

СПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА НА НЕРАВНОМЕРНОЙ КООРДИНАТНОЙ СЕТКЕ

*М. А. Захаров*¹

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Исследуется принципиальная возможность численного решения нестационарного уравнения Шредингера для волновой функции, определенной на неравномерной координатной сетке, спектральным методом с использованием алгоритма быстрого преобразования Фурье. В основе метода лежит приведение неравномерной координатной сетки к равномерной путем нелинейного преобразования координат с последующей аппроксимацией оператора эволюции с помощью формулы произведения Ли–Троттера–Сузуки. Построены алгоритмы численного решения первого и второго порядков.

The fundamental possibility of a numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation for a wave function defined on a non-uniform coordinate grid by the spectral method using the fast Fourier transform algorithm is discussed. The method is based on reducing the non-uniform coordinate grid to a uniform one by a non-linear transformation of coordinates and approximation of the obtained evolution operator using the Lee–Trotter–Suzuki product formula. Algorithms for the numerical solution of the first and second orders are constructed.

PACS: 02.70.Hm; 02.30.Nw; 03.65.Db; 02.60.Cb

ВВЕДЕНИЕ

Одним из популярных и часто используемых методов численного решения нестационарного уравнения Шредингера является метод расщепления оператора эволюции [1–5] (подробный обзор можно найти в работе [6]). В основе метода лежит аппроксимация оператора эволюции набором более простых экспоненциальных операторов, последовательно действующих на волновую функцию.

Одной из основных особенностей метода является раздельная работа с операторами, содержащими производные по координате, и операторами, зависящими от координат. В случае операторов, содержащих производные, расчет производится в импульсном представлении, во втором случае — в координатном. Переход из одного представления в другое может быть эффективно осуществлен с помощью алгоритма быстрого преобразования Фурье (БПФ). В настоящее время существует множество оптимизированных алгоритмов БПФ и библиотек для расчета, например [7], в том числе

¹E-mail: zakharovmax@jinr.ru

для распределенных вычислений (технология CUDA Nvidia, <https://docs.nvidia.com/cuda/cufft>), позволяющих значительно сократить время расчета.

Одним из главных ограничений для реализации описанного выше метода расщепления является необходимость использования равномерной координатной сетки для быстрого преобразования Фурье. Вместе с тем сегодня появляются задачи, в которых может быть выгодным использование неравномерной координатной сетки. Например, в задачах с присутствием тонких потенциальных структур [8–10] или микроразмерных нестационарных квантовых объектов [11, 12].

Проблеме численного решения уравнения Шредингера на неравномерной координатной сетке посвящено множество работ, большинство из которых рассматривает либо использование разностных схем, например, [13–16], либо переход от преобразования Фурье к полиномиальному, как, например, в [17]. Отдельно стоит отметить работы, посвященные изучению возможности применения алгоритма неоднородного преобразования Фурье (NFFT) [18–21].

Однако с учетом скорости вычисления и простоты использования БПФ интересным остается принципиальная возможность его применения к численному решению нестационарного уравнения Шредингера для неравномерной координатной сетки.

В настоящей работе рассматривается решение уравнения Шредингера методом расщепления оператора эволюции в частном случае, когда узлы координатной сетки распределены в пространстве по некоторому нелинейному закону, такому, что преобразованием координат ее можно свести к равномерной. Такой подход, как будет показано ниже, позволяет применить алгоритм БПФ для расчета аппроксимации оператора эволюции.

В разд. 1 представлены примеры нелинейных преобразований координат. Показано, как эти преобразования меняют уравнение Шредингера и какой вид приобретает оператор эволюции. В разд. 2 обсуждается способ аппроксимации полученного оператора эволюции на основе формулы произведения Ли–Троттера–Сузуки. Разд. 3 включает численные примеры, демонстрирующие устойчивость и точность применения на примере одной из вычислительных схем.

1. ОПЕРАТОР ЭВОЛЮЦИИ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА НА НЕРАВНОМЕРНОЙ КООРДИНАТНОЙ СЕТКЕ

Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера, в котором волновая функция определена на дискретной координатной сетке с неравномерным шагом:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\tilde{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(\tilde{x}, t)}{\partial \tilde{x}^2} + U(\tilde{x}, t) \Psi(\tilde{x}, t). \quad (1)$$

Далее будет использоваться безразмерная система единиц, где $m = \hbar = 1$.

Пусть шаг координатной сетки \tilde{x} определен таким образом, чтобы узлы сетки нелинейным преобразованием координат можно было привести к равномерной сетке. Рассмотрим случай, когда узлы сетки \tilde{x} распределены на отрезке от 0 до \tilde{x}_{\max} . Нелинейная замена координат должна сводить узлы сетки \tilde{x} к узлам сетки x , равномерно распределенным на отрезке от 0 до 1.

Таким условиям соответствует множество нелинейных замен координат. В качестве примера приведем пару таких преобразований:

$$\tilde{x} = \tilde{x}_{\max} \sqrt{x}, \quad x = \frac{\tilde{x}^2}{\tilde{x}_{\max}^2}, \quad (2a)$$

$$\tilde{x} = \tilde{x}_{\max} \frac{e^{\alpha x} - 1}{e^{\alpha} - 1}, \quad x = \frac{1}{\alpha} \ln \left[\frac{\tilde{x}}{\tilde{x}_{\max}} (e^{\alpha} - 1) + 1 \right]; \quad (2б)$$

здесь α — вещественная константа. Легко убедиться, что, подставляя в формулы (2) значения x от 0 до 1, получаем значения \tilde{x} от 0 до \tilde{x}_{\max} .

Возможен также случай замены

$$\tilde{x} = \tilde{x}_{\max} \ln x, \quad x = \exp \left[\frac{\tilde{x}}{\tilde{x}_{\max}} \right]. \quad (2в)$$

Здесь значения x будут распределены на отрезке от 1 до e .

