{1/2}u, \\ \mathcal{H} &\rightarrow \tilde{\mathcal{H}} = M^{-1/2}\mathcal{H}M^{-1/2}, \end{aligned} \quad (35)$$

приходим к уравнению, формально совпадающему с (1):

$$i \frac{d\tilde{u}}{dt} = \tilde{\mathcal{H}}(t)\tilde{u}. \quad (36)$$

Применяя к этому уравнению метод дискретизации по времени, описанный в первой части данной работы, и выполняя обратное к (35) преобразование, получаем разностную схему, аппроксимирующую (34) с порядком $O(\tau^4)$:

$$\begin{cases} (M + \frac{\tau}{4}\alpha\mathcal{F}_k)u^{k+1} = (M + \frac{\tau}{4}\alpha\mathcal{F}_k)u^{k+1/2}, \\ (M - \frac{\tau}{4}\alpha\mathcal{F}_k)u^{k+1/2} = (M - \frac{\tau}{4}\alpha\mathcal{F}_k)u^k, \\ u^0 = u_0, \quad k = 0, 1, 2, \dots, K. \end{cases} \quad (37)$$

Матрицы \mathcal{F}_k являются аналогами операторов F_k в операторной схеме (20)

$$\mathcal{F}_k = \mathcal{H} + \frac{\tau^2}{24}\ddot{\mathcal{H}} - i\frac{\tau^2}{12}\{\dot{\mathcal{H}}M^{-1}\mathcal{H} - \mathcal{H}M^{-1}\dot{\mathcal{H}}\}. \quad (38)$$

Здесь подразумевается, что значения \mathcal{H} и ее производных взяты в момент времени $t_{k+1/2}$. Выпишем в явном виде каждое слагаемое в последнем равенстве

$$\mathcal{H}_{jj'} = (\varphi_j', \varphi_{j'}) + (q\varphi_j, \varphi_{j'}), \quad (39)$$

$$\ddot{\mathcal{H}}_{jj'} = (\ddot{q}\varphi_j, \varphi_{j'}), \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \{\dot{\mathcal{H}}M^{-1}\mathcal{H} - \mathcal{H}M^{-1}\dot{\mathcal{H}}\}_{jj'} &= \left\{ \varphi_j'(x)(P_N \dot{q}\varphi_{j'})(x) - \varphi_{j'}'(x)(P_N \dot{q}\varphi_j)(x) \right\} \Big|_{x=a}^{x=b} + \\ &+ (q\varphi_{j'}, P_N \dot{q}\varphi_j) - (q\varphi_j, P_N \dot{q}\varphi_{j'}) + \\ &+ (\varphi_{j'}'', P_N \dot{q}\varphi_j) - (\varphi_j'', P_N \dot{q}\varphi_{j'}). \end{aligned} \quad (41)$$

Поскольку в силу требования (32) имеет место предельное соотношение

$$(P_N \dot{q}\varphi_j)(x) - \dot{q}(x)\varphi_j(x) \rightarrow 0, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad N \rightarrow \infty, \quad (42)$$

то, не нарушая сходимости галеркинской схемы, при практическом вычислении матрицы \mathcal{F}_k можно заменить $(P_N \dot{q}\varphi_j)$ на $\dot{q}(x)\varphi_j(x)$, что значительно упрощает процесс ее нахождения. В этом случае выражение (41) с точностью до порядка принятой аппроксимации имеет вид

$$\{\dot{\mathcal{H}}M^{-1}\mathcal{H} - \mathcal{H}M^{-1}\dot{\mathcal{H}}\}_{jj'} \approx (\varphi_{j'}'', \dot{q}\varphi_j) - (\varphi_j'', \dot{q}\varphi_{j'}). \quad (43)$$

Заметим, что последнее выражение формально можно получить, вычислив непосредственно матрицу $(\{H, H\}\varphi_j, \varphi_{j'})$.

