Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Международный научный семинар

АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Сборник тезисов докладов

Москва
МГУ им. М.В.Ломоносова
Физический факультет
28–29 ноября 2014 г.

МЕТОДЫ С РАСЩЕПЛЕНИЕМ ПО ПОТЕНЦИАЛУ И ДИСКРЕТНЫМИ ПГУ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА В НЕОГРАНИЧЕННОМ ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕДЕ

Злотник А.А.

НИУ Высшая школа экономики, г. Москва

azlotnik2007@mail.ru

Уравнение Шрёдингера играет важную роль в квантовой механике и электронике, ядерной, атомной, волновой физике и др. Часто его необходимо решать в неограниченных областях. Для этой цели разработан ряд методов, обычно использующих приближенные прозрачные граничные условия (ПГУ) на искусственных границах, в том числе дискретные ПГУ. Для последних полностью отсутствуют отражения от искусственных границ на практике и разработана строгая математическая теория. В настоящей работе для возможности эффективной реализации двухслойных схем с дискретными ПГУ в многомерном случае предлагается применить расщепление по потенциалу типа Стренга. Это делается единообразно как для схемы 2-го порядка аппроксимации, так и особенно полезных на практике схем повышенного порядка аппроксимации. Даются теоремы о виде дискретных ПГУ для схем с расщеплением и о единственности и равномерной по времени L^2-устойчивости их решений.

Рассмотрим многомерное нестационарное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi+V\psi \text{ при } x=(x_1,\ldots,x_n)\in\Pi_\infty,\ t>0, \qquad (1)$$

где i — мнимая единица, $\hbar>0$ и $m_0>0$ — постоянные, Δ — n-мерный оператор Лапласа, $n\ge 2$, $\Pi_\infty:=(0,\infty)\times(0,X_2)\times\ldots\times(0,X_n)$ — полубесконечный параллелепипед. Также $\psi=\psi(x,t)$ — искомая комплекснозначная волновая функция, а $V(x)$ — заданный вещественный потенциал. Пусть $c_\hbar:=\hbar^2/2m_0$.

Поставим следующие граничное, на бесконечности и начальное условия

$$\psi(\cdot,t)|_{\partial\Pi_\infty}=0,\ \|\psi(\cdot,t)\|_{L^2(\Pi)}<\infty \text{ при } t>0,\ \psi|_{t=0}=\psi^0(x) \text{ на } \Pi_\infty, \qquad (3)$$

где $\partial\Pi_\infty$ — граница Π_∞. Предположим также, что $V(x)=V_\infty$, $\psi^0(x)=0$ при $x\in\Pi_\infty$ и $x_1\ge X_0$ при некотором (достаточно большом) $X_0>0$.

Введем равномерную сетку $\overline{\omega}_{h,\infty}$ на $\overline{\Pi}_\infty$ с узлами $x_{\mathbf{j}}=(j_1h_1,\ldots,j_nh_n)$, где $j_1\ge 0$, $0\le j_2\le J_2,\ldots,0\le j_n\le J_n$, и шагами $h_1=X_1/J_1,\ldots,h_n=X_n/J_n$, где $X_1>X_0$ и $h_1\le X_1-X_0$. Пусть $\omega_{h,\infty}=\overline{\omega}_{h,\infty}\cap\Pi_\infty$ и $\Gamma_{h,\infty}:=\overline{\omega}_{h,\infty}\setminus\omega_{h,\infty}$ — ее внутренняя часть и граница. Здесь и ниже $h=(h_1,\ldots,h_n)$, $|h|$ — длина h и $\mathbf{j}=(j_1,\ldots,j_n)$. Введем операторы разностных отношений назад $\overline{\partial}_k$ и вперед ∂_k и усреднение по Нумерову $s_{Nk}W_j:=(W_{j-1}+10W_j+W_{j+1})/12$ по x_k. Введем равномерную сетку $\overline{\omega}^\tau$ по времени с узлами $t_m=m\tau$, $m\ge 0$ и шагом $\tau>0$. Пусть $\omega^\tau:=\overline{\omega}^\tau\setminus\{0\}$. Введем операторы разностного отношения назад $\overline{\partial}_t$ по t.

