Авторы: С.И. Виницкий, А.А. Гусев и О. Чулуунбаатар

Язык : Фортран

Назначение:

Подпрограмма TIME6T 1.0 находит численные решения $\psi(x,t)$ задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера на конечном интервале $[x_{\min}, x_{\max}]$ по пространственной переменной

$$\imath \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + f(x,t)\right)\psi(x,t), \tag{1}$$

используя явное разложение Магнуса [1] оператора эволюции с дополнительными калибровочными преобразованиями и его Паде аппроксимации, до порядка $2M (M = 1,2,3)$ точности по шагу τ временной переменной t из конечного интервала $t \in [t_0, T]$ на равномерной сетке $\Omega_\tau[t_0,T] = \{t_0, t_{k+1} = t_k + \tau, (k = 0,1,\ldots,K-1), t_K = T\}$ с начальным условием

$$\psi_0(x) = \psi(x, t_0). \tag{2}$$

Так же потребуем непрерывность волновой функции $\psi(x,t) \in \mathbf{W}_2^1([x_{\min}, x_{\max}] \otimes [t_0, T])$ $(\psi_0(x) \in \mathbf{W}_2^1([x_{\min}, x_{\max}]))$. Предполагается, что потенциальная функция $f(x,t)$ имеет непрерывные частные производные по временной и пространственной переменными до порядка $2M$. Решение $\psi(x,t)$ удовлетворяет условию нормировки

$$\|\psi(x,t)\|^2 = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} |\psi(x,t)|^2 dx = 1, \quad t \in [t_0, T]. \tag{3}$$

Для численного решения задачи (1)–(3) на каждом переходе от $\psi(x,t_k)$ на k-ом слое к $\psi(x,t_{k+1})$ на $k+1$-ом слое используется неявная вычислительная схема с симметричными операторами $A_k^{(M)}$, $S_k^{(M)}$ [2]

$$\begin{aligned}
&\psi_k^0 = \psi(x,t_k),\\
&\left(I - \frac{\overline{\alpha}_\eta^{(L)} S_k^{(M)}}{2L}\right)\psi_k^{\eta/L} = \left(I - \frac{\alpha_\eta^{(L)} S_k^{(M)}}{2L}\right)\psi_k^{(\eta-1)/L}, \quad \eta = 1,\ldots,L,\\
&\tilde{\psi}_k^0 = \psi_k^1,\\
&\left(I + \frac{\tau\overline{\alpha}_\zeta^{(M)} A_k^{(M)}}{2M}\right)\tilde{\psi}_k^{\zeta/M} = \left(I + \frac{\tau\alpha_\zeta^{(M)} A_k^{(M)}}{2M}\right)\tilde{\psi}_k^{(\zeta-1)/M}, \ \zeta = 1,\ldots,M,\\
&\psi_k^0 = \tilde{\psi}_k^1,\\
&\left(I + \frac{\overline{\alpha}_\eta^{(L)} S_k^{(M)}}{2L}\right)\psi_k^{\eta/L} = \left(I + \frac{\alpha_\eta^{(L)} S_k^{(M)}}{2L}\right)\psi_k^{(\eta-1)/L}, \quad \eta = 1,\ldots,L,\\
&\psi(x,t_{k+1}) = \psi_k^1.
\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $L = [\frac{M}{2}]$, I – единичный оператор, коэффициенты $\alpha_\zeta^{(M)}$ $(\zeta = 1,\ldots,M,\ M \geq 1)$, являются корнями полиномиального уравнения ${}_1F_1(-M, -2M, 2M\imath/\alpha) = 0$, где ${}_1F_1(a,b,x)$ – вырожденная гипергеометрическая функция, коэффициенты $\overline{\alpha}_\zeta^{(M)}$ комплексно сопряжены с $\alpha_\zeta^{(M)}$. При значениях $M = 1,2,3$, операторы $A_k^{(M)}$, $S_k^{(M)}$ имеют вид

