

P11-2003-113

В. Д. Рушай

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
И СВЯЗАННОГО С НИМ УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ
МЕТОДОМ ПРИБЛИЖЕННОГО
ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ
ПО УСЛОВНОЙ МЕРЕ ВИНЕРА**

1 Введение

В работах [1],[2] Р.Фейнман выразил волновую функцию $\Psi(x, t)$, которая удовлетворяет уравнению Шредингера

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

$x \in R, t \in (t_0, +\infty)$, через волновую функцию $\Psi(x, t_0)$, $t_0 \geq 0$, посредством равенства

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t; x_0, t_0)\Psi(x_0, t_0)dx_0, \quad (2)$$

в котором пропагатор K (функция Грина) представлен интегралом по траекториям

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(\tau)] \right\} dx_1 \dots dx_{N-1}. \quad (3)$$

Здесь отрезок $[t_0, t]$ разделен на N интервалов $\varepsilon = t_{k+1} - t_k$, $k = 0, \dots, N-1$, $t_N \equiv t$, $x_N \equiv x$; моментам времени t_k сопоставлены точки x_k ;

$$S[x(\tau)] = \int_{t_0}^t (m\dot{x}^2/2 - V(x, \tau)) d\tau$$

- классическое действие для одномерного движения частицы в потенциальном поле $V(x, t)$ вдоль траектории $x(\tau)$, соединяющей точки x_k . В этой работе будет рассматриваться не зависящий от времени потенциал $V(x)$.

Определение интеграла по траекториям, данное Фейнманом, не является математически строгим, поскольку остается открытым вопрос о существовании предела в правой части равенства (3). Основная трудность здесь заключена в том, что интеграл Фейнмана содержит интегрирование вида $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{iS(q)\}dq$. Величина $|\exp\{iS(q)\}|$ всегда равна единице, так что подынтегральное выражение представляет собой незагущающие колебания и этот интеграл не определен [3]. С этим связана невозможность определения счетно-аддитивной меры в пространстве траекторий. В настоящее время имеются различные подходы к построению строгой теории интегралов Фейнмана, однако ни один из них не является универсальным и общепринятым [4].

Позднее М.Кац [5]-[7] записал фундаментальное решение параболического дифференциального уравнения

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} - V(x)Q(x, t) \quad (4)$$

с граничным условием $\lim_{|x| \rightarrow \infty} Q(x, t) = 0$ в виде функционального интеграла по условной мере Винера. Для удобства сравнения с фейнмановским пропагатором (3) результат Каца можно записать следующим образом:

$$Q(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2\pi\varepsilon} \right)^{N/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ - \int_{t_0}^t (\dot{x}^2/2 + V(x)) d\tau \right\} dx_1 \dots dx_{N-1}. \quad (5)$$

Уравнение (4) описывает классическую диффузию с некоторым распределением отрицательных источников, "плотность" которых определяется функцией $V(x)$ [6].

Для заданной начальной функции $Q(x, t_0)$ решение $Q(x, t)$ можно найти по формуле, аналогичной (2):

$$Q(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(x, t; x_0, t_0) Q(x_0, t_0) dx_0. \quad (6)$$

Между уравнениями (1) и (4) и, соответственно, между их решениями (3) и (5) имеется взаимосвязь. При $m = \hbar = 1$ формальный переход к мнимому времени $t \rightarrow -it$ в пропагаторе (3) приводит к выражению, совпадающему с пропагатором (5) для уравнения (4). Поскольку интеграл по мере Винера является математически хорошо определенным объектом, указанная взаимосвязь явилась основой для развития одного из подходов к строгому определению интеграла Фейнмана [8]-[10], начало которому было положено Р. Камероном. Развивая это направление, З.Хаба [11] записал фейнмановский пропагатор в виде функционального интеграла по условной мере Винера.

С появлением интегралов в функциональных пространствах стали развиваться методы их приближенного вычисления. Наиболее известным и широко используемым в настоящее время является метод Монте-Карло, с помощью которого моделируются реализации случайного процесса на некотором дискретном временном множестве. При этом вычисление функциональных интегралов фактически сводится к вычислению обычных (римановых) интегралов большой кратности [12],[13]. Другой подход, инициированный Камероном, основан на построении приближенных формул, точных на некотором классе функционалов [13]-[23]. Применение этого подхода приводит к необходимости вычислять римановы интегралы относительно небольшой кратности, что можно выполнить с помощью различных эффективных методов численного интегрирования [25]. Представление решений уравнений в частных производных в виде функциональных интегралов позволяет использовать указанные приближенные методы для численного решения этих уравнений. В данной статье исследуются некоторые характерные особенности такого подхода на примере решения уравнений (1) и (4) с использованием формулы (23) для приближенного вычисления интегралов по условной мере Винера, точной для функциональных многочленов заданной степени [22],[23]. В следующем разделе упомянутый выше результат Хабы получен другим способом и записан в виде, удобном для применения этой формулы.

2 Представление пропагатора для уравнения Шредингера в форме интеграла по условной нормированной мере Винера

В работе [8], результаты которой будут использованы в дальнейшем в этом разделе, Р.Камерон ввел понятие интеграла Винера с параметром σ для функционала $F\{x(\tau)\}$:

$$\int_{C[0,t]} F[x(\tau)] dW_\sigma(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{R^N} F(x) dW_\sigma^N(x, t).^1 \quad (7)$$

Здесь

$$dW_\sigma^N(x, t) = \prod_{j=1}^N \left[\frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi \Delta t}} \exp \left\{ -\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2\sigma^2 \Delta t} \right\} \right] dx_1 \dots dx_N, \quad (8)$$

¹В оригинальной работе Камерона [8] использованы несколько другие обозначения.

$C[0, t]$ - множество непрерывных на отрезке $[0, t]$ функций $x(\tau)$, удовлетворяющих условию $x(0) = 0$; отрезок $[0, t]$ разделен на N частей $\Delta t = t/N$, которые здесь для простоты выбраны равными; $x_k = x(k \Delta t)$, $k = 0, 1, \dots, N$; $x_0 = 0$; $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$; $F(\mathbf{x}) = F[x_N(\tau)]$, $x_N(\tau)$ - непрерывная кусочно-линейная функция такая, что $x_N(k \Delta t) = x(k \Delta t)$.

При $\sigma = 1$ и определенных условиях на функционал $F[x(\tau)]$ равенство (7) определяет обычный интеграл Винера. С другой стороны, для чисто мнимого σ^2 выражение в правой части (7) можно рассматривать как некую интерпретацию интеграла Фейнмана [8].