Введем n-мерный оператор усреднения по Нумерову $s_N=I+(h_1^2/12)\partial_1\overline{\partial}_1+\ldots+(h_n^2/12)\partial_n\overline{\partial}_n$, расщепленный оператор $\overline{s}_N=s_{N1}\ldots s_{Nn}$ и их $n-1$-мерные варианты $s_{N\hat{k}}$ и $\overline{s}_{N\hat{k}}$ (без $(h_k^2/12)\partial_k\overline{\partial}_k$ и s_{Nk}), а также дискретизации оператора Лапласа — простейшую $\Delta_h=\partial_1\overline{\partial}_1+\ldots+\partial_n\overline{\partial}_n$, типа Нумерова $\Delta_{hN}=s_{N\hat{1}}\partial_1\overline{\partial}_1+\ldots+s_{N\hat{n}}\partial_n\overline{\partial}_n$ и ее модификацию с расщеплением $\overline{\Delta}_{hN}=\overline{s}_{N\hat{1}}\partial_1\overline{\partial}_1+\ldots+\overline{s}_{N\hat{n}}\partial_n\overline{\partial}_n$.

Рассмотрим три трехшаговых симметричных по времени дискретизации уравнения Шрёдингера (1) с расщеплением по потенциалу типа Стренга

$$i\hbar\frac{\breve{\Psi}^m-\Psi^{m-1}}{\tau_m/2}=\Delta V\frac{\breve{\Psi}^m+\Psi^{m-1}}{2} \text{ на } \omega_{h,\infty}, \qquad (3)$$

$$i\hbar s\frac{\tilde{\Psi}^m-\breve{\Psi}^m}{\tau_m}=-c_\hbar\Delta^{(h)}\frac{\tilde{\Psi}^m+\breve{\Psi}^m}{2}+s\Big(\tilde{V}\frac{\tilde{\Psi}^m+\breve{\Psi}^m}{2}\Big)+F^m \text{ на } \omega_{h,\infty}, \qquad (4)$$

$$i\hbar\frac{\Psi^m-\tilde{\Psi}^m}{\tau_m/2}=\Delta V\frac{\Psi^m+\tilde{\Psi}^m}{2} \text{ на } \omega_{h,\infty}, \qquad (5)$$

с краевыми и начальными условиями

$$\breve{\Psi}^m|_{\Gamma_{h,\infty}}=0,\ \tilde{\Psi}^m|_{\Gamma_{h,\infty}}=0,\ \Psi^m|_{\Gamma_{h,\infty}}=0,\ \Psi^0=\Psi_h^0 \text{ на } \overline{\omega}_{h,\infty}, \qquad (6)$$

при всех $m\ge 1$, где $s=I$ (единичный оператор), s_N, $\overline{s}_N$ и $\Delta^{(h)}=\Delta_h$, Δ_{hN}, $\overline{\Delta}_{hN}$ для дискретизаций A (типа Кранка-Никольсон), B (типа Нумерова-Кранка-Никольсон), C (с расщеплением пространственных операторов) соответственно.

Кроме того, $\Delta V:=V-\tilde{V}$ и вспомогательный одномерный потенциал $\tilde{V}=\tilde{V}(x_1)$ таков, что $\tilde{V}(x_1)=V_\infty$ при $x_1\ge X_0$ (в частности, $\tilde{V}(x)\equiv V_\infty$). Пусть $\Psi_h^0|_{\Gamma_{h,\infty}}=0$. Слагаемое F^m добавлено в (4) для более полного изучения устойчивости. Функции $\breve{\Psi}$ и $\tilde{\Psi}$ — вспомогательные неизвестные, а Ψ — основная.

Дискретизация A имеет погрешность аппроксимации 2-го порядка $O(\tau_{\max}^2+|h|^2)$, а B и C — повышенный порядок $O(\tau_{\max}^2+|h|^4)$. Однако операторы дискретизации B при $n\ge 3$ не обладают надлежащими спектральными свойствами и поэтому ниже она рассматривается только при $n=2$, а в дополнение к ней и построена дискретизация C.

Ясно, что уравнения (3) и (5) сводятся к явным формулам

$$\breve{\Psi}^m=\mathcal{E}^m\Psi^{m-1},\ \Psi^m=\mathcal{E}^m\tilde{\Psi}^m \text{ с } \mathcal{E}^m:=\Big(1-i\frac{\tau_m}{4\hbar}\Delta V\Big)/\Big(1+i\frac{\tau_m}{4\hbar}\Delta V\Big). \qquad (7)$$

Пусть H_h — гильбертово пространство функций $W:\ \overline{\omega}_{h,\infty}\to\mathbb{C}$ таких, что $W|_{\Gamma_{h,\infty}}=0$, $\|W\|_{H_h}^2:=\sum_{j_1=1}^{\infty}\sum_{j_2=1}^{J_2-1}\ldots\sum_{j_n=1}^{J_n-1}|W_{\mathbf{j}}|^2h_1\ldots h_n<\infty$.

