



О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ОСНОВНОГО УРАВНЕНИЯ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ С ДРОБНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ ГЕРАСИМОВА – КАПУТО

Неверов Георгий Анатольевич

инженер-аналитик,
ООО «Диджитех»,
Челябинск, Россия
E-mail: ujif07@gmail.com

Иванова Наталья Дмитриевна

кандидат физико-математических наук, доцент,
заведующий лабораторией
комплексных цифровых решений
Инженерной школы цифровых технологий,
Югорский государственный университет,
Ханты-Мансийск, Россия
E-mail: nd_ivanova@ugrasu.ru

Предмет исследования: начально-краевая задача для основного уравнения дробной волновой механики с дробной производной Герасимова – Капуто по времени и влияние параметров численного решения на точность и устойчивость моделирования квантовых систем.

Цель исследования: провести численные эксперименты для иллюстрации точности и эффективности предложенной схемы, демонстрируя ее применимость к задачам, включающим квантовую динамику дробного порядка.

Методы исследования: для аппроксимации решения используется матричный метод прогонки и многомерное моделирование, строится соответствующая конечно-разностная схема; особое внимание уделено алгоритму построенной численной схемы и оценке влияния параметров дробного порядка на точность и стабильность решения.

Объекты исследования: численное решение основного уравнения волновой механики с дробной производной Герасимова – Капуто по времени как математическая модель квантовых процессов.

Основные результаты исследования: полученные численные данные позволяют выявить закономерности изменения поведения системы в зависимости от характеристик дробного дифференцирования, что особенно важно при моделировании сложных физических процессов. Результаты дают представление о поведении решения и способствуют разработке надежных вычислительных методов для дробных дифференциальных уравнений. Разработанная методика может быть применена к широкому классу задач, включая моделирование процессов переноса, волновых явлений и квантовой динамики в системах с аномальной диффузией. Предложенные подходы открывают новые возможности для исследования систем с дробным временем и могут быть полезны при разработке высокоточных численных алгоритмов.

Ключевые слова: дробная волновая механика, производная Герасимова – Капуто, дробная производная, матричный метод прогонки, волновая функция.

ON THE NUMERICAL SOLUTION OF THE BASIC EQUATION OF WAVE MECHANICS WITH THE GERASIMOV – CAPUTO FRACTIONAL DERIVATIVE

Georgy A. Neverov

Analytical Engineer,
LLC "Digitech",
Chelyabinsk, Russia
E-mail: ujif07@gmail.com

Natalya D. Ivanova

Candidate of Physics and Mathematics,
Associate Professor,
head of the complex digital solutions laboratory
Engineering School of Digital Technologies,
Yugra State University,
Khanty-Mansiysk, Russia
E-mail: nd_ivanova@ugrasu.ru

Subject of research: initial-boundary value problem for the fundamental equation of fractional wave mechanics with fractional Gerasimov – Kaputo time derivative and the influence of the numerical solution parameters on the accuracy and stability of quantum system modeling.

Purpose of research: to conduct numerical experiments to illustrate the accuracy and efficiency of the proposed scheme, demonstrating its applicability to problems involving fractional quantum dynamics.

Research methods: the matrix sweep method and multidimensional modeling are used to approximate the solution, a corresponding finite-difference scheme is constructed; special attention is paid to the algorithm of the constructed numerical scheme and the assessment of the influence of fractional parameters on the accuracy and stability of the solution.

Objects of research: numerical solution of the fundamental equation of wave mechanics with fractional Gerasimov – Kaputo time derivative as a mathematical model of quantum processes.

Research findings: the obtained numerical data allow us to identify patterns of changes in the system's behavior depending on the characteristics of fractional differentiation, which is especially important in modeling complex physical processes. The results provide insight into the behavior of the solution and contribute to the development of reliable computational methods for fractional differential equations. The developed technique can be applied to a wide class of problems, including modeling of transport processes, wave phenomena, and quantum dynamics in systems with anomalous diffusion. The proposed approaches open up new possibilities for studying fractional time systems and can be useful in developing high-precision numerical algorithms.

