Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. М. Чеботарев, А. В. Поляков, Оценки уклонений случайных блужданий и стохастический метод решения уравнения Шрёдингера, *Матем. заметки*, 2004, том 76, выпуск 4, 610–624

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm124>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.89.185.249

26 апреля 2023 г., 18:26:37

УДК 517.598

ОЦЕНКИ УКЛОНЕНИЙ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДЕНИЙ И СТОХАСТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

А. М. Чеботарев, А. В. Поляков

Стохастическое представление решения задачи Коши для уравнения Шрёдингера использовано для построения унитарных матриц, аппроксимирующих разрешающий оператор. Показано, что распределения вероятностей отклонений случайных блужданий позволяют получить вероятностные оценки скорости роста производных решения и размера носителя.

Библиография: 12 названий.

1. Введение. Задачи Коши для уравнения Шрёдингера на малых отрезках времени возникают в квантовой химии, квантовой оптике, квантовой теории “броуновских моторов” (см. [1] и содержащуюся там библиографию). В большинстве случаев эти задачи не являются точно решаемыми, а существующие численные методы их решения используют конечные базисы, конечные сетки [2]–[4], либо конечные полиномиальные разложения экспоненты $\exp\{iHt\}$ [5]. Эти подходы не дают априорных оценок размеров носителя, скорости убывания решения и его производных и, вообще говоря, не обеспечивают унитарность разрешающего оператора, что затрудняет оценку погрешности вычислений. В настоящей работе рассматриваются стохастические представления решений задачи Коши для уравнения Шрёдингера с потенциалами, принадлежащими алгебре функций $\mathcal{A}(\mathbb{R}^n)$, являющихся Фурье-образами мер конечной вариации, и задачи, сводящиеся к этому случаю с помощью перехода к представлению взаимодействия. Наличие стохастического представления позволяет использовать численный метод Монте-Карло [6] для оценки средних значений наблюдаемых величин.

Стохастическое представление решения является точным и, в известном смысле, явным, поскольку для представления ψ -функции оно использует сравнительно простые модели случайных блужданий [7]. Такая конструкция позволяет получить априорные оценки решения и его производных в импульсном представлении, а также связать размер носителя решения в момент t с оценками отклонений случайных блужданий за время t . Наличие таких оценок позволяет с заданной точностью построить аппроксимацию разрешающего оператора и представить его в виде унитарной матрицы, размер которой зависит от необходимой точности вычислений, гладкости и размера носителя начального условия, а также отрезка времени, на котором рассматривается эволюция.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта DFG 436 RUS 113/779/0-1.

Возможность построить унитарную матричную аппроксимацию $U_\tau^{(N)}$ разрешающего оператора $U_\tau = \exp\{iH\tau\}$ позволяет гарантировать линейный, а не экспоненциальный рост погрешности приближенных вычислений на отрезке $n\tau$, поскольку в этом случае

$$\|(U_{n\tau}^{(N)} - U_{n\tau})\psi_0\| \leq \sum_{k=0}^{n-1} \|U_{(n-k-1)\tau}^{(N)}(U_\tau^{(N)} - U_\tau)U_\tau^k\psi_0\| \leq n\delta_N,$$

где

$$\delta_N = \sup_{s \in [0, n\tau]} \|(U_\tau^{(N)} - U_\tau)U_s\psi_0\| = O(\varepsilon) + O(N^{-1/2}),$$

N – объем выборки метода Монте-Карло, а δ_N – погрешность, связанная с дискретизацией операторов перехода.

В п. 2 статьи мы приводим явные стохастические представления решений задачи Коши для уравнения Шрёдингера в случаях, сводящихся к задаче с потенциалом класса $\mathcal{A}(\mathbb{R})$. В п. 3 рассматриваются оценки вероятностей уклонений случайных блужданий и приводятся аналитические и численные оценки. В п. 4 с помощью преобразования Кэли вводятся унитарные матричные аппроксимации разрешающих операторов.

2. Стохастические представления решений задачи Коши для уравнения Шрёдингера. Теоретические основы метода Монте-Карло для решения задачи Коши для уравнений Шрёдингера с потенциалами, являющимися Фурье-образами мер конечной абсолютной вариации, были описаны в работах [7]–[9]. Метод не требует построения сеток и при вычислении функции состояния в импульсном представлении допускает простую оценку точности, зависящую только от числа выборочных траекторий пуассоновского процесса, используемых для оценки математического ожидания. В работе [10] приведены результаты численного решения модельных задач квантового туннелирования для потенциалов, являющихся суперпозицией пары гауссовых функций. Метод, использованный в работе [10], в представлении взаимодействия может быть распространен на потенциалы, содержащие дополнительно линейные и квадратичные полиномы, что позволяет, например, вычислить эволюцию средних значений тока или потока энергии, переносимых электронным газом в периодической кристаллической структуре, помещенной в скрещенные электрическое и магнитное поля.

Рассмотрим уравнение Шрёдингера с потенциалом $v(x)$, принадлежащим алгебре функций $\mathcal{A}(\mathbb{R})$, являющихся Фурье-образом комплексной меры конечной вариации [7]–[10]. Для упрощения изложения мы ограничиваемся одномерным случаем:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\gamma^2 y^2}{2} + v(y) + f_\tau y \right) \psi, \quad f_\tau \in \mathbb{R}, \quad v(y) = \kappa \int e^{-iqy + i\Phi(q)} m(dq), \quad (2.1)$$

где Φ – фазовая функция, заданная по $\text{mod}(2\pi)$, такая, что $\Phi(q) = -\Phi(-q)$, а m – вероятностная мера такая, что $m(B) = m(-B)$. Это условие необходимо и достаточно для вещественности потенциала v .

