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

Язык : Фортран

Назначение:

Подпрограмма TIME6T 2.0 находит численные решения $\Psi(\mathbf{r},t)$ задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера в d-мерном пространстве

$$\imath\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\left(-\frac{1}{2}\nabla^2_{\mathbf{r}}+U(\mathbf{r})+f(\mathbf{r},t)\right)\Psi(\mathbf{r},t),\quad \Psi(\mathbf{r},t_0)=\Psi_0(\mathbf{r}),\tag{1}$$

в рамках метода Канторовича [1], используя явное разложение Магнуса [2] 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 $\Omega_\tau[t_0,T]=\{t_0,t_{k+1}=t_k+\tau,(k=0,1,\ldots,K-1),t_K=T\}$.

Так же потребуем непрерывность волновой функции $\Psi(\mathbf{r},t)\in\mathbf{W}^1_2(\mathbf{R}^d\otimes[t_0,T])$ и $\Psi_0(\mathbf{r})\in\mathbf{W}^1_2(\mathbf{R}^d)$. Предполагается, что функция $f(\mathbf{r},t)$ $(f(\mathbf{r},t_0)=0)$ имеет непрерывные частные производные по временной переменной до порядка $2M$, а функции $U(\mathbf{r})$, $f(\mathbf{r},t)$ достаточно гладкие по пространственной переменной. Решение $\Psi(\mathbf{r},t)$ удовлетворяет условию нормировки

$$\|\Psi(\mathbf{r},t)\|^2=\int|\Psi(\mathbf{r},t)|^2d\mathbf{r}=1,\quad t\in[t_0,T].\tag{2}$$

Замечание. При $M=3$ подпрограмма TIME6T 2.0 реализована только для потенциалов $f(\mathbf{r},t)$, удовлетворяющих условию $\nabla^2_{\mathbf{r}}\partial_t f(\mathbf{r},t)\equiv 0$.

В методе Канторовича [2] решение $\Psi(\mathbf{r},t)$ ищется в виде разложения по однопараметрическому набору гиперповерхностных функций $\{B_j(\Omega;r)\}_{j=1}^{j_{\max}}$:

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\sum_{j=1}^{j_{\max}}B_j(\Omega;r)\chi_j(r,t).\tag{3}$$

В разложении (3) вектор-функции $\boldsymbol{\chi}(r,t)=(\chi_1(r,t),\ldots,\chi_{j_{\max}}(r,t))^T$ являются неизвестными, а поверхностные функции $\mathbf{B}(\Omega;r)=(B_1(\Omega;r),\ldots,B_{j_{\max}}(\Omega;r))^T$ по набору угловых переменных Ω для каждого значения гиперрадиуса r, который рассматривается здесь как параметр. Базисные функции $B_j(\Omega;r)\in\mathcal{F}_r\sim\mathbf{L}_2(S^{d-1}(\Omega))$ определяются как решения параметрической задачи на собственные значения

$$\left(-\frac{1}{2r^2}\hat{\boldsymbol{\Lambda}}^2_\Omega+U(\mathbf{r})\right)B_j(\Omega;r)=E_j(r)B_j(\Omega;r),\tag{4}$$

где $\hat{\boldsymbol{\Lambda}}^2_\Omega$ – самосопряженный оператор обобщенного углового момента. Собственные функции этой задачи удовлетворяют краевым условиям по угловым переменным Ω, аналогичным тем, которые наложены на волновую функцию $\Psi(\mathbf{r},t)$ при каждом фиксированном значении параметра $r\in\mathbf{R}^1_+$ и условию нормировки

$$\left\langle B_i(\Omega;r)\middle|B_j(\Omega;r)\right\rangle_\Omega=\int\overline{B}_i(\Omega;r)B_j(\Omega;r)d\Omega=\delta_{ij}.\tag{5}$$