Используя свойство

$$dW_{p\sigma}^N(\mathbf{x}, t) = dW_{\sigma}^N(\mathbf{x}/p, t), \quad (9)$$

где p - некоторое положительное число, Камерон получил равенство

$$\int_{C[0,t]} F[x(\tau)] dW_{p\sigma}(x) = \int_{C[0,t]} F[px(\tau)] dW_{\sigma}(x) \quad (10)$$

и доказал, что при определенных условиях на функционал $F[x(\tau)]$ это равенство справедливо также для комплексных p . В итоге для $\sigma = 1$ и $p = \sqrt{i}$ была получена формула

$$\int_{C[0,t]} F[x(\tau)] dW_{\sqrt{i}}(x) = \int_{C[0,t]} F[\sqrt{i}x(\tau)] dW(x), \quad (11)$$

выражающая интеграл Фейнмана (в определении Камерона) через интеграл Винера, которую Камерон рассматривал в качестве основной формулы для вычисления интеграла Фейнмана.

В пропагаторе (3) интегрирование проводится по множеству $C[t_0, x_0; t, \mathbf{x}]$ непрерывных на отрезке $[t_0, t]$ функций $x(\tau)$, удовлетворяющих условиям $x(t_0) = x_0$, $x(t) = \mathbf{x}$. В дальнейшем будем полагать $t_0 = 0$. В этом случае интеграл Винера с параметром σ можно определить равенством

$$\int_{C[0, x_0; t, \mathbf{x}]} F[x(\tau)] d\tilde{W}_{\sigma}(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{R^{N-1}} F(\mathbf{x}) d\tilde{W}_{\sigma}^N(\mathbf{x}, t), \quad (12)$$

где

$$d\tilde{W}_{\sigma}^N(\mathbf{x}, t) = \prod_{j=1}^N \left[\frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi} \Delta t} \exp \left\{ -\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2\sigma^2 \Delta t} \right\} \right] dx_1 \dots dx_{N-1}, \quad (13)$$

$\mathbf{x} = (x_0, \dots, x_N)$, $x_N = \mathbf{x}$.

Легко видеть, что для выражения (13) с положительными p и σ выполняется свойство

$$d\tilde{W}_{p\sigma}^N(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{p} d\tilde{W}_{\sigma}^N(\mathbf{x}/p, t). \quad (14)$$

Из (12) с учетом (14) получим формулу, аналогичную (10)

$$\int_{C[0, x_0; t, \mathbf{x}]} F[x(\tau)] d\tilde{W}_{\sigma}(x) = \frac{1}{\sigma} \int_{C[0, \frac{x_0}{\sigma}; t, \frac{\mathbf{x}}{\sigma}]} F[\sigma x(\tau)] d\tilde{W}(x).$$

²Символы p и σ будут опускаться, если они равны единице.

³Как следует из использования символов p и σ в свойстве (9), Камерону пришлось применить комбинацию $p = \sqrt{i}$ и $\sigma = 1$ в равенстве (11), однако комбинация $p = 1$ и $\sigma = \sqrt{i}$ кажется более естественной, поскольку это соответствует смыслу параметра σ .

Запишем интеграл в правой части этого равенства в виде, удобном для последующего применения приближенной формулы (23). Для этого необходимо произвести нормировку меры и перейти к интегрированию по пространству $C[0, 0; 1, 0]$ непрерывных на отрезке $[0, 1]$ функций $x(\tau)$ таких, что $x(0) = x(1) = 0$.

Для $F[x(\tau)] \equiv 1$ из (12) и (13) следует равенство

$$\int_{C[0, x_0; t, x]} d\tilde{W}_\sigma(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi t}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2 t}\right\}.$$

Тогда с учетом условия нормировки

$$\int_{C[0, x_0; t, x]} d\tilde{W}_\sigma^*(x) = 1$$

получим

$$\int_{C[0, x_0; t, x]} d\tilde{W}_\sigma(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi t}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2 t}\right\} \int_{C[0, x_0; t, x]} d\tilde{W}_\sigma^*(x).$$

В случае $\sigma = t = 1$, $x_0 = x = 0$ будем иметь

$$\int_{C[0, 0; 1, 0]} d\tilde{W}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{C[0, 0; 1, 0]} d\tilde{W}^*(x). \quad (15)$$

Масштабирование временного интервала можно выполнить, используя следующее свойство выражения (13)

$$d\tilde{W}_\sigma^N(\mathbf{x}, pt) = \frac{1}{\sqrt{p}} d\tilde{W}_\sigma^N(\mathbf{x}/\sqrt{p}, t). \quad (16)$$

Из (12) с учетом (14) и (16) получим

$$\int_{C[0, x_0; t, x]} F[x(\tau)] d\tilde{W}_\sigma(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{t}} \int_{C\left[0, \frac{x_0}{\sigma\sqrt{t}}; 1, \frac{x}{\sigma\sqrt{t}}\right]} F[\sigma\sqrt{t}x(\tau)] d\tilde{W}(x). \quad (17)$$

Далее воспользуемся формулой замены переменных в интеграле Винера [7]

$$\int_{C[0, y_0; t, y]} F[y(\tau)] d\tilde{W}(y) = \exp\left\{-\frac{1}{2} \int_0^t \left(\frac{df}{d\tau}\right)^2 d\tau\right\} \int_{C[0, 0; t, 0]} F[y(\tau) + f(\tau)] \exp\left\{-\int_0^t \frac{df}{d\tau} dy(\tau)\right\} d\tilde{W}(y), \quad (18)$$

где $f(\tau)$ - фиксированная функция из $C[0, y_0; t, y]$. Для $f(\tau) = [(x-x_0)\tau + x_0]/(\sigma\sqrt{t})$ из (15), (17) и (18) получим

$$\int_{C[0, x_0; t, x]} F[x(\tau)] d\tilde{W}_\sigma(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi t}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2 t}\right\} \int_{C[0, 0; 1, 0]} F[\sigma\sqrt{t}x(\tau) + (x-x_0)\tau + x_0] d\tilde{W}^*(x). \quad (19)$$

В случае $\sigma = 1$ из (19) следует формула

$$\int_{C[0, x_0; t, x]} F[x(\tau)] d\tilde{W}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{2t}\right\} \int_{C[0, 0; 1, 0]} F[\sqrt{t}x(\tau) + (x - x_0)\tau + x_0] d\tilde{W}^*(x), \quad (20)$$

которая определяет переход между интегрированием по условной мере Винера в пространстве $C[0, x_0; t, x]$ и интегрированием по условной нормированной мере Винера в пространстве $C[0, 0; 1, 0]$. Для $F[x(\tau)] = \exp\{-\int_0^t V[x(\tau)]d\tau\}$ из (5), (12) и (20) получим пропагатор для уравнения (4) в следующем виде

$$Q(x, t; x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{2t}\right\} \int_{C[0, 0; 1, 0]} \exp\left\{-t \int_0^1 V[\sqrt{t}x(\tau) + (x - x_0)\tau + x_0] d\tau\right\} d\tilde{W}^*(x). \quad (21)$$

