

УДК 519.632.4

**ПРИМЕНЕНИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ–ГАУССА К РЕШЕНИЮ  
ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА:  
ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЧИСЛЕННОГО АЛГОРИТМА**

**Г. Р. Айдагулов<sup>1</sup>**

В работе дается теоретическое обоснование численной процедуры решения задачи Коши для уравнения Шредингера с использованием преобразования Фурье–Гаусса. Выясняются достаточные условия, которым должны удовлетворять задача (потенциал) и начальные условия.

**Ключевые слова:** нестационарное уравнение Шредингера, гауссовы волновые пакеты, преобразование Фурье–Гаусса, задача Коши, численные методы, устойчивость, сходимость.

**1. Введение.** В последнее время проявляется большой интерес к использованию *гауссовых волновых пакетов* при решении задачи Коши для уравнения Шредингера. Так, в работе [1] техника гауссовых волновых пакетов используется для аппроксимации функции Грина задачи. В работах [2, 3] схожие идеи были использованы для построения приближенного решения в квазиклассическом случае ( $\hbar \ll 1$ ).

Эти теоретические исследования дают направление к построению новых численных алгоритмов решения задачи. В работе [4] предложен сеточный метод, в котором решение находится последовательно по временным слоям. Переход на очередной слой осуществляется с помощью приближенной функции Грина из [1]. Результаты, полученные при расчетах конкретных физических задач в этой работе, доказали практическую применимость предложенного метода. Однако не все элементы численной процедуры были строго обоснованы. Это обоснование и является предметом настоящей работы.

**2. Метод гауссовых волновых пакетов.** В этом разделе мы напомним численную процедуру решения задачи, предложенную в [4], и приведем основные положения и результаты, необходимые для ее построения.

Итак, рассматривается задача Коши для нестационарного уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x)\psi(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \in \mathbb{R}^+, \tag{1}$$

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x), \quad x \in \mathbb{R}. \tag{2}$$

В дальнейшем под потенциалом  $V(x)$  будем понимать функцию из  $L^1(\mathbb{R}, dx)$ , где  $dx$  — мера Лебега на действительной прямой  $\mathbb{R}$ . Образ Фурье  $\hat{V}(k)$  функции  $V(x)$  удовлетворяет неравенству

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

Отсюда вытекает, что

$$V \in C_b^3(\mathbb{R}), \tag{4}$$

то есть  $V$  имеет производные вплоть до третьего порядка, которые ограничены на всем  $\mathbb{R}$ .

*Метод гауссовых волновых пакетов*, на котором основывается результат [1], состоит в следующем. Задаче (1), (2) ставится в соответствие система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dQ}{dt} &= P(t), & Q(0) &= q_0, \\ \frac{dP}{dt} &= -\frac{dV}{dQ}(Q(t)), & P(0) &= p_0, \\ \frac{dA}{dt} &= iB(t), & A(0) &= \sigma, \\ \frac{dB}{dt} &= i \frac{d^2V}{dQ^2}(Q(t))A(t), & B(0) &= 1. \end{aligned} \tag{5}$$

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

Здесь начальные условия  $q_0, p_0$  произвольны, а  $\sigma > 0$  — параметр, значение которого будет дано ниже. На решении этой системы определяются функции

$$S(t|q_0, p_0) = \int_0^t \left\{ \frac{1}{2} P^2(\tau|q_0, p_0) - V(Q(\tau|q_0, p_0)) \right\} d\tau$$

и

$$W(x, t|q_0, p_0) = \frac{1}{2(\pi\hbar)^{3/2} A^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{B(x-Q)^2}{2A\hbar} + i\frac{P}{\hbar}(x-Q) + i\frac{S}{\hbar} \right\}.$$

Таким образом,  $W$  — гауссов волновой пакет, средние значения координаты и импульса которого подчиняются классическим уравнениям движения. Важное для нас свойство этой функции состоит в том, что она является точным решением уравнения (1) в случае квадратичного потенциала. В случае потенциала общего вида ее можно рассматривать как приближенное решение на достаточно малом отрезке времени [2]. Но в обоих случаях  $W$  удовлетворяет начальному условию специального вида — гауссову волновому пакету. Чтобы снять указанное ограничение, используется тот факт, что гауссовы волновые пакеты образуют базис в пространстве состояний. Это выражается формулами

$$F : \varphi(\cdot) \rightarrow F(\varphi|\sigma, q, p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{(x-q)^2}{2\hbar\sigma} - i\frac{p}{\hbar}(x-q) \right\} \varphi(x) dx \quad (6)$$

и

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

для прямого и обратного преобразования Фурье–Гаусса [1] (FBI-преобразование в [5]; преобразование Габора в [6]). Преобразование (6) определяется на функциях  $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ ,  $p, q \in \mathbb{R}$ ,  $\sigma > 0$ . На функциях из  $L^2(\mathbb{R}, dx)$  оно определяется на основе равенства Парсевалья.