Keywords: fractional wave mechanics, Gerasimov – Kaputo derivative, fractional derivative, matrix sweep method, wave function.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в связи с успешными попытками применить существующий математический аппарат дробного дифференцирования для описания процессов миграции

примесей в сильно неоднородных средах возродился интерес исследователей к этой области математики. В нашем исследовании особый интерес представляет модификация фундаментального уравнения квантовой механики, используемого для изучения



динамики и эволюции волновых пакетов с течением времени. Классическое основное уравнение квантовой механики (уравнение Шредингера) является одной из наиболее универсальных моделей, описывающих многие физические явления и имеющих важные приложения в гидродинамике и нелинейной оптике [1]. Несколько лет назад классическое уравнение было обобщено до дробного уравнения в частных производных, которое учитывает дробно-пространственную производную Рисса вместо обычного лапласиана [2, 3]. Такая модификация используется для описания квантовых систем с аномальной диффузией или процессов с нелокальными характеристиками, например «полеты Леви» (это вид случайных блужданий, отличных от броуновских, используемых в классическом уравнении квантовой механики). Данные системы нечетко описываются классическим уравнением, которое предполагает гауссову, то есть нормальную, диффузию.

Классическое фундаментальное уравнение квантовой механики, описывающее движение микроскопических частиц, выглядит следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u + Vu,$$

где u – волновая функция, i – мнимая единица, $\hbar$ – постоянная Планка, V – потенциальная функция, m – масса частицы, Δ представляет собой оператор Лапласа. Рассмотрим уравнение

$$i \frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial t^\alpha} = -\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t), \quad x \in [a,b], t \in [0,T]. \quad (1)$$

Здесь a , b и T – действительные неотрицательные числа. Дробная производная $\frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial t^\alpha}$ для $\alpha \in (0,1)$ в смысле Герасимова – Капуто имеет вид

$$\frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial t^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\dot{u}(x,s)}{(t-s)^\alpha} ds. \quad (2)$$

Рассмотрим начально-краевую задачу

$$u(x,0) = \varphi(x), \quad x \in \Omega = [0,L], \quad (3)$$

$$u(0,t) = u(L,t) = \psi(x), \quad t \in [0,T]. \quad (4)$$

Для уравнения (1), где $x \in \Omega = (0,L)$, $t \in (0,T)$ с дробной производной (2), $T, L \in \mathbb{R}_+$, $f(x,t)$, $\varphi(x)$, $\psi(x)$ заданы.

Формула Л1-2-3 и компактный метод конечных разностей для уравнения Шредингера с дробной производной по времени Капуто представлены в работе [4], что вызвало исключительный интерес авторов данного

исследования. Результаты работы [5] использованы для апробации численного метода исследуемого уравнения (1) с производной вида (2).

Основная идея данной работы состоит в численном анализе решения начально-краевой задачи (3)-(4) для основного уравнения квантовой механики (1) с дробной производной по времени Герасимова – Капуто (2). Результат проделанной работы представляет интерес как с теоретической, так и с практической точки зрения.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Произведем выбор и проанализируем численный метод расчета дробной производной Герасимова – Капуто, применим его для решения дробно-временного основного уравнения квантовой механики, исследуем поведение решения начально-краевой задачи. Таким образом, основной целью данной работы является численное моделирование волновой функции уравнения (1).

Введем равномерную сетку на области, пусть $h = (b-a)/N$ и $\tau = T/M$ будут шагами по пространству и времени, соответственно, где N и M – целые положительные числа. Тогда $x_r = rh$, $t_k = k\tau$ при $r=0,1,\dots,N$ и $k=0,1,\dots,M$.

Рассмотрим [6] аппроксимацию дробной производной Герасимова – Капуто (2):

$$\frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial t^\alpha} = \sum_{l=0}^{k-1} \frac{u(x,t_{l+1}) - u(x,t_l)}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} [(k-l)^{1-\alpha} - (k-l-1)^{1-\alpha}].$$

Составим разностный аналог уравнения (1) с производной Герасимова – Капуто. Для этого введем обозначение $u(x_r, t_k) = u_r^k$ и, учитывая, что

$$\Delta u = \frac{u_{r-1}^k - 2u_r^k + u_{r+1}^k}{h^2},$$

получим численную схему

$$i \sum_{l=0}^{k-1} \frac{u_r^{l+1} - u_r^l}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} [(k-l)^{1-\alpha} - (k-l-1)^{1-\alpha}] = \frac{u_{r-1}^k - 2u_r^k + u_{r+1}^k}{h^2} + f(x_r, t_k).$$

Для решения задачи будем использовать метод матричной прогонки. Матричная прогонка относится к прямым методам решения разностных уравнений. Она применяется к уравнениям, которые можно записать в виде системы векторных уравнений. Основное преимущество данного метода заключается в его высокой вычислительной эффективности и устойчивости при решении систем большого размера. Метод позволяет существенно сократить

вычислительные затраты за счет поэтапного исключения переменных, что особенно важно при моделировании процессов с большим числом пространственно-временных узлов. Кроме того, матричная прогонка обеспечивает сохранение структуры матриц и векторов, что способствует более точному учету граничных условий и снижению накопления погрешности при численном интегрировании.