С другой стороны, выражение в левой части равенства (19) соответствует Фейнмановскому пропагатору $K(x, t; x_0, 0)$ (3), если положить $\sigma = \sqrt{i\hbar/m}$ и $F[x(\tau)] = \exp\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t V[x(\tau)]d\tau\}$. Если при некоторых условиях равенство (19) справедливо для мнимых σ^2 , то формулу

$$K(x, t; x_0, 0) = K_0 \int_{C[0, 0; 1, 0]} \exp\left\{-\frac{it}{\hbar} \int_0^1 V\left[\sqrt{\frac{i\hbar t}{m}}x(\tau) + (x - x_0)\tau + x_0\right] d\tau\right\} d\tilde{W}^*(x), \quad (22)$$

где

$$K_0 = K_0(x, t; x_0, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp\left\{-\frac{m(x - x_0)^2}{2i\hbar t}\right\}$$

- пропагатор свободной частицы, можно использовать для вычисления Фейнмановского пропагатора с помощью приближенной формулы (23). Как упоминалось ранее, подобное равенство было получено в работе Хабы [11], где рассматривается вопрос о классе потенциалов, для которых оно выполняется. Хаба указал также, что выражение в правой части (22) удовлетворяет уравнению Шредингера (1). Это выражение, следовательно, может рассматриваться в качестве функции Грина для уравнения Шредингера вне зависимости от его связи с Фейнмановским пропагатором (3). При этом класс потенциалов, для которых такая запись функции Грина имеет смысл, определяется требованием конечности функционального интеграла в правой части равенства (22).

3 Примеры приближенных вычислений

В этом разделе даются примеры численного решения уравнений (1) и (4) с применением формул (2), (6), (21) и (22). Для вычисления пропагаторов (21) и (22) здесь

будет использована формула для приближенного вычисления функциональных интегралов по условной нормированной мере Винера, полученная в работах [22],[23]:

$$\int_{C[0,0;1,0]} F[x(\tau)] d\bar{W}^*(x) \approx \quad (23)$$

$$2^{-l}(2\pi)^{-k/2} \int_{R^k} d\mathbf{u} \int_{-1}^1 dv_1 \dots \int_{-1}^1 dv_l \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{s=1}^k u_s^2 \right\} F[\Theta_l(\mathbf{v}, \tau) - \Theta_{l,k}(\mathbf{v}, \tau) + U_k(\mathbf{u}, \tau)],$$

где $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_k)$, $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_l)$,

$$\Theta_l(\mathbf{v}, \tau) = \sum_{s=1}^l c_{l,s} \rho(v_s, \tau), \quad \rho(v_s, \tau) = \begin{cases} -\tau \operatorname{sign}(v_s), & \tau \leq |v_s| \\ (1 - \tau) \operatorname{sign}(v_s), & \tau > |v_s| \end{cases}$$

$$\Theta_{l,k}(\mathbf{v}, \tau) = \sum_{s=1}^k \frac{2}{s\pi} \sin(s\pi\tau) \sum_{j=1}^l c_{l,j} \operatorname{sign}(v_j) \cos(s\pi v_j),$$

$$U_k(\mathbf{u}, \tau) = \sum_{s=1}^k \frac{\sqrt{2}}{s\pi} u_s \sin(s\pi\tau),$$

$[c_{l,s}]^2$ - корни многочлена $Q_l(r) = \sum_{s=0}^l (-1)^s r^{l-s}/s!$, $s = 1, 2, \dots, l$, $r \in R$. Эта формула является точной для функциональных многочленов степени $\leq 2l + 1$. Для функционалов, не принадлежащих к этому классу и удовлетворяющих определенным условиям, ее погрешность E_{for} оценивается величиной $O(k^{-l-1})$ [22]. Таким образом, приближенное вычисление функционального интеграла сводится к вычислению обычного (риманова) интеграла кратности $k + l$.

Для проверки качества получаемых приближений будут рассмотрены случаи, когда решения уравнений (1) и (4) можно записать в явной форме. Непосредственной подстановкой можно убедиться, что функция

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{2m\omega\eta_0}{\sqrt{2\pi}(2m\omega\eta_0^2 \cosh(\omega t) + i\hbar \sinh(\omega t))} \right)^{1/2} \times \\ \exp \left\{ \frac{m\omega(2m\omega x^2 \eta_0^2 \sinh(\omega t)/\hbar + i(x^2 + a^2) \cosh(\omega t) - i2xa)}{2\hbar \sinh(\omega t) - 4im\omega\eta_0^2 \cosh(\omega t)} \right\}$$

является решением уравнения (1) с потенциалом $V(x) = -m\omega^2 x^2/2$ и начальным условием

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\eta_0^2}} \exp \left\{ -\frac{(x-a)^2}{4\eta_0^2} \right\}.$$

Квадрат модуля этой волновой функции сохраняет вид гауссиана:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi(x, t)\Psi^*(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\eta(t)}} \exp \left\{ -\frac{(x - a \cosh(\omega t))^2}{2\eta(t)} \right\}, \quad (24)$$

$\eta(t) = \eta_0^2 \cosh^2(\omega t) + \hbar^2 \sinh^2(\omega t)/(4m^2\omega^2\eta_0^2)$. Таким образом выполняется условие

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

На рис. 1 и 2 показаны результаты приближенного вычисления функции $|\Psi(x, t)|^2$ соответственно для двух значений дисперсии начального распределения, которые выбирались таким образом, чтобы скорость вычислений в обоих случаях была сопоставима. Интересно отметить, что в расчетах был использован неограниченный снизу потенциал, который не относится к указанному Хабой классу потенциалов.

Также путем подстановки можно убедиться, что функция

$$Q(x, t) = \left(\frac{\omega}{2\pi (\omega\xi^2 \cosh(\omega t) + \sinh(\omega t))} \right)^{1/2} \times \exp \left\{ \frac{\omega^2 x^2 \xi^4 + 2a\omega x \xi^2 \sinh(\omega t) + a^2 \sinh^2(\omega t)}{\xi^4 \omega \sinh(2\omega t) + 2\xi^2 \sinh^2(\omega t)} - \frac{\omega x^2 \xi^2 \cosh(\omega t) + a^2 \sinh(\omega t)}{2\xi^2 \sinh(\omega t)} \right\} \quad (25)$$

удовлетворяет уравнению (4) с потенциалом $V(x) = \omega^2 x^2 / 2$, начальным условием

$$Q(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\xi^2}} \exp \left\{ -\frac{(x-a)^2}{2\xi^2} \right\}$$

и граничным условием $Q(x, t) \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$. Результаты приближенного вычисления функции $Q(x, t)$ для различных значений дисперсии начального распределения представлены на рис. 3 и 4.