Далее, на  $C_0^\infty(\mathbb{R})$  определим оператор

$$K(t, \sigma) : \psi_0(\cdot) \rightarrow K(t, \sigma)\psi_0(x) = \int_{\mathbb{R}^2} W(x, t|q_0, p_0) F(\psi_0|\sigma, q_0, p_0) dq_0 dp_0.$$

Естественно ожидать, что оператор  $K(t, \sigma)$  является приближенным оператором эволюции задачи (1), (2) для достаточно малого промежутка времени. Чтобы получить приближенное решение на произвольных отрезках времени, надо последовательно применять оператор, осуществляя вычисления по слоям. Именно, пусть  $U(t, \hbar)$  — оператор эволюции уравнения (1). Основным результатом работы [1] дается следующей теоремой.

**Теорема 1** [1]. *Если потенциал удовлетворяет условию (3), то существует такое  $\varepsilon > 0$ , зависящее только от потенциала  $V(x)$ , и для любого фиксированного  $T < \infty$  такая не зависящая от  $\hbar$  ( $0 < \hbar < \text{const}$ ) константа  $a(T) < \infty$ , что при всех целых  $n$  и  $0 \leq t \leq \min(\varepsilon n; T)$  выполнена оценка*

$$\|K(t/n, t/n)^n - U(t, \hbar)\| \leq a(T)\hbar^{1/2}n^{-3/2},$$

где  $\|\cdot\|$  — операторная норма в  $L^2(\mathbb{R}, dx)$ .

На практике, чтобы избежать вычисления образа на каждом слое, нам будет удобнее работать в представлении Фурье–Гаусса. Для этого надо посчитать FBI-образ функции  $W$ :

$$\begin{aligned} F(W|\sigma, q, p) &\equiv F_W(t|q_0, p_0, q, p, \sigma) = \\ &= \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{\sigma}{2(A+\sigma B)}} \exp \left\{ -\frac{(Q-q)^2 B}{2(A+\sigma B)\hbar} - \frac{(P-p)^2 A\sigma}{2(A+\sigma B)\hbar} - i\frac{(Q-q)(P-p)A}{(A+\sigma B)\hbar} + \frac{ip(q-Q)}{\hbar} + \frac{i}{\hbar} S \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Функция  $F_W$  является аппроксимацией функции Грина задачи в представлении Фурье–Гаусса. Зададимся FBI-образом  $\Psi_0(q, p)$  начального условия  $\psi_0(x)$ . Тогда, согласно теореме 1, мы можем всегда выбрать достаточно маленький<sup>2</sup> шаг по времени  $\tau$  и соответственно достаточно большую степень  $n$ , чтобы получить

<sup>2</sup>Шаг  $\tau$  не должен превосходить некоторого  $\varepsilon$ , которое определяется только потенциалом.

с любой заданной точностью FBI-образ  $\Psi$  приближенного решения в момент времени  $t_n = n\tau$ :

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

где

$$\xi_j \equiv (q_j, p_j), \quad |\xi_j|^2 \equiv q_j^2 + p_j^2, \quad d\xi_j \equiv dq_j dp_j, \quad j = 0, 1, \dots, n-1, \quad G(\tau, \xi_k, \xi_l) = F_W(\tau | q_l, p_l, q_k, p_k, \tau).$$

В работе [4] предлагается следующая *сеточная реализация* для (8). В качестве начальных условий  $\Psi_0(q, p)$  используются волновые пакеты, которые можно считать локализованными в некоторой конечной области плоскости  $(q, p)$ . Тогда естественно предположить, что с течением времени приближенное решение  $\Psi$  будет также волновым пакетом. Это предположение позволяет заменить интегрирование в (8) по всему пространству интегрированием по некоторой, выбранной изначально с запасом, конечной области  $D$ . В этой области вводится сетка  $\Omega$  и интегралы вычисляются приближенно по квадратурной формуле прямоугольников. Функцию  $G$  достаточно определить один раз только в точках сетки для фиксированных в начале вычислений параметров  $\tau$  и  $\sigma$ . При этом для решения системы (5) на отрезке  $[0, \tau]$  использовался приближенный метод (например, метод Рунге–Кутты 4-го порядка).