Рассмотрим результаты численного эксперимента для $N=100$, $M=100$, $\alpha=0,5$, $L=2$, $T=1$, точного решения $u(x,t)=(1+i)t^2 \sin(\pi x)$, при

$$f(x,t) = \frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)}(i-1)\sin(\pi x) + (1+i)t^2\pi^2 \sin(\pi x).$$

Иллюстрация численного эксперимента представлена на рисунках 1 и 2 для соответствующих действительной и мнимой частей решения. Погрешность и порядок сходимости метода, в зависимости от пространственного шага h , представлены в таблице, где $\text{order} = \log_2 \frac{E(2h)}{E(h)}$, $E(h) = \max_{0 \leq k \leq M, 0 \leq r \leq N} |u(x_r, t_k) - u_r^k|$ – максимальная погрешность.

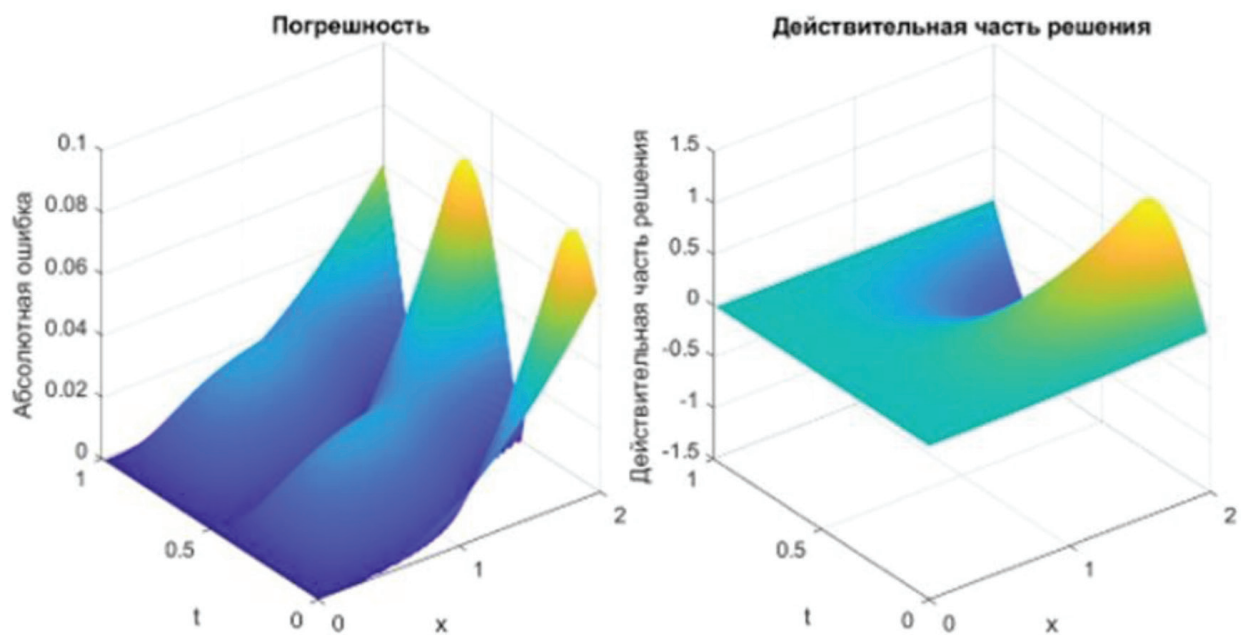


Рисунок 1. Действительная часть решения и погрешность

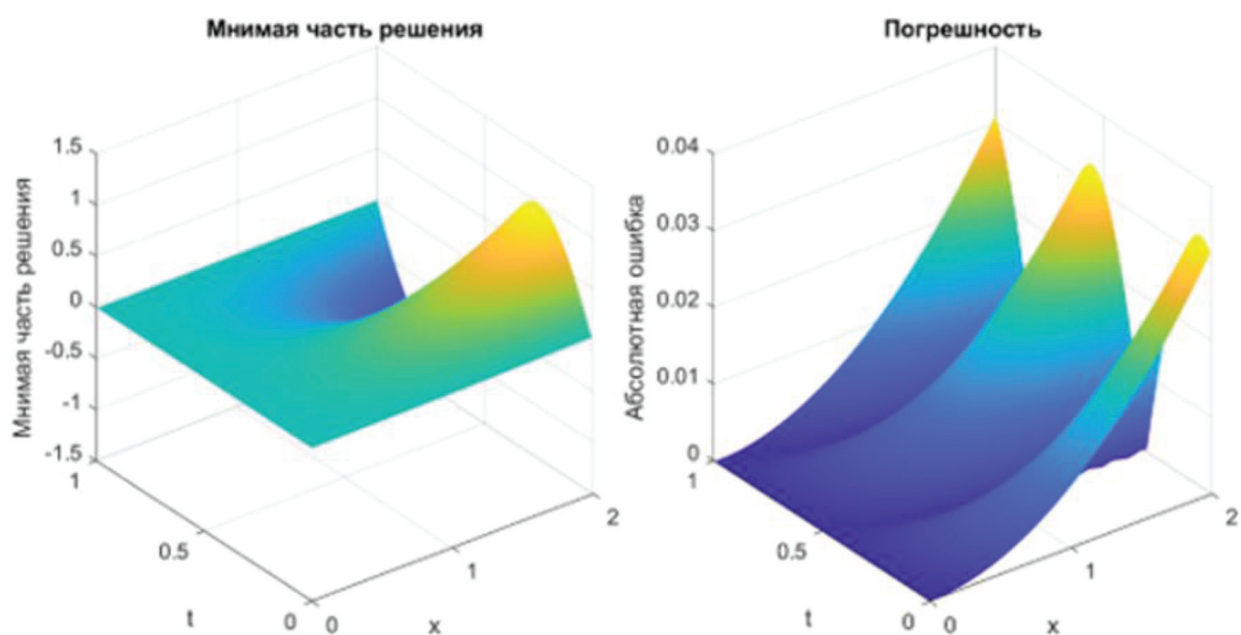


Рисунок 2. Мнимая часть решения и погрешность

Таблица. Погрешность и сходимость метода

h	$\alpha=0,3$		$\alpha=0,5$		$\alpha=0,7$		$\alpha=0,9$	
	order	$E(h)$	order	$E(h)$	order	$E(h)$	order	$E(h)$
1/100		0.0743		0.0605		0.0719		0.0813
1/200	0.2751	0.0614	1.0071	0.0301	0.3174	0.0577	0.1357	0.0746
1/400	0.2649	0.0511	0.9474	0.0155	0.0665	0.0551	0.0	0.0751
1/800	0.2289	0.0436	0.2317	0.0132	0.0157	0.0545		

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Экспериментально полученные дробные импульсы во временной области открывают возможности для разработки схем обработки сигналов. Используя волновые функции, найденные из решений уравнения Шредингера, можно описать квантовые состояния только нерелятивистских частиц, которые движутся со скоростями, значительно меньшими скорости света в вакууме. Результаты этого