В предлагаемом подходе погрешность вычислений можно записать в виде $E = E_0 + E_{for} + E_{int}$, где E_0 - погрешность приближенного интегрирования по переменной x_0 в формулах (2) и (6), E_{int} - погрешность вычисления интеграла кратности $k + l$ в правой части приближенного равенства (23). Если подынтегральная функция в формулах (2) и (6) достаточно быстро стремится к нулю при стремлении $|x_0|$ к бесконечности, то бесконечный интервал интегрирования по x_0 можно заменить конечным отрезком, который выбирается таким образом, чтобы неучитываемая часть интеграла была пренебрежимо мала. При этом величина E_0 складывается из погрешности, возникающей при такой замене, и погрешности выбранного метода интегрирования. Рассматриваемые в данной работе функционалы не принадлежат классу функционалов, для которых формула (23) точна. Поскольку параметры, характеризующие исследуемую физическую систему, а также параметры пропагатора x_0, x, t входят в интегрируемый функционал, от их значений зависит погрешность E_{for} формулы (23) при фиксированных значениях параметров k и l . Ошибка численного интегрирования E_{int} , как правило, растет с ростом кратности $k + l$ аппроксимирующего интеграла и зависит от выбранного метода его вычисления. Погрешность E_{int} включает в себя также ошибку, возникающую вследствие замены бесконечной области интегрирования по переменным u_1, \dots, u_k конечным k -мерным параллелепипедом. При этом неучитываемая часть интеграла должна быть мала для любых значений параметров, содержащихся в функционале $F[x(\tau)]$. Скорость убывания подынтегральной функции при стремлении переменных u_1, \dots, u_k к бесконечности зависит от вида потенциала $V(x)$. Например, как следует из явных выражений для интеграла по $u_1 \dots u_k$, которые можно получить в случае квадратичной зависимости потенциала от x , при вычислении пропагатора (22) с потенциалом $V(x) = m\omega^2 x^2 / 2$ этот интеграл расходится, если $\omega t \geq \pi$. В то же время для $V(x) = -m\omega^2 x^2 / 2$ он конечен при любых ω и t .

Как видно из рис. 1 - 4, для используемых значений физических параметров и временных интервалов хорошая точность приближений достигается уже при минимальных значениях $k = l = 1$. Изменение параметров физической системы или

увеличение временных интервалов может привести к тому, что точность вычислений при таких k и l окажется неудовлетворительной. В этом случае увеличение кратности $k + l$ уменьшает погрешность E_{for} , однако чтобы суммарная погрешность E была близка к E_{for} , необходимо соблюдать условие $E_0 + E_{int} \ll E_{for}$. На рис. 5 показана функция $|\Psi(x, t)|^2$, вычисленная для фиксированного момента времени при $l = 1$ и различных значениях k . Аналогичные результаты для функции $Q(x, t)$ представлены на рис. 7.

При значении $l = 1$, с учетом аналитического нахождения интегралов по $u_1 \dots u_k$, для приближенного вычисления функциональных интегралов в приведенных примерах потребовалось численное интегрирование обычных (римановых) интегралов кратности 1.

4 Метод повышения точности вычислений

Если эволюцию физических процессов необходимо исследовать на достаточно длительных промежутках времени, то для достижения приемлемой точности вычислений может потребоваться значительное увеличение параметров k и l . Согласно формуле (23), с ростом кратности $k + l$ аппроксимирующего риманова интеграла усложняется его подынтегральная функция, что приводит к увеличению объема вычислений и росту счетного времени. Одновременно, как отмечалось выше, растет погрешность E_{int} вычисления этого интеграла, которая, как правило, вносит основной вклад в суммарную погрешность численного интегрирования $E_0 + E_{int}$. Вместе с этим, для выполнения условия $E_0 + E_{int} \ll E_{for}$, в соответствии с оценкой для E_{for} , суммарную погрешность $E_0 + E_{int}$ с ростом k и l необходимо уменьшать, что может потребовать больших затрат счетного времени. В этом разделе описана альтернативная процедура уменьшения погрешности вычислений.

Разделим общий отрезок времени $[0, t]$ на n частей $[0, t_1], [t_1, t_2], \dots, [t_{n-1}, t], 0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t$. Согласно формуле (2) для каждого из отрезков $[t_{j-1}, t_j]$ можно записать

$$\Psi(x_j, t_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) \Psi(x_{j-1}, t_{j-1}) dx_{j-1}, \quad (26)$$

$j = 1, \dots, n, t_n = t, x_n = x$. Таким образом, имеется итерационная формула, в которой решение для некоторого момента времени выражается только через решение для некоторого предыдущего момента времени и не зависит от более ранних моментов. Это означает, что пропагатор $K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1})$ зависит от разности $t_j - t_{j-1}$, т.е. $K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) = K(x_j, t_j - t_{j-1}; x_{j-1}, 0)$. Для нахождения функции $\Psi(x, t)$ по формуле (26) необходимо последовательно вычислить n однократных интегралов по переменным x_0, \dots, x_{n-1} , что равносильно вычислению $\Psi(x, t)$ по формуле (2), в которой пропагатор K представлен в виде интеграла кратности $n - 1$:

$$K(x, t; x_0, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t - t_{n-1}; x_{n-1}, 0) K(x_{n-1}, t_{n-1} - t_{n-2}; x_{n-2}, 0) \times \\ \dots \times K(x_1, t_1; x_0, 0) dx_1 \dots dx_{n-1}. \quad (27)$$

Это равенство было получено Фейнманом для пропагаторов $K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1})$ [2]. Если интегрирование по x_0, \dots, x_{n-1} рассматривается как вычисление n -кратного интеграла и выполняется по какой-либо кубатурной формуле, то описанная процедура

не является итерационной по характеру своей практической реализации, поскольку при этом нарушается последовательность нахождения приближенных решений в формуле (26). Использование формулы (27) фактически позволяет увеличивать интервал времени $[0, t]$, для которого пропагатор $K(x, t; x_0, 0)$ может быть вычислен с достаточной точностью.

