

СИМВОЛЬНО-ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Виницкий С.И., Гусев А.А., Ростовцев В.А., Чулуунбаатар О.
Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Представлено краткое описание математических моделей и соответствующего набора символьно-численных алгоритмов для решения спектральных и эволюционных двумерных краевых задач в квантовой механике.

We present a brief description of the mathematical models and corresponding set of the symbolic-numerical algorithms for solving the spectral and evolution two-dimensional boundary problems in quantum mechanics.

Ключевые слова: математические модели, символьно-численные алгоритмы, краевые задачи, квантовая механика.

Keywords: mathematical models, symbolic-numerical algorithms, boundary problems, quantum mechanics.

1. Введение. В настоящее время основные понятия, математические модели и методы в квантовой механике служат основой для построения алгоритмов квантовых вычислений будущих квантовых компьютеров, в которых информация будет передаваться, обрабатываться и храниться на уровне квантовомеханических процессов, реализующихся в мезоскопических наноструктурах или конечномерных квантовых системах [1]. Для математического моделирования конечномерные квантовые системы во внешних полях являются подходящим объектом, поскольку они интенсивно исследуются из-за разнообразия их приложений, например, в процессах рассеяния света на системах квантовых точек [2], генерации второй гармоники и трехфотонного рассеяния в квантово-оптических устройствах [3], импульсного воздействия лазерных полей на атомы и ионы в магнитно-оптических ловушках и полупроводниковых наноструктурах [4].

Динамические свойства мезоскопических наноструктур или квантовых конечномерных систем во внешних полях описывается в простейшем случае математическими моделями в классе эволюционных краевых задач для линейного или нелинейного уравнения Шрёдингера с потенциалами, зависящими от физическими параметрами и времени. Для формулировки математических моделей и разработки алгоритмов решения данного класса параметрических эволюционных краевых задач применяются алгебры динамической симметрии, канонические преобразования, символьные и численные методы. Использование символьных методов существенно упрощает процесс формулировки и анализа математической модели, позволяет избежать ошибок округления, получать решение поставленной задачи для необходимой области определения набора исходных параметров, а также рассматривать сингулярные функции и изучать их асимптотическое поведение.

Промежуточные результаты символьных вычислений, как правило, имеют большой объём, а их преобразование к искомой форме требует значительных компьютерных ресурсов. Поэтому, необходима разработка комплексных алгоритмов, сочетающих достоинства символьных и численных методов и позволяющих визуализировать исследуемые решения, зависящие от набора физических параметров. Для тестирования разрабатываемых алгоритмов и контроля эффективности их работы необходимо построение эталонных моделей. Таким образом, разработка дискретных моделей, комплексных алгоритмов и программ, которые реализуют решение данного класса параметрических эволюционных краевых задач, является актуальной проблемой математического моделирования конечномерных квантовых систем во внешних полях.

В обзоре представлено краткое описание математических моделей и соответствующего набора символьно-численных алгоритмов для решения спектральных и эволюционных двумерных краевых задач квантовой механики, представленных в [2]–[7].

Структура обзора следующая. В разделе 2 представлены символьные алгоритмы нормализации и квазиклассического квантования полиномиальных гамильтонианов. В разделе 3 рассмотрены схемы алгоритма расщепления оператора эволюции для нестационарного уравнения Шрёдингера с гамильтонианом, зависящим от времени. В разделе 4 представлена схема символьно-численных алгоритмов решения методом Канторовича краевых задач для эллиптического дифференциального уравнения второго порядка в частных производных в двумерной области. В заключении указаны перспективы применения данных алгоритмов и программ.

2. Алгоритмы нормализации и квантования полиномиальных гамильтонианов. Гамильтониан системы n -связанных осцилляторов с вещественными частотами ω_ν в окрестности точки равновесия $(p^{(0)}, q^{(0)}) \in R^n \times R^n$ фазового пространства $R^n \times R^n$ представим в полиномиальном виде:

$$H(q, p) = H^{(2)}(q, p) + \sum_{j=3}^{j_{\max}} H^{(j)}(q, p), \quad (1)$$

$$H^{(2)}(q, p) = \sum_{\nu=1}^n \frac{\omega_\nu}{2} (p_\nu^2 + q_\nu^2), \quad H^{(j)}(q, p) = \sum_{|l|+|m|=j} V_{lm} q^l p^m.$$

где l, m мультииндексы, заданы набором целых чисел $l = (l_1, l_2, \dots, l_n)$, $m = (m_1, m_2, \dots, m_n)$, $|l| = l_1 + l_2 + \dots + l_n$, $|m| = m_1 + m_2 + \dots + m_n$, $q^l = q_1^{l_1} \cdot q_2^{l_2} \cdot \dots \cdot q_n^{l_n}$, $p^m = p_1^{m_1} \cdot p_2^{m_2} \cdot \dots \cdot p_n^{m_n}$. Процедура нормализации состоит в нахождении нового гамильтониана

$$\Gamma(\xi, \eta) = \Gamma^{(2)}(\xi, \eta) + \sum_{s=3}^{s_{\max}} \Gamma^{(s)}(\xi, \eta), \quad \Gamma^{(2)}(\xi, \eta) = \sum_{\nu=1}^n \frac{\omega_\nu}{2} (\eta_\nu^2 + \xi_\nu^2) \quad (2)$$

и канонического преобразования $(q, p) \rightarrow (\xi, \eta)$, связывающего гамильтонианы (1) и (2). Здесь $\Gamma^{(s)}(\xi, \eta)$ - однородные полиномы степени s , которые удовлетворяют соотношению со скобками Пуассона $\{, \}$

$$\left\{ \Gamma^{(2)}(\xi, \eta), \Gamma^{(s)}(\xi, \eta) \right\} = \sum_{\nu=1}^n \omega_\nu \left(\xi_\nu \frac{\partial}{\partial \eta_\nu} - \eta_\nu \frac{\partial}{\partial \xi_\nu} \right) \Gamma^{(s)}(\xi, \eta) = 0. \quad (3)$$

В зависимости от способов задания преобразования $(q, p) \rightarrow (\xi, \eta)$ существует несколько методов получения нормальных форм [11].

Метод Биркгофа-Густавсона (BG) [11], состоит в выражении старых импульсов p и новых координат ξ через новые импульсы η и старые координаты q

$$p_\nu = \frac{\partial W_{BG}}{\partial q_\nu}, \quad \xi_\nu = \frac{\partial W_{BG}}{\partial \eta_\nu}, \quad W_{BG}(q, \eta) = \sum_{\nu=1}^n q_\nu \eta_\nu + \sum_{s=3}^{s_{\max}} W_{BG}^{(s)}(q, \eta) \quad (4)$$

с помощью производящей функции второго типа $W_{BG}(q, \eta)$.