Введем новые *безразмерные* переменные $t = t_0 \cdot \tau$, $x = l_0 \cdot y$ такие, что

$$t_0 \cdot 1 \text{ эВ} / \hbar = 1, \quad \frac{m_e \cdot l_0^2}{\hbar \cdot t_0} = 1, \quad \frac{t_0 \cdot \gamma^2}{\hbar \cdot \omega^2} = 1.$$

Тогда уравнение (2.1) переписывается в виде

$$\frac{1}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\omega^2 x^2}{2} + V(x) + F_t x \right) \psi, \quad \psi|_{t=0} = \psi_0(x), \quad V(x) = v\left(\frac{x}{l_0}\right), \quad F_t = f_{t/t_0}. \quad (2.2)$$

Рассмотрим задачу (2.1) в импульсном представлении, используя унитарное в $L_2(\mathbb{R})$ преобразование Фурье

$$\mathcal{F}_{x \rightarrow p} \varphi(x) = \tilde{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ipx} \varphi(x) dx.$$

Операторы умножения на независимую переменную и дифференцирования имеют Фурье-образы

$$\mathcal{F}_{x \rightarrow p} x \mathcal{F}_{x \rightarrow p}^{-1} = i \frac{\partial}{\partial p} = \hat{x}, \quad \mathcal{F}_{x \rightarrow p} \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{F}_{x \rightarrow p}^{-1} = ip = i\hat{p}.$$

Обозначим через $U_{0,t}$ унитарный коцикл

$$U_{0,t} = e^{i \int_0^t \hat{H}_0(s) ds}, \quad \hat{H}_0(t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\omega^2 x^2}{2} + F_t x,$$

записанный в виде хронологической экспоненты, так что

$$\frac{d}{dt} U_{0,t} = i U_{0,t} \hat{H}_0(t).$$

Он обладает следующими коммутационными свойствами:

$$\begin{aligned} \hat{p}_t &= U_{0,t} \hat{p} U_{0,t}^* = \hat{p} \cos \omega t - \omega \hat{x} \sin \omega t + P_t, & P_t &= \int_0^t F_s \cos \omega(t-s) ds, \\ \hat{x}_t &= U_{0,t} \hat{x} U_{0,t}^* = \hat{x} \cos \omega t + \omega^{-1} \hat{p} \sin \omega t + X_t, & X_t &= \omega^{-1} \int_0^t F_s \sin \omega(t-s) ds. \end{aligned} \quad (2.3)$$

В дальнейшем изложении предполагается, что функция F_t вещественна, измерима и ограничена на любом конечном отрезке $[0, T]$. Таким образом, интегралы в формулах (2.3) являются вещественными, непрерывными и ограниченными функциями.

Используя формулу Бейкера–Хаусдорфа $e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}$ для $A = -iq\hat{x} \times \cos \omega t$, $B = -iq\omega^{-1}\hat{p} \sin \omega t$ нетрудно вычислить оператор $i\hat{V}_t$ в импульсном представлении:

$$\begin{aligned} i\hat{V}_t &= U_{0,t} V(\hat{x}) U_{0,t}^* = i\kappa \int_{\mathbb{R}} m(dq) e^{-iq\hat{x}_t + i\Phi(q)} = \kappa \int_{\mathbb{R}} m(dq) e^{iS(p,q,t)} e^{q \cos \omega t \frac{\partial}{\partial p}}, \\ S(p, q, t) &= \frac{q^2}{4\omega} \sin^2(2\omega t) - \frac{qp}{\omega} \sin \omega t - qX_t + \Phi(q) + \frac{\pi}{2}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Отметим, что если $\psi(x, t)$ – решение уравнения (2.1), то уравнение Шрёдингера для функции $\tilde{\varphi}(p, t) = e^{-\kappa t} \mathcal{F}_{x \rightarrow p} U_{0,t}^* \psi(x, t)$ имеет вид

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}(p, t)}{\partial t} = -(i\hat{V}_t + \kappa) \tilde{\varphi}(p, t), \quad \tilde{\varphi}(p, 0) = \tilde{\psi}_0(p).$$

Используя (2.2) и учитывая нормировку вероятностной меры m , правую часть последнего уравнения можно записать в виде математического ожидания от суперпозиции случайных сдвигов импульса и фазы:

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}(p, t)}{\partial t} = \kappa \int_{\mathbb{R}} m(dq) (e^{iS(p, q, t)} \tilde{\varphi}(p + q \cos \omega t, t) - \tilde{\varphi}(p, t)) \stackrel{\text{def}}{=} \kappa(\hat{L}(t) - I) \tilde{\varphi}(p, t). \quad (2.5)$$

Нетрудно видеть, что $\hat{L}(t)$ – семейство операторов *равномерно ограниченных* в пространствах $L_1(\mathbb{R})$, $L_2(\mathbb{R})$ и $L_\infty(\mathbb{R})$ по $t \in \mathbb{R}_+$. Поэтому уравнение (2.5), рассматриваемое как однозначно разрешимая задача Коши для ОДУ

$$\frac{d}{dt} \tilde{\varphi} = \kappa(\hat{L}(t) - I) \tilde{\varphi}, \quad \tilde{\varphi}|_{t=0} = \tilde{\psi}_0$$

со значениями в любом из трех указанных банаховых пространств, в силу принципа Дюамеля эквивалентно интегральному уравнению вольтерровского типа

$$\tilde{\varphi}(t) = e^{-\kappa t} \tilde{\psi}_0(0) + \kappa \int_0^t e^{-\kappa(t-\tau)} \hat{L}(\tau) \tilde{\varphi}(\tau) d\tau$$

или

$$\tilde{\varphi}(p, t) = e^{-\kappa t} \tilde{\psi}_0(p) + \kappa \int_0^t d\tau e^{-(t-\tau)\kappa} \int_{\mathbb{R}} m(dq) \tilde{\varphi}(p + q \cos \omega \tau, \tau) e^{iS(p, q, \tau)}. \quad (2.6)$$

Его решение может быть записано в виде абсолютно сходящегося ряда

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(p, t) = e^{-\kappa t} & \left\{ \tilde{\psi}_0(p) + \sum_{n=1}^{\infty} \kappa^n \int_0^t \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_1 \cdots dt_n \int_{\mathbb{R}} m(dq_1) \cdots \int_{\mathbb{R}} m(dq_n) \right. \\ & \times \tilde{\psi}_0 \left(p + \sum_{k=1}^n q_k \cos \omega t_k \right) \exp \left\{ i \sum_{k=1}^n S \left(p + \sum_{j=0}^{k-1} q_j \cos \omega t_j, q_k, t_k \right) \right\} \Bigg\}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Рассмотрим пространственно однородный марковский скачкообразный процесс π_τ , начинающийся в точке $p(t) = 0$ в момент времени $\tau = t$ идвигающийся в обратном направлении времени вплоть до момента $\tau = 0$. Пусть $p_n = \sum_{j=0}^n q_j \cos \omega t_j$ – текущее значение траектории, совершившей n скачков, q_j – величина j -го скачка, $q_0 \stackrel{\text{def}}{=} 0$, $p_n = \pi_{t_n}$, $t_n = t - \sum_{j=1}^n \tau_j$ – момент n -го скачка, τ_j – случайное время ожидания j -го скачка,

$$\mathbf{P}\{q_j = B\} = \int_B m(dq), \quad \mathbf{P}\{\tau_j > T\} = e^{-\kappa T}$$