Обозначим через $E_{for}^{(j)}$ погрешность формулы (23) при вычислении пропагатора $K(x_j, t_j - t_{j-1}; x_{j-1}, 0)$ и через $E_{int}^{(j)}$ погрешность вычисления кратного интеграла в правой части этой формулы. Отрезки $[t_{j-1}, t_j]$, $j = 1, \dots, n$ можно выбирать таким образом, чтобы выполнение условий $E_{int}^{(j)} < E_{for}^{(j)}$ не было сопряжено со значительными вычислительными затратами. С другой стороны, с ростом n возрастает объем вычислений, связанных с приближенным интегрированием по переменным x_1, \dots, x_{n-1} . Кроме того, появляется проблема определения границ области интегрирования по этим переменным, заменяющей пространство R^{n-1} . Чтобы оценить погрешность, возникающую от такой замены, необходимо учитывать динамику изменения среднего значения и дисперсии распределения $|\Psi(x, t)|^2$. При итерационном способе вычислений область интегрирования по x_k можно определить по моментам распределения, полученного при интегрировании по x_{k-1} . Оптимальный выбор точек t_1, \dots, t_{n-1} , а также параметров k и l зависит от физических характеристик рассматриваемых процессов и от интервалов времени, на которых исследуется их эволюция.

Аналогичную процедуру можно использовать для нахождения функции $Q(x, t)$. В этом случае из уравнений

$$Q(x_j, t_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) Q(x_{j-1}, t_{j-1}) dx_{j-1},$$

$j = 1, \dots, n$, получим равенство

$$Q(x, t; x_0, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} Q(x, t - t_{n-1}; x_{n-1}, 0) Q(x_{n-1}, t_{n-1} - t_{n-2}; x_{n-2}, 0) \times \\ \dots \times Q(x_1, t_1; x_0, 0) dx_1 \dots dx_{n-1}. \quad (28)$$

которое является следствием известной формулы Чепмена-Колмогорова-Смолуховского [3]

$$Q(x, t; x_0, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(x, t; x_1, t_1) Q(x_1, t_1; x_0, 0) dx_1.$$

На рис. 6 и 8 показаны соответственно функции $|\Psi(x, t)|^2$ и $Q(x, t)$, вычисленные при различных значениях n . Для нахождения пропагаторов $K(x_j, t_j - t_{j-1}; x_{j-1}, 0)$ и $Q(x_j, t_j - t_{j-1}; x_{j-1}, 0)$ применялась формула (23) с $k = l = 1$. Как видно из этих рисунков, путем разбиения временного интервала можно значительно повысить точность вычислений без увеличения точности приближенной формулы (23). При необходимости, однако, можно увеличивать как число итераций n , так и значения параметров k и l при вычислении пропагаторов $K(x_j, t_j - t_{j-1}; x_{j-1}, 0)$ или $Q(x_j, t_j - t_{j-1}; x_{j-1}, 0)$, комбинируя, таким образом, два указанных способа повышения точности вычислений.

5 Заключение

В рамках данной работы возможно лишь обозначить условия, при которых подход с использованием функциональных интегралов может эффективно применяться. Пол-

ное определение "вычислительной ниши" этого подхода может произойти только в процессе его широкого практического применения.

Поскольку решения (2) и (6) рассмотренных в этой работе уравнений определены для всего пространства независимых переменных x и t и вычисление соответствующих функциональных интегралов по формуле (23) не связано с какими-либо ограничениями области изменения пространственной переменной x [24], использование предлагаемого подхода целесообразно в случаях, когда дисперсия искомого распределения и, соответственно, пространственная область определения приближенного решения быстро меняется со временем. С практической точки зрения эта область ограничивается погрешностью численного нахождения пропагаторов $K(x, t; x_0, t_0)$ и $Q(x, t; x_0, t_0)$ при больших $|x|$ и t . Сильная зависимость дисперсии от времени, как правило, имеет место, когда начальное распределение представляет собой узкий пик или содержит такие пики. При заданном положении этих пиков численное интегрирование по x_0 в формуле (6) является относительно несложной задачей. Как видно из приведенного в разделе 3 примера приближенного решения уравнения (4), в котором в качестве начального условия был выбран гауссиан с дисперсией $\xi^2 = 10^{-300}$, хорошая точность вычислений может быть достигнута за счет подходящего выбора области изменения переменной x_0 и сетки численного интегрирования.

Если погрешность, связанная с ограничением бесконечной области интегрирования по x_0 , достаточно мала, то суммарная погрешность вычислений в предлагаемом подходе определяется в основном точностью формулы (23). Основной вычислительной проблемой в этом случае является численное нахождение аппроксимирующих римановых интегралов с погрешностью, не превышающей погрешность этой формулы. В приведенных в данной работе примерах выражения, аппроксимирующие функциональные интегралы, содержали римановы интегралы кратности не выше 4. В настоящее время существуют различные эффективные методы приближенного вычисления интегралов такой кратности [26]-[29].

Как показано в работах [25],[30], с помощью формулы, точной для функционалов определенного вида, кратные функциональные интегралы по мере Винера также могут хорошо аппроксимироваться римановыми интегралами относительно небольшой кратности. Это указывает на возможность успешного применения предлагаемого подхода в случае многомерных задач. Вычисление пропагаторов $K(x, t; x_0, t_0)$ и $Q(x, t; x_0, t_0)$ по формуле (23) не связано также с дискретизацией пространства независимых переменных x и t [24],[30] либо с видоизменением заданного потенциала, что позволяет решать задачу в постановке, близкой к исходной, и делает описанный подход простым в практическом применении.

Для широкого использования метода приближенного функционального интегрирования необходимо развитие соответствующей теоретической базы. С одной стороны, должна быть исследована возможность представления решений различных уравнений математической физики в виде функциональных интегралов, с другой стороны, развиты соответствующие методы приближенного вычисления таких интегралов. В этом направлении получены определенные результаты (См. [25] и цит. литературу). Примеры численного решения уравнения Шредингера и связанного с ним уравнения диффузии, а также приведенные выше соображения позволяют надеяться, что приближенное интегрирование в функциональных пространствах станет в будущем эффективным методом численного решения уравнений в частных производных.