$$\begin{aligned}
A_k^{(1)} &= -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + f(x,t_c), \quad S_k^{(1)} = 0,\\
A_k^{(2)} &= A_k^{(1)} + \frac{\tau^2}{24}\ddot{f}, \quad S_k^{(2)} = S_k^{(1)} + \frac{\tau^2}{12}\dot{f},\\
A_k^{(3)} &= A_k^{(2)} + \frac{\tau^4}{1920}\overset{\cdot\cdot\cdot\cdot}{f} + \frac{\tau^4}{1440}\left(\frac{\partial}{\partial x}\dot{f}\right)^2 - \frac{\tau^4}{2880}\left(\frac{\partial^4}{\partial x^4}\ddot{f}\right)
\end{aligned}$$

$$
-\frac{\tau^4}{720}\left(\frac{\partial}{\partial x}\ddot{f}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}f\right)-\frac{\tau^4}{720}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ddot{f}\right)\frac{\partial}{\partial x}, \tag{5}
$$

$$
S_k^{(3)}=S_k^{(2)}+\frac{\tau^4}{480}\dddot{f}+\frac{\tau^4}{720}\left(\frac{\partial}{\partial x}\dot{f}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}f\right)
+\frac{\tau^4}{2880}\left(\frac{\partial^4}{\partial x^4}\dot{f}\right)+\frac{\tau^4}{720}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\dot{f}\right)\frac{\partial}{\partial x},
$$

где использованы обозначения $f\equiv f(x,t_c)$, $\dot{f}\equiv \partial_t f(x,t)|_{t=t_c},\ldots$ и $t_c=t_k+\tau/2$. Заметим, что при $M=1$ имеем известную схему Кранка-Николсона [3].

Метод:

Алгоритм на основе которого была построена данная процедура опубликован в работе [2]. Для аппроксимации на каждом слое $t=t_k$ задачи (4)–(5) по пространственной переменной $x\in[x_{\min},x_{\max}]$ используется метод конечных элементов [4], с интерполяционными полиномами Лагранжа до порядка $p=8$ при подходящей гладкости решения.

Литература:

[1] Magnus W. Commun. Pure Appl. Math., 1954, v. 7, pp. 649–673.
[2] Chuluunbaatar O. et al. J. Phys. A, 2008, v. 41, pp. 295203–1–25.
[3] Crank J. and Nicolson P. Proc. Cambridge Philos. Soc., 1947, v. 43, pp. 50–67.
[4] Bathe K.J. *Finite element procedures in engineering analysis*. Englewood Cliffs, Prentice Hall, New York, 1982.


```
Структура:

     SUBROUTINE
     Имя: TIME6T
     Внутренние подпрограммы: TMSOLV, ASSMBS, ASSMBM, EMASSD, ESTIFD,ADDVEC,
                              BOUNDC, COLMHT, ERRDIM, FEGRID,MAXHT, GAULEG,
                              NODGEN, SHAPEF, MULTC, MULTCC, REDBAC, DECOMC
     Внешние подпрограммы:    POTCAL, DINIT (составляются пользователем)

Обращение:

     CALL TIME6T(TITLE,NPOL,TMIN,TMAX,TAU,ITORDR,IPRINT,IPRSTP,
    1            IPRITT,NMESH,RMESH,IBOUND,FNOUT,IOUT,FMATR,
    2            IOUM,EVWFN,IOUF,TOT,ITOT,ZTOT,MTOT,MITOT,MZTOT)
     INPUT:      TITLE,NPOL,TMIN,TMAX,TAU,ITORDR,IPRINT,IPRSTP,
                 IPRITT,NMESH,RMESH,IBOUND,FNOUT,IOUT,FMATR,
                 IOUM,EVWFN,IOUF,TOT,ITOT,ZTOT,MTOT,MITOT,MZTOT:

 TITLE   -- символьная переменная, название рабочего варианта программы.
 NPOL    -- целая переменная, порядок интерполяционных полиномов Лагранжа.
 TMIN    -- вещественная переменная, начальная точка временного интервала.
 TMAX    -- вещественная переменная, конечная точка временного интервала.
 TAU     -- вещественная переменная, шаг по временной переменной t.
 ITORDR  -- целочисленная переменная, принимающая значения 1--3, порядок
            разложения Магнуса.
 IPRINT  -- целочисленная переменная, принимающая значения 0--2, уровень печати
            результатов.
 IPRSTP  -- целочисленная переменная, шаг печати решения по пространственной переменой x.
 IPRITT  -- целочисленная переменная, шаг печати решения по временной переменой t.
 NMESH   -- целочисленная переменная, размерность массива RMESH. Значение NMESH всегда > = 3
```

```
              и нечетное.
 RMESH   -- вещественный массив, массив RMESH содержит информацию о делении
              интервала [x_min,x_max] по пространственной переменой x на подынтервалы:
              RMESH(1) = x_min, RMESH(NMESH) = x_max, и значения
              RMESH(I), I=2, 4, ... , NMESH-1, устанавливается число элементов в каждом
              подынтервале [RMESH(I-1), RMESH(I+1)].
 IBOUND  -- целочисленная переменная, параметр, задающий тип краевых условий в граничных
              точках x = x_min и x = x_max:
              = 1 -- Дирихле -- Дирихле;
              = 2 -- Дирихле -- Нейман;
              = 3 -- Нейман -- Дирихле;
              = 4 -- Нейман -- Нейман.
 FNOUT   -- символьная переменная, название файла, в котором печатаются
              полученные численные результаты.
 IOUT    -- целочисленная переменная, номер выходного логического устройства FNOUT.
 FMATR   -- символьная переменная, название файла, в котором хранятся
              значения используемых матриц.
 IOUM    -- целочисленная переменная, номер выходного логического устройства FMATR.
 EVWFN   -- символьная переменная, название файла, в котором печатаются
              значения  узловых точек и полученные численные решения в этих точках.
              Эта опция используется только, если IOUF > 0.
 IOUF    -- целочисленная переменная, номер выходного логического устройства EVWFN.
 TOT     -- вещественный массив, рабочий вектор.
 ITOT    -- целочисленный массив, рабочий вектор.
 ZTOT    -- комплексный массив, рабочий вектор.
 MTOT    -- целочисленная переменная, размерность массива TOT.
 MITOT   -- целочисленная переменная, размерность массива ITOT.
 MZTOT   -- целочисленная переменная, размерность массива ZTOT.


     OUTPUT:
            WRITE(IOUF) NN,NGRID,TT,TAU,(XGRID(J),J=1,NGRID)
    1                 ,(ZU(J),J=1,NN)

 NGRID -- целочисленная переменная, число конечно-элементных узлов.
 NN    -- целочисленная переменная, число конечно-элементных узлов численного решения.
 TT    -- вещественная переменная, значения временной переменной t.
 TAU   -- вещественная переменная, шаг по временной переменной t.
 XGRID -- вещественный массив, содержащий значения конечно-элементных узлов.
 ZU    -- комплексный массив, содержащий вычисленное решение.

Пример: подпрограмма POTCAL задания потенциальной функции
      f(x,t) = (4 - 3 * exp(-t)) * x**2 / 2:

      SUBROUTINE POTCAL(RG,TT,TAU,DA,HH,DS,SS,ITORDR)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DATA ZERO / 0.D0 /, ONE / 1.D0 /
C
      HH = (4 - 3 * DEXP(-TT)) * RG**2 / 2
      SS = ZERO
      DA = ONE / 2
      DS = ZERO
C
      IF (ITORDR .GE. 2) THEN
C
        F1 = -3 * DEXP(-TT) / 24 * RG**2 / 2
```

```
        HH = HH + TAU**2 * F1
        F1 =  3 * DEXP(-TT) / 12 * RG**2 / 2
        SS = SS + TAU**2 * F1
C
      END IF
C
      IF (ITORDR .GE. 3) THEN
C
        F1 = -3 * DEXP(-TT) * RG**2 / 2 / 1920
     1    + ( 3 * DEXP(-TT) * RG)**2 / 1440
     2    - (-3 * DEXP(-TT) * RG) * (4 - 3 * DEXP(-TT)) * RG / 720
        HH = HH + TAU**4 * F1
        F1 = 3 * DEXP(-TT) * RG**2 / 2 / 480
     1     + (3 * DEXP(-TT) * RG) * (4 - 3 * DEXP(-TT)) * RG / 720
        SS = SS + TAU**4 * F1
C
        DA = DA + (- 3 * DEXP(-TT)) * TAU**4 / 720
        DS = DS - (  3 * DEXP(-TT)) * TAU**4 / 720
C
      END IF
      RETURN
      END
```

```
 RG    -- вещественная переменная, значение пространственной переменной x.
 TT    -- вещественная переменная, значение временной переменной t.
 TAU   -- вещественная переменная, шаг по временной переменной t.
 HH    -- вещественная переменная, содержит часть оператора A^(M)_k без
          дифференциального оператора из формулы (5) при значении M=ITORDR.
 SS    -- вещественная переменная, содержит часть оператора S^(M)_k без
          дифференциального оператора из формулы (5) при значении M=ITORDR.
 DA    -- вещественная переменная, содержит коэффициенты при дифференциальных
          операторах оператора A^(M)_k из формулы (5) при значении M=ITORDR.
          DA = 1/2 при ITORDR = 1 и 2, а DA = 1/2 + f_{xxtt}(x,t) * TAU**4 / 720
          при ITORDR = 3.
 DS    -- вещественная переменная, содержит коэффициенты при дифференциальных
          операторах оператора S^(M)_k из формулы (5) при значении M=ITORDR.
          DS = 0 при ITORDR = 1 и 2, а DS = - f_{xxt}(x,t) * TAU**4 / 720
          при ITORDR = 3.
```