Нелинейная замена координат неизбежно меняет дифференциальное уравнение (1). В общем случае при нелинейном преобразовании координат нестационарное уравнение Шредингера (1) преобразуется к виду

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -i \hat{H}(x, t) \Psi(x, t) = -i \left[f(x) \frac{\partial}{\partial x} + g(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right] \Psi(x, t), \quad (3)$$

где $f(x)$, $g(x)$ — некоторые вещественные функции.

Для предложенных выше преобразований координат (2a), (2б), (2в) получим следующие уравнения в переменных x и t :

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{i}{\tilde{x}_{\max}^2} \left[\frac{d}{dx} + 2x \frac{d^2}{dx^2} \right] \Psi(x, t) - iU(x, t) \Psi(x, t), \quad (4a)$$

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{i}{2\alpha} \left(\frac{e^{\alpha} - 1}{\tilde{x}_{\max}} \right)^2 \left[-e^{-2\alpha x} \frac{d}{dx} + \frac{e^{-2\alpha x}}{\alpha} \frac{d^2}{dx^2} \right] \Psi(x, t) - iU(x, t) \Psi(x, t), \quad (4б)$$

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{i}{\tilde{x}_{\max}^2} \left[x \frac{d}{dx} + x^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \Psi(x, t) - iU(x, t) \Psi(x, t). \quad (4в)$$

Решение уравнения (3) в точке $t = t_0 + \tau$ можно представить в виде действия оператора эволюции на начальное волновое состояние, выраженного через упорядоченную по времени операторную экспоненту

$$\Psi(x, t) = T \left\{ \exp \left(-i \int_{t_0}^t \hat{H}(x, t') dt' \right) \right\} \Psi(x, t_0). \quad (5)$$

Гамильтониан $\hat{H}(x, t)$ представим в виде суммы кинетической и потенциальной частей, где от времени явно зависит лишь потенциальная часть:

$$\hat{H}(x, t) = \hat{T}(x) + \hat{V}(x, t); \quad (6)$$

здесь

$$\hat{T}(x) = f(x) \frac{\partial}{\partial x} + g(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad \hat{V}(x, t) = U(x, t). \quad (7)$$

Можно показать (см., например, [2, 22], а также [23]), что выражение (5) может быть сведено к действию оператора

$$\Psi(x, t_0 + \tau) = \hat{S}(x, t, t_0) \Psi(x, t_0) = \exp \left\{ -i\tau \left[\tilde{T}(x, t) + \hat{V}(x, t) \right] \right\} \Psi(x, t_0), \quad (8)$$

где

$$\tilde{T}(x, t) = \hat{T}(x) + \overleftarrow{D}_t. \quad (9)$$

\overleftarrow{D}_t — оператор сдвига по времени, действующий влево [2]:

$$\overleftarrow{T}^t(\tau) = \exp \left(\tau \overleftarrow{D}_t \right) = \exp \left(\tau \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial t} \right). \quad (10a)$$

Оператор (10a) коммутирует с оператором $\hat{T}(x)$ и определяется свойством

$$A(t) \overleftarrow{T}^t(\tau) B(t) = \overleftarrow{T}^t(\tau) A(t + \tau) B(t). \quad (10b)$$

Таким образом, задача аппроксимации оператора эволюции (5) сводится к проблеме аппроксимации оператора вида

$$\hat{S} = \exp \left\{ \tau \left(\hat{A} + \hat{B} \right) \right\}. \quad (11)$$

2. АППРОКСИМАЦИЯ ОПЕРАТОРА ЭВОЛЮЦИИ

Аппроксимация оператора (11) может быть представлена в виде формулы произведения Ли–Троттера–Сузуки

$$\exp \left\{ \tau \left(\hat{A} + \hat{B} \right) \right\} = \prod_{j=1}^k \exp \left(a_j \tau \hat{A} \right) \exp \left(b_j \tau \hat{B} \right) + o(\tau^n). \quad (12)$$

Здесь k — необходимое количество пар экспоненциальных операторов A, B для аппроксимации оператора $\exp \{ \tau(A + B) \}$ с точностью $o(\tau^n)$; a_i, b_i — вещественные коэффициенты.

Процедура нахождения коэффициентов a_i, b_i основывается на применении формулы Бэйкера–Кэмпбелла–Хаусдорфа (БКХ)

$$\exp \{ X \} \exp \{ Y \} = \exp \left\{ X + Y + \frac{1}{2} [X, Y] + \frac{1}{12} ([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) + \dots \right\}. \quad (13)$$

Используя формулу БКХ дважды, можно получить аналогичное выражение для симметричного оператора:

$$\exp \{ X \} \exp \{ Y \} \exp \{ X \} = \exp \left\{ 2X + Y - \frac{1}{6} ([X, [X, Y]] - [Y, [Y, X]]) + \dots \right\}. \quad (14)$$

Из формул (13), (14) можно получить выражения аппроксимации для формулы (12) второго и третьего порядков точности соответственно, отбрасывая все слагаемые с коммутаторами.

Аппроксимация формулы (12) первого порядка точности:

$$\exp \{ \tau (A + B) \} = \exp \{ \tau A \} \exp \{ \tau B \} + o(\tau^2). \quad (15)$$

Аппроксимация формулы (12) второго порядка точности:

$$\exp \{ \tau (A + B) \} = \exp \left\{ \frac{1}{2} \tau A \right\} \exp \{ \tau B \} \exp \left\{ \frac{1}{2} \tau A \right\} + o(\tau^3). \quad (16)$$

Таким образом, аппроксимация действия оператора (8) может быть выражена через формулы

$$\hat{S}\Psi = \exp \{ -i\tau\tilde{T} \} \exp \{ -i\tau\hat{U} \} \Psi + o(\tau^2), \quad (17)$$

$$\hat{S}\Psi = \exp \left\{ -i\frac{\tau}{2}\hat{U} \right\} \exp \{ -i\tau\tilde{T} \} \exp \left\{ -i\frac{\tau}{2}\hat{U} \right\} \Psi + o(\tau^3). \quad (18)$$

Одним из основных преимуществ аппроксимации оператора формулой Ли–Троттера–Сузуки является возможность разделить действие оператора на последовательное действие более простых операторов.