После усреднения уравнение (1) по базису $B_j(\Omega;r)$ получаем систему из $j_{\max}$ обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка относительно неизвестных функций $\boldsymbol{\chi}(r,t)$:

$$\imath\mathbf{I}\frac{\partial\boldsymbol{\chi}(r,t)}{\partial t}=\mathbf{H}(r,t)\boldsymbol{\chi}(r,t),\quad \boldsymbol{\chi}(r,t_0)=\boldsymbol{\chi}_0(r),\tag{6}$$

где

$$\mathbf{H}(r,t)=-\frac{1}{2r^{d-1}}\mathbf{I}\frac{\partial}{\partial r}r^{d-1}\frac{\partial}{\partial r}+\mathbf{V}(r)+\tilde{\mathbf{Z}}^{(1)}(r,t)+\mathbf{Q}(r)\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^{d-1}}\frac{\partial r^{d-1}\mathbf{Q}(r)}{\partial r}.\tag{7}$$

Здесь $\mathbf{I}$, $\mathbf{V}(r)$, $\tilde{\mathbf{Z}}^{(1)}(r,t)$ и $\mathbf{Q}(r)$ матрицы размерностью $j_{\max}\times j_{\max}$, элементы которых определяются соотношениями

$$\begin{aligned}
V_{ij}(r) &= V_{ji}(r) = \frac{E_i(r)+E_j(r)}{2}\delta_{ij} + \frac{1}{2}\left\langle \frac{\partial B_i(\Omega;r)}{\partial r}\right|\left.\frac{\partial B_j(\Omega;r)}{\partial r}\right\rangle_{\Omega},\\
Q_{ij}(r) &= -Q_{ji}(r) = -\frac{1}{2}\left\langle B_i(\Omega;r)\right|\left.\frac{\partial B_j(\Omega;r)}{\partial r}\right\rangle_{\Omega},\\
\tilde{Z}^{(1)}_{ij}(r,t) &= \tilde{Z}^{(1)}_{ji}(r,t) = \left\langle B_i(\Omega;r)\middle| f(\mathbf{r},t)\middle| B_j(\Omega;r)\right\rangle_{\Omega}.
\end{aligned}\tag{8}$$

Для численного решения задачи (6)–(8) на каждом переходе от $\boldsymbol{\chi}(r,t_k)$ на k-ом слое к $\boldsymbol{\chi}(r,t_{k+1})$ на $k+1$-ом слое используется неявная вычислительная схема [2] с симметричными операторами $\tilde{\mathbf{A}}^{(M)}_k$, $\tilde{\mathbf{S}}^{(M)}_k$

$$\begin{aligned}
&\tilde{\boldsymbol{\chi}}^0_k = \boldsymbol{\chi}(r,t_k),\\
&\left(\mathbf{I} - \frac{\overline{\alpha}^{(L)}_\eta \tilde{\mathbf{S}}^{(M)}_k}{2L}\right)\tilde{\boldsymbol{\chi}}^{\eta/L}_k = \left(\mathbf{I} - \frac{\alpha^{(L)}_\eta \tilde{\mathbf{S}}^{(M)}_k}{2L}\right)\tilde{\boldsymbol{\chi}}^{(\eta-1)/L}_k,\ \eta=1,\ldots,L,\\
&\hat{\boldsymbol{\chi}}^0_k = \tilde{\boldsymbol{\chi}}^1_k,\\
&\left(\mathbf{I} + \frac{\tau\overline{\alpha}^{(M)}_\zeta \tilde{\mathbf{A}}^{(M)}_k}{2M}\right)\hat{\boldsymbol{\chi}}^{\zeta/M}_k = \left(\mathbf{I} + \frac{\tau\alpha^{(M)}_\zeta \tilde{\mathbf{A}}^{(M)}_k}{2M}\right)\hat{\boldsymbol{\chi}}^{(\zeta-1)/M}_k,\ \zeta=1,\ldots,M,\\
&\tilde{\boldsymbol{\chi}}^0_k = \hat{\boldsymbol{\chi}}^1_k,\\
&\left(\mathbf{I} + \frac{\overline{\alpha}^{(L)}_\eta \tilde{\mathbf{S}}^{(M)}_k}{2L}\right)\tilde{\boldsymbol{\chi}}^{\eta/L}_k = \left(\mathbf{I} + \frac{\alpha^{(L)}_\eta \tilde{\mathbf{S}}^{(M)}_k}{2L}\right)\tilde{\boldsymbol{\chi}}^{(\eta-1)/L}_k,\ \eta=1,\ldots,L,\\
&\boldsymbol{\chi}(r,t_{k+1}) = \tilde{\boldsymbol{\chi}}^1_k.
\end{aligned}\tag{9}$$