Метод Дебри-Хори (DH) [11], состоит в выражении старых канонических переменных (q, p) через новые (ξ, η)

$$q_\nu = \xi_\nu + \sum_{k=1}^{s_{\max}-2} \frac{1}{k!} L_W^k \xi_\nu, \quad p_\nu = \eta_\nu + \sum_{k=1}^{s_{\max}-2} \frac{1}{k!} L_W^k \eta_\nu, \quad W_{DH}(\xi, \eta) = \sum_{k=3}^{s_{\max}} W_{DH}^{(k)}(\xi, \eta) \quad (5)$$

с помощью генератора $W_{DH}(\xi, \eta)$. Оператор L_W^k определен рекуррентным соотношением $L_W^k = L_W(L_W^{k-1})$, $L_W^0 = 1$ через дифференциальный оператор Ли: $L_W f \equiv L(f, W) = \{f, W\}$. Подставляя ряды (4) или (5) в основное уравнение

$$H(q, p) = \Gamma(\xi, \eta),$$

разлагая левую и правую части в ряды Тейлора по степеням канонических переменных (q, η) или (ξ, η) , и выделяя однородные полиномы степени $s = 3, 4, \dots, s_{\max}$ от этих переменных, получим систему уравнений

$$\Gamma^{(s)} = \{\Gamma^{(2)}, W^{(s)}\} + H^{(s)} + T_s, \quad (6)$$

которая решается последовательно, начиная с $s = 3$. В уравнении (6), неизвестными величинами являются компоненты нового гамильтониана $\Gamma^{(s)}$ и производящей функции $W^{(s)} = W_{BG}^{(s)}$ или генератора $W^{(s)} = W_{DH}^{(s)}$. Вспомогательные полиномы T_s зависят от ранее найденных компонент $\Gamma^{(s')}$, $W^{(s')}$, $H^{(s')}$, где $s' = 3, \dots, s-1$, при этом $T_3 \equiv 0$.

Алгоритм Биркгофа-Густавсона (БГ) с производящей функцией (4) в терминах универсального псевдокода был описан в работе [12], а описание программы GITA, реализованной в системе символьных вычислений REDUCE дано в [13]. Соответственно алгоритм Дебри-Хори (ДХ) в терминах универсального псевдокода дан в работе [3], а описание программы LINA, реализованной в системе REDUCE, дана в [14]. Алгоритмы БГ и ДХ были также реализованы в виде пакетов программ в системах символьных вычислений MAPLE и MATHEMATICA.

Для сравнения эффективности работы алгоритмов БГ и ДХ, реализованных на различных системах REDUCE(red), MAPLE(mws) и MATHEMATICA(nb), приведем Таблицу 1, в которой указано число мономов NM и время вычисления T (в секундах) нормальной формы G и генератора W_{DH} до заданного порядка s_{\max} ,

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
	s_{\max}	H	G	W_{BG}	W_{DH}	BG <i>mws</i>	DH <i>mws</i>	BG <i>nb</i>	DH <i>nb</i>	BG <i>red</i>	DH <i>red</i>	[15] <i>red</i>
(7)	40	3	230	209	209	89.1	25.4	16.4	20.9	90.5	18.5	106.0
(8)	4	5	14	22	17	2.0	1.3	2.1	1.1	0.2	0.2	0.3
(9)	4	8	46	590	410	54.2	29.6	16.2	3.8	78.8	18.2	2.3
(10)	6	26	200	164	164	7.9	5.1	4.6	2.0	3.0	2.8	8.2

Таблица 1: В столбцах 1-2 даны ссылки на гамильтонианы для которых ищется нормальная форма и порядок нормализации s_{\max} . Столбцы 3-6 содержат число мономов, содержащихся в исходном гамильтониане (H), нормальной форме (G), в производящей функции W_{BG} и в генераторе W_{DH} . В столбцах 7-12 приведено время выполнения процедуры нормализации (в секундах) на PC-3 600MHz 128MB, WINDOWS 98, методами Биркгофа-Густавсона (BG) и Денри-Хори (DH), реализованными на REDUCE (*red*), MAPLE (*mws*) и MATHEMATICA (*nb*). В столбце 13 дано время выполнения программы нормализации методом ДХ [15], написанной на REDUCE.

для следующих полиномиальных гамильтонианов H :

$$H(q, p) = \frac{\omega_1}{2}(p_1^2 + q_1^2) + aq_1^4, \quad \omega_1 = 1, \quad (7)$$

$$H(q, p) = \frac{\omega_1}{2}(p_1^2 + q_1^2) + \frac{\omega_2}{2}(p_2^2 + q_2^2) + aq_1^2q_2, \quad (8)$$

$$H(q, p) = \sum_{\nu=1}^3 \frac{\omega_\nu}{2}(p_\nu^2 + q_\nu^2) + \alpha q_1 q_3^2 + \beta q_2 q_3^2, \quad (9)$$

$$H(q, p) = \sum_{\nu=1}^4 \frac{\omega_\nu}{2}(q_\nu^2 + p_\nu^2) - \frac{4F}{\omega^3}(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2)(q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 + q_4^2), \\ - \frac{4\gamma}{\omega^4}(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2)(q_1^2 + q_4^2)(q_2^2 + q_3^2), \quad \omega_\nu = 1. \quad (10)$$

В примерах (7)–(10), $a, \alpha, \beta, F, \omega, \gamma$ – вещественные параметры. В примерах (8) и (9), ω_1, ω_2 и ω_3 несоизмеримые частоты, т.е. $\nexists b_\nu \in \mathcal{Z}, \sum_{\nu=1}^n \omega_\nu b_\nu = 0$.

Как видно из Таблицы 1, время вычисления зависит от от числа мономов и структуры задания параметров компонент $H^{(s)}$, $s \geq 3$ исходного гамильтониана H . При этом, задание частот ω_ν в виде несоизмеримых параметров в примерах (8), (9), по сравнению с явным заданием соизмеримых частот $\omega_\nu = 1$ в примерах (7), (10), значительно увеличивает время вычисления, поскольку в промежуточных алгебраических выражениях содержатся рациональные дроби с полиномиальными знаменателями. Заметим, что раскрытие этих выражений наиболее эффективно выполняется в системе MATHEMATICA.

Алгоритм квазиклассического квантования [3], реализованный в виде программы QUANTGIT в системе REDUCE, преобразует классическую нормальную форму в комплексных переменных $z_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_k + i\xi_k)$, $z_k^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_k - i\xi_k)$ с помощью

подстановки Вейля

$$z_k^m z_k^{*n} \longrightarrow \frac{1}{2^m} \sum_{l=0}^m \frac{m!}{l!(m-l)!} \hat{a}_k^{+l} \hat{a}_k^n \hat{a}_k^{+m-l}, \quad (11)$$

в квантовую нормальную форму

$$\hat{\Gamma}(a^+, a) = \sum_{s=2}^{s_{\max}} \hat{\Gamma}^{(s)}(a^+, a), \quad (12)$$