Так, действие операторов, содержащих в степени экспоненты лишь функцию от координаты, является умножением на функцию

$$\exp \left\{ \tau \hat{V}(x, t) \right\} \Psi(x, t) = \exp \{ \tau U(x, t) \} \Psi(x, t). \quad (19)$$

Действие операторов, содержащих в степени экспоненты какую-либо комбинацию производных, достаточно легко вычислить в импульсном представлении, поскольку в этом представлении

$$-i \frac{\partial}{\partial x} = k. \quad (20)$$

Тогда действие операторной экспоненты можно представить в виде

$$\exp \left\{ \tau \hat{u} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \Psi(x, t) = F^{-1} \exp \{ \tau \hat{u}(ik) \} F \Psi(x, t). \quad (21)$$

Здесь F, F^{-1} — соответственно прямое и обратное преобразование Фурье; \hat{u} — любая комбинация, состоящая только из производных $\partial/\partial x$.

Подобный подход, однако, напрямую неприменим к случаю гамильтониана (6), (7), поскольку кинетическая часть в нем содержит в степени экспоненты слагаемые, в которых производная умножается на функцию от координаты. Здесь переход в импульсное представление не упрощает действие оператора.

Проведем аппроксимацию оператора вида $\exp \{ f(x)\partial_x + g(x)\partial_x^2 \}$. Воспользуемся идеей формулы Ли–Троттера–Сузуки и представим действие оператора кинетической части гамильтониана в виде последовательного действия более простых операторов.

Для этого с помощью коммутатора представим функцию в степени экспоненты оператора в виде выражения, содержащего только функции от координат или только производные, без смешанных слагаемых:

$$f(x) \frac{\partial}{\partial x} + g(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left[\hat{N} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right), \hat{M} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] + \hat{K} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (22)$$

Для представленных примеров искомые выражения будут выглядеть следующим образом:

$$\frac{d}{dx} + 2x \frac{d^2}{dx^2} = \left[\frac{1}{3} \frac{d^3}{dx^3}, x^2 \right] - \frac{d}{dx}, \quad (23a)$$

$$-e^{-2\alpha x} \frac{d}{dx} + \frac{e^{-2\alpha x}}{\alpha} \frac{d^2}{dx^2} = \left[\frac{1}{6\alpha^2} \frac{d^3}{dx^3} + e^{-2\alpha x}, \frac{1}{4\alpha} \frac{d^2}{dx^2} + e^{-2\alpha x} \right] - \frac{1}{3} \alpha e^{-2\alpha x}, \quad (23б)$$

$$x \frac{d}{dx} + x^2 \frac{d^2}{dx^2} = \left[\frac{1}{4} x^2 + \frac{d^3}{dx^3}, \frac{1}{9} x^3 + \frac{d^2}{dx^2} \right] - \frac{1}{6}. \quad (23в)$$

Применим формулу БКХ для аппроксимации полученного вида оператора

$$\begin{aligned} & \exp \left\{ \tau \left[\hat{N} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right), \hat{M} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] + \tau \hat{K} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} = \\ & = \exp \left\{ \tau \left[\hat{N} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right), \hat{M} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \right\} \exp \left\{ \tau \hat{K} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} + o(\tau^2), \end{aligned} \quad (24a)$$

$$\begin{aligned} & \exp \left\{ \tau \left[\hat{N} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right), \hat{M} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] + \tau \hat{K} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} = \\ & = \exp \left\{ \frac{\tau}{2} \hat{K} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \exp \left\{ \tau \left[\hat{N} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right), \hat{M} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \right\} \times \\ & \quad \times \exp \left\{ \frac{\tau}{2} \hat{K} \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} + o(\tau^3). \end{aligned} \quad (24б)$$

Действие экспоненциального оператора, в степени которого находится коммутатор, можно представить в виде последовательного действия экспоненциальных коммутаторов, в степени которых находятся выражения из коммутатора:

$$\exp \left(\tau \left[\hat{N}, \hat{M} \right] \right) = \prod_{j=1}^k \exp \left(n_j \lambda \hat{N} \right) \exp \left(m_j \lambda \hat{M} \right) + o(\lambda^n). \quad (25)$$

Здесь n, m — вещественные коэффициенты, которые необходимо найти. Коэффициент λ — малый параметр, значение и связь с τ которого будут определены чуть позже. Нахождение неизвестных коэффициентов возможно с помощью применения формулы БКХ к выражению (25).

Идея метода состоит в последовательном применении формулы БКХ к каждой паре экспонент в правой части формулы (25) и представлении пар в виде отдельных

экспонент:

$$e^{n_1 \lambda \hat{N}} e^{m_1 \lambda \hat{M}} = e^{\Omega_1}, \quad e^{n_2 \lambda \hat{N}} e^{m_2 \lambda \hat{M}} = e^{\Omega_2}, \dots, e^{n_k \lambda \hat{N}} e^{m_k \lambda \hat{M}} = e^{\Omega_k}. \quad (26)$$

Здесь Ω — выражения, содержащие функции и коммутаторы от операторов N, M .

Затем из полученных экспонент последовательно составляются новые пары и снова по формуле БКХ преобразуются к одной экспоненте,

$$e^{\Omega_1} e^{\Omega_2} = e^{\Theta_1}, \quad e^{\Theta_1} e^{\Omega_3} = e^{\Theta_2}, \dots, e^{\Theta_{k-1}} e^{\Omega_k} = e^{\Theta_k}. \quad (27)$$

Итоговую экспоненту будем искать в виде

$$\begin{aligned} \exp \{ \Theta_k \} = \exp \left\{ A_{1,k}(n, m) \lambda \hat{N} + A_{2,k}(n, m) \lambda \hat{M} + B_k(n, m) \lambda^2 \left[\hat{N}, \hat{M} \right] + \right. \\ \left. + C_{1,k}(n, m) \lambda^3 \left[\hat{N}, \left[\hat{N}, \hat{M} \right] \right] + C_{2,k}(n, m) \lambda^3 \left[\hat{M}, \left[\hat{M}, \hat{N} \right] \right] + \dots \right\}. \quad (28) \end{aligned}$$

Здесь A, B, C — функции, содержащие неизвестные коэффициенты n_j, m_j .