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

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{A}}^{(1)}_k &= \mathbf{H}(r,t_c), & \tilde{\mathbf{S}}^{(1)}_k &= \mathbf{0},\\
\tilde{\mathbf{A}}^{(2)}_k &= \tilde{\mathbf{A}}^{(1)}_k + \tilde{\mathbf{G}}^{(2)}, & \tilde{\mathbf{S}}^{(2)}_k &= \tilde{\mathbf{S}}^{(1)}_k + \tilde{\mathbf{Z}}^{(2)},\\
\tilde{\mathbf{A}}^{(3)}_k &= \tilde{\mathbf{A}}^{(2)}_k + \tilde{\mathbf{G}}^{(3)}, & \tilde{\mathbf{S}}^{(3)}_k &= \tilde{\mathbf{S}}^{(2)}_k + \tilde{\mathbf{Z}}^{(3)},
\end{aligned}\tag{10}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{G}^{(2)}_{ij}(r,t_c) &= \tau^2\left\langle B_i(\Omega;r)\middle|\frac{1}{24}\ \ddot{f}\middle|B_j(\Omega;r)\right\rangle_{\Omega},\\
\tilde{Z}^{(2)}_{ij}(r,t_c) &= \tau^2\left\langle B_i(\Omega;r)\middle|\frac{1}{12}\ \dot{f}\middle|B_j(\Omega;r)\right\rangle_{\Omega},\\
\tilde{G}^{(3)}_{ij}(r,t_c) &= \tau^4\left\langle B_i(\Omega;r)\middle|\frac{1}{1920}\ \ddddot{f} + \frac{1}{1440}\left(\nabla_{\mathbf{r}}\ \dot{f}\right)^2 - \frac{1}{720}\left(\nabla_{\mathbf{r}}\ \ddot{f}\right)\left(\nabla_{\mathbf{r}}(U+f)\right)\middle|B_j(\Omega;r)\right\rangle_{\Omega},\\
\tilde{Z}^{(3)}_{ij}(r,t_c) &= \tau^4\left\langle B_i(\Omega;r)\middle|\frac{1}{480}\ \dddot{f} + \frac{1}{720}\left(\nabla_{\mathbf{r}}\ \dot{f}\right)\left(\nabla_{\mathbf{r}}(U+f)\right)\middle|B_j(\Omega;r)\right\rangle_{\Omega},
\end{aligned}\tag{11}$$

где использованы обозначения $f\equiv f(\mathbf{r},t_c)$, $\dot{f}\equiv \partial_t f(\mathbf{r},t)|_{t=t_c}$, …, $U\equiv U(\mathbf{r})$ и $t_c=t_k+\tau/2$.

Метод:

Алгоритм, на основе которого была построена данная процедура, опубликован в работе [3]. Для аппроксимации на каждом слое $t=t_k$ задачи (9)–(11) по пространственной переменной $r\in[0,r_{\max}]$ используется метод конечных элементов [4], с интерполяционными полиномами Лагранжа до порядка $p=8$ при подходящей гладкости решения.

Тест:

Тестовый пример взят из работы [5] для точной решаемой двухмерной модели (1), (2) с потенциалами $U(\mathbf{r}) = \omega^2 r^2/8$ и $f(\mathbf{r}, t) = r(f_1(t)\cos(\theta) + f_2(t)\sin(\theta))$, где $f_1(t) = \cos(\omega t/2)E_1(t) - \sin(\omega t/2)E_2(t)$, $f_2(t) = -\sin(\omega t/2)E_1(t) - \cos(\omega t/2)E_2(t)$, $E_j(t) = a_j \sin(\omega_j t)$. В тестовом расчете на интервале $t \in [0, 0.4]$ использовались следующие значения параметров $\omega = 4\pi$, $\omega_1 = \pi$,$\omega_2 = 2\pi$, $a_1 = 1$, $a_2 = 2$.

