

На правах рукописи

Злотник Илья Александрович

**Численные методы решения обобщенного
нестационарного уравнения Шрёдингера в
неограниченных областях**

01.01.07 – вычислительная математика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт».

Научный руководитель: *доктор физико-математических наук, профессор, Амосов Андрей Авенирович*

Официальные оппоненты: *Поляков Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий сектором Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук*
Разгулин Александр Витальевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры математической физики факультета ВМК Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

Ведущая организация: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет»*

Защита состоится **«27» мая 2013 г. в 16:30** на заседании диссертационного совета Д 002.045.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики Российской академии наук (ИВМ РАН), расположенном по адресу: 119333, г. Москва, ул. Губкина, д. 8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИВМ РАН.

Автореферат разослан «_____» _____ 2013 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 002.045.01,

доктор физико-математических наук

Г.А. Бочаров

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Линейное нестационарное уравнение Шрёдингера играет важную роль в квантовой механике, ядерной, атомной и молекулярной физике, волновой физике и акустике, микроэлектронике, нанотехнологиях и др. Часто его необходимо решать в неограниченных по пространству областях. Это требует применения специальных численных методов, обычно связанных с постановкой на искусственных границах точных или приближенных неотражающих/прозрачных граничных условий (ПГУ). Используются также абсорбирующие граничные условия (АВС), идеально соответствующие слои (PML), комплексные абсорбирующие потенциалы (САР) и др.

Такие задачи привлекают большое внимание как в России, так и за рубежом. В этой и смежных областях работали: В.С. Рябенский, И.Л. Софронов, Н.А. Зайцев, В.А. Гордин, В.А. Баскаков, А.В. Попов, Р.З. Даутов, Е.М. Карчевский, В.А. Трофимов, М.Ю. Трофимов, А.А. Злотник, А. Arnold, M. Ehrhardt, A. Schädle, F. Schmidt, M. Schulte (Германия), X. Antoine, C. Besse, L. Di Menza, V. Ducomet, J. Szeftel (Франция), L. Greengard, B. Mayfield, C.A. Moyer (США), T. Fevens, D. Yevick (Канада), J. Jin, H. Han, X. Wu (Китай) и многие другие. Ряд аспектов численного решения уравнения Шрёдингера отражен в недавних работах С.В. Полякова и А.В. Разгулина.

Среди существующих подходов выделяется подход, использующий *дискретные* ПГУ (ДПГУ), представляющие собой выводимые на дискретном уровне аналоги аналитических ПГУ, но не какую-либо их непосредственную аппроксимацию. Применение ДПГУ характеризуется *полным* отсутствием отражений от искусственных границ и устойчивостью вычислений. Четкая математическая основа ДПГУ позволяет построить строгую теорию устойчивости и обеспечить выполнение законов сохранения для использующих их методов. Для стандартных разностных схем для одномерного и двумерного уравнения Шрёдингера их впервые разработали А. Arnold, M. Ehrhardt, И.Л. Софронов в 1998-2003 гг.

Целью диссертационной работы является разработка и анализ эффективных численных методов решения одномерного и двумерного нестационарного уравнения Шрёдингера в неограниченных областях. Для этого выполняется построение и анализ устойчивости семейств разностных схем, метода конечных элементов (МКЭ) и схемы с расщеплением по потенциалу с

приближенными ПГУ для обобщенного уравнения Шрёдингера на полуоси и в полуполосе, вывод и исследование дискретных ПГУ, разработка эффективных алгоритмов реализации методов с ДПГУ, их программная реализации и выполнение численных экспериментов.

Научная новизна. В работе построены и изучены семейства разностных схем, МКЭ и схема с расщеплением по потенциалу. Для них предложен новый естественный способ записи общих приближенных ПГУ; для дискретного ПГУ он непосредственно приводит к вычислительно устойчивой форме записи. Для семейств схем выведены новые дискретные ПГУ; для МКЭ произвольного порядка дискретные ПГУ также новые и построены впервые. Развита новая методика исследования устойчивости методов с дискретными ПГУ и для них доказана абсолютная устойчивость как по начальным данным, так и по правой части. Соответствующие оценки решений установлены не только в норме L_2 , но и в энергетической норме по пространству, и являются равномерными по времени. Значительно упрощен и сделан строгим вывод дискретных ПГУ. Выполнены численные эксперименты, результаты которых позволили сравнить свойства методов, дать практический анализ их погрешности и дополнить теоретические результаты.

Практическая значимость. Построенные и изученные в работе семейства разностных схем, МКЭ и схема с расщеплением по потенциалу с дискретными ПГУ могут быть эффективно использованы для решения различных прикладных задач. В качестве примера выполнены серии численных экспериментов по свободному распространению гауссовой волны и моделированию туннельного эффекта для потенциалов ступенчатой формы. В них наглядно видна эффективность применения дискретных ПГУ, включая полное отсутствие отражений от искусственных границ. Показано, что применение правильных усреднений в разностных схемах позволяет повысить качество численных решений. Продемонстрированы преимущества МКЭ высокого порядка даже в случае быстро осциллирующих решений и разрывных потенциалов. В двумерном случае проверено, что использование расщепления по потенциалу сохраняет хорошую точность результатов.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались автором на XV–XVIII Международных научно-технических конференциях студентов и аспирантов «Радиоэлектроника, электротехника и энергети-

ка» (Москва, 2009–2012); XIX и XX Международных научно-технических конференциях «Информационные средства и технологии» (Москва, 2011, 2012); XVII Международной конференции «Математическое моделирование и анализ» (Таллин, 2012); V Международной конференции «Вычислительные методы в прикладной математике» (Берлин, 2012); а также на научных семинарах: «Дифференциальные уравнения и математическое моделирование» в НИУ МЭИ (2011, 2012, рук. проф. Ю.А. Дубинский и проф. А.А. Амосов); им. К.И. Бабенко в ИПМ РАН им. М.В. Келдыша (2012); на каф. математики физфака МГУ им. М.В. Ломоносова (2012, рук. проф. А.Н. Боголюбов); «Вычислительная математика, математическая физика, управление» в ИВМ РАН (2012, рук. проф. Г.М. Кобельков и проф. А.В. Фурсиков).

Публикации. Результаты диссертации опубликованы в 15 печатных работах, из них 5 статей [1–4, 6] в журналах из Перечня ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, рекомендованных ВАК, 2 статьи [8, 9] в зарубежных рецензируемых журналах и 2 статьи [5, 7] в трудах конференций, а также 6 тезисов докладов на конференциях. Общий объем статей 6,7 п.л. (147 стр.); из них лично автору принадлежат 4,25 п.л. (93,5 стр.).

Личный вклад автора. Утверждения 1.1, 1.4, 1.6, 1.7, 1.10 и их следствия в главе 1; все результаты главы 2 (см. [3, 4, 6]); утверждения 3.1–3.4 и их следствия и результаты раздела 3.5 в главе 3 (см. [5, 7]); утверждение 4.2 и его следствие и результаты раздела 4.3 в главе 4 получены автором самостоятельно. Остальные теоретические результаты, опубликованные в совместных работах [1, 2, 8, 9], принадлежат соавторам в равной степени. Программная реализация всех методов и все расчеты выполнены лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 146 страниц, включая 29 рисунков и 8 таблиц. Библиография содержит 88 наименований. В приложения вынесена часть результатов численных экспериментов (их объем 29 страниц, включая 42 рисунка).

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана

практическая значимость полученных результатов, а также кратко изложено ее содержание.

Работа посвящена численным методам с использованием ДПГУ для решения обобщенного нестационарного уравнения Шрёдингера в неограниченных областях. Строятся и изучаются следующие методы:

- 1) семейство разностных схем с усреднением по пространству для одномерного уравнения Шрёдингера на полупрямой (или всей прямой);
- 2) семейство разностных схем с усреднением по пространству для двумерного уравнения Шрёдингера в полуполосе (или полосе);
- 3) МКЭ произвольного порядка для одномерного уравнения Шрёдингера на полупрямой (или всей прямой);
- 4) разностная схема с расщеплением по потенциалу для двумерного уравнения Шрёдингера в полуполосе (или полосе).

