УДК 519.63

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

Г. Р. Айдагулов[1]

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.

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 временны́м 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 $\widehat{V}(k)$ функции $V(x)$ удовлетворяет неравенству

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

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

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

[1] 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

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

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

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

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 Парсеваля.

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

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

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). Основной результат 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* $\hbar$ ($0 < \hbar <$ const) *константа* $a(T) < \infty$, *что при всех целых* n *и* $0 \leqslant t \leqslant \min(\varepsilon n; T)$ *выполнена оценка*

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

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:

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

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[2] шаг по времени τ и соответственно достаточно большую степень n, чтобы получить

[2]Шаг τ не должен превосходить некоторого ε, которое определяется только потенциалом.

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

$$\Psi(t_n, \xi_n) = \overbrace{\int \cdots \int}^{n \text{ раз}}_{\mathbb{R}^{2n}} G(\tau, \xi_n, \xi_{n-1})\, G(\tau, \xi_{n-1}, \xi_{n-2}) \ldots G(\tau, \xi_1, \xi_0)\, \Psi_0(\xi_0)\, d\xi_0 \ldots d\xi_{n-1}, \tag{8}$$

где

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

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 Ψ 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 Ω и интегралы вычисляются приближенно по квадратурной формуле прямоугольников. Функцию G достаточно определить один раз только в точках сетки для фиксированных в начале вычислений параметров τ и σ. При этом для решения системы (5) на отрезке $[0, \tau]$ использовался приближенный метод (например, метод Рунге–Кутта 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 τ и σ 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*

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

где $C_0 > 0$, $\alpha_0 > 0$ — некоторые постоянные. Тогда для любых достаточно малых фиксированных τ и σ $(0 < \tau \leqslant \sigma)$ существуют положительные постоянные C и γ, такие, что подынтегральное выражение в (8) можно ограничить по модулю

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

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

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

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

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 $\tau \leqslant \sigma$, а остальные коэффициенты есть функции от этих значений:

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

Для величин (10) в [1] получены оценки[3] при малых σ:

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

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

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

[3] Здесь и далее под C мы будем понимать все постоянные, конкретные значения которых неважны.

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

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

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 $\xi_k = (q_k, p_k)$:

$$\alpha_{11}(Q - q_k)^2 + 2\alpha_{12}(Q - q_k)(P - p_k) + \alpha_{22}(P - p_k)^2 \geqslant$$

$$\geqslant \underline{\alpha}_{11}(Q - q_k)^2 - 2\overline{\alpha}_{12}|Q - q_k||P - p_k| + \underline{\alpha}_{22}(P - p_k)^2 \geqslant \tag{11}$$

$$\geqslant \gamma\bigl((Q - q_k)^2 + (P - p_k)^2\bigr) = \gamma\widetilde{f}(\xi_k, \xi_l). \tag{12}$$

Существование постоянной γ 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 $\tau \leqslant \sigma$ с начальными условиями q_l, p_l. Для получения оценок удобнее рассмотреть эквивалентные интегральные соотношения

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

Отсюда получаем

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

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

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

не зависит от q_l, p_l. Поэтому $\widetilde{f}(\xi_k, \xi_l)$ 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

$$\bigl|\,G(\xi_n, \xi_{n-1})\ldots G(\xi_1, \xi_0)\,\Psi_0(\xi_0)\,\bigr| \leqslant Ce^{-\Gamma\widetilde{F}(\xi_n,\ldots,\xi_0)}$$

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

$$\begin{aligned}\widetilde{F}(\xi_n, \ldots, \xi_0) = {}&(q_{n-1} + \tau p_{n-1} - q_n + \delta^q_{n-1})^2 + (p_{n-1} - p_n + \delta^p_{n-1})^2 + \\ &+ (q_{n-2} + \tau p_{n-2} - q_{n-1} + \delta^q_{n-2})^2 + (p_{n-2} - p_{n-1} + \delta^p_{n-2})^2 + \cdots + (q_0 + \tau p_0 - q_1 + \delta^q_0)^2 + \\ &+ (p_0 - p_1 + \delta^p_0)^2 + q_0^2 + p_0^2 = \|Av_n + \delta_n\|^2.\end{aligned}$$

Здесь

$$v_n = (q_0, p_0, q_1, p_1, \ldots, q_n, p_n), \quad \delta_n = (0, 0, \delta^q_0, \delta^p_0, \ldots, \delta^q_{n-1}, \delta^p_{n-1})$$

— 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 δ_n — вектор возмущений, который зависит от v_n: $\delta_n = \delta_n(v_n)$. Однако, как было отмечено выше, δ_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

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

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

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

для любых v_n.

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

$$Ce^{-\gamma(|\xi_n|^2+|\xi_{n-1}|^2+\dots+|\xi_0|^2)} \qquad (14)$$

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

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

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* $\xi_n\in\mathbb{R}^2$ *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*,* α_n*, такие, что*

$$\big|\Psi(t_n,\xi_n)\big|\leqslant C_ne^{-\alpha_n|\xi_n|^2}\quad\forall\,\xi_n\in\mathbb{R}^2.$$

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