

УДК 519.63

## МЕТОД ПОДВИЖНОЙ СЕТКИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Г. Р. Айдагулов<sup>1</sup>

В работе предложен новый численный алгоритм решения задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера на подвижной сетке. Представлены результаты применения нового метода к решению модельных задач. Обсуждается влияние параметров метода на точность расчетов.

**Ключевые слова:** нестационарное уравнение Шредингера, подвижная сетка, метод гауссовых волновых пакетов, преобразование Фурье–Гаусса.

**1. Введение.** Настоящая работа посвящена построению численного метода решения задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера. В предлагаемом методе приближенное решение ищется в представлении Фурье–Гаусса последовательно по временным слоям. Для перехода на следующий слой используется аппроксимация функции Грина оператора Шредингера, предложенная в [1]. Применение этого метода на неподвижной сетке было продемонстрировано в работе [2]. Теоретическим обоснованием является оценка погрешности аппроксимации функции Грина, полученная в [1], и исследование полученного приближенного решения, проведенное в [3]. Последнее позволило модифицировать имеющуюся численную процедуру, добавив в нее алгоритм преобразования пространственной сетки при переходе на очередной слой, в результате которого сетка с течением времени может изменять свой размер и перемещаться.

Применение подвижной сетки позволяет использовать тот факт, что решение есть волновой пакет, перемещающийся в фазовом пространстве (см. рис. 1). Другими словами, это позволяет рассматривать каждый раз сетку не во всем объеме, в котором предполагается появление пакета, а лишь в его подмножестве, где именно в данный момент сосредоточен пакет. С ростом величины перемещения пакета вычислительные затраты метода с фиксированной сеткой неограниченно возрастают вместе с объемом сетки, в то время как в случае подвижной сетки они зависят лишь от естественного уширения самого решения с течением времени. Это делает использование подвижной сетки единственным реализуемым на практике способом рассмотрения, например, инфинитного движения системы.

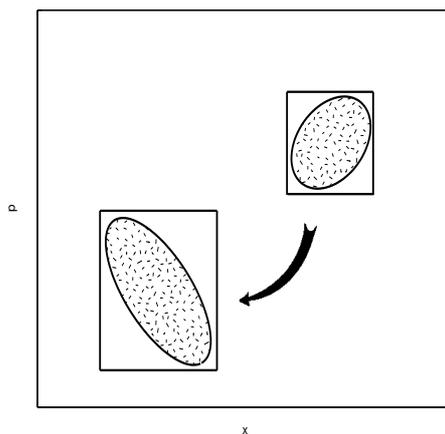


Рис. 1. Перемещение волнового пакета в фазовой плоскости  $(x, p)$  с течением времени. Заштрихованы области, где в соответствующие моменты времени функция отлична от нуля (или превышает по модулю некоторый малый порог). Подвижная сетка может быть определена, например, в выделенных прямоугольниках

<sup>1</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Воробьевы горы, 119992, Москва; e-mail: gallyam@mail.ru

Ниже дается описание сеточного метода и алгоритма преобразования сетки, а затем приводятся результаты расчетов на модельных задачах.

**2. Описание алгоритма.** Напомним численную процедуру, предложенную в [2], а также основные результаты работ [1] и [3], которые понадобятся нам далее.

Итак, предметом настоящей работы является приближенное решение задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2} \Delta \psi(x, t) + V\psi(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \in \mathbb{R}_+, \\ \psi(x, 0+0) &= \psi_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}, dx). \end{aligned} \tag{1}$$

Под функцией-потенциалом  $V = V(x)$  будем понимать элемент  $L^1(\mathbb{R}, dx)$ , образ Фурье  $\widehat{V}(k)$  которого удовлетворяет неравенству

$$\int (1 + |k|)^3 |\widehat{V}(k)| dk < \infty. \tag{2}$$

Условие (2) фактически представляет собой ограничение на гладкость потенциала. Из него, в частности, вытекает, что  $V \in C_b^3(\mathbb{R})$ , т.е.  $V(x)$  имеет производные вплоть до третьего порядка, которые ограничены на всем  $\mathbb{R}$ .

Далее приведем для справки формулы для прямого

$$F : \varphi(\cdot) \rightarrow F\{\varphi \mid \sigma, q, p\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{(x-q)^2}{2\hbar\sigma} - i\frac{p}{\hbar}(x-q)\right\} \varphi(x) dx \tag{3}$$

и обратного преобразования Фурье–Гаусса [1] (FBI-преобразование в [5]; преобразование Габора в [6])

$$\varphi(x) = \frac{1}{2(\pi\hbar)^{3/2}\sigma^{1/2}} \int_{\mathbb{R}^2} \exp\left\{-\frac{(x-q)^2}{2\hbar\sigma} + i\frac{p}{\hbar}(x-q)\right\} F\{\varphi \mid \sigma, q, p\} dq dp, \tag{4}$$

где  $\sigma > 0$  — произвольный фиксированный параметр. Преобразование (3) определено на функциях  $\varphi(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}$  из  $L^2(\mathbb{R}, dx)$ , и с точностью до нормировочного множителя представляет собой разложение функции  $\varphi$  по системе гауссовых волновых пакетов

$$\zeta(x \mid \sigma, q, p) = (\hbar\sigma\pi)^{-1/4} \exp\left\{-\frac{(x-q)^2}{2\hbar\sigma} + i\frac{p}{\hbar}(x-q)\right\}, \quad \|\zeta\|_{L^2} = 1 \tag{5}$$

с центром  $(q, p)$  и фиксированной пространственной шириной (параметр  $\sigma$ ).

В [1] модификация известной *техники гауссовых волновых пакетов* была применена для построения аппроксимации функции Грина  $G$  задачи (1) в представлении Фурье–Гаусса:  $G = G(\tau, \xi_k, \xi_l, \sigma, \hbar)$ , где  $\tau$  — шаг по времени,  $\xi_k = (q_k, p_k)$ ,  $\xi_l = (q_l, p_l) \in \mathbb{R}^2$ ,  $|\xi|^2 \equiv q^2 + p^2$ ,  $\sigma$  — параметр FBI-преобразования (3),  $\hbar$  — постоянная Планка в уравнении (1).