Для аппроксимации экспоненциального оператора, в степени которого коммутатор операторов N и M , необходимо приравнять к нулю все функции $C_i(n, m)$, кроме одной, стоящей перед коммутатором $\left[\hat{N}, \hat{M} \right]$,

$$\begin{aligned} A_{1,k}(n, m) = 0, \quad A_{2,k}(n, m) = 0, \\ B_k(n, m) = 1, \quad C_{1,k}(n, m) = 0, \quad C_{2,k}(n, m) = 0, \dots \end{aligned} \quad (29)$$

Таким образом, задача сводится к определению всех функций A, B, C , которые будем искать рекуррентным образом, и последующему решению системы нелинейных алгебраических уравнений для удовлетворения условиям (29).

Из выражения (28) становится ясна связь между малыми параметрами λ и τ :

$$\lambda = \sqrt{\tau}. \quad (30)$$

Из соотношения (30) следует, что для того, чтобы получить аппроксимацию оператора (25) с погрешностью $o(\tau^n)$, необходимо выполнить условия (29) для функций при всех слагаемых в (28) порядка меньше λ^{2n} . Так, для аппроксимации с точностью $o(\tau^2)$ требуется решение системы из пяти уравнений.

Аппроксимация первого порядка точности. Вычислим коэффициенты n_j, m_j для аппроксимации оператора (25) первого порядка точности. Рекуррентные формулы для функций A, B, C построим следующим образом. Поскольку уравнений в системе пять, то минимальное количество пар экспонент должно быть три.

Введем обозначения

$$\begin{aligned} \Xi_1 = \hat{N}, \quad \Xi_2 = \hat{M}, \quad \Xi_{1,2} = \left[\hat{N}, \hat{M} \right], \\ \Xi_{112} = \left[\hat{N}, \left[\hat{N}, \hat{M} \right] \right], \quad \Xi_{221} = \left[\hat{M}, \left[\hat{M}, \hat{N} \right] \right]. \end{aligned} \quad (31)$$

Запишем для каждой из пар формулу БКХ в обозначениях (31) до четвертого порядка λ^4 :

$$\begin{aligned}
 e^{\lambda n_1 \hat{N}} e^{\lambda m_1 \hat{M}} &= e^{\Omega_1}, \quad \Omega_1 = \lambda n_1 \Xi_1 + \lambda m_1 \Xi_2 + \\
 &\quad + \frac{\lambda^2}{2} n_1 m_1 \Xi_{12} + \frac{\lambda^3}{12} n_1^2 m_1 \Xi_{112} + \frac{\lambda^3}{12} n_1 m_1^2 \Xi_{221}, \\
 e^{\lambda n_2 \hat{N}} e^{\lambda m_2 \hat{M}} &= e^{\Omega_2}, \quad \Omega_2 = \lambda n_2 \Xi_1 + \lambda m_2 \Xi_2 + \\
 &\quad + \frac{\lambda^2}{2} n_2 m_2 \Xi_{12} + \frac{\lambda^3}{12} n_2^2 m_2 \Xi_{112} + \frac{\lambda^3}{12} n_2 m_2^2 \Xi_{221}, \\
 e^{\lambda n_3 \hat{N}} e^{\lambda m_3 \hat{M}} &= e^{\Omega_3}, \quad \Omega_3 = \lambda n_3 \Xi_1 + \lambda m_3 \Xi_2 + \\
 &\quad + \frac{\lambda^2}{2} n_3 m_3 \Xi_{12} + \frac{\lambda^3}{12} n_3^2 m_3 \Xi_{112} + \frac{\lambda^3}{12} n_3 m_3^2 \Xi_{221}.
 \end{aligned} \tag{32}$$

В качестве первой итерации возьмем результат для первой пары

$$e^{\Theta_1} = \exp \left(A_{1,1} \lambda \Xi_1 + A_{2,1} \lambda \Xi_2 + B_1 \frac{\lambda^2}{2} \Xi_{12} + C_{1,1} \frac{\lambda^3}{12} \Xi_{112} + C_{2,1} \frac{\lambda^3}{12} \Xi_{221} \right) \equiv e^{\Omega_1}, \tag{33}$$

где $A_{1,1} = n_1$, $A_{2,1} = m_1$, $B_1 = n_1 m_1$, $C_{1,1} = n_1^2 m_1$, $C_{2,1} = n_1 m_1^2$.

Соединим первую и вторую пары по формуле БКХ:

$$\begin{aligned}
 e^{\Theta_1} e^{\Omega_2} &= e^{\Theta_1} e^{\Omega_2} = e^{\Theta_2}, \\
 \Theta_2 &= \Theta_1 + \Omega_2 + \frac{1}{2} [\Theta_1, \Omega_2] + \frac{1}{12} [\Theta_1, [\Theta_1, \Omega_2]] + \frac{1}{12} [\Omega_2, [\Omega_2, \Theta_1]].
 \end{aligned} \tag{34}$$

Подставим в формулу (34) выражения для Θ_1 (33) и Ω_2 (32) и представим в следующем виде:

$$\Theta_2 = A_{1,2} \lambda \Xi_1 + A_{2,2} \lambda \Xi_2 + B_2 \frac{\lambda^2}{2} \Xi_{12} + C_{1,2} \frac{\lambda^3}{12} \Xi_{112} + C_{2,2} \frac{\lambda^3}{12} \Xi_{221}. \tag{35}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
 A_{1,2} &= A_{1,1} + n_2, \quad A_{2,2} = A_{2,1} + m_2, \\
 B_2 &= B_1 + n_2 m_2 + A_{1,1} m_2 - A_{2,1} n_2, \\
 C_{1,2} &= C_{1,1} + n_2^2 m_2 + 2A_{1,1} n_2 m_2 - 3B_1 n_2 + A_{1,1}^2 m_2 + A_{2,1} n_2^2 - A_{1,1} A_{2,1} n_2, \\
 C_{2,2} &= C_{2,1} + n_2 m_2^2 - 4A_{2,1} n_2 m_2 + 3B_1 m_2 + A_{2,1}^2 n_2 + A_{1,1} m_2^2 - A_{1,1} A_{2,1} m_2.
 \end{aligned} \tag{36}$$