в терминах операторов a , a^+ , $[a_k, a_l^+] = \delta_{kl}$. Построенный с помощью программы QUANTGIT оператор $\hat{\Gamma}$ используется для решения задачи на собственные значения

$$\hat{\Gamma}(a^+, a)|\lambda\rangle = \lambda(E)|\lambda\rangle. \quad (13)$$

Вид полученной нормальной формы зависит от соотношения между частотами: если частоты ω_ν несоизмеримы, т.е. соотношения $\sum_{\nu=1}^n \omega_\nu(m_\nu - l_\nu) = 0$ выполняются только при $m_\nu = l_\nu$, $\nu = 1, 2, \dots, n$, то гамильтониан имеет n независимых интегралов движения $I_\nu = (\xi_\nu^2 + \eta_\nu^2)/2$. Тогда действие соответствующего квантового оператора $\hat{\Gamma}$ принимает диагональный вид $G = \hat{\Gamma}|k_1, k_2, \dots, k_n\rangle = \gamma|k_1, k_2, \dots, k_n\rangle$ и для решения задачи на собственные значения (13) достаточно решить уравнение $\gamma = \lambda(E)$. При этом собственная функция задачи совпадает с собственной функцией $|k_1, k_2, \dots, k_n\rangle$ оператора $\hat{\Gamma}^{(2)}$. Если частоты ω_ν , r - соизмеримы $\exists b_{k\nu} \in \mathcal{Z}$, $\sum_\nu \omega_\nu b_{k\nu} = 0$, $k = 1, \dots, r$, то $n - r$ величин $I_\nu = \sum_\nu a_{s\nu}(\xi_\nu^2 + \eta_\nu^2)/2$, $s = 1, \dots, n - r$, являются интегралами движения, где $a_{s\nu}$ определяются из системы уравнений $\sum_\nu a_{s\nu} b_{k\nu} = 0$, $k = 1, \dots, r$, и действие оператора нормальной формы на базис n -мерного гармонического осциллятора G не принимает диагональный вид. Общие схемы решения задачи на собственные значения (13) в недиагональном представлении вместе с алгоритмом вычисления приближённых интегралов движения даны в [5].

В качестве примера рассмотрим гамильтониан двумерного атома водорода ($n = 2$) с зарядом Z_a в электрическом поле удаленного точечного заряда Z_b при фиксированном значении $E < 0$

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + q_1^2 + q_2^2) + \frac{Z_b(-2E)^{-3/2}}{2R^2}(q_1^4 - q_2^4) \\ &- \frac{Z_b(-2E)^{-2}}{4R^3}(q_1^2 + q_2^2)(q_2^4 - 4q_1^2 q_2^2 + q_1^4) + \dots, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\varepsilon = R^{-1} \ll 1$ - величина обратная расстоянию между зарядами Z_a и Z_b . В результате выполнения алгоритма 1 была получена БГНФ (2) при $s_{\max} = 8$ все члены нечетного порядка которой равны нулю. Приведем только первые два ненулевых члена

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)} &= \frac{1}{2}(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2), \\ \Gamma^{(4)} &= \frac{3Z_b(-2E)^{-3/2}}{16R^2}((\eta_1^2 + \xi_1^2)^2 - (\eta_2^2 + \xi_2^2)^2). \end{aligned} \quad (15)$$

Используя алгоритм 4, найдем действие нормальной формы на собственную функцию 2-мерного гармонического осциллятора ($|k_1, k_2\rangle$):

$$\begin{aligned}
G &= \Gamma|k_1, k_2\rangle = (a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + 1)|k_1, k_2\rangle \\
&- \frac{3Z_b(-2E)^{-3/2}}{4R^2}(a_1^{+2}a_1^2 + 2a_1^\dagger a_1 - a_2^{+2}a_2^2 - 2a_2^\dagger a_2)|k_1, k_2\rangle + \dots \\
&= (k_1 + k_2 + 1)|k_1, k_2\rangle - \frac{3Z_b(-2E)^{-3/2}}{4R^2}(k_1 + k_2 + 1)(k_1 - k_2)|k_1, k_2\rangle \\
&- \frac{3Z_b(-2E)^{-2}}{8R^3}(k_1 + k_2 + 1)\sqrt{(k_1^2 - k_1)(k_2^2 + 3k_2 + 2)}|k_1 - 2, k_2 + 2\rangle \\
&- \frac{3Z_b(-2E)^{-2}}{8R^3}(k_1 + k_2 + 1)\sqrt{(k_1^2 + 3k_1 + 2)(k_2^2 - k_2)}|k_1 + 2, k_2 - 2\rangle + \dots
\end{aligned}$$

Для решения задачи на собственные значения (13) представим в виде рядов действие G оператора нормальной формы $\hat{\Gamma}$ на вектор $|k_1, k_2\rangle$

$$G = (k_1 + k_2 + 1)|k_1, k_2\rangle + \sum_{j=1}^{j_m} R^{-j} \sum_{a=-j+1}^{j-1} f_{k_1+a, k_2-a}^{(j)} |k_1 + a, k_2 - a\rangle, \quad (16)$$

а также искомого собственный вектор

$$|\lambda\rangle = \sum_{j=0}^{j_m-1} R^{-j} \sum_{a=-j+1}^{j-1} b_{k_1+a, k_2-a}^{(j)} |k_1 + a, k_2 - a\rangle \quad (17)$$

и спектральный параметр

$$\lambda(E) = \sum_{j=0}^{j_m} R^{-j} \lambda^{(j)}. \quad (18)$$

Для нахождения коэффициентов $b_{k_1+a, k_2-a}^{(j)}$ и $\lambda^{(j)}$ разложений (17) и (18) с малым параметром $\varepsilon = R^{-1}$ применяется фрагмент алгоритма решения задачи на собственные значения (13) в виде системы неоднородных алгебраических уравнений [2]:

$$\begin{aligned}
f_{k_1, k_2}^{(j)} &= 0 \rightarrow \lambda^{(j)}, \\
f_{k_1+a, k_2-a}^{(j)} &= 0 \rightarrow b_{k_1+a, k_2-a}^{(j-2)}, \quad a \neq 0
\end{aligned} \quad (19)$$

с начальными условиями

$$b_{k_1, k_2}^{(0)} = 1, \quad b_{k_1+a, k_2-a}^{(0)} = 0, \quad a \neq 0 \quad \lambda^{(0)} = k_1 + k_2 + 1. \quad (20)$$

Квазиклассический спектр $E_{n,d}$ атома водорода в поле удаленного точечного заряда, найдем из алгебраического уравнения ¹

$$\lambda(E_{n,d}) = Z_a \sqrt{-2/E_{n,d}},$$

¹Заметим, что физический смысл имеют только четные значения k_1, k_2

где $n = (k_1 + k_2)/2 + 1/2$, $d = (k_1 - k_2)/2$, с помощью стандартной итерационной процедуры:

$$E_{n,d} = -\frac{Z_a^2}{2n^2} + \frac{3Z_b}{2Z_a R^2} n d + \frac{n^2 Z_b}{2Z_a^2 R^3} (n^2 - 6d^2 - 1 + \delta_1^{(3)}) \quad (21)$$

$$-\frac{n^3 d Z_b}{64 Z_a^3 R^4} (156n^2 - 436d^2 - 227 + \delta_1^{(4)}) - \frac{n^4 Z_b^2}{64 Z_a^4 R^4} (68n^2 - 12d^2 + 85 + \delta_2^{(4)}) + \dots$$

Здесь коэффициенты $\delta_i^{(j)} \equiv 0$. Спектр, определяемый методом квантовомеханической теории возмущений [2], отличается от квазиклассического спектра (21) только соответствующими значениями $\delta_i^{(j)}$, в частности $\delta_1^{(3)} = \delta_1^{(4)} = 0$, $\delta_2^{(4)} = -18$. Полное время счета данного примера ($s_{\max} = 10$) на компьютере РС-3 600MHz 128MB, WINDOWS 98 в системе MAPLE составляет 90 секунд.