Поскольку матрица \mathcal{F}_k является эрмитовой, то для схемы (37) справедливы сделанные ранее утверждения о сохранении нормы u на временных слоях $t_k, t_{k+1/2}, k = 1, 2, \dots, K$. Норма в этом случае дается выражением $\|u^k\|_{M^{-1}}^2 = u^{k\dagger} M u^k$ и согласована с $L_2[a, b]$ -нормой.

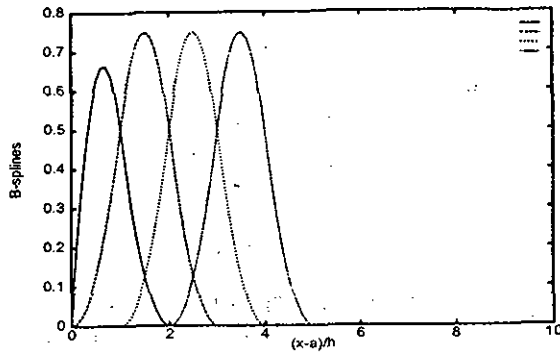


Рис. 1. B_2 -сплайны

3. Численный пример

3.1. Базисные функции

В качестве системы функций $\{\varphi_j(x)\}$ для численного решения уравнения (29) с граничными условиями (30) возьмем B -сплайны [9] 2-го порядка. Как известно, сплайн B_m любого порядка m имеет дефект 1 и конечный носитель минимальной "длины" $m + 1$, что, с одной стороны, обеспечивает им хорошие аппроксимационные свойства, а с другой стороны, приводит к возможности обращать ленточные матрицы с минимальной шириной ленты.

Введем равномерное разбиение отрезка $[a, b]$, $x_j = a + jh$, $h = (b - a)/N$, $j = -2, -1, \dots, N$. В качестве ряда Галеркина (31) используем выражение

$$\psi_N(x, t) = \sum_{j=-1}^{N-2} u_j(t) b_j(x), \quad b_j(x) \in \mathcal{W}_2^2[a, b], \quad (44)$$

где

$$b_j(x) = \begin{cases} B_2\left(\frac{x-x_j}{h}\right), & j = 0, 1, \dots, N-3, \\ B_2\left(\frac{x-x_{-1}}{h}\right) - B_2\left(\frac{x-x_{-2}}{h}\right), & j = -1, \\ B_2\left(\frac{x-x_{N-2}}{h}\right) - B_2\left(\frac{x-x_{N-1}}{h}\right), & j = N-2. \end{cases} \quad (45)$$

Графики функций $b_j(x)$ приведены на рис. 1, а элементы матриц M и F_k в приложении 2. Обращение матриц в схеме (37) с полушириной ленты, равной двум, проводилось методом исключения Гаусса.

3.2. Осциллятор с переменной частотой

Одной из задач, для которых найдены решения уравнения (29) в аналитическом виде, является задача Коши для гармонического осциллятора с произвольной зависимостью частоты от времени [10]. При этом решение задачи о квантовом осцилляторе выражается через решение задачи о классическом осцилляторе.

Мы выберем потенциал $q(x, t)$ в (29) в следующем виде:

$$q(x, t) = \frac{\omega^2(t)x^2}{2}, \quad \omega^2(t) = \omega_+^2 + (\omega_-^2 - \omega_+^2)e^{-t/\theta}. \quad (46)$$

При этом одним из точных решений, с которым мы в дальнейшем будем сравнивать результаты вычислений по схеме (37), является

$$\psi(x, t; z) = \left(\frac{\omega_-}{\omega_+}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{1}{2}(Ax^2 - 2Bx + C)\right\}; \quad (47)$$

$$A = -i\frac{\dot{\xi}(t)}{\xi(t)}, \quad B = \sqrt{2\omega_-}\frac{z}{\xi(t)}, \quad C = \frac{\xi(t)}{\xi(0)}z^2 + \log \xi(t).$$

Здесь $\xi(t)$ - решение задачи о классическом осцилляторе

$$\ddot{\xi}(t) + \omega^2(t)\xi(t) = 0, \quad \xi(0) = 1, \quad \dot{\xi}(0) = i\omega_-,$$