Литература:

[1] Канторович Л.В. и Крылов В.И. *Приближенные методы высшего анализа.* Москва, Гостехиздат, 1952.

[2] Magnus W. Commun. Pure Appl. Math., 1954, v. 7, pp. 649–673.

[3] Chuluunbaatar O. et al. J. Phys. A, 2008, v. 41, pp. 295203–1–25.

[4] Bathe K.J. *Finite element procedures in engineering analysis.* Englewood Cliffs, Prentice Hall, New York, 1982.

[5] Chuluunbaatar O. et al. Phys. Rev E, 2008, v. 78, pp. 017702–1–4.

```
Структура:

      SUBROUTINE
      Имя: TIME6T
      Внутренние подпрограммы: TMSOLV, ASSMBN, ASSMBT, EMASSD, ESTIFD, ESTIFN,
                               ESTITD, ESTITN, ADDVEC, HQPOTN, SGPOTN, BOUNDC,
                               COLMHT, ERRDIM, FEGRID, MAXHT, GAULEG, NODGEN,
                               SHAPEF, MULTC, MULTCC, REDBAC, DECOMC
      Внешние подпрограммы:    POTCAL, POTTIM, DINIT (составляются пользователем)

Обращение:

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

 TITLE   -- символьная переменная, название рабочего варианта программы.
 MDIM    -- целая переменная, число уравнений.
 IDIM    -- целая переменная, размерность пространства.
 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 r.
 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 [0,r_max] по пространственной переменой r на подынтервалы:
```

```
            RMESH(1) = r, RMESH(NMESH) = r_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 r = 0 и r = r_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.
 POTEN   -- символьная переменная, название файла, в котором хранятся
            значения используемых потенциальных матриц.
 IOUP    -- целочисленная переменная, номер выходного логического
            устройства POTEN.
 POTTM   -- символьная переменная, название файла, в котором хранятся
            значения используемых потенциальных матриц.
 IOUD    -- целочисленная переменная, номер выходного логического
            устройства POTTM.
 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.
```

В подпрограмме POTCAL задаются потенциальные матрицы V, Q

```
      SUBROUTINE POTCAL(RHO,VV,QQ,MDIM,IOUT)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION VV(MDIM,MDIM),QQ(MDIM,MDIM)
      RETURN
      END
```

В подпрограмме POTTIM задаются потенциальные матрицы G, Z

```
      SUBROUTINE POTTIM(RHO,GG,ZZ,TT,TAU,ITORDR,MDIM,IOUT)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION GG(MDIM,MDIM),ZZ(MDIM,MDIM)
      RETURN
      END
```

В подпрограмме DINIT задается начальное условие

```
      SUBROUTINE DINIT(KEY,MDIM,NN,NGRID,XGRID,ZU1)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Y)
      IMPLICIT COMPLEX*16 (Z)
      DIMENSION ZU1(NN),XGRID(NGRID)
      RETURN
      END
```

```
 RHO   -- вещественная переменная, значение пространственной переменной r.
 TT    -- вещественная переменная, значение временной переменной t.
 TAU   -- вещественная переменная, шаг по временной переменной t.
 KEY   -- целочисленная переменная, KEY = 0, если IBOUND >= 3, иначе KEY = 1.
```

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

Примечания:

1. В подпрограмме TIME6T 2.0 используется динамическое распределение памяти для одномерных массивов TOT, ZTOT, ITOT, RMESH. В тестовом примере их размерность задана значениями MTOT=2 000 000, MZTOT=1 000 000, MITOT=300 000, NMESH1=5. Если пользователь задал недостаточные значения размерности вышеуказанных массивов, то программа останавливается и дает диагностику о превышении размерности и указывает, на сколько их нужно увеличить.

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