для любого j . Случайные процессы π_t и $\xi_t = \int_0^t \pi_\tau d\tau$ удобно рассматривать как линейное преобразование однородного пуассоновского процесса η_t , совершающего скачки q_n в моменты $t_n = \sum_{k=1}^n \tau_k$:

$$\begin{aligned} \eta_t &= \int_0^t \int_{\mathbb{R}} q \nu(dq, d\tau), \\ \pi_t &= \pi_t(\eta_\bullet) = \int_0^t \cos \omega \tau d\eta_\tau, \quad \xi_t = \xi_t(\eta_\bullet) = \int_0^t ds \int_0^s \cos \omega \tau d\eta_\tau, \end{aligned}$$

где $\nu(B, T)$ – целочисленная случайная мера Леви со средним $M\nu(B, T) = \kappa m(B) \text{mes } T$, $B, T \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ [11].

Следующая теорема показывает, что сумма ряда (2.7) может быть эквивалентным образом представлена как математическое ожидание функционала, заданного на траекториях пуассоновского процесса η_t [7]–[10]:

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}(p, t) &= M_t \tilde{\psi}_0(p + p_N) \exp \left\{ i \sum_{n=0}^N S(p + p_{n-1}, q_n, t_n) \right\} \\ &= M_t \tilde{\psi}_0(p + \pi_t) e^{iS_t - ip\xi_t} = e^{-\kappa t} U_{0,t}^* \tilde{\psi}_0(p),\end{aligned}\quad (2.8)$$

где

$$p_N = \pi_t = \sum_{j=0}^N q_j \cos \omega t_j, \quad \xi_t = \sum_{j=0}^N q_j \frac{\sin \omega t_j}{\omega},$$

$N = N(t)$ – случайное число скачков за время t ,

$$S_t = \sum_{k=1}^N \left(q_k^2 \frac{\sin^2 2\omega t_k}{4\omega} - q_k \frac{\sin \omega t_k}{\omega} \sum_{j=1}^{k-1} q_j \cos \omega t_j - q_k X_{t_k} + \Phi(q_k) + \frac{\pi}{2} \right). \quad (2.9)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. В дальнейшем изложении мы предполагаем, что начальное условие $\tilde{\psi}_0(p)$ принадлежит пересечению пространств $L_1(\mathbb{R})$, $L_2(\mathbb{R})$ и $C(\mathbb{R})$. Формула (2.8) показывает, что оператор $\tilde{\psi}_0 \rightarrow \tilde{\varphi}(t)$ является сжимающим в этих пространствах. Более того, при таком отображении образом компактного в $C(\mathbb{R})$ множества является компакт. Действительно, очевидно, что образ равномерно ограниченного множества равномерно ограничен. Его равностепенная непрерывность следует из оценки

$$\sup_p |\tilde{\varphi}(p, t) - \tilde{\varphi}(p + \Delta, t)| \leq \sup_p |\tilde{\psi}_0(p) - \tilde{\psi}_0(p + \Delta)| + 2\|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})} M_t \left| \sin \left(\frac{\Delta \xi_t}{2} \right) \right|, \quad (2.10)$$

так что правая часть не зависит от p и стремится к нулю при $\Delta \rightarrow 0$.

ТЕОРЕМА 2.1. (1) *Функция (2.8) является решением уравнения (2.5). В координатном представлении решение имеет вид*

$$\varphi(p, t) = M_t \psi_0(x - \xi_t) e^{i\tilde{S}_t - ix\pi_t} = e^{-\kappa t} U_{0,t}^* \psi_0(x), \quad \tilde{S}_t = S_t + \xi_t \pi_t. \quad (2.11)$$

(2) *Среднее значение наблюдаемой $\hat{A} = A(\hat{x}, \hat{p})$ может быть вычислено по формуле*

$$(\psi(t), \hat{A}\psi(t)) = \int \overline{\tilde{\varphi}(p, t)} A(\hat{x}_t, \hat{p}_t) \tilde{\varphi}(p, t) dp, \quad (2.12)$$

где $\hat{x}_t = \hat{x} \cos \omega t + \omega^{-1} p \sin \omega t + X_t$, $\hat{p}_t = p \cos \omega t - \omega \hat{x} \sin \omega t + P_t$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. (1) За время Δt могут произойти следующие несовместные события: ни одного скачка с вероятностью $P_0(\Delta t) = 1 - \kappa \Delta t + O(\Delta t)^2$, один скачок с вероятностью

$$P_1(\Delta t) = \kappa \int_t^{t+\Delta t} e^{-\kappa \tau} d\tau + O(\Delta t)^2,$$

более одного скачка с вероятностью $P_{\geq 2}(\Delta t) = O(\Delta t)^2$, причем величина скачка q и время его ожидания τ являются независимыми случайными величинами. В силу марковского свойства рассматриваемого скачкообразного процесса этим событиям соответствуют три члена в правой части следующего разложения:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(p, t + \Delta t) &= P_0(\Delta t) \mathbf{M}_t \tilde{\psi}_0(p + p_N) \exp \left\{ i \sum_{n=0}^N S(p + p_{n-1}, q_n, t_n) \right\} \\ &+ \kappa \int_0^{\Delta t} e^{-\kappa \tau} d\tau \int_{\mathbb{R}} m(dq) e^{iS(q, p, t + \tau)} \mathbf{M}_{t+\tau} \tilde{\psi}_0(p + q \cos \omega(t + \tau) + p_N) \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{n=0}^N S(p + q \cos \omega(t + \tau) + p_{n-1}, q_n, t_n + \tau) \right\} + O((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Первое утверждение теоремы достаточно доказать для начальных условий, принадлежащих подмножеству, плотному в $L_2(\mathbb{R})$. Пусть $\tilde{\psi}_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R})$; тогда функция $f(p, q, t, \tau)$, стоящая под знаком интеграла в (2.13), равномерно ограничена по параметру $\tau \in [0, \Delta t]$. Запишем этот интеграл в виде

$$\int_0^{\Delta t} d\tau \int_{\mathbb{R}} m(dq) f(p, q, t, \tau) = \Delta t \int_0^1 d\tau \int_{\mathbb{R}} m(dq) f(p, q, t, \Delta t \cdot \tau).$$

В силу теоремы Лебега о предельном переходе под знаком интеграла можно перейти к пределу при $\Delta t \rightarrow 0$. В результате получим

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}(p, t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\tilde{\varphi}(p, t + \Delta t) - \tilde{\varphi}(p, t)}{\Delta t} = \kappa \int_{\mathbb{R}} m(dq) \left(e^{iS(p, q, t)} \tilde{\varphi}(p + q \cos \omega t, t) - \tilde{\varphi}(p, t) \right).$$

Формула (2.11) получается при обращении преобразования Фурье. Первое утверждение теоремы доказано.