которое для выбранной зависимости $\omega(t)$ имеет вид

$$\xi(t) = C_1 J_{1/2}(pe^{-t/2\theta}) + C_2 J_{-1/2}(pe^{-t/2\theta}); \quad (48)$$

$$C_1 = \frac{1}{W} \left[J'_{-1/2}(p) + \frac{2i\theta\omega_-}{p} J_{-1/2}(p) \right], \quad C_2 = -\frac{1}{W} \left[J'_{1/2}(p) + \frac{2i\theta\omega_+}{p} J_{1/2}(p) \right],$$

$$W = -\frac{2i}{\pi h} \operatorname{sh} s\pi, \quad s = 2\theta\omega_+, \quad p = 2i\theta\sqrt{\omega_+^2 - \omega_-^2}.$$

Решение $\psi(x, t; z)$ согласно (47) - (48) описывает эволюцию во времени когерентного состояния осциллятора [10].

Таблица. Величина среднеквадратичного отклонения решения (47) при $\tau = 0.00125$, $h = 0.00625$ и коэффициент наклона σ прямых на рис. 2

t	схема Кранка-Николсона		схема $O(\tau^4)$	
	e_N	σ	e_N	σ
1.0	0.113299E-04	1.999633	0.532924E-09	3.899376
2.0	0.312878E-04	1.999153	0.834298E-09	4.008864
3.0	0.586077E-04	1.999138	0.118639E-08	3.976561
4.0	0.897313E-04	1.998968	0.169485E-08	4.005726
5.0	0.124378E-03	1.998796	0.286966E-08	4.005446
6.0	0.160400E-03	1.998755	0.253352E-08	4.002083
7.0	0.197628E-03	1.998559	0.386817E-08	4.007324
8.0	0.235570E-03	1.998416	0.439916E-08	4.004705
9.0	0.273839E-03	1.998239	0.474281E-08	4.005229
10.0	0.312394E-03	1.997999	0.612064E-08	4.007347

На рис.2 приведены графики точного решения и отклонения от точного решения при значениях параметров

$$\omega_- = 1, \quad \omega_+ = 2, \quad \theta = 2, \quad z = 1,$$

$$h = 0.00625, \quad \tau = 0.00125, \quad T = 5, \quad b = -a = 10.$$

Отрезок $[a, b]$ был выбран достаточно большой, чтобы подавить влияние неточных краевых условий на приближенное решение. В данном примере с осциллятором это

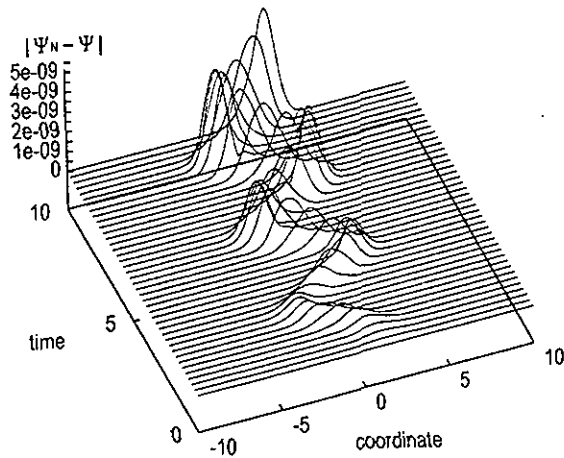
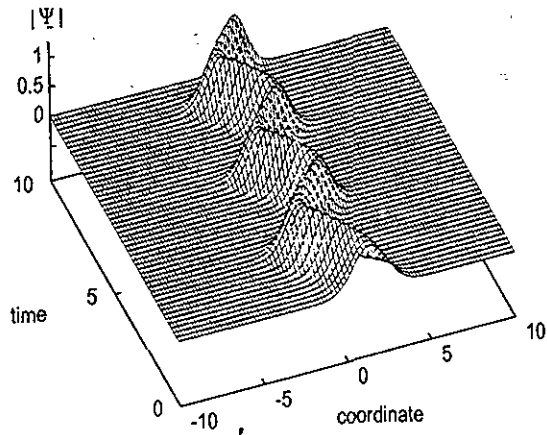