Рекуррентные формулы (36) позволяют сразу написать результат для соединения полученного выражения с третьей парой по формуле БКХ:

$$\begin{aligned}
 e^{\Theta_2} e^{\Omega_3} &= e^{\Theta_3}, \\
 \Theta_3 &= A_{1,3} \lambda \Xi_1 + A_{2,3} \lambda \Xi_2 + B_3 \frac{\lambda^2}{2} \Xi_{12} + C_{1,3} \frac{\lambda^3}{12} \Xi_{112} + C_{2,3} \frac{\lambda^3}{12} \Xi_{221}.
 \end{aligned} \tag{37}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
 A_{1,3} &= A_{1,2} + n_3, & A_{2,3} &= A_{2,2} + m_3, \\
 B_3 &= B_2 + n_3 m_3 + A_{1,2} m_3 - A_{2,2} n_3, \\
 C_{1,3} &= C_{1,2} + n_3^2 m_3 + 2A_{1,2} n_3 m_3 - 3B_2 n_3 + A_{1,2}^2 m_3 + A_{2,2} n_3^2 - A_{1,2} A_{2,2} n_3, \\
 C_{2,3} &= C_{2,2} + n_3 m_3^2 - 4A_{2,2} n_3 m_3 + 3B_2 m_3 + A_{2,2}^2 n_3 + A_{1,2} m_3^2 - A_{1,2} A_{2,2} m_3.
 \end{aligned}
 \tag{38}$$

Полученная система нелинейных алгебраических уравнений

$$\begin{aligned}
 A_{1,3}(n, m) &= 0, & A_{2,3}(n, m) &= 0, \\
 B_3(n, m) &= 1, & C_{1,3}(n, m) &= 0, & C_{2,3}(n, m) &= 0,
 \end{aligned}
 \tag{39}$$

состоящая из пяти уравнений и шести неизвестных, слишком громоздка для аналитического решения, однако она может быть решена с помощью встроенных средств программы Mathematica. Среди набора всех решений существует всего два вещественных, они приведены в табл. 1.

Таблица 1. Численное решение системы уравнений (39)

Параметр	Решение 1	Решение 2
n_1	1,2520310262881504	-0,4320488759454076
n_2	-2,0258287555036407	0,6990697660808564
n_3	0,7737977292154901	-0,2670208901354488
m_1	0,15253855664523966	-0,4420402789085941
m_2	-0,39935112589208854	1,1572764745791828
m_3	0,24681256924684888	-0,7152361956705886

Аппроксимация второго порядка точности. Для аппроксимации оператора (25) второго порядка точности по представленной схеме необходимо в выражении (28) учитывать слагаемые с λ до шестой степени, что уже довольно громоздко.

Увеличить порядок точности аппроксимации можно другим способом, используя уже полученные результаты. Представим итоговую экспоненту аппроксимации оператора (25) в следующем виде:

$$S_1(\lambda) = \exp(\lambda^2 \Xi_{12} + \lambda^4 \Xi_4 + \lambda^5 \Xi_5 + \dots).
 \tag{40}$$

Здесь Ξ_4, Ξ_5 означают выражения, содержащие коммутаторы от операторов N, M четвертого и пятого порядков соответственно.

Рассмотрим пару из операторов S_1 и применим к ней формулу БКХ:

$$S_1(\alpha) S_1(\beta) = \exp[\lambda^2(\alpha^2 + \beta^2) \Xi_{12} + \lambda^4(\alpha^4 + \beta^4) \Xi_4 + \lambda^5(\alpha^5 + \beta^5) \Xi_5 + \dots].
 \tag{41}$$

Условием аппроксимации оператора (25) второго порядка точности будет равенство единице скобки в первом слагаемом и равенство нулю скобок во втором и третьем слагаемых. Довольно легко убедиться, что двух операторов S недостаточно для выполнения указанного условия. Кроме того, ни одна комбинация из вещественных коэффициентов не может удовлетворить заданному условию. Однако возможно подобрать комбинацию из комплексных коэффициентов. Идея метода заключается в том,

чтобы подобрать минимальную комбинацию операторов S для выполнения условий аппроксимации.

Прямая проверка показала, что минимальной комбинацией будет выражение

$$S_1(\alpha) S_1(-\beta) S_1(-\gamma) S_1(\alpha) = \exp[\lambda^2(2\alpha^2 - \beta^2 - \gamma^2) \Xi_{12} + \lambda^4(2\alpha^4 - \beta^4 - \gamma^4) \Xi_4 + \lambda^5(2\alpha^5 - \beta^5 - \gamma^5) \Xi_5 + \dots]. \quad (42)$$

Условиями на аппроксимацию искомого оператора будет система уравнений

$$\begin{aligned} 2\alpha^2 - \beta^2 - \gamma^2 &= 1, \\ 2\alpha^4 - \beta^4 - \gamma^4 &= 0, \\ 2\alpha^5 - \beta^5 - \gamma^5 &= 0. \end{aligned} \quad (43)$$

Некоторые решения системы уравнений (43) представлены в табл. 2.

