УДК 519.63

В. А. Петенько (Ужгородский нац. ун-т)

О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ОТЫСКАНИЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

The algorithm of numerical solving of search problem for quantum mechanical wave function is constructed in this paper. Quasyprobabilistic method to proving convergence of differencial schemes is used.

В даній роботі побудований алгоритм наближеного розв'язання задачі знаходження квантомеханічної хвильової функції. До доведення збіжності різницевих схем використаний квазіймовірностний підхід.

Задача отыскания волновой функции в одномерном случае состоит в решении задачи Коши вида

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}; \quad x \in \mathbb{R},\ t \geq 0,$$

$$\psi(x,0) = f(x),$$

где $\hbar$ — постоянная Планка, деленная на 2π, m — масса електрона.

Как известно [1], в банаховом пространстве непрерывных функций с максимум-нормой

$$\|\psi\| = \sup_x |\psi(x)|$$

рассматриваемая задача является некорректной. В работе [1] также указывается, что с использыванием теории распределений, рассматривая в качестве пространства решений $L_2(\mathbb{R})$, указанной некорректности можно избежать. В то же время возникают осложнения в связи с переходом к большей размерности пространства.

В данной заметке рассмотрен вопрос о численном решении задачи отыскания одномерной волновой функции. В целом изложенный подход близок к методу квазиобращения, изложенному в работе [2] применительно к численному решению задачи, обратной к задаче теплопроводности. Главным в таком подходе является идея использывания квазивероятностного аппарата к построению алгоритма численного решения рассматриваемой задачи и доказательству его сходимости (в указанном смысле). Следует отметить, что переход к большей размерности связан только с увеличением вычислительной работы.

1. Как известно [3], квазивероятносным распределением называется совокупность, вообще говоря, комплексных чисел $\{p_k\}$ дающих в суме единицу, а в случае их счётного количества ряд $\sum\limits_k |p_k|$ обязан быть сходящимся. Числовые и функциональные характеристики дискретных случайных величин, которым приписываются квазивероятностные распределения, определяются по аналогии с соответствующими понятиями в теории вероятностей.

Пусть $\{k\Delta x\}$ — одномерная решетка и $\{\xi_{nn}\}$ — последовательность серий (первый индекс — номер серии, а второй изменяется от 1 до n) взаимно-независимых одинаково распределённых в пределах каждой серии решетчатых случайных величин, $\{p_{nk}\}$ — квазивероятностное распределение в смысле соответствия

$$p_{nk} = P\{\xi_{nj} = k\Delta x\},\ j = \overline{1,n};$$

$w(s) = \sum_k e^{isk\Delta x} p_{nk}$ — преобразование Фурье-Стильтьеса (п. ф. с.) распределения $\{p_{nk}\}$. Если через $\{P_n(k)\}$ обозначить распределение суммы $\xi_{n1} + \xi_{n2} + \ldots + \xi_{nn}$, то это же распределение вычисляется как n-кратная свёртка набора $\{p_{nk}\}$ с собой, определяемая по схеме

$$P_2(k) = \sum_l p_{nk-l} p_{nl},\ P_3(k) = \sum_l P_2(k-l) p_{nl}, \ldots, P_n(k) = \sum_l P_{n-1}(k-l) p_{nl}. \qquad (1)$$

Соответственно, п. ф. с. распределения $\{P_n(k)\}$ будет $w^n(s)$. Как и в классическом случае [4], можно получить формулу обращения

$$P_n(k) = \frac{\Delta x}{2\pi} \int_D e^{-isk\Delta x} \varphi^n(s) ds,$$

где $D = \left[-\frac{\pi}{\Delta x}, \frac{\pi}{\Delta x}\right]$. Пусть, далее, $\alpha_r = \sum_k (k\Delta x)^r p_{nk}$ — момент порядка r распределения $\{p_{nk}\}$.

Лемма 1. *Пусть $\{\xi_{nn}\}$ — последовательность серий взаимно-независимых и одинаково распределённых решетчатых случайных величин с распределением $\{p_{nk}\}$ и п. ф. с. $w(s)$ каждая в n-ой серии. Если* 1) $\alpha_1 = \alpha_3 = 0$; 2) $\alpha_2 = \frac{2ia}{\sqrt{n}}$; 3) $\alpha_4 = 4!\, b$; 4) *существует* α_5, $(a, b > 0)$, *то при* $n \to \infty$

$$w^n\left(\frac{s}{\sqrt[4]{n}}\right) - e^{-ias^2 - bs^4} = O\left(\frac{s^5}{\sqrt[4]{n}}\right).$$

Лемма 2. *Пусть для последовательности серий $\{\xi_{nn}\}$ выполняютя условия леммы* 1, *и, кроме того, для функции* $w_0(s) = w(s) - \frac{ia\sin^2 s}{\sqrt{n}}$ *в области* $D \setminus \{0\}$ *выполняется* $|w_0(s)| < 1$. *Тогда найдётся такое* $b_0 > 0$, *что в области* $\sqrt[4]{n} D = \left[-\frac{\sqrt[4]{n}\pi}{\Delta x}, \frac{\sqrt[4]{n}\pi}{\Delta x}\right]$

$$\left| w^n\left(\frac{s}{\sqrt[4]{n}}\right)\right| \le e^{as^2 - b_0 s^4}.$$

Эти леммы используються при доказательстве следуещего варианта локальной предельной теоремы для квазивероятностных решетчатых распределений.