Рис. 2. Точное решение (47) (вверху) и отклонение от точного решения при $\tau = 0.00125$, $h = 0.00625$

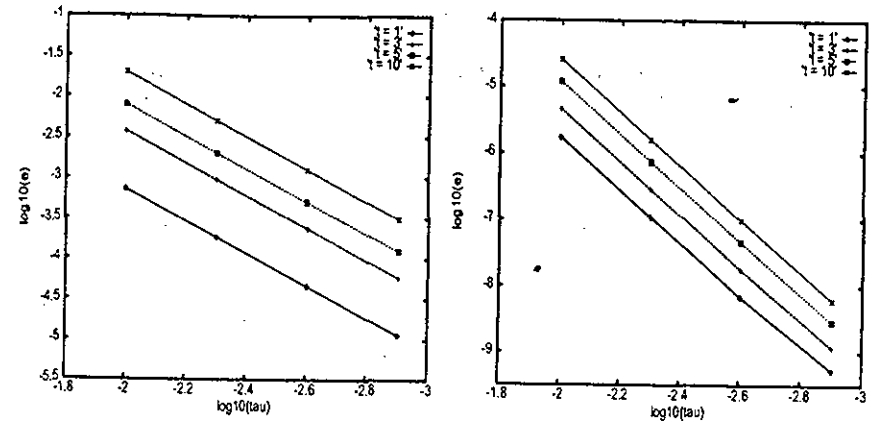


Рис. 3. Зависимость среднеквадратичного отклонения e_N от точного решения (47) при изменении шага по времени для схемы Кранка-Николсона (слева) и схемы $O(\tau^4)$

возможно сделать, т. к. точное решение быстро (порядка e^{-z^2}) спадает при увеличении x .

В таблице и на рис. 3 проведено исследование поведения среднеквадратичной ошибки $e_N(t)$ при измельчении разбиения по времени и координате, а также сравнение с аналогичным поведением $e_N(t)$ при использовании схемы Кранка-Николсона. Погрешность $e_N(t)$ вычислялась с помощью

$$e_N^2(t_k) = \int_a^b dx |\psi(x, t_k) - \psi_N(x, t_k)|^2. \quad (49)$$

Значения e_N вычислялись при последовательно уменьшающемся вдвое шаге по времени τ начиная с $\tau = 0.01$. При этом шаг по координате h уменьшался начиная с $h = 0.05$ в соответствии с условиями согласованности: $h \sim \tau$ для схемы (37) и $h \sim \tau^{1/2}$ для схемы Кранка-Николсона, т. к. аппроксимация по координате в обеих схемах составляет $O(h^4)$. Таким образом, ожидаемая скорость стремления $e_N(t)$ к нулю есть $e_N(t) \sim \tau^\sigma$, $\sigma = 2$ для схемы Кранка-Николсона, и $\sigma = 4$ для схемы (37). Фактические скорости сходимости приведены в таблице.

Заключение

Можно ожидать, что развитая методика получения операторно-разностных схем повышенного порядка точности может быть использована для построения эффективных вычислительных алгоритмов нахождения приближенного решения задачи Коши для нестационарных уравнений типа Шредингера, описывающих динамику экзотических квантовых систем во внешних полях, а также распространение лазерных пучков в средах.

Данная работа частично поддержана РФФИ, грант 96-02-17715 и ИНТАС-РФФИ, грант 95-0512.

