FORMATION OF THE MAIN REPRESENTATIONS ABOUT QUANTUM MECHANICS

I.V. Ryzhov, Candidate of Physico-mathematical Sciences, Professor at the Department «Theoretical Physics and Astronomy»,
I.S. Kosova, Candidate of Pedagogical Sciences, Assistant Professor at the Department of «Algebra»
N.A. Vasilyev, Candidate of Physico-mathematical Sciences, Professor at the Department of «Theoretical physics and astronomy»,
L.V. Zhukov, Doctor of Pedagogical Sciences, Professor at the Department «Theoretical physics and astronomy»,
Russian State Pedagogical University A.I.Gertsen, St. Petersburg (Russia)
V.N. Aniskin, Candidate of Pedagogic Sciences, Associate
Professor, Professor at the Department «Informatics, Applied Mathematics and Technique of Their Teaching»,
Samara State Academy of Social Sciences and Humanities, Samara (Russia)

Abstract. Formation of quantum mechanics bases is impossible without acquisition of knowledge and abilities for the solution of the corresponding tasks in this section of theoretical physics. At the same time, the exact solution of tasks is not always possible in quantum mechanics, especially if they are non-stationary and multipartial tasks. Various approximate methods (the theory of perturbations, a variation method, quasiclassical and adiabatic approximations) are developed for the solution of quantum mechanical problems. Sometimes tasks which are studied in a standard course of quantum mechanics can be solved by the one-dimensional equation of Schrödinger, but the division method of variables is, in fact, exclusive, and similar decisions can have special features, which are not characteristic for solutions of a general kind. The quantity of the solution methods applied to this class of problems is limited. In this article it is shown that a number of the main representations of quantum mechanics can be created without preliminary studying of its mathematical apparatus, by use of de Broil waves.
Keywords: bases of quantum mechanics; Schrödinger's equation for one particle:, a method of potentials of zero radius; de Broil wave, tunnel effect; levels broadening of a potential hole; a method of the solution of quantum mechanical problems.

УДК 532/533

РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА – БЛОХА

И.В. Рыжов, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и астрономии
Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург (Россия)
А.А. Васильев, учебный мастер управления информационных технологий
Санкт-Петербургская академия постдипломного педагогического образования, Санкт-Петербург (Россия)
Н.А. Васильев, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и астрономии,
И.С. Косова, кандидат педагогических наук, доцент кафедры алгебры,
Л.В. Жуков, доктор педагогических наук,профессор кафедры теоретической физики и астрономии
Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург (Россия)
В.Н. Аниськин, кандидат педагогических наук, профессор кафедры информатики, прикладной математики и методики их преподавания
Поволжская государственная социально-гуманитарная академия, Самара (Россия)

Аннотация. В статье предпринята попытка составления алгоритма с условным названием разностного оператора решений S, для вычисления значений сеточных функций $R_{x,t}$, $E_{x,t}$, удовлетворяющеготаким условиям, как:

$\max \| R_{x,t} - R(x,t) \| \to 0$, $\max \| E_{x,t} - E(x,t) \| \to 0$, где $\| \cdot \|$ означает норму соответствующих величин.

Ключевые слова: нелинейная оптика; уравнения Максвелла – Блоха; задача Коши; вычисление значений сеточных функций; одношаговые вычислительные правила последовательного повышения точности результата; вычислительные правила наивысшей алгебраической степени точности.

Постановка задачи и основные определения.

В нелинейной оптике можно выделить целый класс задач, которые описываются одномерными нелинейными уравнениями Максвелла – Блоха, например, типа:

$$R(x,t)_t = f(x,t,R,E), \quad (1)$$

$$E(x,t) = \int_0^L R(\xi,t)\cos|x-\xi|\,d\xi, \quad (2)$$

где нижний индекс t в левой части уравнения (1) означает частную производную по времени. Как правило, точное решение этой системы уравнений не удается выразить через элементарные функции. Обычно в таких ситуациях приходится прибегать к помощи приближенных методов решения.

Пусть требуется найти решение системы уравнений (1), (2), удовлетворяющее начальным условиям:

$$R(x,0) = r(x), \quad E(x,0) = e(x). \quad (3)$$

Условия существования и единственности решения поставленной задачи Коши будем считать выполненными. Предположим, что $R(x,t)$ и $E(x,t)$ есть точное решение уравнений (1) – (3), обладающее в ограниченной (с границей $G \in \{x=0, x=L; t=0, t=T\}$) области изменения своих аргументов Q необходимой гладкостью $D = Q + G$.