Таблица 2. Решения системы уравнений (43)

Параметр	Решение 1	Решение 2	Решение 3	Решение 4
α	2,094958612914	-2,094958612914	-2,094958612914	2,094958612914
β	2,433776563036	-2,433776563036	1,361776347593	-1,361776347593
γ	-1,361776347593	1,361776347593	-2,433776563035	2,433776563036

3. АНАЛИЗ АЛГОРИТМА РАСЧЕТА

Рассмотрим особенности применения схемы аппроксимации оператора эволюции для представленных примеров. Для этого необходимо вернуться к формуле (24) и учесть, что, согласно формулам (3), перед коммутатором в степени экспоненты стоит комплексный коэффициент

$$\exp\left\{iA\tau\left[\hat{N}, \hat{M}\right] + \tau\hat{K}\right\} = \exp\left\{iA\tau\left[\hat{N}, \hat{M}\right]\right\} e^{\tau\hat{K}} + o(\tau^2), \quad (44a)$$

$$\begin{aligned} \exp\left\{iA\tau\left[\hat{N}, \hat{M}\right] + iA\tau\hat{K}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right)\right\} &= \exp\left(iA\frac{\tau}{2}\hat{K}\right) \exp\left\{iA\tau\left[\hat{N}, \hat{M}\right]\right\} \times \\ &\times \exp\left(iA\frac{\tau}{2}\hat{K}\right) + o(\tau^3). \end{aligned} \quad (44b)$$

Коэффициент iA необходимо внести внутрь коммутатора. При этом существует свобода выбора, вносить в правую или в левую часть коммутатора, поскольку это никак не повлияет на выражение аппроксимации.

Из практических соображений мнимую единицу необходимо внести под функцию, не содержащую третью производную, поскольку иначе в формуле произведений будут присутствовать экспоненты с быстро растущей вещественной функцией в степени, что сделает невозможным компьютерный расчет,

$$\exp\left(i\lambda\frac{d^3}{dx^3}\right) \rightarrow F^{-1} e^{\lambda k^3} F. \quad (45)$$

Кроме того, существует неопределенность в коэффициентах при функциях в коммутаторе. Мы можем помножить N и M на любые взаимно обратные константы, и при этом выражение аппроксимации оператора не изменится,

$$\tau [\hat{N}, \hat{M}] = \frac{a}{a} \tau [\hat{N}, \hat{M}] = \tau \left[\frac{1}{a} \hat{N}, a \hat{M} \right] = \tau \left[a \hat{N}, \frac{1}{a} \hat{M} \right]. \quad (46)$$

Приведем итоговые формулы для аппроксимации операторов эволюции уравнений (3) первого порядка точности.

Для первого примера:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \tau \frac{i\tau}{\tilde{x}_{\max}^2} \left[\frac{d}{dx} + 2x \frac{d^2}{dx^2} \right] + \tau \overleftarrow{D}_t - \tau iU(x, t) \right\} \simeq \\ \simeq \exp \left\{ \left[a \hat{N}, \frac{i}{a} \hat{M} \tau \right] \right\} \exp \left(\tau \frac{i}{\tilde{x}_{\max}^2} \frac{d}{dx} \right) e^{-\tau iU(x, t)}, \quad (47) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \left[a \hat{N}, \frac{i}{a} \hat{M} \tau \right] \right\} = e^{\lambda n_1 a \hat{N}} \exp \left(\lambda m_1 \frac{1}{a} i \hat{M} \right) e^{\lambda n_2 a \hat{N}} \times \\ \times \exp \left(\lambda m_2 \frac{1}{a} i \hat{M} \right) e^{\lambda n_3 a \hat{N}} \exp \left(\lambda m_3 \frac{1}{a} i \hat{M} \right), \\ \lambda = \sqrt{2\tau}, \quad \hat{N} = \frac{1}{3\tilde{x}_{\max}^2} \frac{d^3}{dx^3}, \quad \hat{M} = x^2. \end{aligned}$$

Для второго примера:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \tau \frac{i}{2\alpha} \left(\frac{e^\alpha - 1}{\tilde{x}_{\max}} \right)^2 \left[\frac{1}{6\alpha^2} \frac{d^3}{dx^3} + e^{-2\alpha x}, \frac{1}{4\alpha} \frac{d^2}{dx^2} + e^{-2\alpha x} \right] + \right. \\ \left. + \tau \overleftarrow{D}_t - \tau \frac{i}{6} \left(\frac{e^\alpha - 1}{\tilde{x}_{\max}} \right)^2 e^{-2\alpha x} - \tau iU(x, t) \right\} \simeq \\ \simeq e^{\tau [ia\hat{N}, a^{-1}\hat{M}]} \exp \left\{ -i\tau \left(\frac{1}{6} \left(\frac{e^\alpha - 1}{\tilde{x}_{\max}} \right)^2 e^{-2\alpha x} + U(x, t) \right) \right\}, \quad (48) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} e^{\tau [a\hat{N}, ia^{-1}\hat{M}]} = e^{\lambda n_1 a \hat{N}} e^{i\lambda m_1 a^{-1} \hat{M}} e^{\lambda n_2 a \hat{N}} e^{i\lambda m_2 a^{-1} \hat{M}} e^{\lambda n_3 a \hat{N}} e^{i\lambda m_3 a^{-1} \hat{M}}, \\ \lambda = \sqrt{2\tau}, \quad \hat{N} = \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{e^\alpha - 1}{\tilde{x}_{\max}} \right)^2 \left(\frac{1}{6\alpha^2} \frac{d^3}{dx^3} + e^{-2\alpha x} \right), \quad \hat{M} = \frac{1}{4\alpha} \frac{d^2}{dx^2} + e^{-2\alpha x}. \end{aligned}$$

Для третьего примера:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \frac{i\tau}{\tilde{x}_{\max}^2} \left[\frac{1}{4} x^2 + \frac{d^3}{dx^3}, \frac{1}{9} x^3 + \frac{d^2}{dx^2} \right] - \frac{i\tau}{6\tilde{x}_{\max}^2} + \tau \overleftarrow{D}_t - \tau iU(x, t) \right\} \simeq \\ \simeq \exp \left\{ \left[a \hat{N}, \frac{i}{a} \hat{M} \right] \tau \right\} \exp \left(-\frac{i\tau}{6\tilde{x}_{\max}^2} \right) e^{\tau \overleftarrow{D}_t} e^{-\tau iU(x, t)}, \quad (49) \end{aligned}$$