Приложение 1

Разложение Магнуса. Здесь мы приведем формулу для вычисления операторов A_n в (6) и ее краткий вывод согласно [6]. Решение задачи

$$\begin{cases} i(\partial/\partial t)U_\lambda = \lambda H(t)U_\lambda(t, t_0), \\ U_\lambda(t_0, t_0) = I \end{cases} \quad (50)$$

ищется в виде $U_\lambda(t, t_0) = \exp\{A(\lambda, t)\}$, $\lambda \in [0, 1]$ - непрерывный параметр, и $U_\lambda(t, t_0)$ удовлетворяет условиям

$$U_0(t, t_0) = I, \quad U_1(t, t_0) = U(t, t_0).$$

С помощью формулы дифференцирования операторной экспоненты

$$(\partial/\partial t) \exp\{A(\lambda, t)\} = \left(\int_0^1 dx \exp\{xA\} \dot{A} \exp\{-xA\} \right) \exp\{A\}, \quad \dot{A} = (\partial/\partial t)A,$$

и уравнения (50) получаем соотношение для определения $A(\lambda, t)$

$$i \int_0^1 dx \exp\{xA\} \dot{A} \exp\{-xA\} = \lambda H. \quad (51)$$

Раскладывая $A(\lambda, t)$ в степенной ряд по λ

$$A(\lambda, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n A_n(t)$$

и пользуясь известным соотношением

$$\exp\{A\}B \exp\{-A\} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(adA)^k}{k!} B, \quad (adA)X = [A, X],$$

приходим к искомой формуле для определения коэффициентов A_n в разложении $A(\lambda, t)$:

$$-i\lambda H = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l_1, \dots, l_k=1}^{\infty} \frac{\lambda^{l_1 + \dots + l_k + n}}{(k+1)!} (adA_{l_1}) \dots (adA_{l_k}) \dot{A}_n. \quad (52)$$

Эта формула удобна тем, что позволяет рекурсивно определять A_n . Например, для $n=1$, приравняв члены слева и справа при первой степени λ и полагая $\lambda=1$, получаем

$$\dot{A}_1 = -iH(t),$$

откуда следует выражение (7) в тексте. ($A_n(t_0) = 0 \quad \forall n$).

Соответственно, при $n=2, 3$

$$\dot{A}_2 + \frac{1}{2}[A_1, \dot{A}_1] = 0, \quad \text{и} \quad \dot{A}_3 + \frac{1}{2}[A_1, \dot{A}_2] + \frac{1}{2}[A_2, \dot{A}_1] + \frac{1}{6}[A_1, [A_1, \dot{A}_1]] = 0,$$

откуда следуют выражения (8), (9) в тексте.

Приложение 2

Здесь выписаны с точностью $O(h^4)$ ненулевые элементы матриц

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{jj'} &= (b_j, b_{j'}), \\ \mathcal{D}_{jj'} &= (b_j', b_{j'}'), \\ \Omega_{jj'}^{(k)} &= (q_k b_j, b_{j'}'), \\ \mathcal{V}_{jj'}^{(k)} &= (b_j'', v_k b_j) - (b_j'', v_k b_{j'}'), \quad j = -1, 0, \dots, N-2, \end{aligned}$$

где b_j есть функции, определенные согласно (45).

Полагая $q_k(x) = (q(x, t_k) + 4q(x, t_{k+1/2}) + q(x, t_{k+1}))/6$, $v_k(x) = (q(x, t_{k+1}) - q(x, t_k))/\tau$, где $q(x, t)$ - потенциал в уравнении (29), мы получаем матрицу \mathcal{F}_k в виде

$$\mathcal{F}_k = \mathcal{M} + \mathcal{D} + \Omega^{(k)} - i \frac{\tau^2}{12} \mathcal{V}^{(k)}.$$

Ниже используются обозначения $q_j = q(x_j)$, $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, N$.