Второе утверждение вытекает из определения среднего и коммутационных соотношений (2.3). Теорема доказана.

Важно отметить, что функционал S_t в формуле (2.9) не зависит от начальной точки траектории. Поэтому математическое ожидание (2.8) определяется плотностью вероятности $P_t(p, x, S)$, описывающей совместное распределение вероятностей введенных выше случайных процессов координаты ξ_t , импульса π_t и действия S_t при условии, что $\xi_0 = \pi_0 = S_0 = 0$:

$$\tilde{\varphi}(p, t) = \int_0^{2\pi} e^{iS} dS \int_{\mathbb{R}} e^{-ip\xi} d\xi \int_{\mathbb{R}} P_t(\pi, \xi, S) \tilde{\psi}_0(p + \pi) d\pi.$$

В импульсном представлении процесс π_t описывает распыливание носителя начального условия, а процесс ξ_t – рост производных решения, а в координатном – наоборот, от

процесса π_t зависит рост производных, а от процесса $\xi_t = \int_0^t \pi_s ds$ – расширение носителя. В обоих случаях вдали от носителя решение убывает экспоненциально. Ниже мы ограничимся более подробным рассмотрением импульсного представления. Действие коцикла $U_{0,t}$ портит эту картину: при свободной эволюции в координатном представлении вне носителя решение убывает степенным образом. Поэтому при вычислении средних целесообразно использовать формулу (2.12), которая явным образом переносит действие коцикла на наблюдаемую.

Для начального условия $\tilde{\psi}_0$ из $L_1 \cap L_2 \cap C$ формула (2.8) позволяет стандартным образом оценить точность вычисления $\tilde{\varphi}(p, t)$ методом Монте-Карло с помощью центральной предельной теоремы и грубой оценки дисперсии D_t функционала

$$\theta_t = \tilde{\psi}_0(p + \pi_t) e^{iS_t - ip\xi_t}, \quad \pi_t = \pi_t(\eta.), \quad \xi_t = \xi_t(\eta.)$$

случайной траектории η_t в (2.8): $D_t \leq \sigma_t = \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})}^2$. В этом случае справедливы следующие три предложения, обосновывающие применение метода Монте-Карло для уравнения Шрёдингера и позволяющие оценить размер носителя и гладкость решения.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.1. *Вероятностная оценка точности метода Монте-Карло имеет вид*

$$\mathbf{P} \left\{ \|\tilde{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}_N(t)\|_{L_2(\mathbb{R})}^2 \leq \frac{4x \|\tilde{\psi}_0\|_{L_1(\mathbb{R})} \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})}}{\sqrt{N}} \right\} \leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^x e^{-z^2/2} dz \quad (2.14)$$

при $N \rightarrow \infty$, где $\tilde{\varphi}_N(p, t)$ – выборочное среднее по выборке объема N :

$$\tilde{\varphi}_N(p, t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{iS_t^{(n)} - ip\xi_t^{(n)}} \tilde{\psi}_0(p + \pi_t^{(n)});$$

здесь $S_t^{(n)}$, $\xi_t^{(n)}$, $\pi_t^{(n)}$ – выборочные значения в момент t стохастического действия, координаты и импульса соответственно.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Нетрудно видеть, что если $\tilde{\psi}_0 \in L_1 \cap L_2 \cap C$, то случайная величина $e^{iS_t - ip\xi_t} \tilde{\psi}_0(p + \pi_t)$ имеет любое число конечных абсолютных моментов, равномерно ограниченных по p . Поэтому в каждой точке p разность между выборочным средним и средним значением, нормированная на $\sqrt{D_t/N}$ (D_t – дисперсия случайной величины θ_t), является нормально распределенной случайной величиной с точностью до членов $O(N^{-1/2})$. Более точно, для этого достаточно существование трех абсолютных моментов (см. [11]). Поскольку семейство

$$\{e^{iS_t^{(n)} - ip\xi_t^{(n)}} \tilde{\psi}_0(p + \pi_t^{(n)})\}_{n=1}^\infty$$

компактно в $C(\mathbb{R})$ по переменной p (см. замечание перед теоремой 2.1), то аналогичная оценка имеет место и для верхней грани разностей:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left\{ \sqrt{\frac{N}{D_t}} \sup_p |\tilde{\varphi}(p, t) - \tilde{\varphi}_N(p, t)| \leq 2x \right\} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^x e^{-z^2/2} dz.$$

Теперь доказываемое утверждение следует из очевидных оценок $D_t \leq \sigma_t = \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})}^2$ и

$$\|\tilde{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}_N(t)\|_{L_2}^2 \leq \|\tilde{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}_N(t)\|_C \|\tilde{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}_N(t)\|_{L_1} \leq 2\|\tilde{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}_N(t)\|_C \|\tilde{\psi}_0\|_{L_1}.$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.2. Если начальное условие $\tilde{\psi}_0$ имеет носитель, принадлежащий множеству $\mathcal{D}_0 \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ и $\mathcal{D} \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ – произвольное борелевское множество, то

$$|\tilde{\varphi}(p, t)| \leq \int |\tilde{\psi}_0(p+q)| P(dq, t) \leq \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})} P(\mathcal{D}_0 - p, t),$$

$$\int_{\mathcal{D}} |\tilde{\varphi}(p, t)|^2 dp \leq \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})}^2 \sup_{p \in \mathcal{D}_0} P(p - \mathcal{D}, t),$$

где

$$P(B, t) = \int_B \int_{\mathbb{R}} \int_0^{2\pi} P_t(\pi, \xi, S) d\pi d\xi dS$$

– вероятность перехода случайного процесса π_t за время t из точки 0 на множество $B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, $I_B(q)$ – индикаторная функция множества B , $\mathcal{D}_0 - p = \{d : d + p \in \mathcal{D}_0\}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Первое утверждение вытекает из определения переходной вероятности:

$$|\tilde{\varphi}(p, t)| \leq \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})} M_t I_{\mathcal{D}_0}(p + \pi_t) = \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})} P(\mathcal{D}_0 - p, t),$$