Теорема 1. *Пусть $F^m,\Psi_h^0\in H_h$ при всех $m\ge 1$. Тогда существует единственное решение схемы с расщеплением (3)–(6) такое, что $\Psi^m\in H_h$ при всех $m\ge 0$, и для него верна выражающая устойчивость оценка*

$$\max_{0\le m\le M}\|\Psi^m\|_{H_h}\le\|\Psi_h^0\|_{H_h}+\frac{2c_0}{\hbar}\sum_{m=1}^{M}\|F^m\|_{H_h}\tau_m \text{ при всех } M\ge 1,$$

где $c_0=1,6,(3/2)^n$ для дискретизаций A, B, C соответственно.

При $F=0$ верен закон сохранения $\|\Psi^m\|_{H_h}^2=\|\Psi_h^0\|_{H_h}^2$ при всех $m\ge 1$.

Схема (3)–(6) непосредственно не реализуема на практике из-за бесконечности числа неизвестных на каждом слое по времени. Выполним ее сужение на конечную сетку по пространству $\bar{\omega}_h := \{x_{\mathrm{j}} \in \bar{\omega}_{h,\infty};\, 0 \le j_1 \le J_1\}$. Пусть ω_h и $\partial\omega_h = \bar{\omega}_h \setminus \omega_h$ — внутренняя часть и граница $\bar{\omega}_h$, а $\Gamma_{1h} := \{x_{\mathrm{j}};\, j_1 = J_1,\, 1 \le j_2 \le J_2 - 1, \dots, 1 \le j_n \le J_n - 1\}$ и $\Gamma_h = \partial\omega_h \setminus \Gamma_{1h}$ — части границы. Пусть также $\tilde{\omega}_h := \omega_h \cup \Gamma_{1h}$, $\omega_{h1} := \{j_1 h_1;\, 1 \le j_1 \le J_1 - 1\}$ и $\omega_{h\hat{1}} = \{(j_2 h_2, \dots, j_n h_n);\, 1 \le j_2 \le J_2 - 1, \dots, j_n \le J_n - 1\}$.

По определению *дискретное ПГУ* — это такое (нелокальное) граничное условие на Γ_{1h}, которое позволяет выполнить указанное сужение. Чтобы его явно записать, введем операторы $s_{N1}^{-} W_j = \frac{1}{12} W_{j-1} + \frac{5}{12} W_j$ (действует по x_1), $s_N^{-} = s_{N1}^{-} + \frac{h_2^2}{24}\partial_2\bar{\partial}_2$, $\bar{s}_{N,\hat{1}\hat{k}} := \prod_{2 \le \ell \le n,\, \ell \ne k} s_{N\ell}$.

Положим $\Delta_{\hat{1}}^{(h)} = \partial_2\bar{\partial}_2 + \dots + \partial_n\bar{\partial}_n$, $\bar{s}_{N\hat{1}\hat{2}}\partial_2\bar{\partial}_2 + \dots + \bar{s}_{N\hat{1}\hat{n}}\partial_n\bar{\partial}_n$ для дискретизаций A и C соответственно. Введем следующие аппроксимации $c_h\partial/\partial x_1$ на искусственной границе

$$\mathcal{D}_{1h}(\breve{\Psi}, \check{\Psi}) := c_h\bar{\partial}_1 \frac{\breve{\Psi} + \check{\Psi}}{2} - \frac{h_1}{2}\Big[i\hbar\frac{\breve{\Psi} - \check{\Psi}}{\tau} + \big(c_h\Delta_{\hat{1}}^{(h)} - V_\infty I\big)\frac{\breve{\Psi} + \check{\Psi}}{2}\Big],$$

$$c_h s_{N2}\bar{\partial}_1 \frac{\breve{\Psi} + \check{\Psi}}{2} - h_1\Big[i\hbar s_N^{-}\frac{\breve{\Psi} - \check{\Psi}}{\tau} + \big(c_h s_{N1}^{-}\partial_2\bar{\partial}_2 - V_\infty s_N^{-}\big)\frac{\breve{\Psi} + \check{\Psi}}{2}\Big],$$

$$c_h\bar{s}_{N\hat{1}}\bar{\partial}_1 \frac{\breve{\Psi} + \check{\Psi}}{2} - h_1 s_{N1}^{-}\Big[i\hbar\bar{s}_{N\hat{1}}\frac{\breve{\Psi} - \check{\Psi}}{\tau} + \big(c_h\Delta_{\hat{1}}^{(h)} - V_\infty\bar{s}_{N\hat{1}}\big)\frac{\breve{\Psi} + \check{\Psi}}{2}\Big]$$

для дискретизаций A, B, C соответственно.