Функция  $G$  строится как образ Фурье–Гаусса

$$G(t, \xi_k, \xi_l) = F\{W(x, t; \sigma, \xi_l) \mid \sigma, \xi_k\}, \quad \xi_k = (q_k, p_k), \tag{6}$$

гауссова волнового пакета  $W(x, t; \sigma, \xi_l)$  с начальной дисперсией  $\sigma$  и центром, который перемещается по классической траектории, исходящей из точки  $\xi_l = (q_l, p_l)$ . Для функции  $W$  интеграл (6) может быть вычислен точно, что дает явное выражение для  $G$  вида (см. [1, 3])

$$\begin{aligned} G(t, \xi_k, \xi_l, \sigma, \hbar) &= \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{\sigma}{2(A + \sigma B)}} \times \\ &\times \exp\left\{-\frac{(Q - q_k)^2 B}{2(A + \sigma B)\hbar} - \frac{(P - p_k)^2 A \sigma}{2(A + \sigma B)\hbar} - i\frac{(Q - q_k)(P - p_k)A}{(A + \sigma B)\hbar} + \frac{ip_k(q_k - Q)}{\hbar} + \frac{i}{\hbar} S\right\} \end{aligned} \tag{7}$$

через параметры пакета  $W$  (центр  $(Q, P)$  и ширину), зависящие от времени:

$$Q = Q(t, q_l, p_l), \quad P = P(\dots), \quad \dots$$

Эти параметры, в свою очередь, удовлетворяют системе обыкновенных дифференциальных уравнений, состоящей из уравнений Гамильтона–Якоби для центра пакета  $W$  и уравнений для параметров  $A$  и  $B$ , определяющих его ширину. Для того чтобы вычислить функцию  $G$  в заданных точках, надо найти решение этой системы в момент времени  $\tau$  и подставить его в формулу (7) для  $G$ . Эта процедура подробно описана в [1–3].

Основным результатом работы [1] является оценка в операторной норме погрешности полученного приближения к точному оператору эволюции в зависимости от параметров метода  $\sigma$  и  $\tau$ . Эта оценка получена в предположении на потенциал (2) и дает возможность с любой степенью точности записать следующее представление для образа Фурье–Гаусса решения задачи (1) в произвольный фиксированный момент времени  $T = n\tau$ :

$$\Psi(T, \xi_n) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \overbrace{\dots}^{n \text{ раз}} G(\tau, \xi_n, \xi_{n-1}) G(\tau, \xi_{n-1}, \xi_{n-2}) \dots G(\tau, \xi_1, \xi_0) \Psi_0(\xi_0) d\xi_0 \dots d\xi_{n-1}, \quad (8)$$

где  $\Psi_0(\xi_0 = (q_0, p_0))$  — образ Фурье–Гаусса начального условия. Формула (8) дает основание искать приближенное решение задачи (1) на фиксированном отрезке времени  $[0, T]$  последовательно по временным слоям  $\{t_k = k\tau, k = 0, 1, \dots, n; t_n = n\tau = T\}$ :

$$\Psi(t_{k+1}, \xi_{k+1}) = \int_{\mathbb{R}^2} G(\tau, \xi_{k+1}, \xi_k) \Psi(t_k, \xi_k) d\xi_k, \quad \xi_{k+1} \in \mathbb{R}^2, \quad k = \overline{0, n-1}. \quad (9)$$

В качестве начального условия  $\psi_0$  мы будем использовать гауссов волновой пакет (5) с заданным центром  $(q_0, p_0)$  и дисперсией  $\sigma_0$ . Образ Фурье–Гаусса  $\Psi_0$  в этом случае имеет вид

$$\Psi_0(\sigma, q, p) = (\hbar\sigma_0\pi)^{-1/4} \left( \frac{2\pi\hbar\sigma\sigma_0}{\sigma + \sigma_0} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{(q - q_0)^2 - 2i(q - q_0)(\sigma p + \sigma_0 p_0) + \sigma\sigma_0(p - p_0)^2}{2\hbar(\sigma + \sigma_0)} \right\}. \quad (10)$$

Модуль  $|\Psi_0|$  является экспонентой с отрицательно определенной квадратичной формой по переменным  $(q, p)$  в показателе. Поэтому  $\Psi_0$  — быстроубывающая на бесконечности функция, которую можно с любой точностью считать отличной от нуля лишь в некоторой конечной области — “носителе”. Если *предположить*, что с течением времени решение задачи будет также оставаться быстроубывающей на бесконечности функцией, то можно фиксировать на плоскости  $(q, p)$  конечную область, которая содержала бы в себе “носитель” решения задачи во все моменты времени из  $[0, T]$ . В качестве такой области можно взять, например, прямоугольник  $D$ . Тогда выбором достаточно большого прямоугольника  $D$  можно с любой точностью заменить на всех слоях  $k$  интегрирование в (9) по всей плоскости интегрированием по прямоугольнику  $D$ . После введения в  $D$  равномерной сетки  $\Omega$  с шагами  $h_q$  и  $h_p$  и приближенного интегрирования в (9) по квадратурной формуле, получим следующую численную процедуру решения задачи (1):

$$\Psi^{k+1}(\xi_{k+1}) = h_q h_p \sum_{\xi_k \in \Omega} G(\tau, \xi_{k+1}, \xi_k) \Psi^k(\xi_k), \quad \xi_k, \xi_{k+1} \in \Omega, \quad k = \overline{0, n-1}, \quad (11)$$

где  $\{\Psi^k(\xi_k), \xi_k \in \Omega\}$  — вектор (матрица) узловых значений приближенного решения задачи на сетке  $\Omega$  на  $k$ -ом слое по времени.

Эта численная процедура, соответствующая расчетам на *фиксированной сетке*, подробно описана в [2]. Параметрами алгоритма, определяющими точность вычислений, здесь являются: шаг по времени  $\tau$ , ГВІ-параметр  $\sigma$ , размер прямоугольника  $D$ , шаги сетки  $\Omega$ . Эти параметры должны выбираться эмпирически. Результаты численных расчетов, полученные в [2], продемонстрировали влияние параметров на точность метода и доказали практическую применимость метода, подтвердив исходное предположение о характере искомого решения, лежащее в основе алгоритма.

Теоретическим обоснованием численной процедуры (11) служит работа [3]. Ее результатом является теорема, из которой вытекает конечность “носителя” приближенного решения, получаемого по формуле (9).