Рассмотрим некоторое множество $D=\{M_{x,y}\}$, состоящее из изолированных точек $M_{x,t}$, принадлежащих области D, где переменные x и t определены в промежутках $0 \le x \le L/\Delta x$, $0 \le t \le T/\Delta t$ и являются натуральными числами [1]. Число точек множества D будем характеризовать величинами Δx и Δt (шагами решения). Чем меньше Δx и Δt, тем большим будет число точек множества D. Множество D есть сетка решений, а точки $M_{x,t}$ из этого множества – узлы сетки решений. Функции $R_{x,t}$, $E_{x,t}$, определенные в узлах сетки решений, суть искомые сеточные функции, являющиеся, в нашем случае, двумерными массивами, в которых число значений равно числу точек области D. Основной целью статьи является составление алгоритма, который назовем разностным оператором решений S, для вычисления значений сеточных функций $R_{x,t}$, $E_{x,t}$, удовлетворяющего следующим условиям: $\max \| R_{x,t} - R(x,t) \| \to 0$, $\max \| E_{x,t} - E(x,t) \| \to 0$, где $\| \cdot \|$ означает норму соответствующих величин.

1. Алгоритм решения**.**

Оператор решений S должен вычислять значения сеточных функций $R_{x,t}$, $E_{x,t}$ последовательно по заданному алгоритму:

Оператором решений S вычисляем значения функций (3) $r(x) \to R_{x,0}$, $e(x) \to E_{x,0}$ в узловых точках $M_{x,0}$ сетки решений вдоль оси x. Получаем два вектора столбца одинаковой размерности. Каждая найденная точка будет являться начальной для решения дифференциального уравнения (1)(см. рис.1).

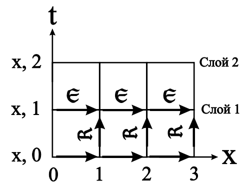

Рисунок 1 -Схема приближенного вычисления функций $R_{x,t}$, на сетке решений

Опираясь на значения $R_{x,0}$, $E_{x,0}$, оператор решений S делает первый шаг по времени и находит сеточную функцию $R_{x,1}$ в узловых точках $M_{x,1}$ первого сеточного слоя по времени. При этом, в зависимости от приближенного метода решения уравнения (1), могут вычисляться промежуточные точки $M_{x,m}$ m слоя по времени (где m может принимать любые значения из единичного промежутка времени).

Зная функцию $R_{x,1}$, которая является подынтегральной в интеграле (2), оператор решений S находит функцию для $E_{x,1}$ первого сеточного слоя времени. Важно заметить, если приближенный метод (см. предыдущий пункт) вычисляет m-ые промежуточные слои по времени, то оператор S должен вычислять интеграл (2) на каждом m-ом промежуточном слое. Далее процесс вычисления повторяется для второго сеточного слоя по времени и т.д.

2. Одношаговые вычислительные правила последовательного повышения точности результата для решения уравнения (1)**.**

Рассмотрим второй шаг алгоритма (см. п.2). Возьмем за основу метода решения уравнения (1), с начальными условиями на нулевом слое по времени (3), хорошо известный метод последовательных приближений, или метод Пикара [1 – 3]. Однако этот метод редко используется в практике вычислений. Одним из его недостатков, препятствующих широкому применению метода, является необходимость выполнения операции интегрирования при осуществлении каждой итерации. Несколько более широкое распространение в вычислительной практике получил модифицированный метод, основанный на идее разложения в ряд решения рассматриваемой задачи Коши. Интегрируя уравнение (1) в пределах от t до $t+1$, получим равенство, которое для наших целей удобно записать в виде:

$$R(x, t_n + \Delta t) = R(x, t_n) + \Delta t \int_0^1 z_n(\alpha) d\alpha. \quad (4)$$