Введем прямое $\mathcal{F}_k$ и обратное $\mathcal{F}_k^{-1}$ дискретные преобразования Фурье по синусам по x_k, $2 \le k \le n$. Пусть $(R * Q)^m := \sum_{p=0}^{m} R^p Q^{m-p}$ $(m \ge 0)$ — дискретная свертка функций $R, Q : \bar{\omega}^\tau \to \mathbb{C}$.

Теорема 2. *Пусть* $F^m = 0$ *и* $\Psi_h^0 = 0$ *на* $\omega_{h,\infty} \setminus \omega_h$ *при всех* $m \ge 1$ *и* $\Psi_h^0|_{j_1 = J_1 - 1} = 0$. *Решение схемы (3)–(6) такое, что* $\Psi^m \in H_h$ *при всех* $m \ge 0$, *удовлетворяет схеме с расщеплением на конечной сетке, в которой уравнения (3), (5) выполняются на* $\omega_h \cup \Gamma_{1h}$, *а (6) — на* ω_h, *с граничными условиями*

$$\breve{\Psi}^m|_{\Gamma_h} = 0,\ \check{\Psi}^m|_{\Gamma_h} = 0,\ \Psi^m|_{\Gamma_h} = 0,\ \mathcal{D}_{1h}(\breve{\Psi}^m, \check{\Psi}^m) = c_h S_{\mathrm{ref}}^m \overset{\square}{\mathbf{\Psi}}{}^m_{J_1} \ \text{на}\ \Gamma_{1h}, \tag{8}$$

при всех $m \ge 1$ *и начальным условием* $\Psi^0 = \Psi_h^0$ *на* $\bar{\omega}_h$; *здесь* $\overset{\square}{\mathbf{\Psi}}{}^m_{J_1} = \{\check{\Psi}^0|_{j_1 = J_1}, \dots, \check{\Psi}^m|_{j_1 = J_1}\}$ *— вектор-функция.*

Оператор в правой части дискретного ПГУ (8) имеет вид

$$S_{\mathrm{ref}}^m \mathbf{\Phi}^m := \mathcal{F}_2^{-1} \dots \mathcal{F}_n^{-1}\big[\sigma_{\mathrm{q}} R_{\mathrm{q}} * \Phi^{\mathrm{q}}\big]^m \tag{9}$$

для любых $\Phi:\ \omega_{h\hat{1}} \times \bar{\omega}^\tau \to \mathbb{C}$ *таких, что* $\Phi^0 = 0$, *с* $\mathbf{\Phi}^m := \{\Phi^0, \dots, \Phi^m\}$ *и* $\Phi^{\mathrm{q}} := (\mathcal{F}_n \dots (\mathcal{F}_2\Phi)^{(q_2)} \dots)^{(q_n)}$, $\mathrm{q} = (q_2, \dots, q_n)$. *Явный вид* σ_{q} *и трехчленные рекуррентные формулы для вычисления* R_{q} *даны в [1–4].*

Пусть для дискретизаций B и C выполнено условие $|\tilde{V}(a) - \tilde{V}(b)| \le L|b - a|^\alpha$ при всех $0 \le a < b \le X_1$, с некоторым $\alpha \in [0,1]$.