Аппроксимация по времени во всех этих схемах и МКЭ – двухслойная симметричная (т.е. типа Кранка-Никольсон).

Исследование всех методов проводится по следующему единому плану:

- 1) выводятся теоремы о равномерной по времени устойчивости методов в L_2 и в энергетической норме по начальным данным и правой части при общем приближенном ПГУ типа *Dirichlet-to-Neumann map* (на конечной сетке);
- 2) изучаются варианты методов на бесконечной сетке по пространству, доказываются аналогичные теоремы о равномерной по времени устойчивости и выводятся законы сохранения;
- 3) на основе результатов, доказанных для бесконечной сетки, с помощью аналитического решения вспомогательных сеточных задач строго выводятся ДПГУ и обосновывается равномерная устойчивость методов с ДПГУ;
- 4) методы программно реализуются, проводятся серии численных экспериментов и делаются выводы о практических свойствах методов.

В **главе 1** решается начально–краевая задача для обобщенного нестационарного уравнения Шрёдингера на полуоси

$$\begin{aligned}
 i\hbar\rho D_t\psi &= -\frac{\hbar^2}{2}D(BD\psi) + V\psi \quad \text{при } x > 0, \quad t > 0, \\
 \psi(0, t) &= 0 \quad \text{и} \quad \psi(x, t) \rightarrow 0 \quad \text{при } x \rightarrow \infty \quad \text{и} \quad \text{всех } t > 0, \\
 \psi(x, 0) &= \psi^0(x) \quad \text{при } x > 0.
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Коэффициенты $B(x) \geq \nu > 0$, $\rho(x) \geq \underline{\rho} > 0$ и потенциал $V(x)$ вещественны, $\hbar > 0$ – постоянная, $D_t = \partial/\partial t$ и $D = \partial/\partial x$. Предполагается, что $B(x) =$

$B_\infty > 0$, $\rho(x) = \rho_\infty > 0$, $V(x) = V_\infty$ при $x \geq X_0$ и $\psi^0(x) = 0$ при $x \geq X_0$, при некотором $X_0 > 0$.

Известное интегро-дифференциальное ПГУ

$$D\psi(X, t) = -\frac{1-i}{\sqrt{\pi\hbar B_\infty/\rho_\infty}} e^{-i(V_\infty/\rho_\infty\hbar)t} D_t \int_0^t \psi(X, \tau) e^{i(V_\infty/\rho_\infty\hbar)\tau} \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}}$$

при $t > 0$ и любых $X \geq X_0$ позволяет заменить задачу на полуоси на задачу на конечном отрезке $[0, X]$. Но любая дискретизация таких ПГУ ведет к появлению отражений от искусственных границ, поэтому в работе используются не они, а выводимые на дискретном уровне их аналоги – *дискретные* ПГУ.

Для задачи (1) строится новое семейство разностных схем с усреднениями по пространству с параметром θ . Это делается с целью единообразного изучения различных по способу построения схем: наиболее стандартной схемы без усреднений ($\theta = 0$); линейного МКЭ с различными способами численного интегрирования ($\theta = 1/6, 1/4$); векторной мультисимплектической схемы ($\theta = 1/4$); схемы типа Нумерова повышенного порядка точности ($\theta = 1/12$).

Семейство схем исследуется по указанному выше плану, в том числе, доказываются **утверждения** 1.1, 1.2, 1.4 и 1.5 о равномерной по времени устойчивости по начальным данным и правой части, строго выводятся новые ДПГУ и выполняется практическое сравнение перечисленных схем. Эти результаты здесь опускаются, поскольку ниже они переносятся на более сложный двумерный случай, а соответствующие формулировки аналогичны и подробно приводятся. Результаты главы 1 опубликованы в работах [1, 8].

В **главе 2** решается начально-краевая задача для обобщенного уравнения Шрёдингера в полуполосе

$$\begin{aligned} i\hbar\rho D_t\psi &= \mathcal{H}\psi \quad \text{при } (x, y) \in \Omega := (0, \infty) \times (0, Y) \text{ и } t > 0, \\ \psi|_{\partial\Omega \times (0, \infty)} &= 0, \quad \|\psi(x, \cdot, t)\|_{L_2(0, Y)} \rightarrow 0 \quad \text{при } x \rightarrow \infty \text{ для всех } t > 0, \\ \psi|_{t=0} &= \psi^0(x, y) \quad \text{при } (x, y) \in \Omega, \end{aligned} \quad (2)$$

содержащее двумерный оператор Гамильтона (эллиптический оператор)

$$\mathcal{H}\psi := -\frac{\hbar^2}{2} [D_x (B_{11}D_x\psi) + D_x (B_{12}D_y\psi) + D_y (B_{21}D_x\psi) + D_y (B_{22}D_y\psi)] + V\psi$$

с вещественными матрицей $\mathbf{B} = \{B_{pq}(x, y)\}_{p,q=1}^2$, $\mathbf{B} = \mathbf{B}^T \geq \nu I$ и функциями $\rho(x, y) \geq \underline{\rho} > 0$ и $V(x, y)$ (потенциалом). Предполагается, что $B_{11}(x, y) =$

$B_{1\infty}, B_{12}(x, y) = B_{21}(x, y) = 0, B_{22}(x, y) = B_{2\infty}, \rho(x, y) = \rho_\infty, V(x, y) = V_\infty$ и $\psi^0(x, y) = 0$ при $(x, y) \in [X_0, \infty) \times [0, Y]$, при некотором $X_0 > 0$.

При $t > 0$ и любых $X \geq X_0$ можно записать интегро-дифференциальное ПГУ, разложив решение в ряд Фурье по синусам по переменной y . В работе аналогичным образом применяется дискретное преобразование Фурье (ДПФ) по синусам по переменной y при выводе двумерных *дискретных* ПГУ.

Вводятся неравномерные сетки: $\bar{\omega}_{h,\infty}$ по x на $[0, \infty)$ с узлами $0 = x_0 < \dots < x_J = X < \dots$ и шагами $h_j := x_j - x_{j-1}$, где $h_j = h$ при $j \geq J$; $\bar{\omega}_\delta$ по y на $[0, Y]$ с узлами $0 = y_0 < \dots < y_K = Y$ и шагами $\delta_k := y_k - y_{k-1}$; $\bar{\omega}^\tau$ по t на $[0, \infty)$ с узлами $0 = t_0 < \dots < t_m < \dots$ и шагами $\tau_m := t_m - t_{m-1}$. Нам потребуются сетки $\omega_{h,\infty} := \bar{\omega}_{h,\infty} \setminus \{0\}$, $\bar{\omega}_h := \{x_j\}_{j=0}^J$, $\omega_h := \{x_j\}_{j=1}^{J-1}$ и $\omega^\tau := \bar{\omega}^\tau \setminus \{0\}$, $\omega_m^\tau := \{t_\ell\}_{\ell=1}^m$ и сетки-произведения $\bar{\omega}_{\mathbf{h},\infty} := \bar{\omega}_{h,\infty} \times \bar{\omega}_\delta$, $\bar{\omega}_{\mathbf{h}} := \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\delta$, $\omega_{\mathbf{h}} := \omega_h \times \omega_\delta$. Пусть $x_{j-1/2} := (x_{j-1} + x_j)/2$, $y_{k-1/2} := (y_{k-1} + y_k)/2$.