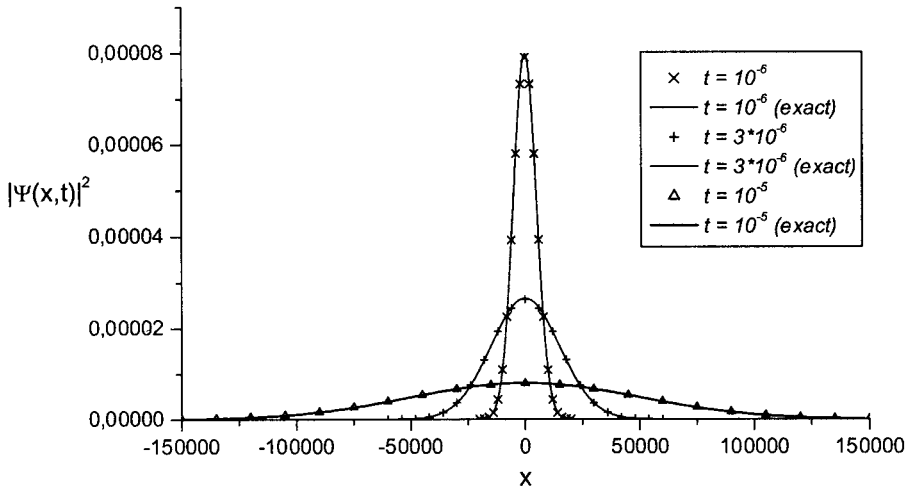


Рис. 1. Функция $|\Psi(x,t)|^2$, вычисленная по формулам (2) и (22) при $\hbar = m = \omega = 1$, $a = 0, \eta^2 = 10^{-20}$ для различных значений времени t . Пропагатор (22) вычислялся по формуле (23) с параметрами $l = k = 1$. Соответствующие точные решения, полученные по формуле (24), показаны сплошными линиями

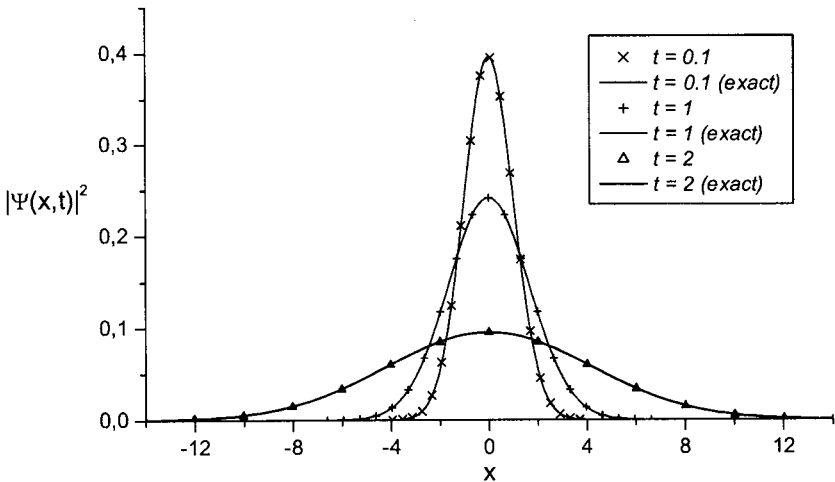


Рис. 2. Функция $|\Psi(x,t)|^2$, вычисленная по формулам (2) и (22) при $\hbar = m = \omega = 1$, $a = 0, \eta^2 = 1$ для различных значений времени t . Пропагатор (22) вычислялся по формуле (23) с параметрами $l = k = 1$. Соответствующие точные решения, полученные по формуле (24), показаны сплошными линиями

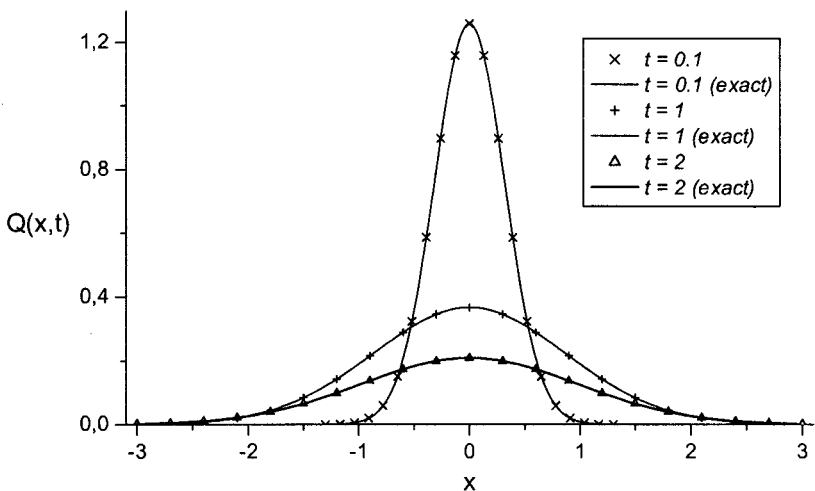


Рис. 3. Функция $Q(x, t)$, вычисленная по формулам (6) и (21) при $\omega = 1, a = 0, \xi^2 = 10^{-300}$ для различных значений времени t . Пропагатор (21) вычислялся по формуле (23) с параметрами $l = k = 1$. Соответствующие точные решения, полученные по формуле (25), показаны сплошными линиями

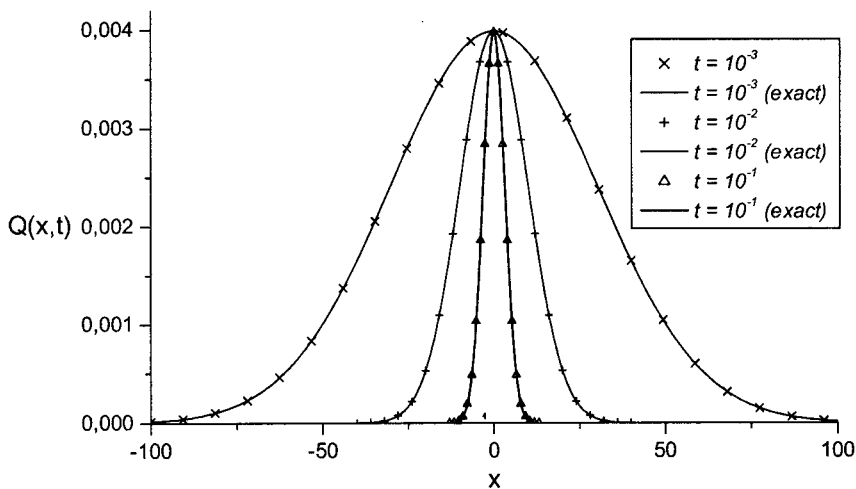


Рис. 4. Функция $Q(x, t)$, вычисленная по формулам (6) и (21) при $\omega = 1, a = 0, \xi^2 = 100$ для различных значений времени t . Пропагатор (21) вычислялся по формуле (23) с параметрами $l = k = 1$. Соответствующие точные решения, полученные по формуле (25), показаны сплошными линиями