где $z_n(\alpha) = f[x, t_n + \alpha \Delta t, R(t_n + \alpha \Delta t), E(t_n + \alpha \Delta t)]$. Это равенство посредством последнего интеграла связывает значения решения рассматриваемого уравнения (1) в двух точках, удаленных друг от друга на расстояние шага Δt. Указав эффективный метод приближенного вычисления интеграла в (4), мы получим тем самым одно из правил численного интегрирования уравнения (1). Заменим интеграл в (4) квадратурной суммой, тогда:

$$\begin{aligned} R(x, t_n + \Delta t) &\approx R(x, t_n) + \Delta t \sum_{i=0}^{q} A_i z_n(\alpha_i) = \\ &= R(x, t_n) + \Delta t \sum_{i=0}^{q} A_i f[x, t_n + \alpha_i \Delta t, R(x, t_n + \alpha_i \Delta t), E(x, t_n + \alpha_i \Delta t)]. \end{aligned} \quad (5)$$

Выбор параметров A_i, α_i, $i = 0,1,\ldots,q$, в этом приближенном равенстве будем осуществлять, например, на основании требования, чтобы квадратурная формула:

$$\int_0^1 z_n(\alpha) d\alpha \approx \sum_{i=0}^{q} A_i z_n(\alpha_i) \quad (6)$$

была точной для всевозможных алгебраических многочленов до степени $k-1$ $(0 < k \le 2q+2)$ включительно. Это приводит к следующей системе k уравнений с $2q+2$ неизвестными A_i, α_i, $i = 0,1,\ldots,q$:

$$\sum_{i=0}^{q} A_i = 1, \quad \sum_{i=0}^{q} A_i \alpha_i^j = \frac{1}{j+1}; \quad j = 1,2,\ldots,k-1. \quad (7)$$

Так как весовая функция в случае интеграла $\int_0^1 z_n(\alpha)d\alpha$ равна единице, то квадратурная формула вида (6), имеющая наивысшую степень точности $2q+1$, может быть построена, и притом единственным образом, для любого $q \ge 0$. Поэтому при $k = 2q+2$ система (7) имеет единственное решение, при этом $0 < A_i \le 1$, $0 < \alpha_i < 1$, $i = 0,1,\ldots,q$. Следовательно, при $1 \le k \le 2q+2$ у этой системы существует хотя бы одно решение, и приближенное равенство (5) может быть построено. Опробуем предлагаемый метод построения вычислительных правил на нескольких простых примерах.

Методы первого порядка точности. Система (7) в этом случае вырождается в единственное требование

$$\sum_{i=0}^{q} A_i = 1. \quad (8)$$

Параметры α_i, $i = 0,1,\ldots,q$, могут принимать при этом, любые фиксированные значения. Однако для случая одношаговых методов выбор этих параметров должен быть ограничен условием $0 \le \alpha_i \le 1$. Взяв, например, $q = 0$, найдем, что $A_0 = 1$. Полагая $\alpha_0 = 0$, получим формулу известного метода Эйлера:

$$R(x,t_{n+1}) = R(x,t_n) + \Delta t\, f(x,t_n,R(x,t_n),E(x,t_n)) + O(\Delta t^2).$$

Взяв, например, $\alpha_0 = 1$ получим простейший неявный метод

$$\overset{[2]}{R}_{n+1} = \overset{[2]}{R}_n + \Delta t \overset{[2]}{f}_{n+1}, \quad (9)$$

где $\overset{[k]}{R}_{n+1}$ – найденное с локальной ошибкой порядка Δt^k приближенное значение решения в точках $(x, t_n + \alpha\Delta t)$

Методы второго порядка точности. В этом случае требование (8) дополним условием

$$\sum_{i=0}^{q} A_i\alpha_i = \frac{1}{2}. \quad (10)$$

При $q = 0$ система (8), (10) имеет единственное решение $A_0 = 1$, $\alpha_0 = 1/2$, что приводит к следующему вычислительному правилу типа предиктор–корректор:

$$\begin{aligned} \overset{[2]}{R}_{n+1/2} &= \overset{[3]}{R}_n + \frac{\Delta t}{2}\overset{[3]}{f}_n, \\ \overset{[3]}{R}_{n+1} &= \overset{[3]}{R}_n + \Delta t \overset{[2]}{f}_{n+1/2}. \end{aligned} \quad (11)$$

При $q = 1$, система (8), (10) примет вид:

$$A_0 + A_1 = 1, \quad A_0\alpha_0 + A_1\alpha_1 = \frac{1}{2}. \quad (12)$$

Выбрав, скажем, $\alpha_0 = 0$, $\alpha_1 = 1$, найдем, что $A_0 = A_1 = 1/2$, и получим неявный метод трап

$$\overset{[3]}{R}_{n+1} = \overset{[3]}{R}_n + \frac{\Delta t}{2}\left(\overset{[3]}{f}_n + \overset{[3]}{f}_{n+1}\right). \quad (13)$$