Вводятся разностные отношения $\bar{\partial}_x W_j := (W_j - W_{j-1})/h_j$, $\hat{\partial}_x W_j := (W_{j+1} - W_j)/h_{j+1/2}$ по x и операторы усреднения

$$\hat{s}_x W_j := \frac{h_j}{2h_{j+1/2}} W_j + \frac{h_{j+1}}{2h_{j+1/2}} W_{j+1},$$

$$A_\theta[\varkappa_h] W_j := \theta \frac{h_j}{h_{j+1/2}} \varkappa_{h_j} W_{j-1} + (1 - 2\theta) (\hat{s}_x \varkappa_{h_j}) W_j + \theta \frac{h_{j+1}}{h_{j+1/2}} \varkappa_{h_{j+1}} W_{j+1},$$

$s_\theta := A_\theta[1] = s_\theta^- + s_\theta^+$ по x , где $s_\theta^- W_j := (h_j/h_{j+1/2})(\theta W_{j-1} + (1/2 - \theta)W_j)$, $s_\theta^+ := s_\theta - s_\theta^-$. Будем использовать также их аналоги по переменной y . Пусть, кроме того, $\bar{\partial}_t Y^m := (Y^m - Y^{m-1})/\tau_m$, $\bar{s}_t Y^m := (Y^{m-1} + Y^m)/2$ и $\check{Y}^m := Y^{m-1}$.

Для задачи (2) изучается семейство разностных схем с векторным параметром $\theta = (\theta, \eta)$ с общим приближенным ПГУ

$$\begin{aligned} i\hbar A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}] \bar{\partial}_t \Psi &= \mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} \bar{s}_t \Psi + F \quad \text{на } \omega_{\mathbf{h}} \times \omega^\tau, \\ \Psi|_{j=0} &= 0, \quad \Psi|_{k=0,K} = 0, \\ \mathcal{D}_{\Gamma\theta}(\Psi, \check{\Psi})|_{j=J} + \frac{\hbar}{2} F_J &= \frac{\hbar^2}{2} B_{1\infty} \mathcal{S}\Psi|_{j=J} \quad \text{на } \omega_\delta \times \omega^\tau, \\ \Psi^0 &= \Psi_{\mathbf{h}}^0 \quad \text{на } \bar{\omega}_{\mathbf{h}}. \end{aligned} \tag{3}$$

Здесь $\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta}$ – сеточный оператор Гамильтона

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} W &:= -\frac{\hbar^2}{2} [\hat{\partial}_x (A_\eta[B_{11\mathbf{h}}] \bar{\partial}_x W) + \hat{\partial}_x \hat{s}_y (B_{12\mathbf{h}} \bar{s}_x \bar{\partial}_y W) + \\ &\quad + \hat{s}_x \hat{\partial}_y (B_{21\mathbf{h}} \bar{\partial}_x \bar{s}_y W) + \hat{\partial}_y (A_\theta[B_{22\mathbf{h}}] \bar{\partial}_y W)] + A_\theta[V_{\mathbf{h}}] W, \end{aligned}$$

а $A_\theta[\varkappa_{\mathbf{h}}] := A_\theta[A_\eta[\varkappa_{\mathbf{h}}]]$ – двумерный оператор, являющийся суперпозицией одномерных операторов усреднения по x и y , где $\varkappa_{\mathbf{h}_{jk}} = \varkappa(x_{j-1/2}, y_{k-1/2})$ для

$\varkappa = \rho, \mathbf{B}, V$. Функция F добавляется в (3) для исследования устойчивости и играет важную роль при обосновании устойчивости схем с ДПГУ.

$$\begin{aligned} & \text{Используются также сеточный оператор Неймана } \mathcal{D}_{\Gamma\theta}(\Psi, \check{\Psi})|_{j=J} := \\ & := \left\{ \frac{\hbar^2}{2} B_{1\infty} \bar{\partial}_x s_\eta \bar{s}_t \Psi - \hbar s_\theta^- [s_\eta (i\hbar \rho_\infty \bar{\partial}_t - V_\infty \bar{s}_t) \Psi + \frac{\hbar^2}{2} B_{2\infty} \widehat{\partial}_y \bar{\partial}_y \bar{s}_t \Psi] \right\} |_{j=J} \end{aligned}$$

и \mathcal{S}^m – произвольный линейный оператор в пространстве функций $\Phi: \bar{\omega}_\delta \times \omega_m^\tau \rightarrow \mathbb{C}$, причем $\Psi^m|_{j=J} := \left\{ \Psi^\ell|_{j=J} \right\}_{\ell=1}^m$ при $m \geq 1$.

Подобно одномерному случаю, семейство (3) включает немало разных по конструкции схем. Введем множество параметров $\bar{\Theta} := \{\theta = (\theta, \eta); \theta \leq 1/4, \eta \leq 1/4\}$, для которых выводится абсолютная устойчивость. Нам потребуются разностные аналоги скалярных произведений в пространстве $L_2(0, X)$

$$(U, W)_{\bar{\omega}_h} := (U, W)_{\omega_h} + U_J W_J^* \frac{\hbar}{2}, \quad (U, W)_{\tilde{\omega}_h} := \sum_{j=1}^J U_j W_j^* h_j,$$

а также порожденные ими нормы $\|\cdot\|_{\bar{\omega}_h}, \|\cdot\|_{\tilde{\omega}_h}$. В пространствах $L_2(0, Y)$ и $L_2((0, X) \times (0, Y))$ скалярные произведения и нормы вводятся аналогично.

Утверждение 2.1. Пусть оператор \mathcal{S} удовлетворяет неравенству

$$\text{Im} \sum_{m=1}^M (\mathcal{S}\Phi^m, \bar{s}_t \Phi^m)_{\omega_\delta} \tau_m \geq 0 \quad \text{при любых } M \geq 1 \quad (4)$$

для всех функций $\Phi: \bar{\omega}_\delta \times \bar{\omega}^\tau \rightarrow \mathbb{C}$ таких, что $\Phi^0 = 0$ и $\Phi|_{k=0, K} = 0$. Тогда для решения разностной схемы (3) при $\theta \in \bar{\Theta}$ и любых $M \geq 1$ верна оценка

$$\max_{0 \leq m \leq M} \|\Psi^m\|_{A_\theta[\rho_h]} \leq \|\Psi_h^0\|_{A_\theta[\rho_h]} + \frac{2}{c_\theta \hbar} \sum_{m=1}^M \|F^m\|_{\bar{\omega}_h} \tau_m,$$

где $c_\theta := \sqrt{(1 - 4\theta^+)(1 - 4\eta^+) \underline{\rho}}$ $c \theta^+ := \max\{\theta, 0\}$, $\eta^+ := \max\{\eta, 0\}$.

Здесь $\|\cdot\|_{A_\theta[\rho_h]}$ – энергетическая норма оператора $A_\theta[\rho_h]$, эквивалентная сеточной норме L_2 на $\bar{\omega}_h$ при $\theta \in \bar{\Theta}$. Аналогичный результат справедлив и при $\theta \in \partial\bar{\Theta}$. Доказательства этой и других теорем устойчивости в работе проводятся методом энергетических неравенств.

Выведена устойчивость еще в одной норме. Пусть $\hat{v} \in \mathbb{R}$ таково, что оператор $\mathcal{H}_{h\theta} + \hat{v} A_\theta[\rho_h]$ положительно определен и $\|\cdot\|_{\mathcal{H}_{h\theta} + \hat{v} A_\theta[\rho_h]}$ – соответствующая энергетическая норма, а $\|\cdot\|^{(-1)}$ – двойственная к ней норма.