а второе – из неравенства Коши $M\bar{a}Ma \leq M|a|^2$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{D}} |\tilde{\varphi}(p, t)|^2 dp &\leq \int_{\mathcal{D}} M_t |\tilde{\psi}_0(p + \pi_t)| M_t |\tilde{\psi}_0(p + \pi'_t)| dp \leq \int_{\mathcal{D}} M_t |\tilde{\psi}_0(p + \pi_t)|^2 dp \\ &= \int_{\mathcal{D}_0} M_t |\tilde{\psi}_0(p)|^2 \int_{\mathcal{D}} P(p - \pi, t) d\pi \leq \|\tilde{\psi}_0\|_{L_2(\mathbb{R})}^2 \sup_{p \in \mathcal{D}_0} P(p - \mathcal{D}, t). \end{aligned}$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.3. Пусть $P_t(\pi, \xi, S)$ – введенное выше совместное распределение случайных величин π, ξ, S . Тогда

$$|\partial_p \tilde{\varphi}(p, t)| \leq \left\{ \|\partial_p \tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})} P(\mathcal{D}_0 - p, t) + \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})} \int_{\mathcal{D}_0} \int_{\mathbb{R}} \int_0^{2\pi} |\xi| P_t(\pi, \xi, S) d\pi d\xi dS \right\}. \quad (2.15)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО следует из формулы (2.8) и первого утверждения предложения 2.1.

Таким образом, поведение $\tilde{\varphi}(p, t)$ и ее производной по p определяется совместным распределением случайных величин π_t и ξ_t , поскольку $|\tilde{\varphi}(p, t)|$ при больших p убывает быстрее, чем $\|\tilde{\psi}_0\|_C P(\mathcal{D}_0 - p, t)$, а производная $|\partial_p \tilde{\varphi}(p, t)|$ – быстрее, чем

$$\|\partial_p \tilde{\psi}_0\|_C P(\mathcal{D}_0 - p, t) + \|\tilde{\psi}_0\|_C \int_{\mathcal{D}_0} \int_{\mathbb{R}} \int_0^{2\pi} |\xi| P_t(p + \pi, \xi, S) d\pi d\xi dS,$$

где $\mathcal{D}_0$ – носитель $\tilde{\psi}_0$, а

$$P(B, t) = \int_B \int_{\mathbb{R}} \int_0^{2\pi} P_t(\pi, \xi, S) d\pi d\xi dS.$$

Этот результат важен для определения параметров алгоритма численного решения уравнения Шрёдингера на отрезке $[0, t]$: если начальное условие является финитной ограниченной функцией с носителем на $\mathcal{D}_0 = [-R_0, R_0]$, то для контролируемой точности компактификации решения его носитель должен удовлетворять условию $\mathcal{D} = [-R_0 - R_t(\varepsilon), R_0 + R_t(\varepsilon)]$, где $R_t(\varepsilon)$ выбирается так, чтобы

$$\|\tilde{\psi}_0\|_{L_2}^2 P(\mathbb{R} \setminus \mathcal{D}_t, t) \leq \varepsilon, \quad \mathcal{D}_t = [-R_t(\varepsilon), R_t(\varepsilon)].$$

При этом $\bigcup_{p \in \mathcal{D}_0} \{p - \mathbb{R} \setminus \mathcal{D}\} \subset \mathbb{R} \setminus \mathcal{D}_t$, и в силу предложения 2.2 норма $\tilde{\psi}(t)$ на дополнении множества $\mathcal{D}$ меньше ε :

$$\int_{\mathbb{R} \setminus \mathcal{D}} \|\tilde{\varphi}(p, t)\|^2 dp \leq \|\tilde{\psi}_0\|_{L_2}^2 \sup_{p \in \mathcal{D}_0} P(p - \mathbb{R} \setminus \mathcal{D}, t) \leq \|\tilde{\psi}_0\|_{L_2}^2 P(\mathbb{R} \setminus \mathcal{D}_t, t) \leq \varepsilon.$$

Таким образом, продолжая решение нулем вне множества $\mathcal{D}$, мы совершаем ошибку ε в норме $L_2(\mathbb{R})$. Оценка производной (2.15) важна для определения шага h сетки на $\mathcal{D}$, обеспечивающей погрешность δ для кусочно-постоянного сужения $\tilde{\varphi}_h(p, t)$ решения $\tilde{\varphi}(p, t)$ на сетку с шагом h в нормах пространств $C(\mathbb{R})$, $L_1(\mathbb{R})$ и $L_2(\mathbb{R})$. Пусть

$$C_t = \|\partial_p \tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})} \max_{p \in \mathcal{D}} P(\mathcal{D}_0 - p, t) + \|\tilde{\psi}_0\|_{C(\mathbb{R})} \int_{\mathcal{D}_0} \int_{\mathbb{R}} \int_0^{2\pi} |\xi| P_t(\pi, \xi, S) d\pi d\xi dS.$$

Тогда (см. предложения 2.1–2.3)

$$\|\tilde{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}_h(t)\|_C \leq h C_t, \quad \|\tilde{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}_h(t)\|_{L_1} \leq 2R_t h C_t, \quad \|\tilde{\varphi}(t) - \tilde{\varphi}_h(t)\|_{L_2} \leq \sqrt{2R_t h} C_t. \quad (2.16)$$

Правые части этих формул дают априорные оценки погрешности сеточной аппроксимации.

3. Совместное распределение π_t, ξ_t . Рассмотрим характеристический функционал совместного распределения случайных величин π_t и ξ_t , определяемых введенным в предыдущем пункте пуассоновским процессом η_t :

$$\begin{aligned} f_t(\lambda, \mu) &= \text{Me}^{i\lambda\pi_t + i\mu\xi_t} \\ &= e^{-\kappa t} \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \kappa^n \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \int m(dq_1) \cdots \int m(dq_n) \right. \\ &\quad \times \exp \left\{ i\lambda \sum_{k=1}^n q_k \left(\lambda \cos \omega t_k + \mu \frac{\sin \omega t_k}{\omega} \right) \right\} \Bigg) \\ &= \exp \left\{ -\kappa \int_0^t d\tau \int (1 - e^{iq(\lambda \cos \omega \tau + \mu (\sin \omega \tau)/\omega)}) m(dq) \right\} \\ &= \exp \left\{ -2\kappa \int_0^t d\tau \int \sin^2 \left(\frac{q}{2} \left(\lambda \cos \omega \tau + \mu \frac{\sin \omega \tau}{\omega} \right) \right) m(dq) \right\}. \end{aligned}$$

Ясно, что если мера $m(dq)$ имеет $2k$ абсолютных моментов, то $2k$ производных функции $f_t(\lambda, \mu)$ по λ, μ равномерно ограничены. Поэтому плотность распределения

$$P(p, x, t) = \frac{1}{2\pi} \iint e^{-ip\lambda - ix\mu} d\lambda d\mu$$

имеет столько же конечных абсолютных моментов [11].