Используя формулу Эйлера, это вычислительное правило можно преобразовать в явное правило тоже типа предиктор-корректор:

$$\begin{aligned} R_{n+1} &= R_n + \Delta t\, f_n, \\ \overset{[3]}{R}_{n+1} &= \overset{[2]}{R}_n + \frac{\Delta t}{2}\left(\overset{[2]}{f}_n + \overset{[2]}{f}_{n+1}\right), \end{aligned} \quad (14)$$

Но, пользуясь вычислительным правилом (14), рекомендуется сделать на шаге одну итерацию для лучшей сходимости метода.

Методы третьего порядка точности. Требования (8), (10) здесь необходимо дополнить уравнением:

$$\sum_{i=0}^{q} A_i\alpha_i^2 = \frac{1}{3}.$$

Этим условиям удовлетворяют, например, вычислительные правила:

$$\begin{aligned} \overset{[2]}{R}_{n+1/4} &= \overset{[4]}{R}_n + \frac{\Delta t}{4}\overset{[4]}{f}_{n+1/4}, \\ \overset{[3]}{R}_{n+1/2} &= \overset{[4]}{R}_n + \frac{\Delta t}{2}\overset{[2]}{f}_{n+1/4}, \\ \overset{[3]}{R}_{n+1} &= \overset{[4]}{R}_n + \Delta t \overset{[3]}{f}_{n+1/2}, \\ \overset{[4]}{R}_{n+1} &= \overset{[4]}{R}_n + \frac{\Delta t}{6}\left(\overset{[4]}{f}_n + 4\overset{[3]}{f}_{n+1/2} + \overset{[3]}{f}_{n+1}\right). \end{aligned} \quad (15)$$

Построенное правило на один узел сетки требует четырехкратного обращения к блоку нахождения правых частей уравнения (1). Заметим, что данный метод, как и метод (11, 14), имеет предсказывающе-исправляющий характер. Приближенное значение величины $\overset{[3]}{R}_{n+1}$ в третьей формуле (15), найденное с локальной погрешностью порядка Δt^3, уточняется затем по четвертой формуле в (15). Сравнение $\overset{[3]}{R}_{n+1}$, $\overset{[4]}{R}_{n+1}$ дает практическую возможность по ходу вычислений без дополнительных затрат составить представление о локальной точности полученного приближения. Такое сравнение, в частности, может быть положено в основу правила с автоматическим выбором шага Δt интегрирования уравнения (1).

На примере приведенных выше вычислительных правил легко видеть, что предлагаемый выше способ построения методов численного интегрирования уравнения (1) удовлетворяет принципу модульности, когда сложные вычислительные алгоритмы компонуются на основе более простых типовых расчетных формул. Например, последнее равенство в (15) непосредственно связано с формулой Симпсона.

3. Вычислительные правила наивысшей алгебраической степени точности для решения уравнения (2)**.**

Рассмотрим третий шаг алгоритма (см. п.2). В прикладных исследованиях типа уравнений Максвелла – Блоха часто возникает необходимость вычисления интегралов типа (2). Этот интеграл выражает напряженность электрического поля при прохождении и взаимодействии его с нелинейной средой состоящей из атомов или молекул. Обычно для вычисления интеграла (2) применяют специальные численные методы [4]. Наиболее широко используют на практике квадратурные формулы типа (6). Не вдаваясь в подробности составления квадратурных формул, этот метод довольно подробно освещен в п.3, приведем несколько типовых вычислительных правил интеграла (2) которые имеют наивысшую степень аппроксимации.

Метод трапеций

$$\int_0^L R(\xi,t)\cos|x-\xi|\,d\xi \approx \Delta x[(R_{0,t}\cos(|x|\Delta x) + R_{L/\Delta x,t}\cos(|x-L/\Delta x|\Delta x))/2 + \sum_{i=1}^{L/\Delta x} R_{i,t}\cos(|x-i|\Delta x)]. \quad (16)$$

Квадратурный метод наивысшей алгебраической степени точности с пропущенным шагом

$$\int_0^L R(\xi,t)\cos|x-\xi|\,d\xi \approx (\Delta x/8)\sum_{i=0}^{(L/\Delta x)-2}[2R_{i,t}\cos(|x-i|\Delta x) + 6R_{i+2,t}\cos(|x-(i+2)|\Delta x)]. \quad (17)$$