Утверждение 2.2. Пусть оператор \mathcal{S} удовлетворяет неравенству

$$\text{Im} \sum_{m=1}^M (\mathcal{S}\Phi^m, i\hbar \bar{\partial}_t \Phi^m + \hat{v} \bar{s}_t \Phi^m)_{\omega_\delta} \tau_m \geq 0 \quad \text{при любых } M \geq 1 \quad (5)$$

для всех функций $\Phi: \bar{\omega}_\delta \times \bar{\omega}^\tau \rightarrow \mathbb{C}$ таких, что $\Phi^0 = 0$ и $\Phi|_{k=0,K} = 0$. Тогда для решения разностной схемы (3) при $\theta \in \bar{\Theta}$ и любых $M \geq 1$ верна оценка

$$\begin{aligned} \max_{0 \leq m \leq M} \|\Psi^m\|_{\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} + \hat{v}A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}]} &\leq \|\Psi_{\mathbf{h}}^0\|_{\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} + \hat{v}A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}]} + \\ &+ 2 \sum_{m=1}^M \left(\frac{|\hat{v}|}{\hbar} \|F^m\|^{(-1)} + 2 \|\bar{\partial}_t F^m\|^{(-1)} \right) \tau_m + 4 \|F^0\|^{(-1)}. \end{aligned}$$

Далее изучается соответствующее семейство схем на бесконечной сетке для исходной начально–краевой задачи в полуполосе

$$\begin{aligned} i\hbar A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}] \bar{\partial}_t \Psi &= \mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} \bar{s}_t \Psi + F \quad \text{на } \omega_{\mathbf{h},\infty} \times \omega^\tau, \\ \Psi^m &\in H_{\mathbf{h}} \quad \text{при } m \geq 1, \quad \Psi^0 = \Psi_{\mathbf{h}}^0 \in H_{\mathbf{h}}, \end{aligned} \quad (6)$$

где $H_{\mathbf{h}}$ – гильбертово пространство функций $W: \bar{\omega}_{\mathbf{h},\infty} \rightarrow \mathbb{C}$ таких, что $W|_{j=0} = W|_{k=0,K} = 0$ и $\|W\|_{\bar{\omega}_{\mathbf{h},\infty}} < \infty$. Схема (6) не реализуема на практике из-за бесконечности числа неизвестных на каждом слое по времени. Однако сужение решения схемы на конечную сетку на $[0, X] \times [0, Y]$ можно найти с помощью вывода и применения ДПГУ с оператором $\mathcal{S} = \mathcal{S}_{\text{ref}}$ при $x = X$.

Строгий вывод ДПГУ и обоснование устойчивости разностной схемы с ним требует анализа устойчивости схемы (6).

Утверждение 2.3. Пусть $F^m \in H_{\mathbf{h}}$ при любом $m \geq 1$. Тогда при $\theta \in \Theta$ разностная схема (6) имеет единственное решение и верна оценка

$$\max_{0 \leq m \leq M} \|\Psi^m\|_{A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}], \infty} \leq \|\Psi_{\mathbf{h}}^0\|_{A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}], \infty} + \frac{2}{c_\theta \hbar} \sum_{m=1}^M \|F^m\|_{\bar{\omega}_{\mathbf{h},\infty}} \tau_m$$

для всех $M \geq 1$. Более того, при $F = 0$ справедлив первый закон сохранения

$$\|\Psi^m\|_{A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}], \infty} = \|\Psi_{\mathbf{h}}^0\|_{A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}], \infty} \quad \text{при любом } m \geq 1.$$

Здесь $\|\cdot\|_{A_\theta[\rho_{\mathbf{h}}], \infty}$, $\|\cdot\|_{\bar{\omega}_{\mathbf{h},\infty}}$ – сеточные аналоги нормы L_2 на $\bar{\omega}_{\mathbf{h},\infty}$. Аналогичный результат справедлив и при $\theta \in \partial\Theta$. Доказательство существования и единственности решения основано на теореме Лакса-Мильграма-Вишика.

Следствие 2.1. Пусть $F^m|_{j \geq J} = 0$ при $m \geq 1$ и $\Psi_{\mathbf{h}}^0|_{j \geq J} = 0$ и решение Ψ разностной схемы (6) удовлетворяет приближенному ПГУ из (3) с $\mathcal{S} = \mathcal{S}_{\text{ref}}$. Тогда для любых θ и $M \geq 1$ имеем

$$\begin{aligned} \hbar \frac{B_{1\infty}}{\rho_\infty} \text{Im} \sum_{m=1}^M (\mathcal{S}_{\text{ref}}^m \Psi_J^m, \bar{s}_t \Psi_J^m)_{\omega_\delta} &= (\Psi^M, \Psi^M)_{\omega_{\mathbf{h}\theta, J, \infty}} := \\ &:= (s_\theta^+ \Psi_J^M, \Psi_J^M)_{\omega_\delta} + \sum_{j=J+1}^\infty (s_\theta \Psi_j^M, \Psi_j^M)_{\omega_\delta} h, \end{aligned}$$

где $s_\theta := A_\theta[1]$.

Выведена устойчивость еще в одной норме. Пусть $\hat{v} \in \mathbb{R}$ таково, что оператор $\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} + \hat{v}A_{\theta}[\rho_{\mathbf{h}}]$ положительно определен и $\|\cdot\|_{\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} + \hat{v}A_{\theta}[\rho_{\mathbf{h}}], \infty}$ – соответствующая энергетическая норма, а $\|\cdot\|_{\infty}^{(-1)}$ – двойственная к ней норма.

Утверждение 2.4. Пусть $F^m \in H_{\mathbf{h}}$ при любом $m \geq 1$. Тогда при $\theta \in \bar{\Theta}$ разностная схема (6) имеет единственное решение и верна оценка

$$\max_{0 \leq m \leq M} \|\Psi^m\|_{\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} + \hat{v}A_{\theta}[\rho_{\mathbf{h}}], \infty} \leq \|\Psi_{\mathbf{h}}^0\|_{\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} + \hat{v}A_{\theta}[\rho_{\mathbf{h}}], \infty} + 2 \sum_{m=1}^M \left(\frac{|\hat{v}|}{\hbar} \|F^m\|_{\infty}^{(-1)} + 2 \|\bar{\partial}_t F^m\|_{\infty}^{(-1)} \right) \tau_m + 4 \|F^0\|_{\infty}^{(-1)}$$

для всех $M \geq 1$. Более того, при $F = 0$ справедлив второй закон сохранения

$$\|\Psi^m\|_{\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} + \hat{v}A_{\theta}[\rho_{\mathbf{h}}], \infty} = \|\Psi_{\mathbf{h}}^0\|_{\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta} + \hat{v}A_{\theta}[\rho_{\mathbf{h}}], \infty} \quad \text{для всех } m \geq 1.$$

Следствие 2.2. Пусть $F^m|_{j \geq J} = 0$ при $m \geq 1$ и $\Psi_{\mathbf{h}}^0|_{j \geq J} = 0$ и решение Ψ разностной схемы (6) удовлетворяет приближенному ПГУ из (3) с $\mathcal{S} = \mathcal{S}_{\text{ref}}$. Тогда для любых θ и $M \geq 1$ имеем

$$\begin{aligned} & \hbar \frac{B_{1\infty}}{\rho_{\infty}} \text{Im} \sum_{m=1}^M \left(\mathcal{S}_{\text{ref}}^m \Psi_J^m, i\hbar \bar{\partial}_t \Psi_J^m + \hat{v} \bar{s}_t \Psi_J^m \right)_{\omega_{\delta}} = \\ & = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=J+1}^{\infty} \left\{ \frac{B_{1\infty}}{\rho_{\infty}} \left[\|\bar{\partial}_x \bar{s}_y \Psi_j^M\|_{\tilde{\omega}_{\delta}}^2 + \left(\frac{1}{4} - \eta \right) \|\delta \bar{\partial}_x \bar{\partial}_y \Psi_j^M\|_{\tilde{\omega}_{\delta}}^2 \right] + \right. \\ & \left. + \frac{B_{2\infty}}{\rho_{\infty}} \left[\|\bar{s}_x \bar{\partial}_y \Psi_j^M\|_{\tilde{\omega}_{\delta}}^2 + \left(\frac{1}{4} - \theta \right) \|h \bar{\partial}_x \bar{\partial}_y \Psi_j^M\|_{\tilde{\omega}_{\delta}}^2 \right] \right\} h + \left(\frac{V_{\infty}}{\rho_{\infty}} + \hat{v} \right) (\Psi^M, \Psi^M)_{\omega_{\mathbf{h}\theta, J, \infty}}. \end{aligned}$$