**Теорема 2.1.** [3]. Пусть потенциал  $V(x)$  удовлетворяет условию (2), а функция  $\Psi_0(\xi_0)$ ,  $\xi_0 \in \mathbb{R}^2$ , такова, что

$$|\Psi_0(\xi_0)| \leq C_0 e^{-\alpha_0 |\xi_0|^2} \quad \forall \xi_0 \in \mathbb{R}^2,$$

где  $C_0 > 0$ ,  $\alpha_0 > 0$  — некоторые постоянные. Тогда

- с любой степенью точности можно заменить интегрирование в (8) по бесконечной области интегрированием по некоторой конечной области, которая может быть выбрана одной и той же для всех  $\xi_n \in \mathbb{R}^2$  (равномерная по параметру  $\xi_n \in \mathbb{R}^2$  сходимость интеграла (8));
- приближенное решение  $\Psi(t_n, \xi_n)$ , полученное по формуле (8), также является быстро убывающей на бесконечности функцией: существуют положительные постоянные  $C_n, \alpha_n$ , такие, что

$$|\Psi(t_n, \xi_n)| \leq C_n e^{-\alpha_n |\xi_n|^2} \quad \forall \xi_n \in \mathbb{R}^2. \quad (12)$$

Описанная только что численная процедура решения задачи (1) на фиксированной сетке оказывается неэффективной, когда решением является волновой пакет, перемещающийся в фазовой плоскости  $(q, p)$ . В этом случае (см. рис. 1) требуется выбор изначально большого прямоугольника  $D$ , который смог бы “покрыть” все возможные положения пакета на рассматриваемом отрезке времени  $[0, T]$ . При этом в каждый отдельный момент времени использование такой большой области неоправданно, т.к. решение отлично от нуля лишь на малом подмножестве  $D$ . Поэтому применение процедуры (11) потребует большого количества лишних вычислений и памяти. В связи с этим возникает необходимость в модификации алгоритма за счет введения *подвижной сетки*. Перейдем к изложению алгоритма.

Вместо прямоугольника  $D$  рассмотрим на каждом временном слое  $k$  наименьший прямоугольник  $D(k)$ , стороны которого параллельны координатным осям и который содержит множество всех точек плоскости, где значения решения по абсолютной величине превышают некоторый малый порог  $\delta$ . Другими словами,  $\delta$  — параметр метода, определяющий степень точности, с которой значения решения считаются равными нулю. В прямоугольнике  $D(k)$  вводится сетка  $\Omega(k)$ , состоящая лишь из “существенных” на текущем слое узлов сетки  $\Omega$ . Вместо (11) используется другая схема вычисления по слоям:

$$\Psi^{k+1}(\xi_{k+1}) = h_q h_p \sum_{\xi_k \in \Omega(k)} G(\tau, \xi_{k+1}, \xi_k) \Psi^k(\xi_k), \quad k = \overline{0, n-1}. \quad (13)$$

С течением времени прямоугольник  $D(k)$  может перемещаться в плоскости  $(q, p)$  и изменять свой размер. Соответствующие преобразования сетки  $\Omega(k)$ , связанные с добавлением и исключением узлов при переходе на следующий слой по времени, предлагается выполнять согласно следующему **алгоритму**.

**Шаг 1.** Пусть известно решение  $\Psi^k(\xi_k)$  на сетке  $\Omega(k)$ . Вычисляем по формуле (13) решение  $\Psi^{k+1}$  на следующем временном слое во всех узлах  $\Omega(k)$ .

**Шаг 2.** *Анализируем найденные значения и удаляем лишние узлы из сетки.* Для этого значения  $\Psi^{k+1}$  в узлах сетки  $\Omega(k)$  просматриваются вглубь по строкам или столбцам в зависимости от выбранной стороны прямоугольника  $D(k)$ . Из сетки удаляются строки (столбцы) узлов, в которых все значения решения меньше порогового по модулю:  $|\Psi^{k+1}(\xi_k)| < \delta$ , до тех пор пока не встретится строка (столбец), где есть хотя бы одно значение, превышающее  $\delta$ . После этого указанная процедура повторяется, начиная со следующей стороны. Таким образом, рассматриваются все стороны прямоугольника в определенной последовательности (например, по часовой стрелке, начиная с левого края).

**Шаг 3.** *Рассматривается возможность добавления в сетку новых узлов.* Сетка может быть расширена на сторонах, где прямоугольник не был обрезан. Если такие стороны есть, то они рассматриваются последовательно. При этом значения решения  $\Psi^{k+1}$  в потенциально новых узлах, не принадлежащих сетке  $\Omega(k)$ , рассчитываются, как и прежде, по формуле (13). Сетка расширяется за счет строк (столбцов) узлов, которые добавляются с соответствующих сторон, до тех пор пока в них есть хоть одно значение решения, превышающее по модулю порог  $\delta$ .

Иллюстрация работы описанного алгоритма представлена на рис. 2. Результатом является приближенное решение  $\Psi^{k+1}$  на следующем слое по времени, определенное, вообще говоря, на новой сетке  $\Omega(k+1)$ .

Алгоритм расчета на подвижной сетке описан. В заключение поясним механизм работы предложенного метода. Как уже было отмечено в [4], способ построения функции  $G$  делает процедуру (9), (10) вычисления по слоям практически идентичной классическому *методу частиц*. Действительно, согласно (6) перепишем формулу (13) (как общий случай (11)) перехода на следующий временной слой в виде

$$\begin{aligned} \Psi^{k+1}(\xi_{k+1}) &= h_q h_p \sum_{\xi_k \in \Omega(k)} F \left\{ W(x, t; \xi_k) \Big|_{\xi_{k+1}} \right\} \Psi^k(\xi_k) = \\ &= F \left\{ h_q h_p \sum_{\xi_k \in \Omega(k)} W(x, \tau; \xi_k) \Psi^k(\xi_k) \Big|_{\xi_{k+1}} \right\}. \quad (14) \end{aligned}$$

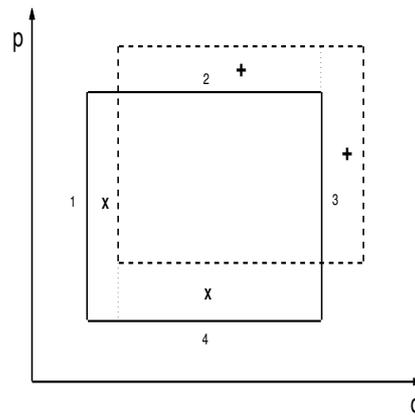


Рис. 2. Порядок, в котором рассматриваются стороны носителя пакета при преобразовании сетки. Зачеркнуты “x” удаленные узлы, помечены “+” добавленные. Сетка, которая получается в результате, изображена пунктиром

Таким образом, переход на следующий слой по времени можно разбить на несколько этапов. Сначала приближенное решение задачи (1)  $\psi^k(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}$ , на  $k$ -ом слое по времени представляется с помощью преобразования Фурье–Гаусса суммой гауссианов (5) с центрами в узлах сетки  $\Omega(k)$  — *частиц*. Затем осуществляется малый шаг по времени  $\tau$ , в продолжении которого каждая частица-гауссиан перемещается по классической траектории. В результате получим функцию

$$\psi^{k+1}(x) = h_q h_p \sum_{\xi_k \in \Omega(k)} W(x, \tau; \xi_k) \Psi^k(\xi_k), \quad x \in \mathbb{R},$$

которую можно интерпретировать как приближенное решение на следующем слое по времени, полученное методом частиц.