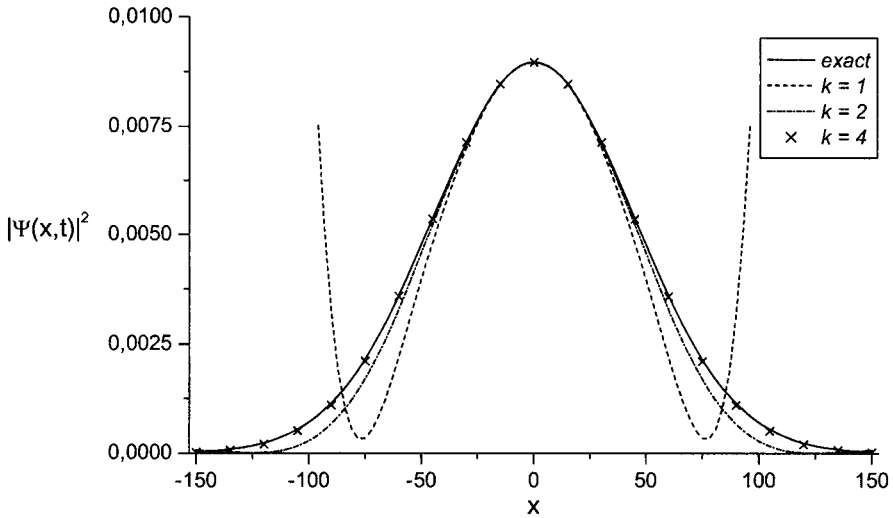


Рис. 5. Функция $|\Psi(x, t)|^2$, вычисленная по формулам (2) и (22) при $\hbar = m = \omega = 1$, $a = 0$, $\eta^2 = 10^{-4}$, и $t = 0.8$. Пропагатор (22) вычислялся по формуле (23) при $l = 1$ и различных значениях параметра k . Точное решение, полученное по формуле (24), показано сплошной линией

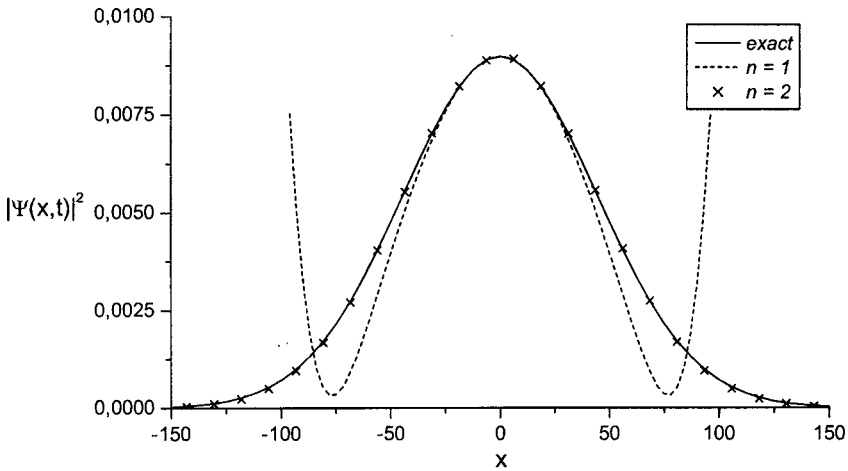


Рис. 6. Функция $|\Psi(x, t)|^2$, вычисленная по формулам (2) и (22) при $\hbar = m = \omega = 1$, $a = 0$, $\eta^2 = 10^{-4}$, и $t = 0.8$. Пропагатор (22) вычислялся по формуле (27) при $n = 1$ и $n = 2$ с промежуточной точкой $t_1 = 0.5$. Точное решение, полученное по формуле (24), показано сплошной линией

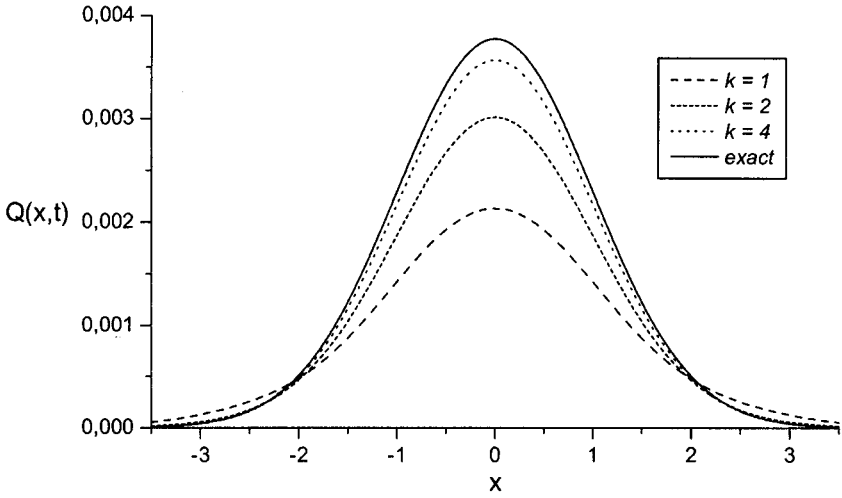


Рис. 7. Функция $Q(x, t)$, вычисленная по формулам (6) и (21) при $\omega = 1, a = 0, \xi^2 = 0.01$ и $t = 10$. Пропагатор (22) вычислялся по формуле (23) при $l = 1$ и различных значениях параметра k . Точное решение, полученное по формуле (25), показано сплошной линией

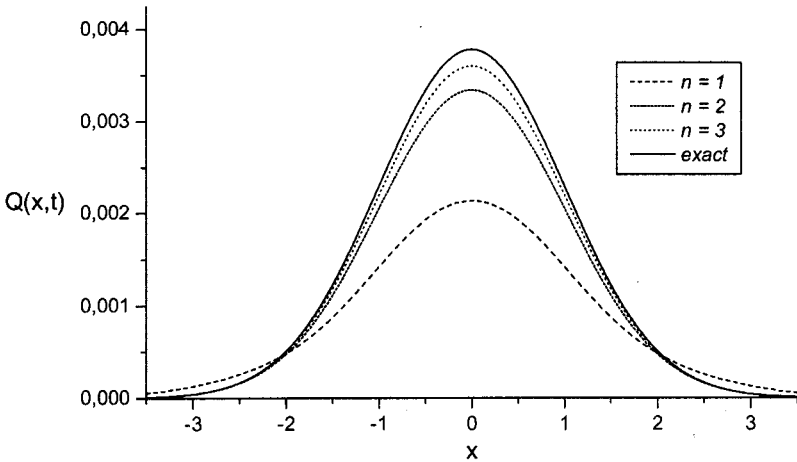


Рис. 8. Функция $Q(x, t)$, вычисленная по формулам (6) и (21) при $\omega = 1, a = 0, \xi^2 = 0.01$ и $t = 10$. Пропагатор (21) вычислялся по формуле (28) при $n = 1, n = 2$ с промежуточной точкой $t_1 = 5$ и $n = 3$ с промежуточными точками $t_1 = 3$ и $t_2 = 6$. Точное решение, полученное по формуле (25), показано сплошной линией

Благодарности

Автор признателен проф. Е.П.Жидкову, кандидатам физ.-мат. наук Ю.Ю.Лобанову, И.В.Амирханову и Ю.В.Пальчикову за полезные обсуждения и критические замечания, позволившие улучшить качество этой работы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 02-01-81023.