Для вывода ДПГУ аналитически решается вспомогательная задача на бесконечной сетке на $[X, \infty) \times [0, Y]$. Пусть сетки $\bar{\omega}_{\delta}$ и $\bar{\omega}^{\tau}$ – равномерные. Тогда при $\theta \in \bar{\Theta}$ оператор двумерного ДПГУ \mathcal{S}_{ref} имеет вид

$$\mathcal{S}_{\text{ref}} \Phi = \mathcal{F}^{-1} \left(\sigma_{\ell\delta} \mathcal{S}_{\text{ref}, \ell} \mathcal{F} \Phi^{(\ell)} \right),$$

где \mathcal{F} и \mathcal{F}^{-1} – операторы прямого и обратного ДПФ по синусам по y ,

$$\mathcal{S}_{\text{ref}, \ell} \Phi = (-1)^{k_{\ell}} \frac{|\alpha_{\ell}|^{1/2}}{2} e^{-i(\arg \alpha_{\ell})/2} (R_{\text{ref}, \ell} * \Phi), \quad 1 \leq \ell \leq K-1$$

– операторы вспомогательных одномерных ДПГУ, а $*$ обозначает дискретную свертку. Их ядра $\{R_{\text{ref}, \ell}^m\}_{m=0}^{\infty}$ выражаются через полиномы Лежандра $P_m(\mu)$ (где $P_m(\mu) \equiv 0$ при $m < 0$):

$$\begin{aligned} R_{\text{ref}, \ell}^m &= -\frac{\varkappa_{\ell}^m}{2m-1} [P_m(\mu_{\ell}) - P_{m-2}(\mu_{\ell})], \\ \varkappa_{\ell} &= -e^{i \arg \alpha_{\ell}}, \quad \mu_{\ell} = \frac{\beta_{\ell}}{|\alpha_{\ell}|}, \quad \alpha_{\ell} = 2a_{\ell} + (1-4\theta)h^2 a_{\ell}^2, \quad \beta_{\ell} = 2 \text{Re} a_{\ell} + (1-4\theta)h^2 |a_{\ell}|^2, \\ a_{\ell} &= \frac{\lambda_{\ell\delta}}{2(1-\eta\delta^2\lambda_{\ell\delta})} \frac{B_{2\infty}}{B_{1\infty}} + \frac{V_{\infty}}{\hbar^2 B_{1\infty}} + i \frac{2\rho_{\infty}}{\tau \hbar B_{1\infty}}, \quad \lambda_{\ell\delta} = \left(\frac{2}{\delta} \sin \frac{\pi\delta\ell}{2Y} \right)^2, \quad \sigma_{\ell\delta} = 1 - \eta\delta^2\lambda_{\ell\delta} > 0 \end{aligned}$$

и k_ℓ такое целое, что $\arg(1 - 2\theta h^2 a_\ell) - \arg \alpha_\ell \in (2k_\ell\pi, 2(k_\ell + 1)\pi)$.

Утверждение 2.5. Для оператора \mathcal{S}_{ref} двумерного ДПГУ при $\theta \in \bar{\Theta}$ выполнены операторные неравенства (4) и (5). Как следствие для схем с ДПГУ верны указанные выше оценки в норме L_2 и в энергетической норме.

В случае B_{11}, B_{22}, ρ, V зависящих только от x и $B_{12} = B_{21} = 0$ выполнена эффективная прямая реализация схем с применением быстрого ДПФ по y и прогонок по x . Результаты главы 2 опубликованы в работах [3, 4, 6].

В главе 3 снова рассматривается начально-краевая задача (1) для обобщенного уравнения Шрёдингера на полуоси, при прежних предположениях на коэффициенты. Практика расчетов показывает эффективность применения методов повышенного порядка точности. Однако ранее ДПГУ для МКЭ удалось построить только в простейшем случае линейных КЭ, см. главу 1.

Вводятся элементы $\Delta_j := [x_{j-1}, x_j]$, $j \geq 1$ такие, что $x_j - x_{j-1} = h$ при $j \geq J$ и соответствующее пространство конечных элементов $H_{h,\infty} := \{\varphi \in C(\bar{\mathbb{R}}^+), \varphi(0) = 0, \varphi|_{\Delta_j} \in \mathcal{P}_n|_{\Delta_j}, j \geq 1\}$, где \mathcal{P}_n – пространство полиномов степени не выше n с комплексными коэффициентами.

Приближенное решение $\Psi^m \in H_{h,\infty}$, $m \geq 0$ начально-краевой задачи (1) с помощью дискретизации Кранка-Никольсон по времени и МКЭ по пространству определяется интегральным тождеством

$$i\hbar(\rho\bar{\partial}_t\Psi^m, \varphi)_{L_2(\mathbb{R}^+)} = \frac{\hbar^2}{2}(BD\bar{s}_t\Psi^m, D\varphi)_{L_2(\mathbb{R}^+)} + (V\bar{s}_t\Psi^m, \varphi)_{L_2(\mathbb{R}^+)}$$

для всех $\varphi \in H_{h,\infty}$ и $m \geq 1$. Кроме того, $\Psi|_{t=0} = \Psi^0 \in H_{h,\infty}$. Этот метод не реализуем на практике из-за бесконечности числа неизвестных на каждом слое по времени. Тем не менее сужение решения на конечную сетку на $\bar{\Omega} = [0, X]$ можно найти с помощью вывода и применения ДПГУ при $x = X$.

Введем пространство конечных элементов $H_h := \{\varphi \in C(\bar{\Omega}), \varphi(0) = 0, \varphi|_{\Delta_j} \in \mathcal{P}_n|_{\Delta_j}, 1 \leq j \leq J\}$ на $\bar{\Omega}$ и построим схему Кранка-Никольсон-МКЭ в $\bar{\Omega}$ с $\Psi^m \in H_h$, $m \geq 0$

$$i\hbar(\rho\bar{\partial}_t\Psi^m, \varphi)_{L_2(\Omega)} = \frac{\hbar^2}{2}(BD\bar{s}_t\Psi^m, D\varphi)_{L_2(\Omega)} + (V\bar{s}_t\Psi^m, \varphi)_{L_2(\Omega)} - \frac{\hbar^2}{2}B_\infty(\mathcal{S}_{\text{ref}}^m\Psi_X^m)\varphi(X) + (F^m, \varphi)_{L_2(\Omega)}$$

для всех $\varphi \in H_h$ и $m \geq 1$, с начальным условием $\Psi|_{t=0} = \Psi^0 \in H_h$. Здесь $\mathcal{S}_{\text{ref}}^m$ – оператор ДПГУ, действующий в пространстве функций $\Phi: \omega_m^\tau \rightarrow \mathbb{C}$, и $\Psi_X^m := \{\Psi_J^\ell\}_{\ell=1}^m$. Его явное построение является основной задачей главы.

Слагаемое $F^m \in L_2(\Omega)$, $m \geq 1$ снова добавляется для изучения устойчивости.

Утверждение 3.1. Пусть оператор \mathcal{S}_{ref} удовлетворяет неравенству

$$\text{Im} \sum_{m=1}^M (\mathcal{S}_{\text{ref}}^m \Phi^m) (\bar{\mathfrak{s}}_t \Phi^m)^* \tau \geq 0 \quad \text{при любых } M \geq 1 \quad (7)$$

и для всех функций $\Phi: \bar{\omega}^\tau \rightarrow \mathbb{C}$ таких, что $\Phi^0 = 0$. Тогда при любых $M \geq 1$ для МКЭ-решения Ψ верна оценка

$$\max_{0 \leq m \leq M} \|\sqrt{\rho} \Psi^m\|_{L_2(\Omega)} \leq \|\sqrt{\rho} \Psi^0\|_{L_2(\Omega)} + \frac{2}{\hbar} \sum_{m=1}^M \left\| \frac{F^m}{\sqrt{\rho}} \right\|_{L_2(\Omega)} \tau.$$

Аналогичная оценка в энергетической норме, эквивалентной норме $H^1(\Omega)$, дана в **утверждении 3.2**.