где

$$e^{\tau[ia\hat{N}, a^{-1}\hat{M}]} = e^{i\lambda n_1 a \hat{N}} e^{\lambda m_1 a^{-1} \hat{M}} e^{i\lambda n_2 \hat{N}} e^{\lambda m_2 a^{-1} \hat{M}} e^{i\lambda n_3 a \hat{N}} e^{\lambda m_3 a^{-1} \hat{M}},$$

$$\lambda = \sqrt{2\tau}, \quad \hat{N} = \frac{1}{4}x^2 + \frac{d^3}{dx^3}, \quad \hat{M} = \frac{i}{\tilde{x}_{\max}^2} \left(\frac{1}{9}x^3 + \frac{d^2}{dx^2} \right).$$

Существует естественное ограничение на величину a . С учетом того, что в экспоненте параметр a умножается на малый параметр λ , варьируя этот параметр, можно фактически регулировать шаг по времени для различных экспонент в аппроксимации оператора эволюции.

Экспоненты, содержащие в показателе степени производные, воздействуют на спектр волнового состояния, меняя фазу волновой функции в импульсном представлении, тем самым сдвигая волновую функцию в координатном представлении. Если взять слишком большой шаг по времени, то действие экспоненты с производной может вывести волновую функцию за пределы рассматриваемой области.

На данный момент не обнаружено условий, которые позволили бы однозначно определить значение параметра a .

Рассмотрим численные примеры. Наибольший практический интерес относительно представленных выше алгоритмов вызывают вопросы об устойчивости изучаемой схемы, совпадает ли порядок точности с предсказанным теорией. Также весьма интересен вопрос, дает ли подобный подход преимущество по сравнению с решением на равномерной сетке. В качестве тестируемой схемы был взят первый пример (47).

Проведены тестовые расчеты, демонстрирующие устойчивость и порядок точности указанной схемы. В качестве тестовой задачи была выбрана известная нестационарная задача — одномерный осциллятор с частотой, зависящей от времени, по аналогии с работой [24].

Уравнение Шредингера для такой системы выглядит следующим образом:

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\omega^2(t) x^2}{2} \Psi(x, t); \quad (50)$$

здесь $\omega^2(t) = 4 - 3 \exp(-t)$ [25].

В качестве начального состояния берется волновой пакет

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} (x - \sqrt{2})^2 \right]. \quad (51)$$

Точное решение задачи известно и может быть записано как

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp [-X(t) x^2 + 2Y(t) x - Z(t)]. \quad (52)$$

Здесь функции $X(t)$, $Y(t)$, $Z(t)$ удовлетворяют следующей задаче Коши:

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} X(t) &= 2X^2(t) - \frac{\omega^2(t)}{2}, & X(0) &= \frac{1}{2}, \\ i \frac{d}{dt} Y(t) &= 2X(t)Y(t), & Y(0) &= \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ i \frac{d}{dt} Z(t) &= -X(t) + 2Y^2(t), & Z(0) &= 1. \end{aligned} \quad (53)$$

Рассматриваемая область пространства определена как $[x_{\min} = 0, x_{\max} = 100]$. Количество узлов в сетке было взято 1000. Шаг по времени выбран $\tau = 0,1$. Расчет состоит из двух частей. Первая часть — расчет волновой функции, заданной на равномерной сетке, вторая — расчет волновой функции, заданной на неравномерной сетке.

Для анализа сходимости на последовательности трех сгущающихся по времени временных сетках вычислялась функция погрешности

$$Er^2(t, j) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} |\psi(x, t) - \psi_{\tau_j}(x, t)|^2 dx. \tag{54}$$

Здесь индекс $j = 1, 2, 3$ нумерует решения, полученные для шагов $\tau, \tau/2, \tau/4$ по временной переменной. В качестве функции $\psi(x, t)$ взято решение (52), (53).

Затем рассчитывался коэффициент Рунге:

$$\beta(t) = \log_2 \left| \frac{Er(t, 1) - Er(t, 2)}{Er(t, 2) - Er(t, 3)} \right|. \tag{55}$$

На рис. 1 приведены кривые $\log_{10} Er(t, j), j = 1, 2, 3$ для схем на равномерной и неравномерной сетках. Как видно из графика, погрешности обеих схем сопоставимы по величине. На рис. 2 представлены графики функции $\beta(t)$ в зависимости от времени. Среднее значение параметра близко к единице, что соответствует заявленному порядку точности вычислительной схемы.

Рис. 1. Результаты тестовых расчетов в виде функций ошибок $\log_{10} Er(t, j), j = 1, 2, 3$. 1.1, 1.2, 1.3 — расчет для волновой функции на равномерной сетке, 2.1, 2.2, 2.3 — расчет для волновой функции на неравномерной сетке с шагом по времени $\tau, \tau/2, \tau/4$ соответственно

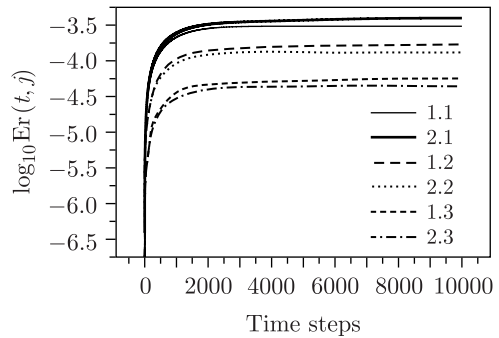
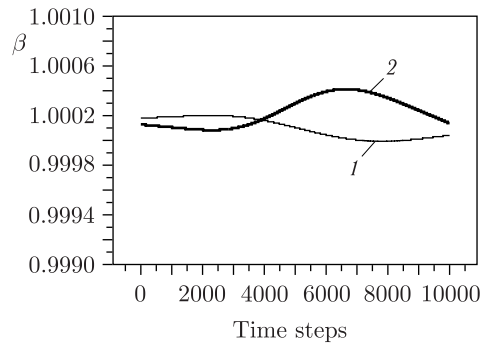


Рис. 2. Поведение функции $\beta(t)$ для схемы расчета на равномерной сетке (1) и неравномерной сетке (2)



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследована принципиальная возможность численного решения нестационарного уравнения Шредингера для волновой функции, определенной на неравномерной координатной сетке спектральным методом с использованием быстрого преобразования Фурье. Продемонстрирована возможность решения нестационарного уравнения Шредингера на специальной неравномерной координатной сетке с использованием алгоритма быстрого преобразования Фурье. Приведены примеры схем численного расчета для трех различных нелинейных преобразований координат. Численные расчеты показывают устойчивость построенной вычислительной схемы и величину погрешности расчета и подтверждают совпадение ее порядка точности с теоретическими оценками.