Аналогия с методом частиц позволяет лучше представить “физический смысл” параметров предлагаемого метода и их влияние на точность в практических расчетах. Так, параметр  $\sigma$  определяет пространственную ширину используемых частиц. Становится совершенно естественным, что чем он меньше, тем точнее получается представление, при условии, что при этом необходимо использовать большее число частиц, т.е. уменьшать шаги в квадратурах. Шаг по времени  $\tau$  должен быть достаточно малым, чтобы частицы “не разлетелись слишком далеко друг от друга”. Скорость же разлета определяется потенциалом, т.е. эта скорость своя для каждой задачи. Из этого также следует, что уменьшение  $\sigma$ , т.е. использование более “узких” частиц, в свою очередь, должно потребовать более мелкого шага по времени. Строго это выражается в том, что все утверждения в работах [1, 3] доказываются в предположении  $0 < \tau \leq \sigma \leq \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  — некоторая постоянная, зависящая только от потенциала.

Перейдем теперь к изложению результатов численных расчетов.

**3. Численные результаты.** Рассмотрим результаты расчетов предложенным методом некоторых модельных задач: гармонический осциллятор, равноускоренное движение, частица в двухъямном потенциале и рассеяние на потенциальном барьере. Во всех постановках в качестве начального условия брался гауссов волновой пакет (5). Расчеты проводились для разных значений параметров метода, чтобы продемонстрировать их влияние на точность. В качестве результата мы будем искать некоторые наблюдаемые величины, такие как среднее значение координаты частицы, норму волновой функции, и следить за перемещением “носителя” приближенного решения (сетки) по фазовой плоскости.

Сначала мы рассмотрим *гармонический осциллятор* и *равноускоренное движение* частицы. Эти задачи являются “книжными” примерами — хорошо изучены и имеют аналитическое решение. Тем не менее, они являются характерными примерами финитного и инфинитного движения системы. Оказывается, что гауссов волновой пакет  $W$  с центром, который движется по классической траектории, в случае квадратического потенциала удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера точно. Это основное утверждение, на котором основывается упомянутый выше метод гауссовых волновых пакетов. Поэтому в обоих случаях функция  $G$  из (7) будет точной функцией Грина и точным решением задачи (1) для начального условия гауссовой формы. Это позволяет автоматически находить аналитическое решение задачи в удобном для нас виде. Заметим также, что хотя функция Грина в данном случае известна точно,

задачи с квадратическим потенциалом являются хорошим тестом для алгоритма преобразования сетки, о точности которого можно судить по отклонению от известного в данном случае точного решения.

**3.1. Гармонический осциллятор.** Движение частицы в гармоническом поле соответствует задаче (1) с потенциалом

$$V(x) = \frac{\omega^2 x^2}{2}, \tag{15}$$

где  $\omega$  — частота колебаний осциллятора. В качестве начального условия будем брать гауссов волновой пакет (5) с дисперсией  $\sigma_0$ , который для определенности имеет нулевой начальный импульс, и с центром, смещенным относительно положения равновесия:

$$q_0 = x_0, \quad p_0 = 0. \tag{16}$$

Известно, что в случае квадратичного потенциала средние значения координаты и импульса по времени удовлетворяют классическим уравнениям движения. Поэтому, учитывая начальные условия (16), получаем следующее точное выражение для среднего значения координаты:

$$\langle x \rangle(t) \equiv \langle \psi | x | \psi \rangle(t) = x_0 \cos(\omega t). \tag{17}$$

Формула (17) вместе с выражением вида (7) для точного решения использовались для контроля точности.

Гармонический осциллятор является примером финитного движения, когда решение является волновым пакетом, который с течением времени перемещается в ограниченном объеме фазового пространства. Особенностью гармонического потенциала также является то, что решение сохраняет гауссов профиль. Причем ширина гауссиана остается неизменной, если только в начальный момент времени она совпадала с шириной основного состояния  $\sigma_0 = \hbar/\omega$ . В представлении Фурье–Гаусса решение (по абсолютной величине) качественно ведет себя как гауссиан, центр которого вращается в фазовой плоскости  $(q, p)$  по эллипсу вокруг точки равновесия  $(0, 0)$ . Это проиллюстрировано на рис. 3, где изображены носители приближенного решения в различные моменты времени.

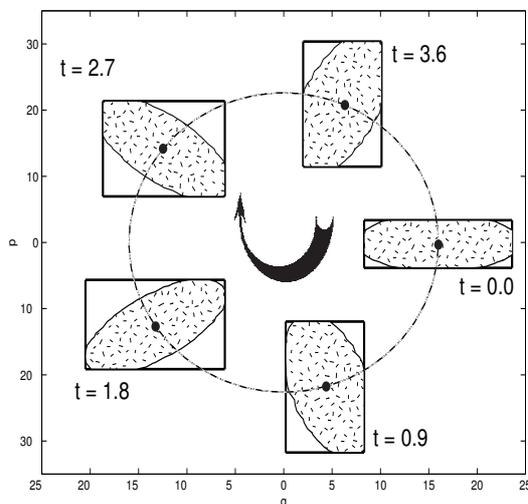


Рис. 3. Гармонический осциллятор: перемещение приближенного решения в фазовой плоскости  $(q, p)$ . Центр пакета описывает эллиптическую траекторию. Заштрихованы множества точек, где решение в соответствующие моменты времени превосходит по модулю порог  $\delta$ . Сплошной линией изображены прямоугольники  $D(k)$ , в которых вводится сетка  $\Omega(k)$

Результат на рис. 3 был получен при  $q_0 = 16, p_0 = 0, \sigma_0 = 4, \hbar = 1, \omega = \sqrt{2}$ . Параметры метода были следующими:  $\tau = 0.1, \sigma = 1, \delta = 10^{-3}, h_q = h_p = 0.9$ .

Результаты расчетов с этими параметрами для различных шагов по времени приведены в табл. 1, которая иллюстрирует влияние шага по времени  $\tau$  на точность вычислений. Задача решалась на отрезке  $[0, 10]$  и каждый раз вычислялось соответствующее число слоев  $N$ . О величине погрешности можно судить по наибольшему отклонению: приближенного решения (столбец 3), среднего значения координаты (столбец 4) и нормы (столбец 5) от точных значений в узлах сетки.