Для схемы Кранка-Никольсон-МКЭ на полуоси соответствующие оценки в нормах L_2 и энергетической норме доказаны в **утверждениях 3.3, 3.4**.

Для построения ДПГУ вводится вспомогательное ОДУ $-w'' + 2\zeta w = 0$ на \mathbb{R}^+ с параметром $\zeta \in \mathbb{C}$. Ищется его модельное МКЭ-решение $W \in H_\infty^{(n)} := \{\varphi \in C(\mathbb{R}^+) : \varphi|_{[j-1, j]} \in \mathcal{P}_n|_{[j-1, j]}, j \geq 1\}$, удовлетворяющее интегральному тождеству

$$\int_{\mathbb{R}^+} (W' \varphi' + 2\zeta W \varphi) dx = 0$$

для всех $\varphi \in H_\infty^{(n)}$, $\varphi(0) = 0$, $\varphi(x) = 0$ при $x \geq j$ (с некоторым $j \geq 1$). Здесь $W(j_0)$ задано для некоторого $j_0 \geq 0$, и ищется решение со свойством $W(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow +\infty$.

Необходимо решить данную МКЭ-задачу *аналитически*. Для этого изучаются матричные пучки $\mathcal{A} + \frac{\zeta}{2} \mathcal{C}$ и $\tilde{\mathcal{A}} + \frac{\zeta}{2} \tilde{\mathcal{C}}$ и численно решаются две обобщенные задачи на собственные значения $\mathcal{A}e = \frac{\lambda}{2} \mathcal{C}e$ и $\tilde{\mathcal{A}}e = \frac{\tilde{\lambda}}{2} \tilde{\mathcal{C}}e$. Здесь \mathcal{A} и \mathcal{C} – бисимметричные матрицы жесткости и масс эталонного элемента $[-1, 1]$:

$$\mathcal{A}_{kl} = \int_{-1}^1 e'_k(x) e'_l(x) dx, \quad \mathcal{C}_{kl} = \int_{-1}^1 e_k(x) e_l(x) dx, \quad 0 \leq k, l \leq n,$$

где $\{e_l\}_{l=0}^n$ – базис Лагранжа в \mathcal{P}_n такой, что $e_l(-1 + \frac{2k}{n}) = \delta_{kl}$, причем δ_{kl} – символ Кронекера, а $\tilde{\mathcal{A}} = \{\mathcal{A}_{kl}\}_{k,l=1}^{n-1}$ и $\tilde{\mathcal{C}} = \{\mathcal{C}_{kl}\}_{k,l=1}^{n-1}$ – их подматрицы.

Справедливы следующие свойства (**утверждения 3.5 и 3.6**)

$$\begin{aligned} \lambda_k^{(n)} &\in \mathbb{R}, \quad 0 = \lambda_0^{(n)} < \lambda_1^{(n)} \leq \dots \leq \lambda_n^{(n)}; \\ \lambda_k^{(n+1)} &\leq \lambda_k^{(n)} \leq \lambda_{k+1}^{(n+1)} \quad \text{при } 0 \leq k \leq n-1; \end{aligned}$$

$$\lambda_k^{(n)} > \frac{(\pi k)^2}{2} \text{ при } 1 \leq k \leq n; \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_k^{(n)} = \frac{(\pi k)^2}{2} \text{ при фиксированном } k \geq 0;$$

$$\tilde{\lambda}_k^{(n)} \in \mathbb{R}, \quad 0 < \tilde{\lambda}_1^{(n)} \leq \dots \leq \tilde{\lambda}_{n-1}^{(n)}; \quad \lambda_{k-1}^{(n)} \leq \tilde{\lambda}_k^{(n)} \leq \lambda_{k+1}^{(n)} \text{ при } 1 \leq k \leq n-1.$$

Кроме того, не менее $n' = [(n+1)/2]$ из собственных значений $\{\lambda_1^{(n)}, \dots, \lambda_n^{(n)}\}$ и $\{\lambda_1^{(n+1)}, \dots, \lambda_{n+1}^{(n+1)}\}$ совпадают.

Выполняется редукция бесконечной алгебраической системы уравнений МКЭ к системе с трехдиагональной матрицей. Последняя система решается аналитически. В итоге оператор ДПГУ находится методом производящих функций и имеет вид дискретной свертки (**утверждение 3.8**)

$$\mathcal{S}_{\text{ref}}^{(n),m} \Phi^m = c_n (K_{\text{ref}}^{(n)} * \Phi)^m = c_n \sum_{q=0}^m K_{\text{ref}}^{(n),q} \Phi^{m-q},$$

где ядро $K_{\text{ref}}^{(n)}$ (n – порядок КЭ) само представляет собой n -кратную свертку

$$K_{\text{ref}}^{(n)} = \begin{cases} R_1^{(n)} * \dots * R_{n'}^{(n)} * L_1^{(n)} * \dots * L_{n'-1}^{(n)} & \text{при } n = 2n' - 1 \\ R_1^{(n)} * \dots * R_{n'}^{(n)} * L_1^{(n)} * \dots * L_{n'}^{(n)} * Q^{(n)} & \text{при } n = 2n'. \end{cases}$$

Последовательности в ней выражаются через полиномы Лежандра P_m :

$$R_\ell^{(n),m} \equiv R^m(\varkappa_\ell, \mu_\ell) = -\frac{\varkappa_\ell^m}{2^{m-1}} [P_m(\mu_\ell) - P_{m-2}(\mu_\ell)] \text{ при } 1 \leq \ell \leq n',$$

$$L_\ell^{(n),m} \equiv L^m(\tilde{\varkappa}_\ell, \tilde{\mu}_\ell) = \tilde{\varkappa}_\ell^m P_m(\tilde{\mu}_\ell) \text{ при } 1 \leq \ell \leq [n/2],$$

$$Q^{(n),m} = \delta_{m0} + e^{i\varphi_n} \delta_{m1},$$

где коэффициенты зависят от n и имеют вид

$$\varkappa_\ell = -\exp\left(i\frac{\varphi_{2\ell-2} + \varphi_{2\ell-1}}{2}\right), \quad \mu_\ell = \cos\frac{\varphi_{2\ell-2} - \varphi_{2\ell-1}}{2} \text{ при } 1 \leq \ell \leq n',$$

$$\tilde{\varkappa}_\ell = -\exp\left(i\frac{\tilde{\varphi}_{2\ell-1} + \tilde{\varphi}_{2\ell}}{2}\right), \quad \tilde{\mu}_\ell = \cos\frac{\tilde{\varphi}_{2\ell} - \tilde{\varphi}_{2\ell-1}}{2} \text{ при } 1 \leq \ell \leq [n/2],$$

$$\varphi_k = \arg\frac{a + \lambda_k^{(n)}}{a^* + \lambda_k^{(n)}}, \quad \tilde{\varphi}_k = \arg\frac{a + \tilde{\lambda}_k^{(n)}}{a^* + \tilde{\lambda}_k^{(n)}}, \quad a = \frac{h^2 V_\infty}{\hbar^2 B_\infty} + i\frac{2h^2 \rho_\infty}{\tau \hbar B_\infty}$$

с введенными выше собственными значениями и $\tilde{\lambda}_n^{(n)} = \lambda_n^{(n)}$ для четных n . Явный вид постоянной c_n опускается.

Утверждение 3.9. Для оператора \mathcal{S}_{ref} ДПГУ для схемы МКЭ с любым n выполнено неравенство (7) и, следовательно, для МКЭ-решения верна выражающая устойчивость оценка в норме L_2 .

Справедлива также оценка МКЭ-решения в энергетической норме.