Вычисляя обратное преобразование Фурье, находим вероятность выхода по крайней мере одной из траекторий процессов π_t или ξ_t из коридора $[-p, p] \times [-x, x]$ в фазовом пространстве в момент t :

$$\begin{aligned} P\{|\xi_t| \geq x \text{ или } |\pi_t| \geq p\} &= 1 - \frac{2}{\pi} \iint \frac{\sin p\lambda \sin x\mu}{\lambda\mu} f_t(\lambda, \mu) d\lambda d\mu \\ &= 1 - \frac{2}{\pi} \iint \frac{\sin \lambda \sin \mu}{\lambda\mu} f_t\left(\frac{\lambda}{p}, \frac{\mu}{x}\right) d\lambda d\mu. \end{aligned} \quad (3.1)$$

При конечных значениях x и p эта формула может быть использована для численных оценок вероятности выхода из коридора. Если мера m имеет три или более конечных абсолютных момента, то при больших $|x|$ и $|p|$ главный член асимптотического разложения стандартным образом аппроксимируется гауссовым распределением

$$\begin{aligned} P\{|\xi_t| \geq x, |\pi_t| \geq p\} &\approx 1 - \int_{|\pi| \leq p} \int_{|\xi| \leq x} \frac{1}{2\pi\sqrt{\det A}} e^{-(1/2)A(\xi, \pi)} d\xi d\pi, \\ A_{1,1} &= \frac{c_1(t)}{a(t)}, \quad c_1(t) = t + \frac{\sin 2\omega t}{2\omega}, \quad A_{1,2} = A_{2,1} = -\frac{c_3(t)}{a(t)}, \quad c_3(t) = \frac{1 - \cos 2\omega t}{4\omega^2}, \\ A_{2,2} &= \frac{c_2(t)}{a(t)}, \quad c_2(t) = \frac{1}{\omega^2} \left(t - \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} \right), \quad a(t) = 2\kappa m_2(c_1(t)c_2(t) - c_3(t)^2), \end{aligned}$$

где $A(\xi, \pi)$ – квадратичная форма с (2×2) -матрицей $\{A_{i,j}\}$, $m_2 = \int q^2 m(dq)$. Нетрудно видеть, что если $\omega = 0$, то $c_1(t) = t$, $c_2(t) = t^3/3$, $c_3(t) = t^2/2$, и в этом случае совместное распределение приближенно равно

$$P_t(x, p) \approx \frac{\sqrt{3}}{\pi \kappa m_2 t^2} \exp \left\{ -\frac{2}{\kappa m_2 t} \left(p^2 + \frac{3x^2}{t^2} - \frac{3xp}{t} \right) \right\},$$

а отдельно взятые предельные распределения случайных величин π_t (при $p \rightarrow \infty$) и ξ_t (при $x \rightarrow \infty$) аппроксимируются нормальными распределениями $\mathcal{N}(0, \kappa c_1(t)m_2)$ и $\mathcal{N}(0, \kappa c_2(t)m_2)$ соответственно. Ниже мы рассмотрим оценки вероятностей выхода траекторий процесса η_t из коридора $[-R, R]$ за время $[0, t]$ при больших R .

Мера $P_0\{\exists \tau \in (0, t) : \eta_\tau \geq R\}$ траекторий пуассоновского процесса η_τ с интенсивностью скачков κ и распределением величины скачка $m(B)$, начинающихся в точке $\eta_0 = 0$ и достигающих уровня R в течение времени $(0, t)$, выражается с помощью принципа Андрэ [12] через вероятность попадания на множество $[R, \infty)$ в момент $\tau = t$:

$$P_0\{\exists \tau \in (0, t) : \eta_\tau \geq R\} = 2P_0\{p_t^\omega \geq R\} = \frac{1}{\pi} \int_1^\infty dx \int dp e^{ipx - \kappa t(1 - f(p/R))} \stackrel{\text{def}}{=} P_t(R),$$

где $f(p) = Me^{ipq}$ – характеристическая функция меры m . В силу условия $m(B) = m(-B)$ необходимого для вещественности потенциала $V(x)$ траектории случайного процесса распределены симметрично относительно начала координат, поэтому

$$P_0\{\exists \tau \in (0, t) : \eta_\tau \geq R\} = P_0\{\exists \tau \in (0, t) : \eta_\tau \leq -R\}.$$

В случае если мера m имеет конечный абсолютный третий момент, то отсюда следует оценка главного члена асимптотики вероятности $P_t(R)$ при больших R [11]:

$$P_t(R) = \frac{1}{\pi} \int_1^\infty dx \int dp e^{ipx - \kappa t(p/R)^2 m_2/2} \approx 2 \int_1^\infty dx \frac{R}{\sqrt{2\pi\kappa t m_2}} e^{-(x^2 R^2)/(2\kappa t m_2)}.$$

Для любого фиксированного момента времени t последний интеграл можно оценить сверху и снизу с помощью неравенства Комацу [12]:

$$\begin{aligned} 2 \left(1 + \sqrt{1 + 4 \frac{\kappa t m_2}{R^2}} \right)^{-1} \sqrt{\frac{\kappa t m_2}{2\pi R^2}} e^{-R^2/(2\kappa t m_2)} &\leq \int_1^\infty dx \frac{R}{\sqrt{2\pi\kappa t m_2}} e^{-x^2 R^2/(2\kappa t m_2)} \\ &\leq 2 \left(1 + \sqrt{1 + 2 \frac{\kappa t m_2}{R^2}} \right)^{-1} \sqrt{\frac{\kappa t m_2}{2\pi R^2}} e^{-R^2/(2\kappa t m_2)}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

При больших R и фиксированном t левая и правая части неравенства (3.2) служат оценками сверху и снизу для вероятности $P_t(R)$.