Таблица 1

1	2	3	4	5
$\tau$	$N$	$\max_n \ \Delta\Psi^n\ _{C(\Omega)}$	$\max_n  \Delta x(n) $	$\max_n \ \psi^n\ _{L^2(\Omega)} - 1$
0.01	1000	0.007723	0.006612	0.000232
0.05	200	0.002816	0.001411	0.000047
0.1	100	0.002019	0.000759	0.000025
0.2	50	0.045909	0.101418	0.002601
0.25	40	0.553962	5.950544	0.189092

Из таблицы видно, что с ростом  $\tau$  погрешность увеличивается. Используя связь с методом частиц, можно сказать, что частицы начинают “разлетаться” слишком далеко друг от друга. Использование же слишком мелкого шага  $\tau$  также неоправданно, поскольку число слоев увеличивается, а каждый слой вносит некоторую “неустранимую” ошибку квадратуры.

Повысить точность можно за счет “измельчения” частиц. Табл. 2 иллюстрирует влияние  $\sigma$  на точность вычислений. Расчеты проводились с шагом  $\tau = 0.25$  при различных  $\sigma$  для  $N = 40$  слоев по времени на отрезке  $[0, 10]$ . Остальные параметры задачи и метода оставлены без изменений.

Таблица 2

1	2	3	4
$\sigma$	$\max_n \ \Delta\Psi^n\ _{C(\Omega)}$	$\max_n  \Delta x(n) $	$\max_n \ \psi^n\ _{L^2(\Omega)} - 1$
1.0	0.553962	5.950544	0.189092
0.8	0.128834	0.610864	0.016309
0.5	0.011076	0.026219	0.000842
0.25	0.189855	1.520247	0.047894

Шаг  $\tau = 0.25$  оказался слишком велик для  $\sigma = 1.0$ . Из табл. 2 видно, что уменьшением  $\sigma$  до 0.5 удалось сделать погрешность приемлемой. Дальнейшее уменьшение вызывает увеличение ошибки. Это связано с тем, что пространственная сетка с шагами  $h_q = h_p = 0.9$  оказывается слишком грубой для все более “мелких” частиц. Это подтверждает табл. 3, где приведены результаты расчетов для различных шагов  $h_q$  и  $h_p$  при фиксированных  $\tau = \sigma = 0.25$ . Эта таблица иллюстрирует влияние шагов пространственной сетки  $h_q$  и  $h_p$  на точность вычислений для  $N = 40$  слоев по времени на отрезке  $[0, 10]$ . Остальные параметры задачи и метода оставлены без изменений.

Таблица 3

1	2	3	4
$h_q = h_p = h$	$\max_n \ \Delta\Psi^n\ _{C(\Omega)}$	$\max_n  \Delta x(n) $	$\max_n \ \psi^n\ _{L^2(\Omega)} - 1$
0.9	0.189855	1.520247	0.047894
0.8	0.069396	0.244634	0.008393
0.65	0.010923	0.018654	0.000605

В заключение отметим, что для применения предложенного метода к решению задачи (1) необходимо требовать выполнения условия (2) на потенциал. Для гармонического осциллятора и некоторых других задач в настоящей работе, в которых  $V(x)$  неограниченно возрастает, формально это условие не выполнено. Но так как задача решается приближенно на конечном отрезке времени, мы можем считать потенциал в уравнении (1) равным  $V(x)$  лишь в достаточно большой, но ограниченной области, где фактически перемещается сетка и решение. За пределами этой области потенциал можно взять равным нулю.

**3.2. Равноускоренное движение частицы.** Рассмотрим задачу (1) с потенциалом вида

$$V(x) = Ex, \tag{18}$$

где  $E$  — некоторая постоянная. Задача (1), (18) в совокупности с начальным условием (5) соответствует движению частицы в однородном внешнем поле, которая в начальный момент находилась в точке  $q_0$  и имела импульс  $p_0$  (например, электрон в однородном электрическом поле с напряженностью  $E$ ). Здесь мы имеем частный случай квадратического потенциала. Поэтому, как и для гармонического осциллятора, метод гауссовых волновых пакетов дает нам функцию Грина и решение задачи точно (см. формулу (7)). Однако равноускоренное движение является характерным примером инфинитного движения. Решение в этом случае неограниченно перемещается и расплывается по пространству, сохраняя гауссов профиль.

Тестовые расчеты проводились при следующих значениях параметров:  $\hbar = 1$ ,  $E = 1.0$ ,  $q_0 = 2.5$ ,  $p_0 = -1.0$ ,  $\sigma_0 = 1.0$  и  $\tau = 1.0$ ,  $\sigma = \sigma_0 = 1.0$ ,  $\delta = 10^{-2}$ ,  $h_q = h_p = 0.9$ . Результат представлен на рис. 4.

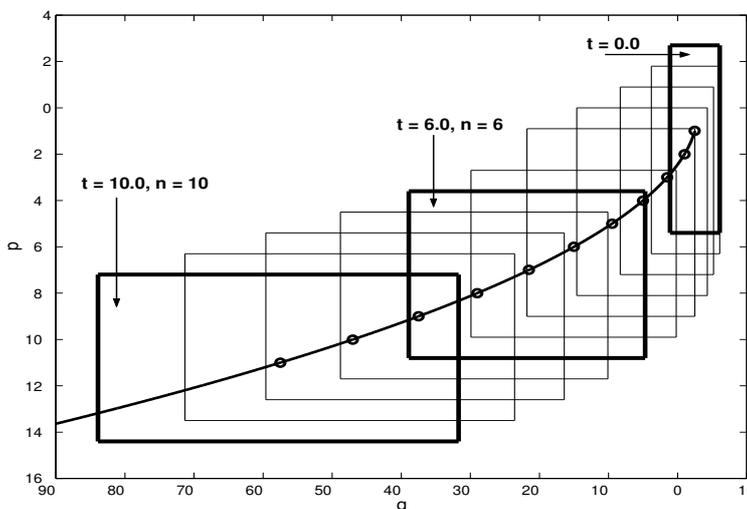


Рис. 4. Равноускоренное движение: изменение сетки (перемещение носителя) с течением времени. Особо выделены: носитель начального условия  $t = 0.0$  и первый носитель, не пересекающийся с ним  $t = 6.0 = 6\tau$ , а также носитель решения в финальный момент времени  $t = 10.0 = 10\tau$ . Сплошная линия — классическая траектория, “o” — центры пакетов (средние значения координаты и импульса)

Этот рисунок демонстрирует, что хотя функция Грина аппроксимируется точно, шаг по времени нельзя выбирать сколь угодно большим. Это ограничение связано уже с использованным алгоритмом перемещения сетки. Шаг по времени должен быть достаточно малым для того, чтобы носители приближенного решения при переходе со слоя на слой перекрывались. На рис. 4 хорошо видно, что шаг  $\tau$  не должен превышать 6.0. Практические расчеты также показывают, что вычисления нельзя вести сколь угодно долго с фиксированным шагом. Даже если изначально  $\tau$  был выбран удачно, то из-за постоянного ускорения пакет в конце концов приобретет слишком высокую для данного шага скорость и носители перестанут перекрываться. Таким образом, чтобы решать задачу на больших отрезках времени, необходимо уменьшать  $\tau$ . Погрешности расчета показаны в табл. 4.