Для последовательностей R^m и L^m верны рекуррентные равенства

$$R^m = \frac{2m-3}{m} \varkappa \mu R^{m-1} - \frac{m-3}{m} \varkappa^2 R^{m-2}, \quad L^m = \frac{2m-1}{m} \varkappa \mu L^{m-1} - \frac{m-1}{m} \varkappa^2 L^{m-2}$$

при $m \geq 2$, с начальными значениями $R^0 = L^0 = 1$ и $R^1 = -L^1 = -\varkappa \mu$. Рис. 1 наглядно иллюстрирует эффективность применения МКЭ высокого порядка с ДПГУ (он соответствует $\hbar = 1$, $\rho = 1$ и $B = 2$). Результаты главы 3 опубликованы в работах [2, 5, 7, 9].

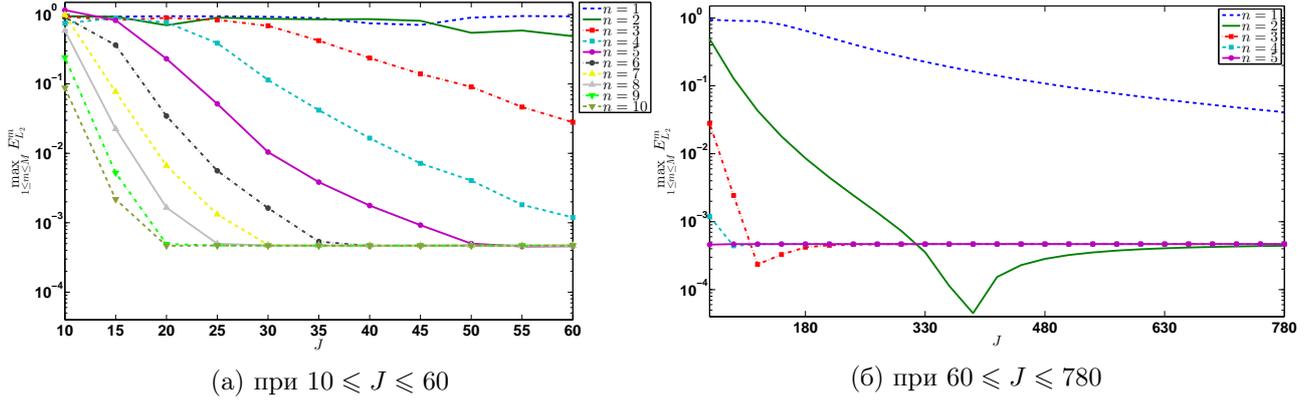


Рис. 1. Максимальные по $1 \leq m \leq 3000$ абсолютные погрешности в норме L_2 для МКЭ в случае $n = 1, \dots, 10$ в зависимости от числа элементов J при $\tau = 2 \cdot 10^{-6}$. Потенциал $V \equiv 0$, а начальная функция – гауссова волна с волновым числом $k = 100$

В главе 4 снова рассматривается начально-краевая задача (2) для обобщенного уравнения Шрёдингера в полуполосе. Запишем \mathcal{H} в виде $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$. Используется разложение потенциала $V(x, y) = \tilde{V}(x) + \Delta V(x, y)$, где $\tilde{V}(x) = V_\infty$ при $x \geq X_0$. В простейшем случае $\tilde{V}(x) \equiv V_\infty$, а $\Delta V(x, y) = V(x, y) - V_\infty$.

На основе схемы без усреднений (с $\theta = (0, 0)$) из главы 2 строится трехшаговая схема с симметризованным расщеплением по потенциалу (типа Стренга) второго порядка аппроксимации

$$\begin{aligned} i\hbar\rho_{\mathbf{h}} \frac{\check{\Psi}^m - \Psi^{m-1}}{\tau_m/2} &= \Delta V_{\mathbf{h}} \frac{\check{\Psi}^m + \Psi^{m-1}}{2} \quad \text{на } (\omega_{\mathbf{h}} \cup x_J) \times \omega_\delta, \\ i\hbar\rho_{\mathbf{h}} \frac{\check{\Psi}^m - \check{\Psi}^m}{\tau_m} &= (\mathcal{H}_{0\mathbf{h}} + \tilde{V}_{\mathbf{h}}) \frac{\check{\Psi}^m + \check{\Psi}^m}{2} \quad \text{на } \omega_{\mathbf{h}}, \\ i\hbar\rho_{\mathbf{h}} \frac{\Psi^m - \tilde{\Psi}^m}{\tau_m/2} &= \Delta V_{\mathbf{h}} \frac{\Psi^m + \tilde{\Psi}^m}{2} \quad \text{на } (\omega_{\mathbf{h}} \cup x_J) \times \omega_\delta, \end{aligned}$$

с краевыми и начальными условиями

$$\begin{aligned} \check{\Psi}^m|_{\Gamma_{\mathbf{h}}} &= 0, \quad \tilde{\Psi}^m|_{\Gamma_{\mathbf{h}}} = 0, \quad \Psi^m|_{\Gamma_{\mathbf{h}}} = 0, \\ \mathcal{D}_\Gamma(\check{\Psi}, \check{\Psi})_J^m &= \frac{\hbar^2}{2} B_{1\infty} \mathcal{S}^m \tilde{\Psi}_J^m \quad \text{на } \omega_\delta, \\ \Psi^0 &= \Psi_{\mathbf{h}}^0 \quad \text{на } \bar{\omega}_{\mathbf{h}} \end{aligned}$$

для всех $m \geq 1$. Здесь $\mathcal{H}_{\mathbf{h}\theta}|_{\theta=(0,0)} = \mathcal{H}_{0\mathbf{h}} + V_{\mathbf{h}}$, $\mathcal{D}_{\Gamma}(\tilde{\Psi}, \check{\Psi}) = \mathcal{D}_{\Gamma\theta}(\tilde{\Psi}, \check{\Psi})|_{\theta=(0,0)}$ и $\Delta V_{\mathbf{h}} := V_{\mathbf{h}} - \tilde{V}_{\mathbf{h}}$. Функции $\tilde{\Psi}$ и $\check{\Psi}$ – вспомогательные, а Ψ – основная искомая. Кроме того, $\Gamma_{\mathbf{h}} := \{(0, y_k), 1 \leq k \leq K-1\} \cup \{(x_j, 0), (x_j, Y), 0 \leq j \leq J\}$ – часть границы $\bar{\omega}_{\mathbf{h}}$ без искусственной части.

Утверждение 4.1. Пусть оператор \mathcal{S} удовлетворяет неравенству (4). Тогда для решения разностной схемы с расщеплением по потенциалу при любых $M \geq 1$ верна оценка

$$\max_{0 \leq m \leq M} \|\sqrt{\rho_{\mathbf{h}}} \Psi^m\|_{\bar{\omega}_{\mathbf{h}}} \leq \|\sqrt{\rho_{\mathbf{h}}} \Psi_{\mathbf{h}}^0\|_{\bar{\omega}_{\mathbf{h}}} + \frac{2}{\hbar} \sum_{m=1}^M \left\| \frac{F^m}{\sqrt{\rho_{\mathbf{h}}}} \right\|_{\bar{\omega}_{\mathbf{h}}} \tau_m.$$

Для схемы с расщеплением оператор ДПГУ \mathcal{S}_{ref} совпадает с использованным в главе 2 при $\theta = (0, 0)$ и удовлетворяет неравенству (4).