3. Алгоритмы расщепления оператора эволюции для нестационарного уравнения Шредингера. Рассмотрим задачу Коши для нестационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом $H(x, t)$, описывающее динамику атома во внешнем поле, на интервале времени $t \in [t_0, T]$ для начального состояния $\psi_0(x)$:

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H(x, t) \psi(x, t), \quad \|\psi\|^2 = \int |\psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad \psi(x, t_0) = \psi_0(x), \quad (22)$$

$$\psi(x, t) \in \mathbf{W}_2^1(\mathbf{R}^n \otimes [t_0, T]), \quad \psi_0(x) \in \mathbf{W}_2^1(\mathbf{R}^n).$$

Рассмотрим задачу на равномерной сетке по временной переменной t

$$\Omega_\tau [t_0, T] = \{t_0, t_{k+1} = t_k + \tau, t_K = T\} \quad (23)$$

с шагом $\tau = t_{k+1} - t_k$, ($k = 0, 1, \dots, K$). Решение задачи $\psi(t_{k+1}) \equiv \psi(x, t_{k+1})$ на $k+1$ -ом слое определяется через решение $\psi(t_k)$ на предыдущем k -ом слое с помощью оператора эволюции $U(t_{k+1}, t_k, \lambda)$, который представим в виде:

$$\psi(t_{k+1}) = U(t_{k+1}, t_k, \lambda) \psi(t_k), \quad U(t_{k+1}, t_k, \lambda) = \exp\{-i\tau A_k(t_{k+1}, \lambda)\}. \quad (24)$$

Операторы выражаются в виде ряда

$$A_k(t, \lambda) = \frac{1}{\tau} \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j A_{(j)k}(t, \lambda), \quad A_k(t_k, \lambda) = 0, \quad (25)$$

по степеням формального параметра λ .

После вычисления неизвестных операторов $A_{(j)}(t) \equiv A_{(j)k}(t, \lambda)$, по алгоритму 1, описанному ниже, этот параметр полагается равным единице ($\lambda = 1$).

Алгоритм 1:

На шаге 1: операторы $A_{(j)}(t)$ вычисляются из операторного тождества

$$-i\lambda H(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{l_1, \dots, l_q=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n+\sum_{i=1}^q l_i} (adA_{(l_1)}(t)) \dots (adA_{(l_q)}(t)) \dot{A}_{(n)}(t)}{(q+1)!}, \quad (26)$$

Здесь линейный оператор $(adA) : \mathcal{L}(X) \rightarrow \mathcal{L}(X)$ определен для операторов $A, B \in \mathcal{L}(X)$ в виде $(adA)B = [A, B] \equiv AB - BA$ и имеет следующие свойства: $(adA)^0 B =$

B , $(adA)^j B = (adA)^{j-1}(adA)B$; точкой над оператором $A_{(n)}(t)$ обозначена частная производная $\dot{A}_{(n)}(t) = \partial_t A_{(n)}(t)$ по временной переменной в момент времени t .

На шаге 2: приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях параметра λ в левой и правой частях операторного тождества (26) получаем рекуррентную систему дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \iota H(t) + \dot{A}_{(1)}(t) &= 0, \\ 1/2(adA_{(1)}(t)) \dot{A}_{(1)}(t) + \dot{A}_{(2)}(t) &= 0, \dots \end{aligned} \quad (27)$$

На шаге 3: ищется решение системы (27) относительно неизвестных операторов $A_{(i)}(t)$, $i = 1, 2, \dots, 2M$.

На шаге 4: подставляя найденные операторы $A_{(i)}(t)$, $i = 1, 2, \dots, 2M$ в разложение (25), находим искомые эффективные операторы $A_k \equiv A_k(t_{k+1}, \lambda = 1)$, независящие явно от временной переменной t и обеспечивающие переход от k -го временного слоя к $k+1$ -му. Отметим, что эти операторы связаны с известным гамильтонианом $H(t)$, зависящим от временной переменной t , разложением Магнуса

$$A_k = \frac{1}{\tau} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt H(t) + \frac{\iota}{2\tau} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt' \int_{t_k}^{t'} dt'' (adH(t'')) H(t') + \dots \quad (28)$$

В предположении, что оператор $H(t) \equiv H(x, t)$ зависит гладко от t , достаточно ограничиться конечным числом членов $L = 2M$ разложения (28) для того, чтобы получить аппроксимацию унитарного оператора эволюции (24) с точностью порядка $O(\tau^{2M+1})$, на сетке (23) с шагом τ

$$U^{(M)}(t_{k+1}, t_k; \tau) = \exp(-\iota \tau A_k^{(M)}(t_{k+1})) \quad A_k^{(M)}(t, \lambda) = \frac{\iota}{\tau} \sum_{j=1}^{2M} \lambda^j A_{(j)k}^{(M)}(t, \lambda). \quad (29)$$

На шаге 5: используя разложение Тейлора оператора $H(t_c)$ в окрестности точки $t = t_c \equiv t_k + \tau/2$

$$H(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(t - t_c)^j}{j!} \partial_t^j H(t_c) \quad (30)$$

и вычисляя интегралы в (28), получаем выражения для операторов $A_k^{(M)}(t_{k+1})$.

На шаге 6: формируется конечный набор операторов $A_k^{(M)} \equiv A_k^{(M)}(t_{k+1})$ в аналитическом виде. В случае $M = 1$ коэффициент $A_k^{(1)}$ имеет тот же вид, что и в схеме Кранка-Николсона:

$$A_k^{(1)} = \int_0^1 d\xi H(t_k + \xi\tau) = H(t_k + \frac{\tau}{2}) + O(\tau^2).$$

При $M \geq 2$ реализация схемы (24)–(30) приводит к громоздким вычислениям. Поэтому генерация набора операторов $A_k^{(M)}$, необходимого для аппроксимации

(29) с требуемой точностью $O(\tau^{2M+1})$, выполняется алгоритмом 1, реализованным в системе MAPLE и представленным в виде псевдокода в работе [4].

Замечания:

1. Интегралы, которые возникают на шаге 3 вычисляются явно на шаге 5 после подстановки разложения гамильтониана $H(x, t)$ в ряд Тейлора (30) по переменной t в окрестности точки $t = t_c = t_{in} + \tau/2$.
2. Применение подходящих квадратурных формул для вычисления интегралов на шаге 3 позволяет генерировать различные операторно-разностные схемы с расщеплением оператора эволюции, учитывающим вид гамильтониана $H(x, t)$.

Алгоритм 2. Поскольку гамильтониан $H(t)$ представим рядом (30), в окрестности точки $t = t_c \equiv t_k + \tau/2$, то $A_k(t_{k+1})$ будем искать в виде ряда с неизвестными коэффициентами $A_{(j)k}$:

$$A_k(t_{k+1}) = \sum_{j=0}^{\infty} \tau^j A_{(j)k}. \quad (31)$$

Заметим, что оператор $U(t_k, t_{k+1}, \lambda)$ является обратным к оператору $U(t_{k+1}, t_k, \lambda)$, т.е. $A_{k+1}(t_k) = A_k(t_{k+1})$. Так как выражение для $A_{k+1}(t_k)$ получается из (31) формальной заменой $\tau \rightarrow -\tau$, то ряд (31) содержит только четные степени τ .