Таблица 4

1	2	3	4	5
$\tau$	$N$	$\max_n \ \Delta\Psi^n\ _{C(\Omega)}$	$\max_n  \Delta x(n) $	$\max_n \left  \ \psi^n\ _{L^2(\Omega)} - 1 \right $
1.0	10	0.010092	0.043391	0.000387

**3.3. Двухъямный потенциал.** Рассмотрим задачу (1) с потенциалом вида

$$V(x) = g(x^2 - x_0^2)^2, \tag{19}$$

где  $g$  и  $x_0$  — фиксированные параметры. Двухъямный потенциал, как и гармонический осциллятор, является примером финитного движения системы, но в этом случае гамильтониан не является квадратичным и аппроксимация функции Грина (6) не является точной.

В качестве начального условия возьмем гауссов волновой пакет (5), покоящийся в одной из ям (см. рис. 5):

$$q_0 = x_0 = 2.5, \quad p_0 = 0.0, \quad \sigma_0 = 1.0, \quad g = 0.02 \quad (\hbar = 1). \quad (20)$$

О точности получаемого приближенного решения будем судить по отклонению его нормы от единицы.

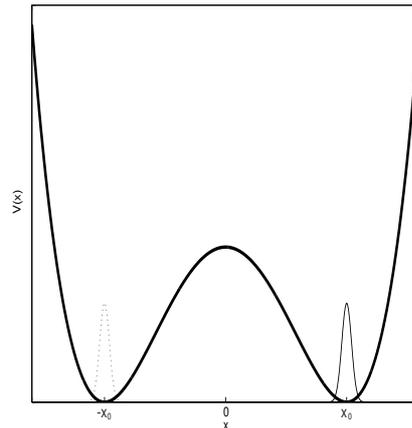


Рис. 5. Двухъямный потенциал: начальное условие (сплошная линия) покоится в одной из ям. С течением времени решение перемещается в другую яму (пунктир) и обратно

Влияние шага по времени  $\tau$  на точность вычислений отражено в табл. 5. Здесь задача решалась на отрезке  $[0, 15]$  для различных  $\tau$  при следующих параметрах метода:  $\sigma = \sigma_0 = 1.0$  и  $h_q = h_p = 0.9$ . Для порога  $\delta$  также выбирались различные значения. Из таблицы видно, что уменьшение  $\delta$  с  $10^{-2}$  до  $10^{-3}$  не оказывает решающего действия на результат.

Таблица 5

1	2	3	
		$\max_n \ \psi^n\ _{L^2(\Omega)} - 1$	
		$\delta = 10^{-2}$	$\delta = 10^{-3}$
0.5	30	0.195226	0.194344
0.05	300	0.039511	0.030262
0.01	1500	0.057938	0.006738

Как уже было продемонстрировано на примере гармонического осциллятора, дальнейшего улучшения точности метода можно добиться за счет уменьшения  $\sigma$ . Влияние параметра  $\sigma$  на точность вычислений при фиксированных  $\tau = 0.05$  и  $\delta = 10^{-3}$  иллюстрируется в табл. 6.

Таблица 6

1	2
$\sigma$	$\max_n \ \psi^n\ _{L^2(\Omega)} - 1$
1.0	0.200890
0.5	0.023004

Было рассчитано 2200 слоев по времени на отрезке  $[0, 110]$ . За это время пакет “возвращается” в яму, из которой он начал свое движение. Это представлено на рис. 6, где изображена зависимость среднего значения координаты частицы от времени  $\langle x \rangle(t)$ . Заметим, что параметры задачи и начального условия (20)

были выбраны таким образом, что  $\langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle \approx 0.515 < V(0) = 0.78125$ . Тем самым, средняя энергия в начальном состоянии меньше высоты барьера между ямами, и частица на рис. 6 туннелирует через барьер.

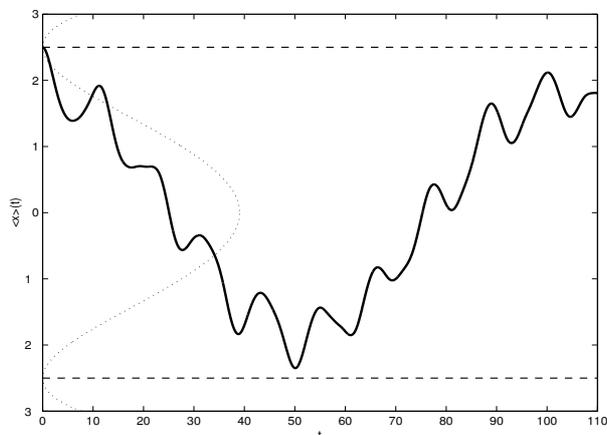


Рис. 6. Двухъямный потенциал: зависимость среднего значения координаты частицы  $\langle x \rangle(t)$  от времени. Частица “перемещается” в пространстве между центрами ям (пунктир), туннелируя под барьером

Задача (1) с двухъямным потенциалом (19) уже рассматривалась в работе [2], где для ее решения была использована процедура (11) с фиксированной сеткой. Двухъямный потенциал является примером задачи, для которой использование фиксированной сетки оказывается более эффективным, чем подвижной. Действительно, как показывают расчеты, начиная буквально с первых шагов по времени приближенное решение становится существенно отличным от нуля во всей области между центрами ям. При этом с течением времени носитель решения практически не перемещается и сохраняет свои размеры. Это проиллюстрировано на рис. 7, где изображен модуль FVI-образа решения в различные моменты времени. Поэтому задача может быть решена и на фиксированной сетке, которая в данном случае обладает рядом преимуществ [2] над подвижной. Но подвижная сетка не требует предварительной оценки размеров области, где будет перемещаться решение, что остается ее основным преимуществом.