Благодарности. Автор благодарит д-ра физ.-мат. наук Владимира Степановича Мележика за ценные замечания и полезные обсуждения. Автор также благодарит команду гетерогенной платформы кластера «HybriLIT» Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова Объединенного института ядерных исследований за предоставленные расчетные ресурсы.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке грантом РФФ № 20-11-20257.

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Yoshida H.* Construction of Higher Order Symplectic Integrators // *Phys. Lett. A.* 1990. V. 150. P. 262–268.
2. *Suzuki M.* Fractal Decomposition of Exponential Operators with Applications to Many-Body Theories and Monte Carlo Simulations // *Phys. Lett. A.* 1990. V. 146, No. 6. P. 319–323.
3. *McLachlan R. I.* On the Numerical Integration of Ordinary Differential Equations by Symmetric Composition // *SIAM J. Sci. Comput.* 1995. V. 16, No. 1. P. 151–168.
4. *Blanes S., Casas F., Ros J.* Symplectic Integration with Processing: A General Study // *SIAM J. Sci. Comput.* 1999. V. 21. P. 711–727.
5. *Chin S. A., Chen C. R.* Gradient Symplectic Algorithms for Solving the Schrödinger Equation with Time-Dependent Potentials // *J. Chem. Phys.* 2002. V. 117. P. 1409–1415.
6. *McLachlan R. I., Quispel G. R. W.* Splitting Methods // *Acta Numer.* 2002. V. 11. P. 341–434.
7. *Frigo M., Johnson S. G.* The Design and Implementation of FFTW3 // *Proc. IEEE.* 2005. V. 93. P. 216–231.
8. *Shalin A. S., Moiseev S. G.* Controlling Interface Reflectance by a Monolayer of Nanoparticles // *Quant. Electron.* 2009. V. 39, No. 12. P. 1175–1181.
9. *Zakharov M. A., Frank A. I., Kulin G. V., Goryunov S. V.* Interaction of Ultracold Neutrons with a Neutron Interference Filter Oscillating in Space // *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* 2020. V. 14. P. 6.
10. *Zakharov M. A., Frank A. I., Kulin G. V.* Reflection of Neutrons from a Resonant Potential Structure Oscillating in Space // *Phys. Lett. A.* 2021. V. 420. P. 127748.
11. *Liu C. S., Tripathi V. K.* Observational Consequences of Parametrically Driven Vibrations of Carbon Nanotubes // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 70. P. 115414.
12. *Ahmad A., Tripathi V. K.* Parametric Excitation of Higher Order Electromechanical Vibrations of Carbon Nanotubes // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 72. P. 193409.

13. *Melezhik V. S.* Polarization of Harmonics Generated from a Hydrogen Atom in a Strong Laser Field // *Phys. Lett. A.* 1997. V. 230. P. 203–208.
14. *Capel P., Baye D., Melezhik V. S.* Time-Dependent Analysis of the Breakup of Halo Nuclei // *Phys. Rev. C.* 2003. V. 68. P. 014612.
15. *Ciegis R., Suboc O.* High Order Compact Finite Difference Schemes on Nonuniform Grids // *Appl. Numer. Math.* 2018. V. 132. P. 205–218.
16. *Decler P., Londersele A., Rogier H., Ginste D. V.* Nonuniform and Higher-Order FDTD Methods for the Schrödinger Equation // *J. Comput. Appl. Math.* 2021. V. 381. P. 113023.
17. *Sørevik T., Birkeland T., Oksa G.* Numerical Solution of the 3D Time Dependent Schrödinger Equation in Spherical Coordinates: Spectral Basis and Effects of Split-Operator Technique // *J. Comput. Appl. Math.* 2009. V. 225. P. 56–67.
18. *Dutt A., Rokhlin V.* Fast Fourier Transforms for Nonequiespaced Data // *SIAM J. Sci. Comput.* 1993. V. 14, No. 6. P. 1386–1393.
19. *Dutt A., Rokhlin V.* Fast Fourier Transforms for Nonequiespaced Data II // *Appl. Comput. Harmon. Anal.* 1995. V. 2. P. 85–100.
20. *Beylkin G.* On the Fast Fourier Transform of Functions with Singularities // *Ibid.* No. 4. P. 363–381.
21. *Steidl G.* A Note on Fast Fourier Transforms for Nonequispaced Grids // *Adv. Comput. Mech.* 1998. V. 9. P. 337–352.
22. *Suzuki M.* General Decomposition Theory of Ordered Exponentials // *Proc. Japan. Acad. B.* 1993. V. 69. P. 161–166.
23. *Zakharov M. A.* Tenth-Order Accurate Numerical Method for Solving the Time-Dependent Schrödinger Equation // *Comput. Math. Math. Phys.* 2024. V. 64. P. 248–265.
24. *Chuluunbaatar O., Derbov V. L., Galtbayar A., Gusev A. A., Kaschiev M. S., Vinitzky S. I., Zhanlav T.* Explicit Magnus Expansions for Solving the Time-Dependent Schrödinger Equation // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2008. V. 41. P. 295203.
25. *Puzynin I. V., Selin A. V., Vinitzky S. I.* A High-Order Accuracy Method for Numerical Solving of the Time-Dependent Schrödinger Equation // *Comput. Phys. Commun.* 1999. V. 123. P. 1–6.

Получено 7 октября 2024 г.