Тогда вместо (26) имеет место операторное тождество

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(adA_k(t_{k+1}))^j}{(j+1)!} \dot{A}_k(t_{k+1}) = -\imath H(t_{k+1}) - \imath \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(adA_k(t_{k+1}))^j}{j!} H(t_k). \quad (32)$$

При заданных коэффициентах разложения (30) гамильтониана $H(t)$ из соотношения (32) следует система рекуррентных уравнений относительно неизвестных коэффициентов ряда (31):

$$(j+1)A_{(j)}(t_c) = \frac{1+(-1)^j}{2^{j+1}j!} \partial_t^j H(t_c) + \sum_{q=1}^j \sum_{n=0}^{j-q} \sum_{l_1, \dots, l_q=0}^{n+q+\sum_{i=1}^q l_i=j} \frac{(-\imath)^q B_{l_1, \dots, l_q}^n(t_c)}{q!},$$

$$B_{l_1, \dots, l_q}^n(t_c) = (adA_{(l_1)}(t_c)) \dots (adA_{(l_q)}(t_c)) \left\{ \frac{(-1)^n}{2^{n+1}n!} \partial_t^n H(t_c) - \frac{n+1}{q+1} A_{(n)}(t_c) \right\}. \quad (33)$$

Алгоритм 2, реализованный в системе MAPLE, представлен в виде псевдокода в работе [4].

Алгоритм 3. Для генерации из (24) неявной операторно-разностной схемы с помощью эффективных операторов $A_k^{(M)}$, вычисленных с помощью алгоритма 1 или 2, представим эволюционный оператор (29) на каждом k -том слое в виде обобщенного $[M/M]$ Паде разложения

$$\exp(-\imath\tau A_k^{(M)}) = \prod_{\zeta=1}^M T_{\zeta k} + O(\tau^{2M+1}), \quad T_{\zeta k} = \frac{I + \frac{\tau}{2M} \alpha_{\zeta}^{(M)} A_k^{(M)}}{I + \frac{\tau}{2M} \bar{\alpha}_{\zeta}^{(M)} A_k^{(M)}}. \quad (34)$$

Здесь коэффициенты $\alpha_\zeta^{(M)}$, $\zeta = 1, \dots, M$, $M \geq 1$ являются корнями полиномиального уравнения ${}_1F_1(-M, -2M, 2M\iota/\alpha) = 0$, где ${}_1F_1$ вырожденная гипергеометрическая функция, коэффициенты $\bar{\alpha}_\zeta^{(M)}$ комплексно сопряженные к $\alpha_\zeta^{(M)}$. Коэффициенты $\alpha_\zeta^{(M)}$ имеют следующие свойства: $\Im\alpha_\zeta^{(M)} < 0$ и $0.6 < |\alpha_\zeta^{(M)}| < \mu^{-1}$, где $\mu \approx 0.28$ корень трансцендентного уравнения $\mu \exp(\mu + 1) = 1$. Заметим, что условие $\tau < 2M\mu \|A_k^{(M)}\|^{-1}$ гарантирует справедливость приближения (34) для всякого ограниченного оператора $A_k^{(M)}$.

Используя разложение (34), произведем *факторизацию эволюционного оператора*, т. е. представим (24), в виде системы M уравнений относительно набора $M - 1$ вспомогательных функций $\psi^{k+\frac{\zeta}{M}}$:

$$\psi^{k+\zeta/M} = T_{\zeta k} \psi^{k+(\zeta-1)/M}, \quad \zeta = 1, \dots, M. \quad (35)$$

решение которой обеспечивает переход от $\psi(t_k)$ на k -том слое к $\psi(t_{k+1})$ на $k+1$ -том слое. Поскольку $\Im\alpha_\zeta^{(M)} < 0$, вспомогательные операторы $T_{\zeta k}$ изометрические, следовательно норма всех $\|\psi^{k+\zeta/M}\|$ равна единице, т.е. $\|\psi^k\| = \|\psi^{k+1/M}\| = \dots = \|\psi^{k+1}\| = 1$.

Применение соотношений (35) на каждом k -том слое сетки Ω_τ для приближенного решения задачи Коши (22) позволяет генерировать неявную операторно-разностную схему:

$$\begin{aligned} \psi^0 &= \psi(t_0), \\ \left(I + \frac{\tau}{2M} \bar{\alpha}_\zeta^{(M)} A_k^{(M)}\right) \psi^{k+\frac{\zeta}{M}} &= \left(I + \frac{\tau}{2M} \alpha_\zeta^{(M)} A_k^{(M)}\right) \psi^{k+\frac{\zeta-1}{M}}, \quad \zeta = 1, 2, \dots, M, \\ \psi(T) &= \psi^K, \quad k = 0, 1, \dots, K-1. \end{aligned} \quad (36)$$

Вспомогательные функции $\psi^{k+\zeta/M}$ ($\zeta = 1, \dots, M-1$) в (36) можно рассматривать как некоторые приближенные решения на дробных шагах $t_{k+\zeta/M} = t_k + \tau\zeta/M$, $\zeta = 1, \dots, M-1$ временного интервала $[t_k, t_{k+1}]$, равном шагу τ равномерной сетки (23).

Эта неявная унитарная M -слоиная схема сохраняет норму разностного решения и является стабильной. Каждое уравнение по отдельности из системы M уравнений (36) имеет порядок аппроксимации не выше второго, тогда как вся схема (36) имеет суммарную аппроксимацию $2M$ -того порядка $O(\tau^{2M})$ по временному шагу сетки. Заметим, что при $2M = 2$ схема (36) сводится к диагональной Паде-аппроксимации ранга $[1/1]$ оператора эволюции, известной как схема Кранка-Николсона.

Для получения схем с частичным расщеплением оператора эволюции, т.е. с выделением симметричной части $\tilde{A}_{t_c}^{(M)}$ оператора $A_{t_c}^{(M)} = \hat{A}_{t_c}^{(M)} + \iota \check{A}_{t_c}^{(M)}$, применяется алгоритм, использующий калибровочное преобразование [4]:

$$\hat{\psi} = \exp\left(\iota S_{t_c}^{(M)}\right) \psi, \quad \tilde{A}_{t_c}^{(M)} = \exp\left(\iota S_{t_c}^{(M)}\right) A_{t_c}^{(M)} \exp\left(-\iota S_{t_c}^{(M)}\right).$$

В результате, на каждом k -том слое сетки (23), вместо схемы (36) имеем схему

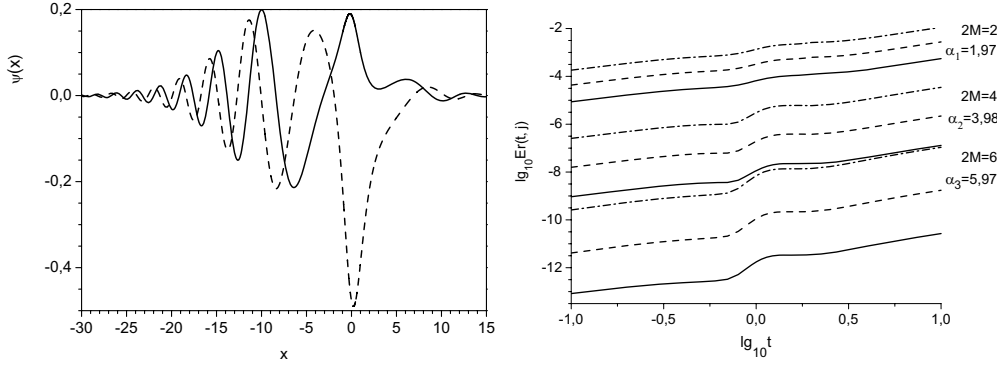


Рис. 1: Вещественная и мнимая части решения $\psi(x, t)$ (сплошная и пунктирная кривые) для атома Пешля-Теллера при $t = T = 10$ и погрешности $Er(t; i)$, $i = 1, 2, 3$ (штрих-пунктирная, пунктирная и сплошная кривые) для схем второго ($2M=2$), четвертого ($2M=4$) и шестого ($2M=6$) порядков.