Метод Симпсона или правило парабол

$$\int_0^L R(\xi,t)\cos|x-\xi|\,d\xi \approx (\Delta x/3)[R_{0,t}\cos(|x|\Delta x) + R_{L/\Delta x,t}\cos(|x-L/\Delta x|\Delta x) + \sum_{i=0}^{(L/2\Delta x)-1} 4R_{2i+1,t}\cos(|x-(2i+1)|\Delta x) + 6R_{2i+2,t}\cos(|x-(2i+2)|\Delta x)]. \quad (18)$$

Можно воспользоваться и другими методами типа Уэдля или Харди, которые дают сравнительно хорошую точность вычислений интеграла (2), но они обладают значительно меньшей эффективностью и используются в вычислительной практике существенно реже. Обратим внимание на то, что процедуры численного интегрирования с адаптивным выбором шага в нашем случае плохо применимы, так как после решения уравнения (1) строго задана сетка для вычисления интеграла (2), и использование для контроля точности какой-либо квадратурной формулы существенно понизит степень точности. Хотя было бы замечательно – автоматически распределять узлы сетки, вдоль оси x учитывая особенности поведения подынтегральной функции $R_{x,t}$.

Отметим в заключении, еще одно правило интегрирования (2). Это метод сплайн аппроксимации таблично заданной подынтегральной функции. Таблично заданная функция $R_{x,t}$ кусочно аппроксимируется (на каждом промежутке Δx) полиномом, например, третьей степени, до границы области интегрирования L. Далее ищется интеграл от аналитически заданной подынтегральной функции методами наивысшей алгебраической степени точности. Этот метод аппроксимирует решение (2) при шаге $\Delta x = 0.002$ с точностью до седьмого знака после запятой, но вычисляет интеграл значительно медленнее, например, формулы Симпсона, имеющей порядок точности до пятого знака после запятой (включительно) при том же шаге интегрирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырный П.И. Вычислительные методы. В 2 томах. Т.II. М.: Наука, 1977. 399 с.; ил.
2. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. В 2 томах. Т.II. М.: Гос. издат. физ.-мат. литературы, 1969. 297 с.
3. Бобков В.В. Об одном способе построения одношаговых правил приближенного решения дифференциальных уравнений. //Изв. АН БССР. Сер. физ.-матем. Наук. 1967, № 4. С. 27-35.
4. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. Вычислительные методы для инженеров: Учебное пособие. М.: Высшая школа, 1994. 544 с.

THE SOLUTION OF THE ONE-DIMENSIONAL EQUATIONS OF MAXWELL – BLOCH

I.V. Ryzhov, Candidate of Physico-mathematical Sciences, Professor at the Department «Theoretical Physics and Astronomy»,
Russian State Pedagogical University A.I.Gertsen, St. Petersburg (Russia)
A.A. Vasilyev, educational master at the technical management department of information technologies
St. Petersburg academy of post-degree pedagogical education, St. Petersburg (Russia)
N.A. Vasilyev, Candidate of Physico-mathematical Sciences, Professor at the Department of «Theoretical physics and astronomy»,
I.S. Kosova, Candidate of Pedagogical Sciences, Assistant Professor at the Department of «Algebra»
L.V. Zhukov, Doctor of Pedagogical Sciences, Professor at the Department «Theoretical physics and astronomy»,
Russian State Pedagogical University A.I.Gertsen, St. Petersburg (Russia)
V.N. Aniskin, Candidate of Pedagogic Sciences, Associate Professor, Professor at the Department «Informatics, Applied Mathematics and Technique of Their Teaching»
Samara State Academy of Social Sciences and Humanities, Samara (Russia)

Abstract. The article gives an attempt of drawing up the algorithm with the conditional name of the differential operator of decisions S, for calculation of values of net functions $R_{x,t}$, $E_{x,t}$, meeting such conditions as: $\max\|R_{x,t} - R(x,t)\| \to 0$, $\max\|E_{x,t} - E(x,t)\| \to 0$, where $\|\cdot\|$ means the norm of the corresponding quantities.

Keywords: nonlinear optics; Maxwell– Bloch equations; Cauchy's problem; calculation of values of net functions; single-step computing rules of consecutive increase of result accuracy; computing rules of the most advanced algebraic accuracy stage.