С другой стороны, очевидно, что

$$P_0\{\forall \tau \in (0, t) : |\eta_\tau| < R\} \leq P_0\{\forall \tau \in (0, t) : \eta_\tau < R\},$$

поскольку все траектории, удовлетворяющие первому условию $\{|\eta_\tau| < R \forall \tau\}$, заведомо удовлетворяют второму условию $\{\eta_\tau < R \forall \tau\}$. Нетрудно видеть, что события

$$\begin{aligned} \{\forall \tau \in (0, t) : |\eta_\tau| < R\} &\quad \text{и} \quad \{\exists \tau \in (0, t) : |\eta_\tau| \geq R\}, \\ \{\forall \tau \in (0, t) : \eta_\tau < R\} &\quad \text{и} \quad \{\exists \tau \in (0, t) : \eta_\tau \geq R\} \end{aligned}$$

являются дополнительными, поэтому

$$P_0\{\exists \tau \in (0, t) : |\eta_\tau| \geq R\} \geq P_0\{\exists \tau \in (0, t) : \eta_\tau \geq R\} = \pi_t(R).$$

Наконец, заметим, что любая траектория, нарушающая условие $\{\forall \tau \in (0, t) : |\eta_\tau| < R\}$, достигает либо уровень R , либо уровень $-R$, либо и тот и другой. Следовательно, в силу симметрии вероятностной меры процесса η_t мы имеем оценку

$$\begin{aligned} P_t(R) &\leq P_0\{\exists \tau \in (0, t) : |\eta_\tau| \geq R\} \\ &\leq P_0\{\exists \tau \in (0, t) : \eta_\tau \geq R\} + P_0\{\exists \tau \in (0, t) : \eta_\tau \leq -R\} = 2P_t(R). \end{aligned}$$

Совместно с оценками (3.2) это неравенство позволяет оценить сверху и снизу вероятность уклонений траекторий процесса η_τ и для любых заданных $\varepsilon > 0$ и $t > 0$ указать столь большое $R = R(\varepsilon, t)$, для которого вероятность выхода траектории η_t из заданного коридора за время $[0, t]$ достаточно мала, т.е. $P_0\{\exists \tau \in (0, t) : |\eta_\tau| \geq R\} < \varepsilon$. Если z таково, что

$$E(z) = \frac{4e^{-z}}{\sqrt{\pi}} (\sqrt{z} + \sqrt{1+z})^{-1} < \varepsilon \quad (3.3)$$

и $R(\varepsilon, t) = \sqrt{2z\kappa t m_2}$, то из неравенства Комацу (3.2) следует, что вероятность выхода траектории из коридора $R(\varepsilon, t)$ за время t меньше ε . Аналогичные, но более трудоемкие оценки вероятностей выхода из заданного коридора могут быть построены аналитически для траекторий π_t и ξ_t . В то же время более точные оценки интеграла (3.1) могут быть получены численно.

4. Унитарная матричная аппроксимация математического ожидания.

Зафиксируем ε , $R = R(\varepsilon, t)$ и предположим, что носитель $\tilde{\psi}_0$ – компактное множество, $R_0 = \max\{p : |p| \in \text{supp } \psi_0\}$. Формула (2.16) показывает, что исключив траектории, покидающие коридор $|\eta_\tau| < R_0 + 2R$, мы допускаем контролируруемую ошибку в нормах $C(\mathbb{R})$, $L_1(\mathbb{R})$ и $L_2(\mathbb{R})$. Если $\tilde{\psi}_0$ – достаточно гладкая функция, то производные $\partial_p \tilde{\varphi}(p, t)$ можно равномерно оценить с помощью формулы (2.15): $|\partial_p \tilde{\varphi}(p, t)| \leq C_t$. Эта величина определяет величину шага сетки по p :

$$h = O\left(\frac{\varepsilon}{C_t}\right).$$

Построим сетку с шагом h на отрезке $\mathcal{D} = [-R(\varepsilon, t - R_0), R(\varepsilon, t + R_0)]$, содержащую $2M + 1$ узел (началу координат $p = 0$ соответствует узел $M = [(R + R_0)/h] + 1$), и рассмотрим стохастическую матрицу перехода состояний за время $\tau < t$. В соответствии с представлением (2.8) амплитуда перехода из узла $n \in [1, 2M + 1]$ в узел $j \in [1, 2M + 1]$ равна среднему значению экспоненты стохастического действия, усредненного по условной вероятностной мере множества траекторий скачкообразного марковского процесса, приходящих из точки $(n - M)h$ в $(j - M)h$. В соответствии с этим определением амплитуда перехода $A_\tau = \{A_{j,n}(\tau)\}$ может быть построена методом Монте-Карло [6].

Пусть объем выборки случайных траекторий равен N . Используя пространственную однородность марковского процесса, достаточно генерировать траектории, начинающиеся в начале координат. Пусть $\pi_s \in \mathcal{D}$ – такая траектория, приходящая в точку, которой соответствует узел $k = [\pi_\tau/h] + M + 1$. Эта траектория может быть использована для выборочной оценки амплитуды перехода между любыми точками $j - m$ и j :

$$A_{j,j-m}^{(n+1)} = A_{j,j-m}^{(n)} + \delta_{k,m} N^{-1} e^{\kappa\tau + iS_\tau^{(n)} - i(j-M)h\xi_\tau^{(n)}}, \quad A_{j,m}^{(0)} = 0 \quad \forall j, m. \quad (4.1)$$

Матрица $A_\tau^{(N)} = \{A_{j,n}^{(N)}\}$ размера $(2M + 1) \times (2M + 1)$, полученная для N траекторий, аппроксимирует формулу (2.8) с аддитивной погрешностью порядка

$$\delta_N = (O(\varepsilon) + O(N^{-1/2}))e^{\kappa\tau}.$$

Заметим, что с помощью каждой выборочной тройки случайных величин π_τ , ξ_τ , S_τ по формуле (4.1) пересчитывается вся диагональ матрицы $A_{j,j-n}^{(n+1)}$, проходящая через точку $(M, M - [\pi_\tau/h])$ (см. рис. 1).