с частичным расщеплением оператора эволюции

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^k &:= \exp\left(iS_{t_c}^{(M)}\right) \psi(t_k), \\ \left(I + \frac{\tau}{2M} \bar{\alpha}_\zeta^{(M)} \tilde{A}_k^{(M)}\right) \hat{\psi}^{k+\frac{\zeta}{M}} &= \left(I + \frac{\tau}{2M} \alpha_\zeta^{(M)} \tilde{A}_k^{(M)}\right) \hat{\psi}^{k+\frac{\zeta-1}{M}}, \quad \zeta = 1, 2, \dots, M \\ \psi(t_{k+1}) &:= \exp\left(-iS_{t_c}^{(M)}\right) \hat{\psi}^{k+1}. \end{aligned} \quad (37)$$

Соответствующий алгоритм 3, реализованный в системе MAPLE, представлен в виде псевдокода в работе [4].

Пример: Модель 1D-атома в поле лазерного импульса.

Задача Коши решалась на интервале $t_0 = 0 \leq t \leq T = 10$ для нестационарного уравнения Шредингера,

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= H(x, t) \psi(x, t), \quad H(x, t) = H(x) + q(x, t), \quad (38) \\ H(x) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad \psi(\pm\infty, t) = 0, \quad \psi(x, t_0) = \psi_0(x), \end{aligned}$$

описывающего динамику 1D-атома с потенциалом Пешля-Теллера, $V(x) = -\cosh^{-2} x$, в поле лазерного импульса в дипольном приближении

$$q(x, t) = x f(t), \quad f(t) = \begin{cases} f_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{2t_0}\right), & 0 < t < 2t_0; \\ 0, & |t - t_0| \geq t_0, \end{cases} \quad (39)$$

при $f_0 = t_0 = 1$. В качестве начального состояния $\psi(x, t_0)$ была выбрана функция основного состояния $\psi_0(x) = 1/(\sqrt{2} \cosh x)$.

Для аппроксимации по пространственной переменной использовалась конечно-элементная сетка

$$\Omega_h^p = \{-1500(200) - 300(200) - 20(200) - 1(400)1(200)20(200)300(200)1500\},$$

где число в скобках означает число конечных элементов на интервале. Между каждыми двумя узлами сетки применялась интерполяционная формула Лагранжа шестого порядка ($p = 6$). Вычисления интегралов проводились по квадратурным формулам Гаусса для полиномов Лежандра порядка $p + 1 = 7$.

Для анализа сходимости на последовательности трёх вдвое сгущающихся временных сеток вычислялись абсолютные погрешности $Er(t, j)$ ($j = 1, 2, 3$) и коэффициент Рунге $\alpha_M(t)$:

$$Er^2(t, j) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} |\psi(x, t) - \psi^{\tau^j}(x, t)|^2 dx, \quad \alpha_M(t) = \ln \frac{|Er(t; 1) - Er(t, 2)|}{|Er(t; 2) - Er(t, 3)|} / \ln 2.$$

Вычисления по сгенерированным схемам с $2M = 2, 4, 6$ на временных сетках $\Omega_\tau[0, 10]$ с шагами по времени $\tau = 0.01, 0.005, 0.0025, 0.00125$ проводились на языке FORTRAN с четверной точностью (33 значащие цифры). На Рис. 1 показаны графики $Er(t; j)$, $j = 1, 2, 3$ для схем с $M = 1, 2, 3$. Верхние три кривые соответствуют схеме (37) с $M = 1$, средние – с $M = 2$ и нижние – с $M = 3$. Возле каждой тройки кривых показано среднее значение α по всем значениям $\alpha(t_k)$ на сетке $\Omega_\tau[0, 10]$. В результате подтверждены теоретические оценки порядка сходимости предложенных схем (37), соответственно, второго ($M = 1$), четвертого ($M = 2$) и шестого ($M = 3$) порядка точности $O(\tau^{2M})$. Время счета составляет 632 секунды на компьютере AMD ATHLON 3GHz, 2GB RAM, Scientific Unix CERN 4.

Замечание. При $M \leq 3$ оператор $S_k^{(M)}$ представляет собой оператор умножения. Однако при $M = 4$ не удается избавиться от несимметричного оператора $\check{A}_{t_c}^{(M)}$, содержащего третью частную производную по пространственной переменной $\frac{\partial^3}{\partial x^3}$, если $S_k^{(4)}$ определен как оператор умножения. Поэтому, при построении схем более высоких порядков $M \geq 4$, $S_k^{(M)}$ представляет собой дифференциальный оператор.

4. Символьно-численные алгоритмы решения двумерных краевых задач в квантовой механике методом Канторовича. Уравнение Шредингера для волновой функции $\hat{\Psi}(r, \theta, \varphi) = \Psi(r, \theta) \exp(i m \varphi) / \sqrt{2\pi}$ водородоподобного атома с зарядом ядра Z , находящимся в аксиально симметричном магнитном поле $\vec{B} = (0, 0, B)$, записанное в сферических координатах (r, θ, φ) при фиксированном значении магнитного квантового числа $m = 0, \pm 1, \dots$ и z-четности $\sigma = \pm 1$ сводится к эллиптическому уравнению второго порядка в частных производных в области $\Omega = \{0 < r < \infty, -1 < \eta = \cos \theta < 1\}$:

$$\left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{A}^{(0)}}{r^2} - \frac{2Z}{r} - \epsilon \right) \Psi(r, \eta) = 0. \quad (40)$$

Здесь $\epsilon = 2E$ удвоенная энергия (в Ридбергах $1\text{Ry} = (1/2) \text{ а.е.}$) состояния $|m\sigma\rangle$ при фиксированных значениях m и σ , $\hat{A}^{(0)} = A^{(0)} + \gamma m r^2$, оператор $A^{(0)} \equiv A^{(0)}(p)$ – соответствует оператору квазиуглового уравнения для сплюснутых сфероидальных функций,

$$A^{(0)}(r, \eta) = -\frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{m^2}{1 - \eta^2} + p^2 (1 - \eta^2), \quad (41)$$

где слагаемое с параметром $p = \gamma r^2/2$ соответствует потенциальной энергии взаимодействия электрона с магнитным полем в приближении бесконечной массы ядра в атомной системе единиц ($\hbar = m_e = e = 1$), $m = 0, \pm 1, \dots$ магнитное квантовое число. Здесь $\gamma = B/B_0$, $B_0 \cong 2.35 \times 10^9 G$ безразмерный параметр, характеризующий магнитное поле B .