Элементы матрицы \mathcal{M}

$$\begin{aligned} h^{-1}\mathcal{M}_{jj} &= 11/20, \quad j = 0, \dots, N-3, \\ h^{-1}\mathcal{M}_{jj+1} &= 13/60, \quad j = 0, \dots, N-4, \\ h^{-1}\mathcal{M}_{jj+2} &= 1/120, \quad j = -1, \dots, N-4, \\ h^{-1}\mathcal{M}_{-1,-1} &= h^{-1}\mathcal{M}_{N-2,N-2} = 1/3, \\ h^{-1}\mathcal{M}_{-1,0} &= h^{-1}\mathcal{M}_{N-2,N-3} = 5/24. \end{aligned}$$

Элементы матрицы \mathcal{D}

$$\begin{aligned} h\mathcal{D}_{jj} &= 1, \quad j = 0, \dots, N-3, \\ h\mathcal{D}_{jj+1} &= -1/3, \quad j = 0, \dots, N-4, \\ h\mathcal{D}_{jj+2} &= -1/6, \quad j = -1, \dots, N-4, \\ h\mathcal{D}_{-1,-1} &= h\mathcal{D}_{N-2,N-2} = 4/3, \\ h\mathcal{D}_{-1,0} &= h\mathcal{D}_{N-2,N-3} = -1/6. \end{aligned}$$

Элементы матрицы $\Omega^{(k)}$

$$\begin{aligned} h^{-1}\Omega_{jj} &= (-17q_j + 325q_{j+1} + 325q_{j+2} - 17q_{j+3})/1120, \quad j = 0, \dots, N-3, \\ h^{-1}\Omega_{jj+1} &= (5q_{j+1} + 81q_{j+2} + 5q_{j+3})/420, \quad j = 0, \dots, N-4, \\ h^{-1}\Omega_{jj+2} &= (-3q_{j+1} + 31q_{j+2} + 31q_{j+3} - 3q_{j+4})/6720, \quad j = -1, \dots, N-4, \\ h^{-1}\Omega_{-1,-1} &= (169q_0 + 783q_1 - 141q_2 + 29q_3)/2520, \\ h^{-1}\Omega_{N-2,N-2} &= (29q_{N-3} - 141q_{N-2} + 783q_{N-1} + 169q_N)/2520, \\ h^{-1}\Omega_{-1,0} &= (61q_0 + 1247q_1 + 95q_2 - 3q_3)/6720, \\ h^{-1}\Omega_{N-2,N-3} &= (-3q_{N-3} + 95q_{N-2} + 1247q_{N-1} + 61q_N)/6720, \end{aligned}$$

Элементы матрицы $\mathcal{V}^{(k)}$

$$h\mathcal{V}_{jj+1} = (-29v_j + 358v_{j+1} - 358v_{j+2} + 29v_{j+3})/720, \quad j = 0, \dots, N-4,$$

$$h\mathcal{V}_{jj+2} = (-v_{j+1} + 63v_{j+2} - 63v_{j+3} + v_{j+4})/720, \quad j = -1, \dots, N-4,$$

$$h\mathcal{V}_{-1,0} = (61v_0 + 77v_1 - 157v_2 + 19v_3)/240,$$

$$h\mathcal{V}_{N-2,N-3} = (-19v_{N-3} + 157v_{N-2} - 77v_{N-1} - 61v_N)/240.$$

Литература

- [1] Х. Цикон, Р. Фрезе, В. Кирш, Б. Саймон, Операторы Шредингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии, М., Мир, 1990.
- [2] Ладыженская О. А., Мат. сборник, т. 39, 4, с.491 (1956),
Ладыженская О. А., Мат. сборник, т. 45, 2, с.123 (1958).
- [3] А. А. Самарский, Теория разностных схем, М. "Наука", 1977, с. 511.
- [4] W. Magnus, Commun. Pure Appl. Math., 7, 649 (1954).
- [5] Магнус В., А. Каррас, Д. Солитэр, Комбинаторная теория групп, М., "Наука", 1974.
- [6] R. M. Wilcox, J. Math. Phys., 8, 962, (1967).
- [7] Дж. Бейкер, мл., П. Грейвс-Моррис, Аппроксимации Паде, М., Мир, 1986.
- [8] В. А. Треногин, Функциональный анализ, М., "Наука", 1980, с. 331.
- [9] Н. П. Корнейчук, Сплайны в теории приближения, М., "Наука", 1984, с. 42.
- [10] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., "Наука", 1971, гл. VI.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 марта 1998 года.