исследования могут быть использованы в оптике, при изучении динамики волновых потоков, в статической механике и, в более общем плане, в квантовой физике и химии. Кроме того, применение дробных производных в основном уравнении квантовой механики позволяет моделировать процессы с памятью и долгосрочной корреляцией, что существенно расширяет диапазон исследуемых явлений. Это особенно актуально для сложных квантовых систем с нестационарными процессами, где традиционные методы оказываются недостаточно точными. Анализ полученных данных демонстрирует возможность улучшения существующих численных алгоритмов, что открывает перспективы разработки новых подходов к моделированию динамических систем с дробным временем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Infeld, E. Nonlinear waves, solitons, and chaos / E. Infeld, G. Rowlands. – Cambridge : Cambridge University Press, 2000. – 391 p.
2. Laskin, N. Fractional quantum mechanics / N. Laskin // Physical Review E. – 2000. – Vol. 62. – P. 3135.
3. Laskin, N. Fractional Schrodinger equation / N. Laskin // Physical Review E. – 2002. – Vol. 66. – P. 056108.
4. Serik, M. Numerical Solution of Time-Fractional Schrodinger Equation by Using FDM / M. Serik, R. Eskar, P. Huang // Axioms. – 2023. – Vol. 12(9). – P. 816.
5. Гордиевских, Д. М. Численное решение некоторых вырожденных дифференциальных уравнений с дробной производной по времени / Д. М. Гордиевских, П. Н. Давыдов // Наукоеведение. – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 98TVN215.
6. Podlubny, I. Fractional differential equation / I. Podlubny. – Elsevier Science, 1999. – 340 p.