Волновые функции $\Psi(r, \eta) \equiv \Psi^{m\sigma}(r, \eta)$ в каждом подпространстве $\mathbf{H}_{m\sigma}$ Гильбертова пространства удовлетворяют краевым условиям на границе области Ω

$$\lim_{\eta \rightarrow \pm 1} (1 - \eta^2) \frac{\partial \Psi(r, \eta)}{\partial \eta} = 0, \quad \text{если } m = 0; \quad \Psi(r, \pm 1) = 0, \quad \text{если } m \neq 0; \quad (42)$$

$$\frac{\partial \Psi(r, 0)}{\partial \eta} = 0, \quad \text{если } \sigma = +1; \quad \Psi(r, 0) = 0, \quad \text{если } \sigma = -1; \quad \lim_{r \rightarrow 0} r^2 \frac{\partial \Psi(r, \eta)}{\partial r} = 0.$$

Волновые функции дискретного спектра $\epsilon \equiv \{\epsilon_i\}_{i=1}^{i_{\max}}$ при больших $r = r_{\max}$ удовлетворяют, следующему из асимптотик решения краевому условию первого рода,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \Psi(r, \eta) = 0 \rightarrow \Psi(r_{\max}, \eta) = 0. \quad (43)$$

Здесь приближенное значение энергии $\epsilon \equiv \epsilon(r_{\max})$ – неизвестное собственное значение $\epsilon_i \equiv \epsilon_i(r_{\max})$ в задаче (40)–(4) на конечном интервале $0 \leq r \leq r_{\max}$, $r_{\max} \gg 1$, при этом выполняется условие нормировки

$$\int_0^{r_{\max}} \int_{-1}^1 r^2 |\Psi(r, \eta)|^2 dr d\eta = 1. \quad (44)$$

Волновые функции непрерывного спектра при больших $r = r_{\max}$ и фиксированном значении энергии ϵ удовлетворяют, следующему из асимптотик решения краевому условию третьего рода,

$$\frac{\partial \Psi(r, \eta)}{\partial r} - \mu \Psi(r, \eta) = 0. \quad (45)$$

Следуя Канторовичу, представим решение $\Psi_i^{m\sigma}(r, \eta)$ в виде разложения по набору одномерных базисных функций $\Phi_j(\eta; r) \equiv \Phi_j^{m\sigma}(\eta; r)$ при фиксированных значениях m и четности σ :

$$\Psi_i^{m\sigma}(r, \eta) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \Phi_j^{m\sigma}(\eta; r) \chi_j^{(i)}(r). \quad (46)$$

Эти функции $\Phi_j(\eta; r)$ при каждом фиксированном значении параметра r являются решениями одномерной параметрической задачи на собственные значения

$$\hat{A}^{(0)}(r, \eta) \Phi_j(\eta; r) = E_j(r) \Phi_j(\eta; r), \quad \int_{-1}^1 \Phi_i(\eta; r) \Phi_j(\eta; r) d\eta = \delta_{ij}. \quad (47)$$

Подставляя разложение (46) в уравнения (40), (41) с учетом (47), получаем краевую задачу для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка относительно неизвестного вектора $\chi^{(i)}(r) = \{\chi_j^{(i)}(r)\}_{j=1}^{j_{\max}}$

$$\left(-\mathbf{I} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\mathbf{U}(r)}{r^2} + \mathbf{Q}(r) \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \frac{dr^2 \mathbf{Q}(r)}{dr} \right) \chi^{(i)}(r) = \epsilon_i \mathbf{I} \chi^{(i)}(r), \quad (48)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица, $\mathbf{U}(r)$ и $\mathbf{Q}(r)$ матрицы конечной размерности $j_{\max} \times j_{\max}$:

$$\begin{aligned} U_{ij}(r) &= \frac{E_i(r) + E_j(r) - 4Zr}{2} \delta_{ij} + r^2 H_{ij}(r), \\ H_{ij}(r) &= \int_{-1}^1 \frac{\partial \Phi_i(\eta; r)}{\partial r} \frac{\partial \Phi_j(\eta; r)}{\partial r} d\eta = H_{ji}(r), \\ Q_{ij}(r) &= - \int_{-1}^1 \Phi_i(\eta; r) \frac{\partial \Phi_j(\eta; r)}{\partial r} d\eta = -Q_{ji}(r). \end{aligned} \quad (49)$$

Ограниченные и регулярные решения $\chi^{(i)}(r)$ подчиняются краевым условиям при $r \rightarrow 0$:

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 \left(\frac{d\chi^{(i)}(r)}{dr} - \mathbf{Q}(r)\chi^{(i)}(r) \right) = 0. \quad (50)$$

Решения дискретного спектра $\epsilon \equiv \{\epsilon_i\}_{i=1}^{i_{\max}}$, соответствующие неизвестным собственным значениям ϵ_i , подчиняются краевым условиям

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \chi^{(i)}(r) = 0 \rightarrow \chi^{(i)}(r_{\max}) = 0, \quad (51)$$

и условиям ортонормировки

$$\int_0^{r_{\max}} r^2 (\chi^{(i)}(r))^T \chi^{(j)}(r) dr = \delta_{ij}. \quad (52)$$

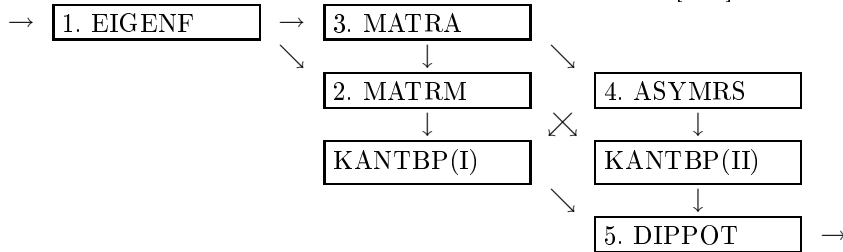
Для непрерывного спектра при фиксированных значениях энергии ϵ и радиальной переменной $r = r_{\max}$ набор ограниченных решений $\chi(r) = \{\chi^{(i)}(r)\}_{i=1}^{N_o}$, $N_o \leq j_{\max}$ подчиняются краевому условию третьего рода с матрицей неизвестных параметров $\mathbf{\Lambda} = \{\delta_{ij}\mu_i\}_{i,j=1}^{N_o}$

$$\frac{d\chi(r)}{dr} - \mathbf{Q}(r)\chi(r) = \chi(r)\mathbf{\Lambda}, \quad (53)$$

где N_o – число открытых каналов при условии $p_{i_o}^2 = 2E - E_{i_o}(\infty) > 0$.

Для редукции исходной двумерной задачи к системе радиальных уравнений решаемой на конечном интервале $r \in (0, r_{\max})$, с краевыми условиями третьего типа, разработан набор символьно-численных алгоритмов решения параметрической задачи на собственные значения и вычисления эффективных потенциалов, включая построение асимптотик эффективных потенциалов и решений радиальных уравнений при малых и больших значениях параметра r .