Здесь глобальные переменные RG, TT, TAU задаются главной
программой и не должны изменяться пользователем.

Пример: подпрограмма DINIT задания начального условия (2)
      psi_0(x) = sqrt(sqrt(1 / pi)) * exp(- (x - sqrt(2))**2 / 2)

```
      SUBROUTINE DINIT(KEY,NN,NGRID,XGRID,ZU1)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Y)
      IMPLICIT COMPLEX*16 (Z)
      DIMENSION ZU1(NN),XGRID(NGRID)
      DATA ONE / 1.D0 /, TWO / 2.D0 /
      PI = DACOS(- ONE)
      FG = DSQRT(DSQRT(ONE / PI))
      DO I = 1 , NN
        X = XGRID(I + KEY)
        ZU1(I) = FG * DEXP( - (X - DSQRT(TWO))**2 / 2)
      END DO
```

```
      RETURN
      END
```

KEY   -- целочисленная переменная, KEY = 0, если IBOUND >= 3, иначе KEY = 1.

Здесь глобальные переменные KEY, NN, NGRID, XGRID задаются главной программой и не должны изменяться пользователем.

Примечания:

1. В подпрограмме TIME6T 1.0 используется динамическое распределение памяти для одномерных массивов TOT, ZTOT, ITOT, RMESH. В тестовом примере их размерность задана значениями MTOT=100000, MZTOT=100000, MITOT=100000, NMESH1=5. Если пользователь задал недостаточные значения размерности вышеуказанных массивов, то программа останавливается и выдает диагностику о превышении размерности и указывает, на сколько их нужно увеличить.

2. Для контроля точности численного решения по шагу TAU дополнительно вычисляется коэффициент Рунге на четырех вдвое сгущающихся сетках с помощью подпрограммы RUNGE.