Ленточная матрица $A_\tau^{(N)}$ аппроксимирует унитарную матрицу U_τ разрешающего оператора задачи Коши. В общем случае ее спектр содержит собственные значения, абсолютная величина которых превосходит единицу, поэтому погрешность композиции n матриц $A_\tau^{(N)}$ растет экспоненциально. В то же время, преобразование Кэли позволяет построить унитарную аппроксимацию матрицы $A_\tau^{(N)}$. Предположим, что точка -1 не принадлежит спектру матриц $A_\tau^{(N)}$ и U_τ , т.е. матрицы $I + A_\tau^{(N)}$ и $I + U_\tau$ обратимы. Это предположение не уменьшает общность метода, поскольку $A_\tau^{(N)} \rightarrow I$, $U_\tau \rightarrow I$ при $\tau \rightarrow 0$. Рассмотрим операторы

$$H_\tau = H_\tau^* = i \frac{I - U_\tau}{I + U_\tau}, \quad H_N = H_N^* = \frac{i}{2} \left(\frac{I - A_\tau^{(N)}}{I + A_\tau^{(N)}} - \frac{I - (A_\tau^{(N)})^*}{I + (A_\tau^{(N)})^*} \right), \quad U_\tau^{(N)} = \frac{I + iH_N}{I - iH_N}.$$

Рис. 1. Структура заполнения ленточной матрицы $A_{j,m}$

Матрица $U_\tau^{(N)}$ является унитарной по построению: $U_\tau^{(N)}(U_\tau^{(N)})^* = (U_\tau^{(N)})^*U_\tau^{(N)} = I$. Выразим оценку погрешности матрицы $U_\tau^{(N)}$ через погрешность матрицы $A_\tau^{(N)}$.

Пусть $\delta = \delta_\tau(N) = U_\tau - A_\tau^{(N)}$ – погрешность аппроксимации U_τ матрицей $A_\tau^{(N)}$. Рассмотрим оценку погрешности аппроксимации U_τ унитарной матрицей $U_\tau^{(N)}$. Имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon = H_N - H_\tau &= i\{(I + A_\tau^{(N)})^{-1}\delta(I + U_\tau)^{-1} - (I + (A_\tau^{(N)})^*)^{-1}\delta(I + U_\tau^*)^{-1}\}, \\ U_\tau - U_\tau^{(N)} &= -i(I - iH_N)^{-1}\varepsilon(I - iH_\tau)^{-1}. \end{aligned}$$

Поскольку операторы H_N и H_τ эрмитовы, то

$$\|U_\tau - U_\tau^{(N)}\| \leq \|\varepsilon\| \leq 2\|\delta\| \|(I + A_\tau^{(N)})^{-1}\| \|(I + U_\tau)^{-1}\|.$$

Таким образом, доказано следующее утверждение.

ТЕОРЕМА 4.1. Пусть точка -1 не принадлежит спектру матрицы A и унитарной матрицы U и $\|U - A\| \leq \delta$. Пусть U_C – унитарная модификация матрицы A , полученная с помощью преобразования Кэли. Тогда

$$\|U - U_C\| \leq 2\delta\|(I + U)^{-1}\| \|(I + A)^{-1}\|.$$

Для задач с гамильтонианом, не зависящим от времени, эта теорема позволяет оценить погрешность матричной аппроксимации $U_\tau^{(N)}$ разрешающего оператора U_τ :

$$\|(U_{n\tau}^{(N)} - U_\tau^n)\psi_0\| \leq \sum_{k=0}^{n-1} \|U_{(n-k-1)\tau}^{(N)}(U_\tau^{(N)} - U_\tau)U_\tau^k\psi_0\| \leq n\delta_N,$$

где

$$\delta_N = \sup_{s \in [0, n\tau]} \|(U_\tau^{(N)} - U_\tau)U_s\psi_0\| = O(\varepsilon) + O(N^{-1/2}),$$

N – объем выборки метода Монте-Карло, а δ_N – погрешность, связанная с дискретизацией операторов перехода. Пример численного решения тестовой точно решаемой задачи Коши для уравнения Шрёдингера в случае $\omega = 0$, $F_t = 0$, $V(x) = 1/\text{ch}^2 x$ за время $t = 10$ приводится на рис. 2.

Рис. 2. На первом рисунке показана вещественная часть точного решения, а на втором – ошибка вещественной и мнимой части приближенного решения $\psi_N(x, 10)$ для начального условия $\psi_0(x) = \psi_e(x, 0)$. Черными точками обозначена вещественная часть решения и его погрешность, полученного с помощью метода Монте-Карло; серыми кружками изображена погрешность мнимой части, объем выборки N равен 10^6 . Унитарная матрица разрешающего оператора построена на отрезке длиной $\tau = 1$, решение $\psi_N(x, 10)$ получено десятикратным применением унитарной матрицы $U_1^{(N)}$

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Manz J. Molecular wavepacket dynamics: Theory for experiments 1926–1996 // *Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Reaction Dynamics at Atomic-Scale Resolution* / ed. V. Sundström. London: Imperial College Press, 1997. P. 80–318.
- [2] Tal-Ezer H., Kosloff R. An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent Schrödinger equation // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 3967–3971.
- [3] Leforestier C. et al. A comparison of different propagation schemes for the time dependent Schrödinger equation // *J. Comp. Phys.* 1991. V. 94. P. 59–80.
- [4] Cerjan C. (ed.) *Numerical Grid Methods and Their Applications to Schrödinger Equation*. Netherlands: Kluwer, 1993.
- [5] Huang Y., Kouri D. J., Hoffman D. K. A general, energy-separable polynomial representation of the time-independent full Green operator with application to time-independent wavepacket forms of Schrödinger and Lippmann–Schwinger equations // *Chem. Phys. Lett.* 1994. V. 225. P. 37–45.
- [6] Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
- [7] Чеботарев А. М. Представление решения уравнения Шрёдингера в виде математического ожидания функционалов скачкообразного процесса // *Матем. заметки*. 1978. Т. 24. № 5. С. 699–706.
- [8] Chebotarev A. M., Maslov V. P. Processus de sauts et leurs applications dans la mécanique quantique // *Lecture Notes in Phys.* 1979. V. 106. P. 58–72.
- [9] Константинов А. А., Маслов В. П., Чеботарев А. М. Вероятностные представления решения задачи Коши для уравнений квантовой механики // *УМН*. 1990. Т. 45. № 6. С. 3–24.
- [10] Chebotarev A. M., Quezada-Batalla R. Stochastic approach to time-dependent quantum tunneling // *Russian J. Math. Phys.* 1996. V. 4. № 3. P. 275–286.
- [11] Прохоров Ю. В., Розанов Ю. А. Теория вероятностей. М.: Наука, 1973.
- [12] Ito K., McKean H. P. *Diffusion Processes and Their Sample Paths*. Berlin: Springer, 1965.

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
E-mail: alex@chebotar.phys.msu.su, avpol@mail.ru

Поступило
12.05.2004