Структура символьно-численных алгоритмов пакета POTHMF представлена в виде диаграммы, где цифра обозначает номер задачи, в рамке указано название самой процедуры, а стрелками их функциональная связь [5, 6]:



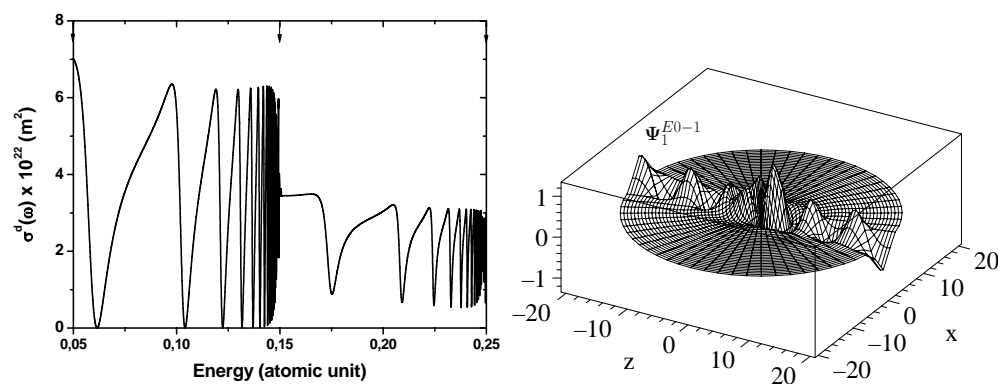


Рис. 2: Сечения фотоионизации из основного состояния $1s$ дискретного спектра в зависимости от энергии конечного состояния E (при $\sigma = -1$, $m = 0$) для $B_0 = 2.35 \times 10^4 T$ ($\gamma = 1 \times 10^{-1}$). Волновая функция непрерывного спектра $\Psi_1^{Em\sigma}$ на плоскости xz при $\sigma = -1$, $Z = 1$, $m = 0$ and $\gamma = 1 \times 10^{-1}$ с энергией $E = 0.0596$ (a.e.) соответствующей первому минимуму сечения.

- EIGENF вычисляет численные значения угловых сплюснутых сфероидальных функций $\Phi_i \equiv \Phi^{m\sigma}(\eta; r)$ по переменной $\eta \in [-1, 1]$, зависящих от параметра r , на сетке значений из конечного интервала $r \in [0, r_{\max}]$.
- MATRM вычисляет численные значения матричных элементов $Q_{ij}(r)$, $H_{ij}(r)$ на сетке значений радиальной переменной из конечного интервала $r \in [0, r_{\max}]$.
- MATRA вычисляет в аналитическом виде коэффициенты асимптотических разложений матричных элементов $(i, j = 1, \dots, j_{\max})$ при больших значениях радиальной переменной $r \gg 1$.
- ASYMRS вычисляет в аналитическом виде асимптотики фундаментальных решений системы дифференциальных уравнений второго порядка по радиальной переменной при $r > r_{\max}$ и $rp_{i_0} \gg 1$ используемых для построения краевых условий на редуцированном интервале.
- KANTBP [7] вычисляет численные значения решения (дискретного или непрерывного спектра) краевых задач (11), (12) для системы дифференциальных уравнений на сетке значений радиальной переменной из конечного интервала $r \in [0, r_{\max}]$.
- DIRPOT вычисляет дипольные матричные элементы перехода, используя решения задач дискретного и непрерывного спектра, полученные с помощью KANTBP(I) и (II), соответственно.

Результаты работы пакета представлены на Рис. 2. Время счета сечения при заданной энергии E непрерывного спектра (при $j_{\max} = 10$) на компьютере AMD ATHLON 3GHz, 2GB RAM, WINDOWS XP на языке FORTRAN-77 составляет 28 секунд.

Заключение. Для решения спектральных и эволюционных двумерных краевых задач в квантовой механике представленный выше набор символьно-численных алгоритмов: нормализации и квазиклассического квантования полиномиальных гамильтонианов, расщепления оператора эволюции и генерации многослойных схем решения нестационарного уравнения Шрёдингера, решения двумерных краевых задач методом Канторовича был реализован в виде набора программ GITA, LINA, POTHMF, KANTBP и т. д. в среде символьных (REDUCE, MAPLE, MATHEMATICA) и численных (FORTRAN) вычислений. Эффективность работы программ продемонстрирована на ряде типичных примеров, что позволяет оценить необходимые ресурсы ЭВМ для решения данного класса задач и возможности его расширения для двухчастичных квантовых систем во внешних полях [16].

Список литературы

- [1] А.Г. Бутковский, Ю.Н. Самойленко, Управление квантово-механическими процессами. Наука, М., 1984.
- [2] В.В. Соколовский, Ю.В. Попов, А.А. Гусев, С.И. Виноцкий. Использование потенциалов нулевого радиуса в качестве алгоритма решения квантовой задачи рассеяния // Вычислительные методы и программирование 5, 83-95, (2004).
- [3] V.P. Karassiov, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky, Polynomial Lie algebra methods in solving the second-harmonic generation model: some exact and approximate calculations // Phys. Lett. A 295, 247-255, (2002).
- [4] Д. Боуместер, А. Экерт, А. Цайлингер, Физика квантовой информации. Постмаркет, М., 2002.
- [5] А.А. Гусев и др., Алгебраическая теория возмущений для атома водорода в слабых электрических полях. // Программирование 1, 27-31, (2001).
- [6] А.А. Гусев и др., Сравнение алгоритмов для нормализации и квантования полиномиальных гамильтонианов. // Программирование 2, 27-36, (2004).
- [7] С.И. Виноцкий и др., Символьный алгоритм факторизации оператора эволюции нестационарного уравнения Шрёдингера. // Программирование 2, 103-113, (2006).
- [8] С.И. Виноцкий и др., Символьно-численный алгоритм вычисления матричных элементов параметрической задачи на собственные значения // Программирование 2, 105-116, (2007).
- [9] O. Chuluunbaatar et al, POTHMF: A program for computing potential curves and matrix elements of the coupled adiabatic radial equations for a Hydrogen-like atom in a homogeneous magnetic field. // Computer Physics Communication, (2007) (submitted).

-
- [10] O. Chuluunbaatar et al, KANTBP: A program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach. // Computer Physics Communication, doi: 10.1016/j.cpc.2007.05.016 (in press) (2007), (accepted).
- [11] Г.Е.О. Джакаля, Методы теории возмущений для нелинейных систем. М., Наука, 1979.
- [12] A.A. Gusev et al, The Programs for Normalization and Quantization of Polynomial Hamiltonians, Computer Algebra in Scientific Computing, V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov (Eds.), Munchen:, Technische Universitat, 2002. p. 147–157.
- [13] V. Basios et al GITA: A REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonians. // Computer Physics Communications, 90, 355–368, (1995).
- [14] Yu.A. Ukolov et al LINA: A REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonians. // Computer Physics Communications, 166, 66–80, (2005).
- [15] А.Г. Сокольский, И.И. Шевченко, Нелинейная нормализация автономных гамильтоновых систем на ЭВМ в аналитическом виде. Ленинград, Препринт ИТА АН СССР № 8, 1990.
- [16] V.V. Serov et al., Wave-packet-evolution approach for single and double ionization of two-electron systems by fast electrons, Phys. Rev. A 75, 012715 (2007).