Предположение о быстром убывании приближенного решения и возможности выбора фиксированной области  $D$  подтвердилось в [4] практическими вычислениями. В следующем разделе мы докажем свойство функции  $G$ , подтверждающее правомерность такого предположения в общем случае, и поэтому являющееся теоретическим обоснованием предложенной численной процедуры.

**3. Доказательство теоремы 1.** Будем считать, что для некоторых значений  $\tau$  и  $\sigma$  построена функция  $G$  так, как это описано в предыдущем разделе. Тогда справедливо следующее утверждение.

**Лемма 1.** Пусть потенциал  $V(x)$  удовлетворяет условию (3), 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 для любых достаточно малых фиксированных  $\tau$  и  $\sigma$  ( $0 < \tau \leq \sigma$ ) существуют положительные постоянные  $C$  и  $\gamma$ , такие, что подынтегральное выражение в (8) можно ограничить по модулю

$$|G(\xi_n, \xi_{n-1}) \dots G(\xi_1, \xi_0) \Psi_0(\xi_0)| < C e^{-\gamma(|\xi_n|^2 + |\xi_{n-1}|^2 + \dots + |\xi_0|^2)}$$

для любых  $\xi_0, \dots, \xi_n \in \mathbb{R}^2$ .

**Доказательство.** Прежде всего оценим модуль  $G$ . Имеем из (7):

$$|G(\tau, \xi_k, \xi_l)| = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{\sigma}{2|A + \sigma B|}} \exp \frac{1}{2\hbar} \{-\alpha_{11}(Q - q_k)^2 - 2\alpha_{12}(Q - q_k)(P - p_k) - \alpha_{22}(P - p_k)^2\}, \quad (9)$$

где

$$P = P(\tau, q_l, p_l), \quad Q = Q(\tau, q_l, p_l), \quad A = A(\tau, q_l, p_l), \quad B = B(\tau, q_l, p_l)$$

— значения решений основной системы (5) с начальными данными  $\xi_l = (q_l, p_l)$  в момент времени  $\tau \leq \sigma$ , а остальные коэффициенты есть функции от этих значений:

$$\alpha_{11} = \text{Re} \frac{B}{A + \sigma B}, \quad \alpha_{12} = -\text{Im} \frac{A}{A + \sigma B}, \quad \alpha_{22} = \sigma \text{Re} \frac{A}{A + \sigma B}. \quad (10)$$

Для величин (10) в [1] получены оценки<sup>3</sup> при малых  $\sigma$ :

$$\alpha_{11} = \frac{2}{5\sigma} (1 + O(\sigma^2)), \quad \alpha_{12} = -\frac{1}{5} (1 + O(\sigma^2)), \quad \alpha_{22} = \frac{3\sigma}{5} (1 + O(\sigma^2)), \quad \frac{\sigma}{2|A + \sigma B|} \leq C = \text{const.}$$

Постоянные в этих оценках не зависят от начальных условий  $\xi_l = (q_l, p_l)$  в основной системе. Поэтому можно выбрать параметр  $\sigma$  достаточно малым (каким именно — это зависит только от потенциала), чтобы следующие точные грани были конечны и удовлетворяли неравенствам

$$\underline{\alpha_{11}} = \inf_{\xi_l \in \mathbb{R}^2} \alpha_{11}(\tau, q_l, p_l) = \frac{2}{5\sigma} (1 + O(\sigma^2)) > 0,$$

<sup>3</sup>Здесь и далее под  $C$  мы будем понимать все постоянные, конкретные значения которых неважны.

$$\underline{\alpha}_{22} = \inf_{\xi_l \in \mathbb{R}^2} \alpha_{22}(\tau, q_l, p_l) = \frac{3\sigma}{5} (1 + O(\sigma^2)) > 0,$$

$$\overline{\alpha}_{12} = \sup_{\xi_l \in \mathbb{R}^2} |\alpha_{12}(\tau, q_l, p_l)| = \frac{1}{5} (1 + O(\sigma^2)) > 0.$$