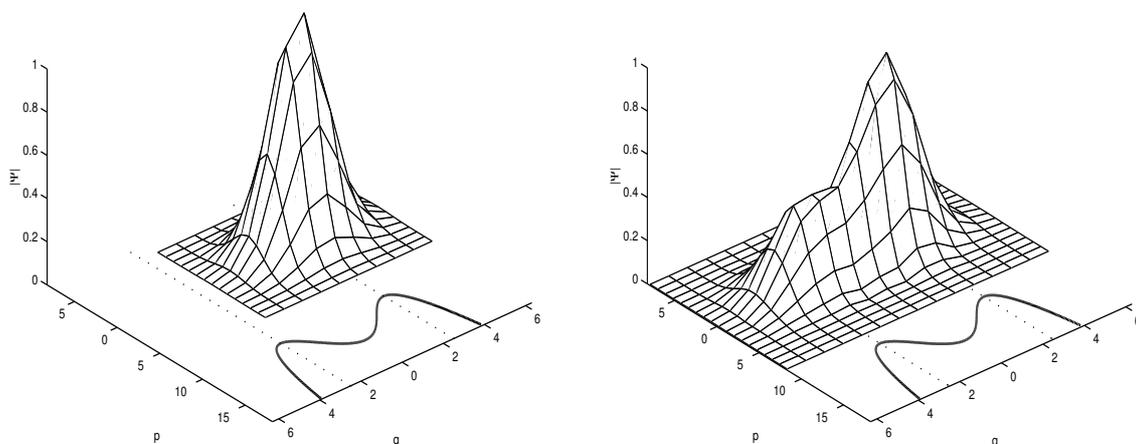


Рис. 7. Двухъямный потенциал: модуль FVI-образа начального условия (слева) и приближенного решения в момент времени  $t = 15.0$  (справа). Для сопоставления относительного положения пакетов пунктиром отмечены центры ям и дан эскиз потенциала. Параметры метода те же, что и при расчетах в табл. 6 для  $\sigma = 0.5$

**3.4. Рассеяние на потенциальном барьере.** Рассмотрим задачу о взаимодействии частицы с барьером в виде максвеллиана высоты  $V_0$  и характерной шириной  $d$

$$V(x) = V_0 \exp\left\{-\frac{18x^2}{d^2}\right\}. \quad (21)$$

Такой профиль барьера выбран потому, что метод [1] требует гладкости потенциала. На этот барьер будем бросать гауссов волновой пакет с различной энергией. Центр начального условия  $q_0$  выбирается в зависимости от  $d$  и  $\sigma_0$  так, чтобы пакет и барьер изначально “не пересекались” (см. рис. 8)

$$V_0 = 5.0, \quad d = 6.0, \quad q_0 = -40.0, \quad \sigma_0 = 1.0.$$

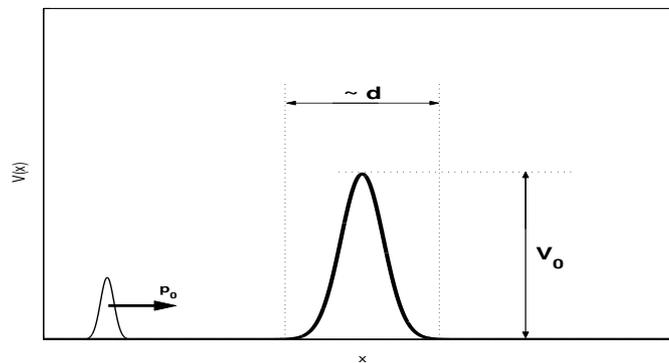


Рис. 8. Рассеяние на потенциальном барьере: начальное условие и потенциал

Конкретные расчеты были проведены для двух различных значений энергии пакета<sup>2</sup>  $E = p_0^2/2$  :  $E = 3.0 < V_0$  и  $E = 6.0 > V_0$ . На рис. 9 изображена зависимость среднего значения координаты частицы от времени  $\langle x \rangle(t)$ .

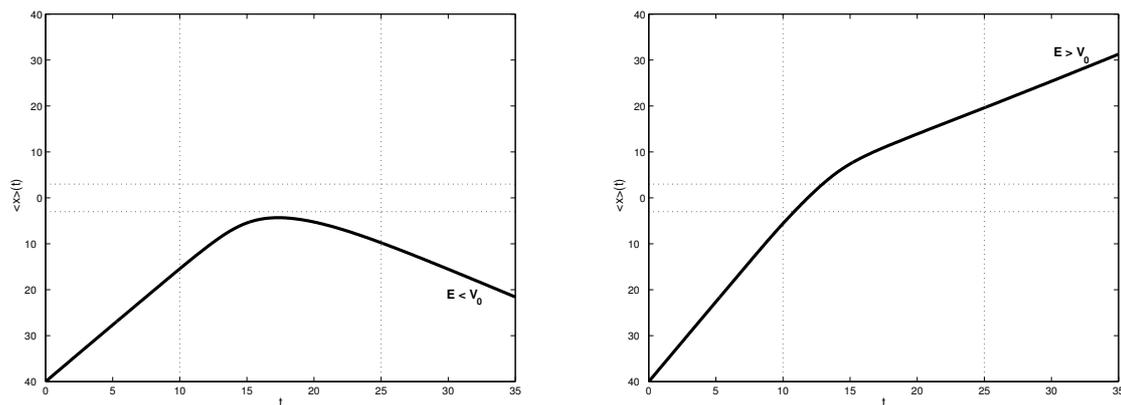


Рис. 9. Рассеяние на потенциальном барьере: зависимость среднего значения координаты от времени  $\langle x \rangle(t) \equiv \langle \psi | x | \psi \rangle(t)$ . Слева — случай, когда энергия пакета  $E$  меньше высоты барьера  $E = 3.0 < 5.0 = V_0$ ; справа — энергия пакета выше высоты барьера  $E = 6.0 > V_0$

В первом случае ( $E < V_0$ ) мы имеем отражение среднего значения от барьера, а во втором ( $E > V_0$ ) — прохождение через барьер. Результат на рис. 9 был получен при следующих параметрах метода:  $\tau = 0.1$ ,  $\sigma = 1.0$ ,  $\delta = 10^{-2}$ ,  $\hbar = 1.0$ .

<sup>2</sup>Напомним, что всюду в расчетах в настоящей работе мы считаем, что параметр  $m$ , соответствующий массе, равен 1.