Шаги 1 и 3 реализуются по простым явным формулам

$$\check{\Psi}^m = \mathcal{E}^m \Psi^{m-1}, \quad \Psi^m = \mathcal{E}^m \tilde{\Psi}^m, \quad \mathcal{E}^m := \frac{1 - i \frac{\tau_m}{4\hbar\rho_{\mathbf{h}}} \Delta V_{\mathbf{h}}}{1 + i \frac{\tau_m}{4\hbar\rho_{\mathbf{h}}} \Delta V_{\mathbf{h}}} \quad \text{на } (\omega_h \cup x_J) \times \omega_{\delta}.$$

Основной шаг 2 при B_{11}, B_{22}, ρ зависящих только от x и $B_{12} = B_{21} = 0$ реализуется следующим образом: применяется ДПФ по переменной y к уравнению шага 2 и ДПГУ. Для коэффициентов Фурье решения $\tilde{\Psi}^{m(l)}$ и $\check{\Psi}^{m(l)}$ получаются не связанные между собой одномерные разностные уравнения Шрёдингера с ДПГУ на m -ом слое

$$\begin{aligned} i\hbar\rho_h \frac{\tilde{\Psi}^{m(l)} - \check{\Psi}^{m(l)}}{\tau_m} &= -\frac{\hbar^2}{2} \hat{\partial}_x \left(B_{11h} \bar{\partial}_x \frac{\tilde{\Psi}^{m(l)} + \check{\Psi}^{m(l)}}{2} \right) + \tilde{V}_l \frac{\tilde{\Psi}^{m(l)} + \check{\Psi}^{m(l)}}{2} \quad \text{на } \omega_h, \\ \tilde{\Psi}^{m(l)} \Big|_{j=0} &= 0, \\ \left\{ \frac{\hbar^2}{2} B_{1\infty} \bar{\partial}_x \frac{\tilde{\Psi}^{m(l)} + \check{\Psi}^{m(l)}}{2} - \frac{\hbar}{2} \left[i\hbar\rho_{\infty} \frac{\tilde{\Psi}^{m(l)} - \check{\Psi}^{m(l)}}{\tau_m} - \tilde{V}_l \frac{\tilde{\Psi}^{m(l)} + \check{\Psi}^{m(l)}}{2} \right] \right\} \Big|_{j=J} &= \\ &= \frac{\hbar^2}{2} B_{1\infty} \frac{1}{2\hbar} (R_l * \tilde{\Psi}_J^{(l)})^m \end{aligned}$$

для всех $m \geq 1$, где $\tilde{\Psi}_J^{m(l)} = \{\tilde{\Psi}_J^{1(l)}, \dots, \tilde{\Psi}_J^{m(l)}\}$, со вспомогательными потенциалами $\tilde{V}_l := \frac{\hbar^2}{2} B_{2\infty} \lambda_{l\delta} + \tilde{V}$ при $1 \leq l \leq K-1$.

Такой алгоритм применим для любого потенциала $V = V(x, y)$ и требует $O((J \log_2 K + m)K)$ операций для вычисления решения на m -м временном слое и $O((J \log_2 K + M)KM)$ операций для вычисления решения на M временных слоях $m = 1, \dots, M$. Здесь $K = 2^p$, p – целое. На рис. 2 представлен один из соответствующих численных примеров, где $\hbar = 1$, $\rho = 1$ и $\frac{1}{2} \mathbf{B}$ – единичная матрица.

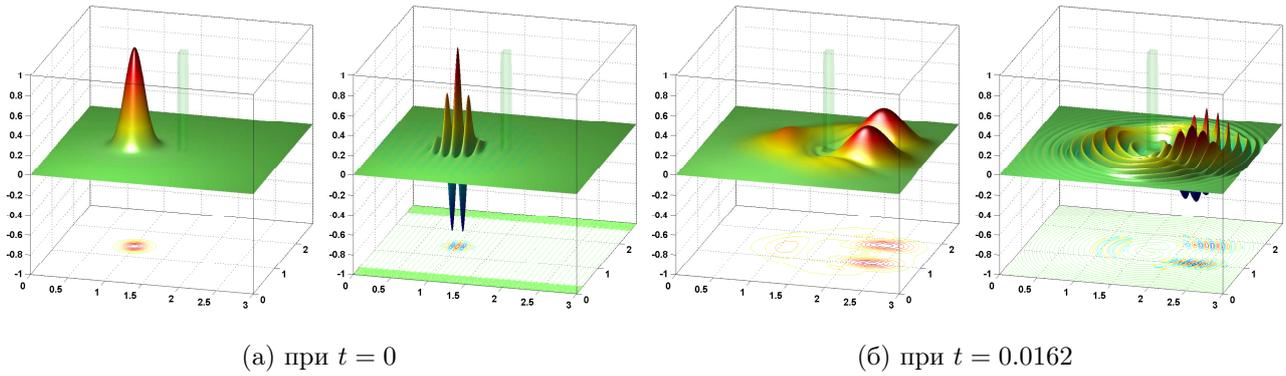


Рис. 2. Пример В. Модуль и вещественная часть численного решения задачи с потенциалом $V = Q\chi_I$, $Q = 1500$, $I = (1.6, 1.7) \times (1.3125, 1.4875)$ (характеристическая функция χ_I типа «колонны» изображена в центре) в моменты времени $t_0 = 0$ и $t_M = 0.0162$. Начальная функция – гауссова волна с волновым числом $k = 30$

В заключении сформулированы основные результаты диссертации.

Основные результаты работы состоят в следующем. Для численного решения начально–краевых задач для обобщенного нестационарного уравнения Шрёдингера в неограниченных областях – на полупрямой и в полуполосе – изучены: 1) новые широкие семейства разностных схем с усреднением по пространству; 2) МКЭ произвольного порядка (в случае полупрямой); 3) разностная схема с расщеплением по потенциалу (в случае полуполосы). Для этих методов: 1) доказаны теоремы о равномерной по времени устойчивости как в L_2 , так и в энергетической норме, по начальным данным и правой части при общем приближенном ПГУ; 2) выведены новые дискретные ПГУ, доказана равномерная по времени устойчивость методов с дискретными ПГУ и получены соответствующие законы сохранения; 3) выполнена программная реализация и проведены серии численных экспериментов.

При этом существенно развита техника исследования устойчивости методов с приближенными и дискретными ПГУ. Разработана новая естественная форма записи дискретных ПГУ, значительно упрощен и сделан строгим их вывод. Вычислительные эксперименты позволили дополнить теоретические результаты, выполнить сравнение методов и дать подробный практический анализ их погрешности.

Основные публикации по теме диссертации

1. Злотник А.А., Злотник И.А. Об устойчивости семейства разностных схем с приближенными прозрачными граничными условиями для уравнения Шрёдингера на полуоси // Вестник МЭИ. 2008. № 6. С. 31–45.
2. Злотник А.А., Злотник И.А. Метод конечных элементов с дискретными прозрачными граничными условиями для одномерного нестационарного уравнения Шрёдингера // Докл. АН. 2012. Т. 447, № 2. С. 130–135.
3. Злотник И.А. Об устойчивости семейства разностных схем с приближенными прозрачными граничными условиями для нестационарного уравнения Шрёдингера в полуполосе // Вестник МЭИ. 2009. № 6. С. 127–144.
4. Злотник И.А. Компьютерное моделирование туннельного эффекта // Вестник МЭИ. 2010. № 6. С. 118–125.
5. Злотник И.А. О двухслойном методе Галёркина для уравнения Шрёдингера // Труды XIX Межд. научно-техн. конф. «Информационные средства и технологии». Т. 1. Изд. дом МЭИ, 2011. С. 215–223.
6. Злотник И.А. Семейство разностных схем с приближенными прозрачными граничными условиями для обобщенного нестационарного уравнения Шрёдингера в полуполосе // ЖВМиМФ. 2011. Т. 51, № 3. С. 384–406.
7. Злотник И.А. О применении МКЭ с дискретными прозрачными граничными условиями для нестационарного уравнения Шрёдингера на полуоси // Труды XX Межд. научно-техн. конф. «Информационные средства и технологии». Т. 1. Изд. дом МЭИ, 2012. С. 172–178.
8. Ducomet B., Zlotnik A., Zlotnik I. On a family of finite-difference schemes with discrete transparent boundary conditions for a generalized Schrödinger equation // [Kinetic and Related Models](#). 2009. V. 2, № 1. P. 151–180.
9. Zlotnik A., Zlotnik I. Finite element method with discrete transparent boundary conditions for the time-dependent 1D Schrödinger equation // [Kinetic and Related Models](#). 2012. V. 5, № 3. P. 639–667.