Тогда выражение, стоящее в показателе экспоненты в правой части (9), можно оценить снизу равномерно по всем  $\xi_l = (q_l, p_l) \in \mathbb{R}^2$  и для всех  $\xi_k = (q_k, p_k)$ :

$$\begin{aligned} & \alpha_{11}(Q - q_k)^2 + 2\alpha_{12}(Q - q_k)(P - p_k) + \alpha_{22}(P - p_k)^2 \geq \\ & \geq \underline{\alpha}_{11}(Q - q_k)^2 - 2\overline{\alpha}_{12}|Q - q_k||P - p_k| + \underline{\alpha}_{22}(P - p_k)^2 \geq \end{aligned} \quad (11)$$

$$\geq \gamma((Q - q_k)^2 + (P - p_k)^2) = \gamma \tilde{f}(\xi_k, \xi_l). \quad (12)$$

Существование постоянной  $\gamma$  в последнем неравенстве следует из того, что величину

$$\Delta = \overline{\alpha}_{12}^2 - \underline{\alpha}_{11}\underline{\alpha}_{22} = -\frac{1}{5} + O(\sigma^2)$$

всегда можно считать отрицательной; поэтому в (11) мы имеем строго положительную форму.

Для дальнейшего доказательства нам потребуется более подробно рассмотреть значения  $Q$  и  $P$ . Это значения решений системы Гамильтона в момент времени  $\tau \leq \sigma$  с начальными условиями  $q_l, p_l$ . Для получения оценок удобнее рассмотреть эквивалентные интегральные соотношения

$$Q(\tau, q_l, p_l) = q_l + \tau p_l - \int_0^\tau (\tau - s)V'(Q(s)) ds, \quad P(\tau, q_l, p_l) = p_l - \int_0^\tau V'(Q(s)) ds.$$

Отсюда получаем

$$|Q - q_l - p_l \tau| \leq M_1 \frac{\tau^2}{2}, \quad |P - p_l| \leq M_1 \tau,$$

где, в силу условия на потенциал (4), постоянная

$$M_1 = \sup_{s \in \mathbb{R}} |V'(s)| < \infty$$

не зависит от  $q_l, p_l$ . Поэтому  $\tilde{f}(\xi_k, \xi_l)$  из (12) можно рассматривать как возмущенное значение функции

$$f(\xi_k, \xi_l) = (q_l + \tau p_l - q_k)^2 + (p_l - p_k)^2,$$

соответствующей свободному движению. Эти возмущения, вносимые потенциалом, равномерно ограничены по начальным условиям  $\xi_l = (q_l, p_l)$ . Наша дальнейшая задача состоит в том, чтобы избавиться в оценках от этих возмущений. Но этого можно добиться, только рассматривая все подынтегральное выражение в (8) целиком.

Таким образом, подынтегральное выражение в (8) можно оценить неравенством

$$|G(\xi_n, \xi_{n-1}) \dots G(\xi_1, \xi_0) \Psi_0(\xi_0)| \leq C e^{-\Gamma \tilde{F}(\xi_n, \dots, \xi_0)}$$

для всех  $\xi_0, \dots, \xi_n \in \mathbb{R}^2$ , где  $\Gamma > 0$  — некоторая постоянная и

$$\begin{aligned} \tilde{F}(\xi_n, \dots, \xi_0) &= (q_{n-1} + \tau p_{n-1} - q_n + \delta_{n-1}^q)^2 + (p_{n-1} - p_n + \delta_{n-1}^p)^2 + \\ &+ (q_{n-2} + \tau p_{n-2} - q_{n-1} + \delta_{n-2}^q)^2 + (p_{n-2} - p_{n-1} + \delta_{n-2}^p)^2 + \dots + (q_0 + \tau p_0 - q_1 + \delta_0^q)^2 + \\ &+ (p_0 - p_1 + \delta_0^p)^2 + q_0^2 + p_0^2 = \|Av_n + \delta_n\|^2. \end{aligned}$$

Здесь

$$v_n = (q_0, p_0, q_1, p_1, \dots, q_n, p_n), \quad \delta_n = (0, 0, \delta_0^q, \delta_0^p, \dots, \delta_{n-1}^q, \delta_{n-1}^p)$$

— векторы из  $\mathbb{R}^{2(n+1)}$ , а  $A \in \mathbb{R}^{2(n+1) \times 2(n+1)}$  — матрица, вид которой сейчас неважен. Под  $\|\cdot\|$  понимается среднеквадратичная норма вектора:  $\|v\|^2 = (v, v) = \sum_k v_k^2$ . Вектор  $\delta_n$  — вектор возмущений, который зависит от  $v_n$ :  $\delta_n = \delta_n(v_n)$ . Однако, как было отмечено выше,  $\delta_n$  ограничен равномерно при всех  $v_n$  по норме константой, которую можно сделать сколь угодно малой, уменьшая шаг по времени.