Теорема 1. *Пусть $\{\xi_{nn}\}$ — последовательность серий взаимно-независимых одинаково распределённых решетчатых случайных величин с квазивероятностным распределением $\{p_{nk}\}$и п. ф. с. $w(s)$ каждая в n-ой серии. Если* 1) $\alpha_1 = d_3 = 0$; 2) $\alpha_2 = \frac{2ia}{\sqrt{n}}$; 3) $\alpha_4 = 4! b$; 4) *существует* α_5; 5) $|w_0(s)| < 1$ *в области* $D \setminus \{0\}$ $(a, b > 0)$. *Тогда равномерно по целым k, при $n \to \infty$ выполняется соотношение*

$$\sqrt[4]{n}\left[\frac{P_n(k)}{\Delta x} - \frac{1}{2\pi}\int_R e^{-isk\Delta x - ia\sqrt{n}s^2 - nbs^4}\, ds\right] \to 0. \qquad (2)$$

Доказательства лемм 1 и 2, а также теоремы 1 в основных чертах совпадают с доказательствами соответствующих утверждений в работе [3].

2. Рассмотрим сначала задачу об отыскании фундаментального решения уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} = ai\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - b\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad u = u(x,t),\ x \in \mathbb{R},\ t \geq 0;\ a, b > 0, \tag{3}$$

т.е. задачи Коши для уравнения (3) с начальным условием

$$u(x,0) = \delta(x), \tag{4}$$

где $\delta(x)$ — δ-функция Дирака. Интегральное представление решения задачи (3), (4) имеет вид

$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_R e^{-isx-(ias^2+bs^4)t}\,ds, \tag{5}$$

к которому можем прийти, применяя метод преобразований Фурье.

Применим к задаче (3), (4) разностную схему, согласно которой

$$\frac{\partial u}{\partial t} \to \frac{u_\Delta(x,t+\Delta t) - u_\Delta(x,t)}{\Delta t},$$
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \to \frac{u_\Delta(x+\Delta x,t) - 2u_\Delta(x,t) + u_\Delta(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2},$$
$$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \to \frac{u_\Delta(x+2\Delta x,t) - 4u_\Delta(x+\Delta x,t) + 6u_\Delta(x,t) - 4u_\Delta(x-\Delta x,t) + u_\Delta(x-2\Delta x,t)}{\Delta x^4};$$

и установим связь между шагами

$$\Delta t = \alpha\Delta x^4. \tag{6}$$

Рассматривая в дальнейшем только значения (x,t) вида $(k\Delta x, n\Delta t)$, где k — целое, n — неотрицательное целое, задача (3), (4) сводится к своему разностному аналогу вида

$$u_\Delta(k\Delta x,(n+1)\Delta t) = \sum_{l=-2}^{2} u_\Delta((k-l)\Delta x, n\Delta t)p_l; \tag{7}$$

$$u_\Delta(k\Delta x, 0) \text{ для } k \neq 0,\ u_\Delta(0,0)\Delta x = 1, \tag{8}$$

где

$$p_0 = 1 - 6\alpha b - 2i\alpha a\Delta x^2; p_1 = p_{-1} = 4\alpha b + i\alpha a\Delta x^2; p_2 = p_{-2} = -\alpha b. \tag{9}$$

Уравнение (7) служит описанием квазивероятностного процесса типа процесса блуждания частицы по узлам одномерной решетки $\{k\Delta x\}$. Порождаемая таким образом случайная величина имеет распределение $\{p_k\}$, определённое соотношениями (9). Заметим, что для каждого $t = n\Delta t$ согласно с (6) p_k зависит и от n: $p_k = p_{kn}$.

Подставляя в (7) последовательно $n = 0, 1, 2, \ldots$, по правилу (1) образования свёртки, получим

$$u_\Delta(k\Delta x, n\Delta t) = \frac{P_n(k)}{\Delta x}. \tag{10}$$

Сходимость разностной схемы, которую будем понимать как наличие соотношения

$$\lim_{n\to\infty} |u_\Delta(k\Delta x, n\Delta t) - u(k\Delta x, n\Delta t)| = 0, \tag{11}$$

докажем, используя теорему 1. Строим п. ф. с. распределения $\{p_k\}$

$$w(s) = 1 - 4ia\alpha\Delta x^2\sin^2\frac{s\Delta x}{2} - 16\alpha b\sin^4\frac{s\Delta x}{2}. \tag{12}$$

Используя разложение синуса, с учётом (6), получаем

$$w(s) = 1 - \alpha\Delta x^4(ias^2 + bs^4) + O\left(\Delta x^6\right),\ \Delta x \to 0.$$