Литература

- [1] Feynman R.P. *Rev. mod. Phys.* **20** (1948), 367-387.
- [2] Feynman R.P., Hibbs A.R. *Quantum Mechanics and Path Integrals* (New York, McGraw-Hill, 1965); Фейнман Р., Хибс А. *Квантовая механика и интегралы по траекториям* (Москва, Мир, 1968).
- [3] Jersak J. In: *Path Integral Method, Lattice Gauge theory and critical phenomena* (Singapore: World Scientific, 1989), p. 1-67.
- [4] Exner P. *Open Quantum Systems and Feynman Integrals* (Holland, D.Reidel Publishing Company, 1985).
- [5] Кас М. *Trans. Amer. Math. Soc.* **65**, (1949), 1-13.
- [6] Кас М. *Probability and Related Topics in the Physical Sciences* (New York, Interscience Pub., 1959); Кац М. *Вероятность и смежные вопросы в физике* (Москва, Мир, 1965).
- [7] Гельфанд И.М., Яглом А.М. *УМН* т.11, вып.1 (67) 1956г. с.77-114; Gelfand I.M. and Yaglom A.M. *J. Math. Phys.* **1** (1960) 48-69.
- [8] Cameron R.H. *J. Math. and Phys.* **39** (1960) 126-140.
- [9] Doss H. *Commun. Math. Phys.* **73** (1980) 247-264.
- [10] Azencott R. and Doss H. (*Lecture Notes in Mathematics 1109*) (Heidelberg, Springer).
- [11] Haba Z. *J. Phys. A* **27** (1994) 6457-6477.
- [12] Creutz M. *Quarks, gluons and lattices* (Cambridge, 1983); Кройц М. *Кварки, глюоны и решетки* (Москва, Мир, 1987).
- [13] Егоров А.Д., Соболевский П.И., Янович Л.А. *Приближенные методы вычисления континуальных интегралов* (Минск, Наука и техника, 1985); Egorov A.D., Sobolevsky P.I. and Yanovich L.A. *Functional Integrals: Approximate Evaluation and Applications* (Dordrecht, Kluwer, 1993).
- [14] Cameron R.H. *Duke Math. J.*, vol.18, 1, (1951), p.111.
- [15] Гельфанд И.М., Ченцов Н.Н. *ЖЭТФ*, т.31, вып.6, (1956) с.1106.
- [16] Владимиров В.С. *УМН*, т.15, вып.4, (1960), с.129.
- [17] Тобиас Т. *Изв. АН ЭССР, сер. физ.-мат и техн. наук*, 2, (1965), с.214.
- [18] Konheim A.G., Miranker W.L. *Math. Comput.*, v.21, (1967), p.49.
- [19] Fosdick L.D., Jordan H.F. *J. Comp. Phys.*, v.3, 1, (1968), p.1.
- [20] Finlayson H.C. а) *Canad.J.Math.*, v.19, 1, (1967), p.58; б) *Trans.Amer.Math.Soc.*,v.132, 2, (1968), p.461; в) *Pacific J. Math.*, v.34, 1, (1970), p.61.

- [21] Янович Л.А. Приближенное вычисление континуальных интегралов по гауссовым мерам (Минск, Наука и техника, 1976).
- [22] Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Шахбагян Р.Р. *Мат. моделирование*, т.1, вып.8, (1989), с.139-157.
- [23] Lobanov Yu.Yu. et al., *J. Comput. Appl. Math.* **70** (1996) 145-160; Lobanov Yu.Yu. *Comp. Phys. Comm.* **99** (1996) 59-72; Lobanov Yu.Yu. *J. Phys. A* **29** (1996) 6653-6669.
- [24] Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю. *ДУ*, т.29, 9, (1993), с.1609-1619.
- [25] Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю. *ЭЧАЯ*, т.27, вып.1, (1996), с.173-242.
- [26] Коробов Н.М. Теоретико-числовые методы в приближенном анализе (Москва, Физматгиз, 1963).
- [27] Соболев С.Л., Васкевич В.Л. Кубатурные формулы (Новосибирск, Изд-во ин-та математики, 1996).
- [28] Evans M., Swartz T. *Approximating Integrals Via Monte Carlo and Deterministic Methods* (Oxford University Press, 2000).
- [29] Жидков Е.П., Лобанов Ю.Ю., Рушай В.Д. ОИЯИ, P11-95-505, Дубна, 1995.
- [30] Lobanov Yu.Yu., Shahbagian R.R., Zhidkov E.P. JINR, E11-91-353, Dubna, 1991; *Мат. моделирование*, т.5, вып.12, (1993), с.61-78.

Получено 17 июня 2003 г.

Рушай В. Д.

P11-2003-113

Численное решение уравнения Шредингера и связанного с ним уравнения диффузии методом приближенного функционального интегрирования по условной мере Винера

Получено выражение фейнмановского пропагатора в форме функционального интеграла по условной мере Винера. Приведены примеры численного решения уравнения Шредингера и уравнения, описывающего диффузию с некоторым распределением отрицательных источников, путем вычисления соответствующих интегралов Винера по приближенной формуле, точной для функциональных многочленов заданной степени. Для повышения точности вычислений предложена итерационная процедура. Обсуждаются некоторые характерные особенности подхода к численному решению уравнений в частных производных, для которых возможно представление их функций Грина в виде функциональных интегралов, основанного на приближенном вычислении таких интегралов.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2003

Перевод автора

Rushai V. D.

P11-2003-113

Numerical Solution of the Schroedinger Equation and Related to It Diffusion Equation by Approximate Functional Integration with Respect to Conditional Wiener Measure

An expression for the Feynman propagator is obtained in the form of a functional integral with respect to the conditional Wiener measure. Examples of numerical solution of the Schroedinger equation and related to it diffusion equation by means of computation of corresponding Wiener integrals with the help of an approximate formula precise for functional polynomials of a given degree are given. An iteration procedure which allows one to increase accuracy of the calculations is proposed. Characteristic features of such an approach to numerical solution of partial differential equations are discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2003

**Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Е. В. Сабоевой***

Подписано в печать 08.07.2003.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,13. Уч.-изд. л. 1,58. Тираж 310 экз. Заказ № 54008.

**Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.**

E-mail: publish@pds.jinr.ru

www.jinr.ru/publish/