Далее, по неравенству Коши–Буняковского получаем

$$\|Av_n + \delta_n\|^2 = \|Av_n\|^2 + 2(Av_n, \delta_n) + \|\delta_n\|^2 \geq \|Av_n\|^2 - 2\|Av_n\|\|\delta_n\| + \|\delta_n\|^2 \geq \frac{1}{2}\|Av_n\|^2 \quad (13)$$

для любого  $v_n$ , такого, что  $\|Av_n\|$  больше некоторого  $R_A$ , если только  $\|\delta_n\|$  — ограничена. Последнее как раз имеет место.

Заметим теперь, что матрица  $A$  невырождена. Действительно, система  $Av_n = 0$  с точностью до порядка уравнений имеет вид

$$\begin{cases} q_0 = 0; & p_0 = 0; \\ q_0 + \tau p_0 - q_1 = 0; & p_0 - p_1 = 0; \\ \dots & \\ q_{n-2} + \tau p_{n-2} - q_{n-1} = 0; & p_{n-2} - p_{n-1} = 0; \\ q_{n-1} + \tau p_{n-1} - q_n = 0; & p_{n-1} - p_n = 0. \end{cases}$$

Эта система, как легко видеть, имеет только тривиальное решение. Таким образом, выражение  $\|Av\|$  есть норма в пространстве  $\mathbb{R}^{2(n+1)}$ . Поэтому, по теореме об эквивалентности норм в конечномерном пространстве найдется постоянная  $\gamma > 0$ , такая, что в правой части (13) выполнено неравенство

$$\frac{1}{2}\|Av_n\|^2 \geq \gamma\|v_n\|^2 \equiv \gamma(|\xi_n|^2 + |\xi_{n-1}|^2 + \dots + |\xi_0|^2)$$

для любых  $v_n$ .

Итак, мы показали, что существуют такие положительные постоянные  $C, \gamma, R$ , что модуль подынтегрального выражения в (8) можно оценить сверху величиной

$$C e^{-\gamma(|\xi_n|^2 + |\xi_{n-1}|^2 + \dots + |\xi_0|^2)} \quad (14)$$

для любых  $\xi_0, \dots, \xi_n \in \mathbb{R}^2$ , если только

$$|\xi_n|^2 + |\xi_{n-1}|^2 + \dots + |\xi_0|^2 > R.$$

Последнее условие, очевидно, означает требование принадлежности точки  $(\xi_0, \dots, \xi_n)$  внешности некоторой сферы. Так как эта сфера конечна и фиксирована, то от этого требования можно отказаться, выбрав достаточно большую постоянную  $C$  в (14). Лемма доказана.

Из только что доказанного утверждения немедленно вытекает следующая

**Теорема 2.** Пусть выполнены условия леммы 1. Тогда

– с любой степенью точности можно заменить интегрирование в (8) по бесконечной области интегрированием по некоторой конечной области, причем эта область может быть выбрана одной и той же для всех  $\xi_n \in \mathbb{R}^2$  (равномерная по параметру  $\xi_n \in \mathbb{R}^2$  сходимости 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

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

Эта теорема гарантирует выполнение условий построения численной процедуры для решения задачи (1), (2), которые были сформулированы в предыдущем разделе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Арсеньев А.А. Оценка функции Грина оператора Шредингера // Теор. и матем. физ. 1998. **115**, № 1. 85–92.
2. Hagedorn G.A. Raising and lowering operators for semiclassical wave packets // Ann. Phys. 1998. **269**. 77–104.
3. Hagedorn G.A., Joye A. Exponentially accurate semiclassical dynamics: propagation, localization, Ehrenfest times, scattering and more general states // Ann. Henri Poincaré. 2000. **1**. 837–883.
4. Айдагулов Г.Р. Применение преобразования Фурье–Гаусса к решению задачи Коши для уравнения Шредингера // ЖВМиМФ. 2002. **42**, № 12. 1810–1815.
5. Folland G.B. Harmonic analysis in phase space. Princeton: Princeton Univ., 1989.
6. Чуи К. Введение в вэйвлеты. М.: Мир, 2001.

Поступила в редакцию  
13.05.2003