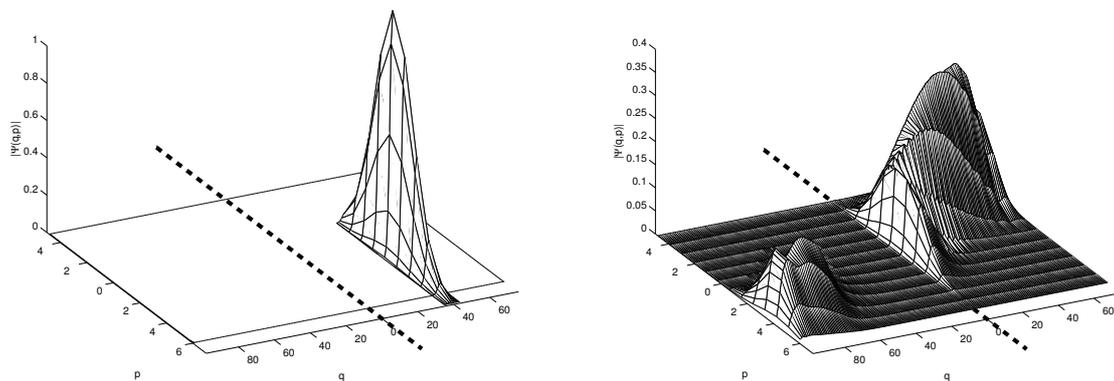


Рис. 10. Рассеяние на потенциальном барьере: случай  $E < V_0$ . Изображен модуль FBI-образа приближенного решения. Влияние барьера схематически представлено пунктиром. Слева: начальное условие относительно носителя приближенного решения в финальный момент времени. Справа: приближенное решение в финальный момент времени  $t = 35.0$  (прошедшая и отраженная волны)

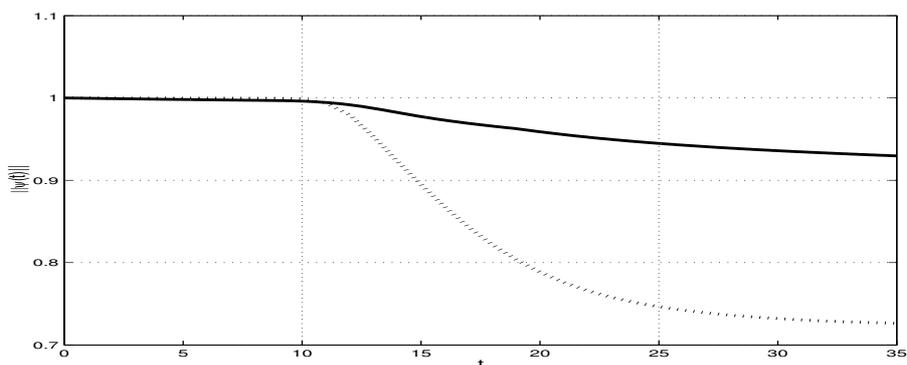


Рис. 11. Рассеяние на потенциальном барьере: влияние шага по времени  $\tau$ . Зависимость  $L^2$ -нормы приближенного решения от времени. Сплошная линия: результат, полученный при  $\tau = 0.1$ ; пунктир: при  $\tau = 1.0$

Рис. 10 дает представление о том, как ведет себя приближенное решение с течением времени для случая  $E < V_0$ . Здесь изображены начальное условие и приближенное решение в финальный момент времени  $t = 35$ . Мы наблюдаем “преобладание” отраженной волны над прошедшей. “Преобладание” здесь понимается в смысле коэффициентов отражения и прохождения, которые при использовании нестационарного подхода определяются обычно как вероятности обнаружить частицу по эту или ту сторону барьера соответственно ( $t \rightarrow \infty$ ):

$$R = \int_{x < 0} |\psi(x, t)|^2 dx, \quad T = \int_{x > 0} |\psi(x, t)|^2 dx, \quad R + T = 1.$$

Относительно точности метода можно сказать, что она теряется в основном во время непосредственного взаимодействия пакета с барьером. Это видно на рис. 11, где изображена зависимость нормы приближенного решения от времени. Здесь приведены результаты расчетов для двух различных шагов по времени  $\tau = 0.1$  и  $\tau = 1.0$ . В последнем случае точность вычислений значительно хуже. На рис. 12 сопоставлены приближенные решения в финальный момент времени  $t = 35.0$ , полученные для различных  $\tau$ . Результат, соответствующий большему шагу по времени, содержит ложные осцилляции, которые возникают из-за того, что “частицы”, составляющие пакет, успевают разлететься слишком далеко друг от друга.

В заключение автор хотел бы выразить благодарность своему научному руководителю профессору А. А. Арсеньеву за постановку задачи и обсуждение результатов.

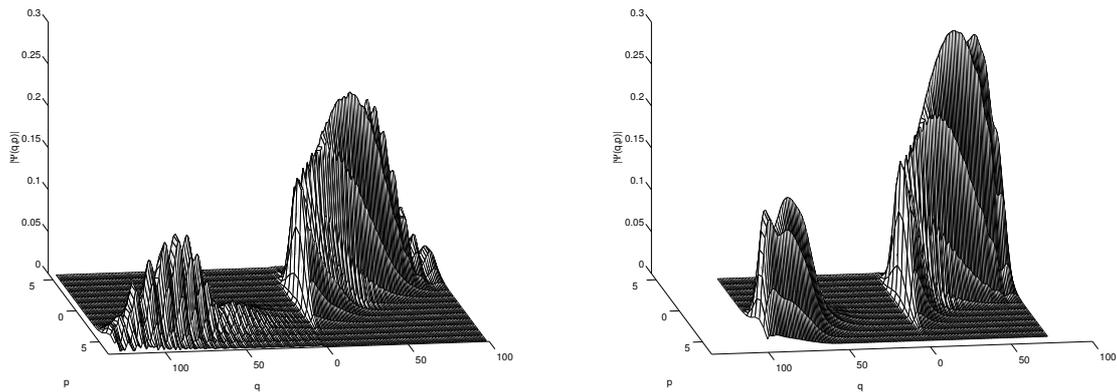


Рис. 12. Рассеяние на потенциальном барьере: влияние шага по времени  $\tau$ . Изображен модуль FWI-образа приближенного решения в момент времени  $t = 35.0$ . Слева: результат, полученный при  $\tau = 1.0$ ; справа:  $\tau = 0.1$

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Арсеньев А.А. Оценка функции Грина оператора Шредингера // Теор. и матем. физ. 1998. **115**, № 1. 85–92.
2. Айдагулов Г.Р. Применение преобразования Фурье–Гаусса к решению задачи Коши для уравнения Шредингера // ЖВМиМФ. 2002. **42**, № 12. 1810–1815.
3. Айдагулов Г.Р. Применение преобразования Фурье–Гаусса к решению задачи Коши для уравнения Шредингера: теоретический анализ численного алгоритма // Вычислительные методы и программирование. 2003. **4**, № 2. 16–20.
4. Arsen'ev A.A. Particle method for the Cauchy problem for the time-dependent Hartree–Fock equation // Preprint 2000:41. Chalmers University of Technology and Göteborg University. Göteborg, 2000 (<http://www.math.chalmers.se/Math/Research/Preprints/>).
5. Folland G.B. Harmonic analysis in phase space. Princeton: Princeton University Press, 1989.
6. Чуи К. Введение в вэйлеты. М.: Мир, 2001.

Поступила в редакцию  
28.11.2003