Из такого представления $w(s)$ следует выполнение первых четырёх условий теоремы 1. Далее, из (12) получаем

$$|w_0(s)|^2 = 1 - 32\alpha b \sin^4 \frac{s\Delta x}{2} + 256\alpha^2 b^2 \sin^8 \frac{s\Delta x}{2}.$$

Легко подсчитать, что условие

$$0 < \alpha < \frac{1}{8b} \tag{13}$$

является достаточным для выполнения условия 5) теоремы 1, вследствие чего имеет место соотношение (2). Это говорит и о том, что соотношение (11) выполняется равномерно по k. Учитывая скорость сходимости в (2), можем утверждать, что для любого натурального n существует такое $A > 0$, что равномерно по k

$$|u_\Delta(k\Delta x, n\Delta t) - u(k\Delta x, n\Delta t)| \le A\Delta x. \tag{14}$$

Расмотрим теперь задачу Коши

$$\frac{\partial v}{\partial t} = ia\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - b\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}; \quad v = v(x,t),\ x \in \mathbb{R},\ t \ge 0,\ a, b > 0; \tag{15}$$

$$v(x, 0) = f(x), \tag{16}$$

где $f(x)$ — кусочно непрырывная финитная функция.

Задача (15), (16) имеет решением свёртку

$$v(x,t) = u(x,t) * f(x) = \int_R u(x-y,t)f(y)\,dy,$$

$u(x,t)$ — фундаментальное решение уравнения (15).

Применяя к задаче (15), (16) разностную схему с такой же заменой производных разностями и связью между шагами, как и в случае отыскания фундаментального решения, получаем разностную задачу

$$v_\Delta(k\Delta x, (n+1)\Delta t) = \sum_{l=-2}^{2} v_\Delta((k-l)\Delta x, n\Delta t)p_l;$$

$$v_\Delta(k\Delta x, 0) = f(k\Delta x),$$

причём набор $\{p_k\}$ определяется соотношениями (9).

Решение последней задачи имеет вид

$$v_\Delta(k\Delta x, n\Delta t) = \sum_l P_n(k-l)f(k\Delta x). \tag{17}$$

Формулу (17) можно использывать в качестве алгоритма численного решения задачи (15), (16). Докажем сходимость этого алгоритма, привлекая соотношение (14).

Действительно

$$|v_\Delta(k\Delta x, n\Delta t) - v(k\Delta x, n\Delta t)| \le \sum_l |f(l\Delta x)| \cdot \left|\frac{P_n(k-l)}{\Delta x} - u((k-l)\Delta x, n\Delta t)\right| \Delta x +$$

$$+\left|\sum_l u((k-l)\Delta x, n\Delta t) f(l\Delta x)\Delta x - \int_R u(k\Delta x - y) f(y)\, dy\right|.$$

Первое слагаемое справа меньше величины $ABC\Delta x$, где A — контстанта в (14), B — мера носителя функции $f(x)$, C — верхняя грань значений $|f(x)|$. А второе слагаемое — модуль разности между сходящимся интегралом и интегральной суммой, такая разность стремится к нулю не медленнее, чем Δx (см. [5]). Таким образом, справедливо утверджение.

Теорема 2. *Алгоритм* (17) *численного решения задачи* (15), (16) *при выборе управления связи между шагами вдоль пространственной и временной осей по правилу* (13), *является сходящимся.*

Возвратимся к задаче отыскания волновой функции, которая может иметь такую форму записи

$$\frac{\partial v}{\partial t} = ia\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \quad a > 0; \tag{18}$$

$$v(x,0) = f(x). \tag{19}$$

"Исправленная" задача

$$\frac{\partial v}{\partial t} = ia\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \varepsilon\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}; \quad a, \varepsilon > 0;$$

$$v(x,0) = f(x).$$

является корректной и для её численного решения можно использывать алгоритм вычислений по формуле (17), полагая $b = \varepsilon$. При этом $\varepsilon > 0$ используем относительно малым. Следует, естественно, учитывать, что при $\varepsilon \to 0$ решение задачи "исправленной" не стремится к решению исходной задачи (18), (19) в обычном смысле.

1. *Рихтмайер Р.* Принципы современной математической физики. – М.: Мир, 1982. – 488 с.
2. *Латтес Р., Лионс Ж. Л.* Метод квазиобращения и его применения. – М.: Мир, 1970. – 502 с.
3. *Петенько В. О.* Про локальну граничну теорему для одного класу квазiймовiрносних гратчастих розподiлiв // Наук. вiсник Ужгород. ун-ту. Сер. матем. – 1998. – Вип. 3. – С. 165-168
4. *Хинчин А. Я.* Математические основания квантовой статистики. – М-Л: ГИТТЛ, 1961. – 256 с.
5. *Петенько В. А.* Об одном расностном решении задачи Коши для некоторого класса параболических по Г. Е. Шилову систем // Мат. методы и физ.-мех поля. Межв. респ. сбор. – К. – 1979. – Вып. 9. – С. 20-25.

Получено 1.10.2003