Теорема 3. *Пусть* $\Psi_h^0|_{j_1 = J_1 - 1, J_1} = 0$. *Решение схемы с расщеплением на конечной сетке единственно, если* $L\tau h_1^\alpha < 8\hbar$ *либо* $L\tau h_1^\alpha < 16\hbar$ *для дискретизаций* B *и* C *соответственно. Для него верна выражающая устойчивость в* L^2 *оценка*

$$\max_{0 \le m \le M} \|\Psi^m\|_{\tilde{\omega}_h} \le \|\Psi_h^0\|_{\tilde{\omega}_h} + \frac{2c_0}{\hbar}\sum_{m=1}^{M} \|F^m\|_{\omega_h}\tau \ \ \text{при всех}\ \ M \ge 1,$$

где обе нормы являются L^2 *— нормами на соответствующих сетках.*

Применение оператора $\mathcal{F}_2 \dots \mathcal{F}_n$ к уравнению (4) на ω_h (для краткости при $F = 0$) и дискретному ПГУ (9) приводит к набору независимых одномерных разностных задач Шрёдингера по x_1 для каждой функции $\breve{\Psi}^{m\mathrm{q}}$

$$i\hbar s_{\theta_{\mathrm{q}}1}\frac{\breve{\Psi}^{m\mathrm{q}} - \check{\Psi}^{m\mathrm{q}}}{\tau} = -c_h\partial_1\bar{\partial}_1\frac{\breve{\Psi}^{m\mathrm{q}} + \check{\Psi}^{m\mathrm{q}}}{2} + s_{\theta_{\mathrm{q}}1}\Big(\tilde{V}_{\mathrm{q}}\frac{\breve{\Psi}^{m\mathrm{q}} + \check{\Psi}^{m\mathrm{q}}}{2}\Big)\ \text{на}\ \omega_{h1},\ \breve{\Psi}^{m\mathrm{q}}|_{j_1=0} = 0,$$

$$\Big[c_{h,\mathrm{q}}\bar{\partial}_1\frac{\breve{\Psi}^{m\mathrm{q}} + \check{\Psi}^{m\mathrm{q}}}{2} - h_1 s_{\theta_{\mathrm{q}}1}^{-}\Big(i\hbar\frac{\breve{\Psi}^{m\mathrm{q}} - \check{\Psi}^{m\mathrm{q}}}{\tau} - V_{\infty,\mathrm{q}}\frac{\breve{\Psi}^{m\mathrm{q}} + \check{\Psi}^{m\mathrm{q}}}{2}\Big)\Big]\Big|_{j_1 = J_1} = c_{h,\mathrm{q}}\big(R_{\mathrm{q}} * \overset{\square}{\mathbf{\Psi}}{}^{\mathrm{q}}_{J_1}\big)^m,$$

где $\tilde{V}_{\mathrm{q}} := \tilde{V} + c_h\Delta V_{\infty,\mathrm{q}}$, а операторы $s_{\theta_{\mathrm{q}}1}W_j = \theta_{\mathrm{q}}W_{j-1} + (1 - 2\theta_{\mathrm{q}})W_j + \theta_{\mathrm{q}}W_{j+1}$ и $s_{\theta_{\mathrm{q}}1}^{-}W_j = \theta_{\mathrm{q}}W_{j-1} + (0.5 - \theta_{\mathrm{q}})W_j$ действуют по x_1. При этом $\theta_{\mathrm{q}} = 0, 1/12$ для дискретизаций A, C соответственно (θ_{q} в случае B см. в [2, 3]); формулы для $\Delta V_{\infty,\mathrm{q}}$ даны в [1–4]. Это позволяет при известном Ψ^{m-1} построить эффективный прямой алгоритм вычисления Ψ^m. Он использует прогонки по x_1, быстрые дискретные преобразования Фурье по $x_2, \dots, x_n$ и формулы (7).

Результаты для каждой из дискретизаций A, B, C подробно даны в [1, 3, 4], см. также [2], причем они легко переносятся на случай задачи типа (1), (2) в бесконечном параллелепипеде (при этом значения $V_{\pm\infty}$ могут различаться). Там же представлены оценки погрешности и результаты расчетов с прямоугольными и гладкими потенциалами (барьерами и ямами).

Работа выполнена при финансовой поддержке программы «Научный фонд НИУ ВШЭ», проект 14–01–0014.

Литература

1. B. Ducomet, A. Zlotnik, I. Zlotnik // ESAIM: Math. Model. Numer. Anal. 2014. V. 48. № 6. P. 1681–1699.
2. A. Zlotnik et al.// Numer. Math. Adv. Appl. – ENUMATH 2013, A. Abdulle et al., eds. Lecture Notes Comput. Sci. Eng. Berlin, Springer. 2014. V. 103. P. 163–171.
3. A. Zlotnik, A. Romanova // Appl. Numer. Math. 2015, принято к печати.
4. B. Ducomet, A. Zlotnik, A. Romanova // Appl. Math. Comput. 2015, принято к печати.